Prof. Dr. Matthes Manuela Lambacher

Zeit-Diskretisierung von Gradientenflüssen

1 Generalisierte Gradientenflüsse

Betrachte

$$\frac{dX}{dt} = -\operatorname{grad} E(X) \qquad X(t=0) = X_0 \tag{1.1}$$

für $X(t) \in \mathbb{R}^k$ für festes $t \in [0, \infty)$, Energie-Funktional E.

Definition 1.1. *Der **approximierte Gradientenfluss** (X_τ) für ein Energie-Funktional E in einem abstraktem metrischen Raum mit einer Distanz wird folgendermaßen konstruiert:*
Sei die zeitliche Schrittweite $\tau > 0$ gegeben, $n \in \mathbb{N}_0$, dann ist die Folge $(X_\tau^n)_{n\geq 0}$:
$X_\tau^0 := X_0$,
X_τ^{n+1} *ist ein Minimierer des Minimerungsproblems*

$$\min \left[E(X) + \frac{\operatorname{dist}(X_\tau^n, X)^2}{2\tau} \right] \tag{1.2}$$

Dann sei X_τ auf $\mathbb{R}_+$ als stückweise konstante Funktion mit Wert $X_\tau(t) = X_\tau^n$ für $t \in [n\tau, (n+1)\tau)$ definiert.

Sei $\|\cdot\|$ die euklidische Norm, $E(X) \geq C$ und $(X_\tau^n)_{n\in\mathbb{N}_0}$ wie in Definition (1.1). Dann sind folgende Aussagen erfüllt:

Lemma 1.2 (Energy estimate)**.**

$$\sup_{n\geq 0} E(X_\tau^n) \leq E(X_0) \tag{1.3}$$

Lemma 1.3 (Total square distance estimate)**.**

$$\sum_{n\geq 0} \|X_\tau^n - X_\tau^{n+1}\|^2 \leq 2\tau(E(X_0) - \inf E) \tag{1.4}$$

Lemma 1.4 (Hölder 1/2-Abschätzung für X_τ)**.**
Für $s < t$ gilt:

$$\|X_\tau(s) - X_\tau(t)\|^2 \overset{1)}{\leq} \left[\frac{t-s}{\tau} + 1\right] \sum_{\frac{s}{\tau}\leq n \leq \frac{t}{\tau}} \|X_\tau^n - X_\tau^{n+1}\|^2 \overset{2)}{\leq} 2(E(X_0) - \inf E)[(t-s) + \tau]. \tag{1.5}$$

Lemma 1.5. *Sei eine zugrundeliegende Riemannstruktur (Differenzierbare Mannigfaltigkeit, Metrik, Tangentenräume) gegeben und das Energie-Funktional hinreichend glatt. Die Lösungen des Minimerungsproblems erfüllen folgende schwache Form der Gradientengleichung für ω:*

$$-\operatorname{grad} E(X_\tau^{n+1}) \cdot \omega = \frac{\langle X_\tau^n - X_\tau^{n+1}, \omega\rangle}{\tau} \tag{1.6}$$

2 Die lineare Fokker-Plank-Gleichung, Monge-Kantorovich und der approximierte Gradientenfluss

Definition 2.1. *Die **lineare Fokker-Planck-Gleichung** (LFP) mit glattem Potential $V(x) : \mathbb{R}^k \to [0, \infty)$ und Anfangswert ρ_0, Wahrscheinlichkeitsdichte auf $\mathbb{R}^k$, ist gegeben durch:*

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \Delta\rho + \nabla \cdot (\rho \nabla V), \\ \rho(0) &= \rho_0. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Eine Wahrscheinlichkeitsdichte ρ erfüllt die (LFP) im schwachen Sinne, falls für alle Testfunktionen ζ gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^k} \int_T (\rho\Delta\zeta + \rho\nabla V \cdot \nabla\zeta - \rho\zeta_t) dt dx = \int \rho_0 \zeta(x, 0) dx \tag{2.2}$$

Definition 2.2. *Für eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho \in P(\mathbb{R}^k)$ und ein hinreichend glattes Potential V sei das **Freie Energie Funktional** $E(\rho)$ gegeben durch:*

$$E(\rho) := \int_{\mathbb{R}^k} \rho \log \rho dx + \int_{\mathbb{R}^k} \rho V dx \tag{2.3}$$

Theorem 2.3. *Sei $V(x)$ ein glattes Potential, das folgende Wachstumsbedingung erfüllt:*
$V(x) = O(|x|^2)$ für $x \to \infty$.
Sei ρ_0 eine Wahrscheinlichkeitsdichte, sodass das Freie Energie Funktional $E(\rho)$ (2.3) an der Stelle ρ_0 endlich ist. Sei $\tau > 0$.
Dann gilt:

*Der **approximierte Gradientenfluss** ρ_τ für $E(\rho)$ bzgl. der quadratischen Wassersteindistanz konvergiert für $\tau \to 0$ für alle $t \in (0, \infty)$ schwach in $L^1(\mathbb{R}^k)$ gegen die eindeutige Lösung $\rho(x, t) \in C^\infty((\mathbb{R}^k \times (0, \infty))$ der linearen Fokker-Planck-Gleichung (2.1) mit Anfangswert ρ_0.*

Der approximierte Gradientenfluss (bzw. die Interpolation) $\rho_\tau : (0, \infty) \times \mathbb{R}^k \to [0, \infty)$ wird hierbei analog zu Def 1.1 konstruiert:

$$\rho_\tau(t) := \rho_\tau^n \quad \text{für } t \in [n\tau, (n + 1)\tau) \tag{2.4}$$

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

$$\rho_\tau^0 = \rho^0;$$

Gegeben ρ_τ^n, definiere den nächsten Schritt als Minimierer von

$$\rho \mapsto E(\rho) + \frac{W_2(\rho_\tau^n, \rho)^2}{2\tau}, \tag{2.5}$$