

Zeit-Diskretisierung von Gradientenflüssen

1 Approximierte Gradientenflüsse

Betrachte

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

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

Definition 1.1. Der **approximierte Gradientenfluss** (X_τ) mit Anfangswert X^0 für das Energie-Funktional E in einem metrischen Raum wird folgendermaßen konstruiert:

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

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

X_τ^{n+1} ist ein Minimierer des Minimierungsproblems

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

Dann sei X_τ auf \mathbb{R}_+^k 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, $E(X) \geq C$, $E(X^0) \leq \infty$ und $(X_\tau^n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ wie in Definition (1.1). Dann sind folgende Aussagen erfüllt:

Lemma 1.2 (Energy estimate).

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

Lemma 1.3 (Total square distance estimate).

$$\sum_{n \geq 0} \|X_\tau^n - X_\tau^{n+1}\|^2 \leq 2\tau(E(X^0) - \inf_X E(X))$$

Lemma 1.4 (Hölder 1/2-Abschätzung für X_τ).

Für $s < t$ gilt:

$$\|X_\tau(s) - X_\tau(t)\|^2 \leq \left\lceil \frac{t-s}{\tau} + 1 \right\rceil \sum_{\frac{s}{\tau} \leq n \leq \frac{t}{\tau}} \|X_\tau^n - X_\tau^{n+1}\|^2 \leq 2(E(X^0) - \inf_X E(X))[(t-s) + \tau].$$

Corollar 1.5. Sei $E \in \mathcal{C}^1$. $X_\tau^m, X_\tau^{m+1} \in (X_\tau^n)_{n \geq 0}$ erfüllen für $\omega \in \mathbb{R}^k$:

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

2 Der approximierte Gradientenfluss der linearen Fokker-Planck-Gleichung

Definition 2.1. Die *lineare Fokker-Planck-Gleichung* mit Potential $V(x) \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^k), \mathbb{R}^k \rightarrow [0, \infty)$, und Anfangswert $\rho_0 \in P_{ac}(\mathbb{R}^k)$ ist gegeben durch:

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

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

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

Definition 2.2. Für eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x) \in P_{ac}(\mathbb{R}^k)$ und ein Potential $V(x) \in L^1(\mathbb{R}^k)$ sei das **Freie Energie Funktional** $E(\rho)$ gegeben durch:

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

Theorem 2.3. Sei $V(x) \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^k)$ ein Potential, sodass $V(x) = O(|x|^2)$ für $x \rightarrow \infty$. Sei $\rho_0 \in P_{ac}(\mathbb{R}^k)$ derart, dass für das Freie Energie Funktional gilt $E(\rho_0) < \infty$. Sei $\tau > 0$.

Sei außerdem $\rho_\tau(x, t)$ der (Def. 1.1) approximierte Gradientenfluss für $E(\rho)$ bzgl. der quadratischen Wassersteinmetrik. Dann gilt:

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

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