

MBAR

$$F = -\beta^{-1} \ln Z = -\beta^{-1} \ln \int e^{-\beta U(x)} dx$$

$$F_{\text{target}} = -\beta^{-1} \ln Z_{\text{target}} = -\beta^{-1} \ln \int e^{-\beta U_{\text{target}}(x)} dx$$

$$F_{\text{target}} - F = \text{MBAR}(U(x), U_{\text{target}}(x))$$

場合 1 F_{target} と F を精度良く求める。

$$\Delta U(x) \equiv U_{\text{target}}(x) - U(x)$$

$$F \approx -\beta^{-1} \ln \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-\beta U(x_n)} \quad F_{\text{target}} \approx -\beta^{-1} \ln \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-\beta U_{\text{target}}(x_n)}$$

場合 2 F_{target} と F の MSE が U_{target} のパラメータを推定

$$\text{Loss}(U_{\text{target}} \text{ のパラメータ } \theta) = (F_{\text{target}}(U_{\text{target}}(\theta)) - F)^2$$

MBAR を
θ で最適化する

$$= \left(\underset{\uparrow}{\text{MBAR}}(U_{\text{target}}(\theta), U_{\text{target}}) \right)^2$$