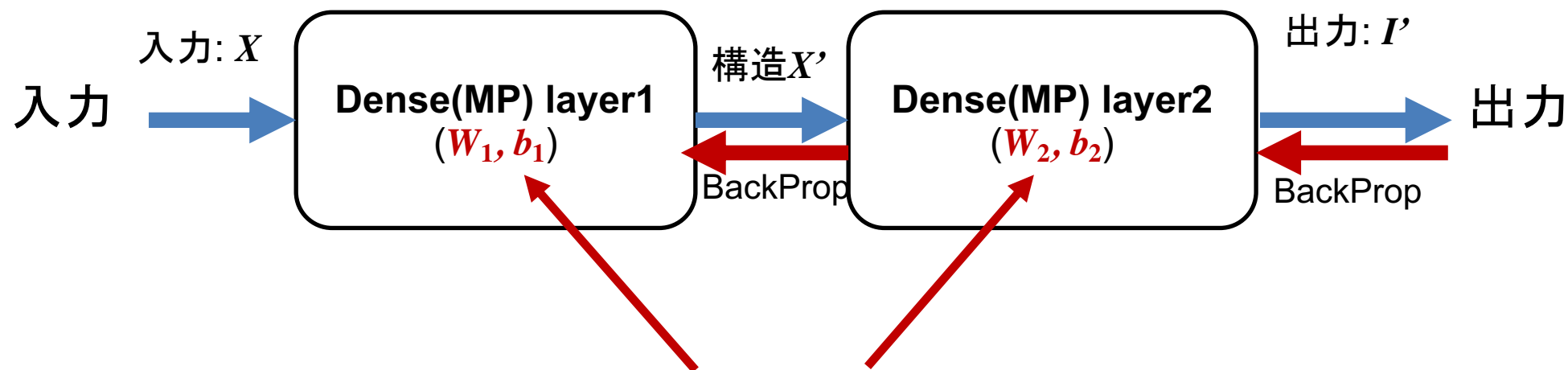


背景: ニューラルネットの学習



ニューラルネットも関数の入れ子構造(階層構造)を持つが
誤差逆伝播法(Back propagation)で効率よく学習することに成功している

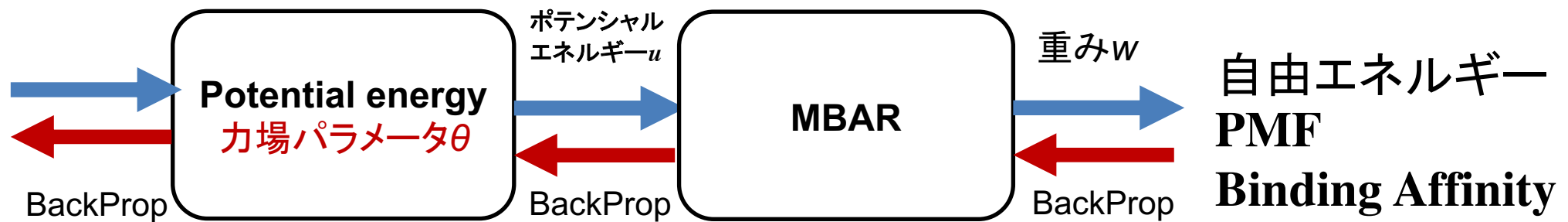
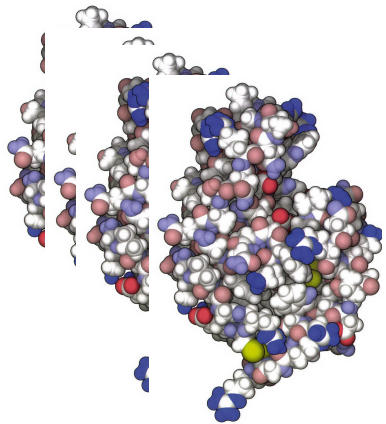
現在開発しているレイヤー: MBARレイヤ

ポテンシャルエネルギー関数 u をターゲットとした時の j 番目のアンサンブル n 番目のフレームの重み w_{jn} とその微分

$$w_{jn} = \frac{1}{\sum_{k=1}^K N_k \exp \left[\hat{f}_k - u_k(x_{jn}) + u(x_{jn}) \right]}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w_{jn}}{\partial u(x_{jn})} &= \frac{-1 \times \left(\sum_{k=1}^K N_k \exp \left[\hat{f}_k - u_k(x_{jn}) + u(x_{jn}) \right] \right)}{\left(\sum_{k=1}^K N_k \exp \left[\hat{f}_k - u_k(x_{jn}) + u(x_{jn}) \right] \right)^2} \\ &= \frac{-1}{\sum_{k=1}^K N_k \exp \left[\hat{f}_k - u_k(x_{jn}) + u(x_{jn}) \right]} \\ &= -w_{jn} \end{aligned}$$

トラジェクトリ



MBARのweightをポテンシャルエネルギーの力場パラメータ θ で微分する試み

M. Wieder, J. Fass, and J. D. Chodera, Teaching Free Energy Calculations to Learn from Experimental Data, bioRxiv, 2021.