

Zeit-Diskretisierung von Gradientenflüssen

1 Approximierte Gradientenflüsse im euklidischen \mathbb{R}^k

Betrachte

$$\frac{dX}{dt} = -\operatorname{grad} E(X), \quad X(0) = X^0, \quad (1.1)$$

wobei das Energie-Funktional $E : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ glatt und nach unten beschränkt sei sowie $E(X^0) < \infty$.

Variationelle Konstruktion des **approximierten Gradientenflusses** (\bar{X}_τ) mit der (euklidischen) Metrik:

Sei $\tau > 0$ die zeitliche Schrittweite, $n \in \mathbb{N}_0$, dann ist die Folge $(X_\tau^n)_{n \geq 0}$ gegeben durch:

i) $X_\tau^0 := X^0$,

ii) X_τ^{n+1} ist eine Lösung des Minimierungsproblems

$$\min_{X \in \mathbb{R}^k} \left[E(X) + \frac{\|X_\tau^n - X\|^2}{2\tau} \right] \quad (1.2)$$

Dann sei $\bar{X}_\tau : \mathbb{R}_{\geq 0} \rightarrow \mathbb{R}^k$ eine stückweise konstante Funktion mit Wert $\bar{X}_\tau(t) = X_\tau^n$ für $t \in [n\tau, (n+1)\tau)$.

Lemma 1.1. $X_\tau^m, X_\tau^{m+1} \subset (X_\tau^n)_{n \geq 0}$ erfüllen für $\omega \in \mathbb{R}^k$:

$$-\operatorname{grad} E(X_\tau^{m+1}) \cdot \omega = \frac{X_\tau^{m+1} - X_\tau^m}{\tau} \cdot \omega \quad (1.3)$$

Lemma 1.2 (Energy estimate).

$$\sup_{n \geq 0} E(X_\tau^n) \leq E(X^0)$$

Lemma 1.3.

$$\frac{\tau}{2} \sum_{n \geq 0} \left(\frac{\|X_\tau^n - X_\tau^{n+1}\|}{\tau} \right)^2 \leq E(X^0) - \inf_{X \in \mathbb{R}^k} E(X)$$

Lemma 1.4 (Hölder 1/2-Abschätzung für \bar{X}_τ).

Für $s < t$ gilt:

$$\|\bar{X}_\tau(s) - \bar{X}_\tau(t)\|^2 \leq \left[\frac{t-s}{\tau} + 1 \right] \sum_{\frac{s}{\tau} \leq n \leq \frac{t}{\tau}} \|X_\tau^n - X_\tau^{n+1}\|^2 \leq 2(E(X^0) - \inf_{X \in \mathbb{R}^k} E(X))[(t-s) + \tau].$$

Corollar 1.5.

$$\bar{X}_\tau(t) \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} X \in \mathcal{C}^{1/2}([0, \infty); \mathbb{R}^k) \text{ gleichmäßig bzgl. } t \geq 0,$$

und es gilt für alle $0 \leq t_1 \leq t_2 < \infty$:

$$-\int_{t_1}^{t_2} \operatorname{grad} E(X(t)) \cdot \omega dt = [X(t_2) - X(t_1)] \cdot \omega \quad (1.4)$$

2 Der approximierte Gradientenfluss der linearen Fokker-Planck-Gleichung

Die **lineare Fokker-Planck-Gleichung** mit Potential $V(x) \in C^2(\mathbb{R}^d)$ und Anfangswert $\rho_0 \in P_{ac}(\mathbb{R}^d)$ ist gegeben durch:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} &= \Delta \rho(x, t) + \nabla \cdot (\rho(x, t) \nabla V(x)), \\ \rho(x, 0) &= \rho_0(x). \end{aligned} \tag{FP}$$

Sei $T > 0$. $\rho(\cdot, t) \in P_{ac}(\mathbb{R}^d)$ erfüllt die (LFP) im schwachen Sinne, falls für alle $\psi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^d} \int_0^T (\rho \Delta \psi + \rho \nabla V \cdot \nabla \psi - \rho \psi_t) dt dx = \int \rho_0 \psi(x, 0) dx \tag{2.1}$$

Definition 2.1. Für eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x) \in P_{ac}(\mathbb{R}^d)$ und ein Potential $V(x) \in L^1(\mathbb{R}^d)$ sei das **Freie Energie Funktional** $H(\rho)$ gegeben durch:

$$H(\rho) := \int_{\mathbb{R}^d} \rho \log \rho \, dx + \int_{\mathbb{R}^d} \rho V dx \tag{2.2}$$

Behauptung/Interpretation: (FP) entspricht $\delta_t \rho = -\text{grad}_{W_2} H(\rho)$

Theorem 2.2. Sei $V(x) \in C^2(\mathbb{R}^d)$ ein Potential, sodass $V(x) = O(|x|^2)$ für $x \rightarrow \infty$. Sei $\rho_0 \in P_{ac}(\mathbb{R}^d)$ derart, dass für das Freie Energie Funktional gilt $H(\rho_0) < \infty$. Sei $\tau > 0$.

Sei außerdem $\bar{\rho}_\tau(x, t)$ der approximierte Gradientenfluss für $H(\rho)$ bzgl. der quadratischen Wassersteinmetrik. Dann gilt:

$$\bar{\rho}_\tau(x, t) \rightharpoonup \rho(x, t) \text{ in } L^1(\mathbb{R}^d) \text{ für } \tau \rightarrow 0,$$

wobei $\rho(x, t) \in C^\infty(\mathbb{R}^d \times (0, \infty))$ die eindeutige Lösung der linearen Fokker-Planck-Gleichung mit Anfangswert ρ_0 ist.

Der approximierte Gradientenfluss $\bar{\rho}_\tau : (0, \infty) \times \mathbb{R}^d \rightarrow [0, \infty)$ wird hierbei analog zu Abschnitt 1 konstruiert:

$$\bar{\rho}_\tau(t) := \rho_\tau^n \text{ für } t \in [n\tau, (n+1)\tau)$$

für die Folge $(\rho_\tau^n)_n$, $n \in \mathbb{N}_0$:

$$i) \quad \rho_\tau^0 = \rho^0;$$

$$ii) \quad \rho_\tau^{n+1} = \operatorname{argmin}_{\rho \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)} \left\{ H(\rho) + \frac{W_2(\rho_\tau^n, \rho)^2}{2\tau} \right\}$$