Research Note

Y. Matsunaga

Exponetial Averaging (Reweightingの一種)

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

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

$$\Delta F = F_{target} - F = -\beta^{-1}\left[\ln Z_{target} - \ln Z\right] = -\beta^{-1}\ln\frac{Z_{target}}{Z}$$

$$= -\beta^{-1}\ln\frac{\int e^{-\beta U_{target}(x)}dx}{Z} = -\beta^{-1}\ln\frac{\int e^{-\beta U_{target}(x)+\beta U(x)-\beta U(x)}dx}{Z}$$

$$= -\beta^{-1}\ln\left\langle e^{-\beta(U_{target}(x)-U(x))}\right\rangle = -\beta^{-1}\ln\left\langle e^{-\beta\Delta U(x)}\right\rangle$$

やること1　F_{target} と F を精度良く求めて $\Delta F = F_{target} - F$ とする

やること2　F_{target} と F の MSE から U_{target} のパラメータを推定

$$Loss(\theta) = \left(\Delta F + \beta^{-1}\ln\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} e^{-\beta\Delta U(x_n)}\right)^2$$

$\Delta U(x) = U_\theta(x) - U(x)$　　θを最適化することで　$U_\theta(x) \approx U_{target}(x)$ とする.

MBAR

$$F_1 = -\beta^{-1}\ln Z_1 = -\beta^{-1}\ln\int e^{-\beta U_1(x)}dx \approx -\beta^{-1}\ln\sum_{n=1}^{N} e^{-\beta U_1(x_n)}$$

$$F_2 = -\beta^{-1}\ln Z_2 = -\beta^{-1}\ln\int e^{-\beta U_2(x)}dx \approx -\beta^{-1}\ln\sum_{n=1}^{N} e^{-\beta U_2(x_n)}$$

$$F_3 = -\beta^{-1}\ln Z_3 = -\beta^{-1}\ln\int e^{-\beta U_3(x)}dx \approx -\beta^{-1}\ln\sum_{n=1}^{N} e^{-\beta U_3(x_n)}$$

やること1

F_1 F_2 F_3 を精度良く求める. mbar() を使って良い

絶対値は求まらないので $F_1=0$ として差分を求める

やること2

F_3 を target として $U_{target} = U_3$ のパラメータ θ_{target} を推定する.

mbar_f() という関数は $F_\theta = \mathrm{mbar\_f}(u\_kl., [F_1, F_2], u_\theta)$

したがって Loss 関数は

$$Loss(\theta) = \left[F_3 - \mathrm{mbar\_f}(u\_kl., [F_1, F_2], u_\theta)\right]^2$$

mbar_f() の中身

$$F_\theta = -\ln \sum_{j=1}^{2} \sum_{n=1}^{N_j} \frac{\exp[-u_\theta(x_{jn})]}{\sum_{k=1}^{2} N_k \exp[\hat{F}_k - u_k(x_{jn})]} = -\ln \sum\sum W$$

$$\frac{\partial F_\theta}{\partial u_\theta(x_{j'n'})} = -\frac{\partial}{\partial u_\theta} \ln \sum\sum W = -\frac{1}{\sum\sum W} \times \frac{\partial}{\partial u_\theta(x_{j'n'})} \sum\sum W$$

$$= -\sum\sum W \times \frac{\partial}{\partial u_\theta(x_{j'n'})} \sum_{j=1}^{2} \sum_{n=1}^{N_j} \frac{\exp[-u_\theta(x_{jn})]}{\sum_{k=1}^{2} N_k \exp[\hat{F}_k - u_k(x_{jn})]}$$

$$= +\sum\sum W \times \frac{\exp[-u_\theta(x_{j'n'})]}{\sum_{k=1}^{2} N_k \exp[\hat{F}_k - u_k(x_{j'n'})]}$$

$$= \exp(-F_\theta) \times w_{j'n'}$$