

Exponential Averaging (Reweighting - 種)

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

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

$$\Delta F = F_{\text{target}} - F = -\beta' [\ln Z_{\text{target}} - \ln Z] = -\beta' \ln \frac{Z_{\text{target}}}{Z}$$

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

$$= -\beta' \ln \langle e^{-\beta(U_{\text{target}}(x) - U(x))} \rangle = -\beta' \ln \langle e^{-\beta \Delta U(x)} \rangle$$

仮定 1 F_{target} と F の精度は ϵ かつ $\Delta F = F_{\text{target}} - F$ である

仮定 2 F_{target} と F の MSE は U_{target} の $1 \rightarrow N$ まで推定

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

$\Delta U(x) = U_{\theta}(x) - U(x)$ θ は最適化対象 $U_{\theta}(x) \approx U_{\text{target}}(x)$ である。