

Zeit-Diskretisierung von Gradientenflüssen

1 Generalisierte Gradientenflüsse

Wir betrachten folgende partielle Diffgleichung:

$$\frac{dX}{dt} = -\text{grad } E(X) \quad (1.1)$$

E ist hierbei die Energie im Bezug auf den Optimalen Transport, die Diffgl beschreibt z.B. die kinetische Energie von Partikeln. Stellen wir uns vor, $X(t)$ ist die Position von gegebenen Partikeln. TODO: Räume, was woraus...

Statt dieses Problem explizit zu lösen, ist unser Ziel, den Gradientenfluss als Grenzwert eines zeitlich diskretisierten Problems darzustellen, sodass jeglicher expliziter Umgang mit Subdifferentialen und dem Gradientenoperator umgangen wird.

Definition 1.1. Der **approximierte Gradientenfluss** (X_τ) für ein geeignetes Energie-Funktional E in einem abstraktem metrischen Raum mit einer metric-denoted Distanz sei gegeben durch:

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 von dem Minimerungsproblem

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

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.

Bemerkung 1.2. 1. Wir setzen zunächst keine Eindeutigkeit des Minimums voraus;

2. Existenz des Minimierers muss durch geeignete Eigenschaften von $E(X)$ gesichert werden, z.B. Koerzivität, Weakly lower semicontinuity und eine untere Schranke bzw. Wachstumsbedingung.

3. Verdeutlichen wir uns, warum dies unser anfängliches Problem approximieren soll:

Betrachtet man den euklidischen Abstand, so besitzt das Problem (1.2) einen kritischen Punkt (der für $E(X)$ konvex ein globales Minimum ist) bei X_τ^{n+1} gegeben durch

$$\frac{X_\tau^{n+1} - X_\tau^n}{\tau} = -\text{grad } E(X_\tau^{n+1}),$$

wobei die linke Seite offensichtlich eine Approximation der zeitlichen Ableitung von $X(t)$ ist.

4. Verbindung zum Subdifferential: $\frac{X_\tau^n - X_\tau^n}{\tau} \in \partial E(X_\tau^{n+1})$

Nach Aufstellen der Diskretisierung wollen wir $\tau \rightarrow 0$ gehen lassen und betrachten den Grenzwert, den "generalisierten Gradientenfluss". Um zu zeigen, dass dieser Grenzwert existiert und die Ausgangsgleichung erfüllt, wollen wir zunächst einige Eigenschaften untersuchen.

1.1 Drei Ungleichungen

Wir nehmen an, dass E nach unten durch eine absolute Konstante ist, d.h. $E(X) \geq C$ unabh. von X .

X_τ^{n+1} ist ein Minimierer von dem Funktional $X \mapsto E(X) + \frac{\text{dist}(X_\tau^n, X)^2}{2\tau}$. Damit ist offensichtlich das Funktional an der Stelle X_τ^{n+1} kleiner gleich dessen Wert an der Stelle X_τ^n (Metrik: $\text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^n) = 0$). Damit haben wir

$$E(X_\tau^{n+1}) + \frac{\text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1})^2}{2\tau} \leq E(X_\tau^n). \quad (1.3)$$

Lemma 1.3 (Energy estimate).

$$\sup_{n \geq 0} E(X_\tau^n) \leq E(X^0) \quad (1.4)$$

Beweis. Folgt sofort aus (1.3), da der zweite Term nichtnegativ und somit die Folge der $(E(X_\tau^n))$ für steigendes n monoton abnehmend ist. \square

Lemma 1.4 (total square distance estimate).

$$\sum_{n \geq 0} \text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1})^2 \leq 2\tau(E(X^0) - \inf E) \quad (1.5)$$

Beweis. Summation über (1.3), Teleskopsumme, Infimum da $E(X_\tau^n)$ monoton fallend. \square

Lemma 1.5 (Hölder 1/2-Abschätzung für X_τ).

Für $s < t$ gilt:

$$\text{dist}(X_\tau(s), X_\tau(t))^2 \stackrel{1)}{\leq} \left[\frac{t-s}{\tau} + 1 \right] \sum_{\frac{s}{\tau} \leq n \leq \frac{t}{\tau}} \text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1})^2 \stackrel{2)}{\leq} 2[E(X^0) - \inf E][(t-s) + \tau], \quad (1.6)$$

Beweis. 2) folgt wiederum aus Aufsummation von (1.3) und Monotonie.

1) Nach Definition: $X_\tau(s) = X_\tau^n$ für $s \in [n\tau, (n+1)\tau)$. Damit gilt für n : $n = \lfloor \frac{s}{\tau} \rfloor$. Analog sei $X_\tau(t) = X_\tau^m$, $m = \lfloor \frac{t}{\tau} \rfloor + 1$.

$$\begin{aligned} \text{dist}(X_\tau(s), X_\tau(t)) &= \text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^m) \\ &\stackrel{\Delta\text{-Ungl.}}{\leq} \text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1}) + \text{dist}(X_\tau^{n+1}, X_\tau^{n+2}) + \dots + \text{dist}(X_\tau^{m-1}, X_\tau^m) \\ &= \sum_{n \leq k \leq m-1} \text{dist}(X_\tau^k, X_\tau^{k+1}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{dist}(X_\tau(s) - X_\tau(t))^2 &\leq \left(\sum_{\frac{s}{\tau} \leq k \leq \frac{t}{\tau}} \text{dist}(X_\tau^k, X_\tau^{k+1}) \right)^2 \\ &\stackrel{CS}{\leq} \left(\sum_{\frac{s}{\tau} \leq k \leq \frac{t}{\tau}} \text{dist}(X_\tau^k, X_\tau^{k+1})^2 \right) \underbrace{\left(\sum_{\frac{s}{\tau} \leq k \leq \frac{t}{\tau}} 1 \right)}_{\frac{t}{\tau} - (\frac{s}{\tau} - 1)} \end{aligned}$$

\square

Lemma 1.6 (Energy gradient estimate). *Sei eine zugrundeliegende Riemannstruktur (Differenzierbare Mannigfaltigkeit, Metrik, Tangentenräume) gegeben und das Energie-Funktional hinreichend glatt. Dann gilt*

$$\tau \sum_{n \geq 0} \|\text{grad } E(X_\tau^n)\|^2 \leq 2[E(X^0) - \inf E] \quad (1.7)$$

bzw. im stetigen Falle für E_τ (nach dessen Definition):

$$\int_0^\infty \|\text{grad } E(X_\tau)\|^2 dt \leq 2[E(X^0) - \inf E] \quad (1.8)$$

Beweis. Sei ω ein beliebiger Tangentenvektor auf X_τ^{n+1} . Wir betrachten Perturbationen von X_τ^{n+1} “entlang ω ”: Definiere für ein kleines $\varepsilon > 0$ einen “Pfad“ \tilde{X}_ε folgendermaßen:

$$\tilde{X}_0 = X_\tau^{n+1}, \quad \left. \frac{d\tilde{X}_\varepsilon}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = \omega \quad (1.9)$$

Da X_τ^{n+1} Minimierer ist, gilt offensichtlich

$$E(X_\tau^{n+1}) + \frac{\text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1})^2}{2\tau} \leq E(\tilde{X}_\varepsilon) + \frac{\text{dist}(X_\tau^n, \tilde{X}_\varepsilon)^2}{2\tau} \quad \forall \varepsilon > 0 \quad (1.10)$$

Unter der Annahme, dass das Energiefunktional glatt ist, gilt, jeweils mit Taylor:

$$\tilde{X}_\varepsilon = X_0 + \left. \frac{d\tilde{X}_\varepsilon}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \cdot \varepsilon + O(\varepsilon^2), \quad (1.11)$$

$$\begin{aligned} E(\tilde{X}_\varepsilon) &= E(X_0) + \langle \text{grad } E(X_0), \underbrace{\tilde{X}_\varepsilon - X_0}_{\omega\varepsilon + O(\varepsilon^2)} \rangle + O((\tilde{X}_\varepsilon - X_0)^2) \\ &= E(X_\tau^{n+1}) + \varepsilon \langle \text{grad } E(X_\tau^{n+1}), \omega \rangle + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (1.12)$$

Außerdem gilt:

$$\begin{aligned} &\text{dist}(X_\tau^n, \tilde{X}_\varepsilon)^2 - \text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1})^2 = \\ &\stackrel{\text{binom.}}{=} \left(\text{dist}(X_\tau^n, \tilde{X}_\varepsilon) + \text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1}) \right) \left(\text{dist}(X_\tau^n, \tilde{X}_\varepsilon) - \text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1}) \right) \\ &\stackrel{\Delta\text{-Ungl.}}{\leq} \left(\text{dist}(X_\tau^n, \tilde{X}_\varepsilon) + \text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1}) \right) \text{dist}(X_\tau^{n+1}, \tilde{X}_\varepsilon) \\ &\stackrel{\Delta\text{-Ungl.}}{\leq} \left(2 \text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1}) + \text{dist}(X_\tau^{n+1}, \tilde{X}_\varepsilon) \right) \text{dist}(X_\tau^{n+1}, \tilde{X}_\varepsilon) \end{aligned}$$

Beobachtung:

$$\text{dist}(X_\tau^{n+1}, \tilde{X}_\varepsilon) = \varepsilon \|\omega\| + o(\varepsilon)$$

. Damit wird aus obiger Gleichung

$$\frac{\text{dist}(X_\tau^n, \tilde{X}_\varepsilon)^2}{2\tau} \leq \frac{\text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1})^2}{2\tau} + \varepsilon \text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1}) \frac{\|\omega\|}{\tau} + o(\varepsilon) \quad (1.13)$$

Jetzt kombinieren wir die drei Aussagen (1.10), (1.12) und (1.13): Dazu setzen wir zunächst (1.12) in (1.10) ein.

$$\begin{aligned} &E(X_\tau^{n+1}) + \frac{\text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1})^2}{2\tau} \leq E(X_\tau^{n+1}) + \varepsilon \langle \text{grad } E(X_\tau^{n+1}), \omega \rangle + O(\varepsilon^2) + \frac{\text{dist}(X_\tau^n, \tilde{X}_\varepsilon)^2}{2\tau} \\ &\Rightarrow \frac{\text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1})^2}{2\tau} \stackrel{1.13}{\leq} \varepsilon \langle \text{grad } E(X_\tau^{n+1}), \omega \rangle + O(\varepsilon^2) + \frac{\text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1})^2}{2\tau} + \varepsilon \text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1}) \frac{\|\omega\|}{\tau} + o(\varepsilon) \\ &\Rightarrow 0 \leq \varepsilon \left(\langle \text{grad } E(X_\tau^{n+1}), \omega \rangle + \text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1}) \frac{\|\omega\|}{\tau} + \underbrace{\frac{o(\varepsilon)}{\varepsilon} + \frac{O(\varepsilon^2)}{\varepsilon}}_{\rightarrow 0 \text{ für } \varepsilon \rightarrow 0} \right) \end{aligned}$$

Nun wählen wir ω explizit: $\omega = -\text{grad } E(X_\tau^{n+1})$ (im Tangentialraum als Ableitung eines Funktionals auf dem Vektorraum?)

$$\begin{aligned} 0 &\leq \underbrace{\langle \text{grad } E(X_\tau^{n+1}), -\text{grad } E(X_\tau^{n+1}) \rangle}_{-\|\text{grad } E(X_\tau^{n+1})\|^2} + \frac{\text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1}) \|\text{grad } E(X_\tau^{n+1})\|}{\tau} \\ &\Rightarrow \frac{\text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1})^2}{\tau^2} \geq \|\text{grad } E(X_\tau^{n+1})\|^2 \end{aligned}$$

In Verbindung mit der square distance estimate (1.5) kommen wir schließlich zu der geforderten Gleichung:

$$2\tau(E(X^0) - \inf E) \geq \sum_{n \geq 0}^{1.5} \text{dist}(X_\tau^n, X_\tau^{n+1})^2 \geq \tau^2 \sum_{n \geq 1} \|\text{grad } E(X_\tau^n)\|^2 \quad (1.14)$$

TODO: warum steht im Buch Summe über $n \geq 0$? Ist auf dist-Seite nicht einmal definiert. \square

Bemerkung 1.7. Die Aussage des Lemmas für X_τ gilt sogar in einer nicht-riemannschen Situation mit einer passenden Definition der Norm des Gradienten.

Diese drei Abschätzungen sollten die relative Kompaktheit von (X_τ) für $\tau \rightarrow 0$ sicherstellen, und damit die Existenz einer konvergenten Teilfolge. (Wie folgt relative Kompaktheit für X_τ aus Abschätzungen für das Energiefunktional??)

Um abschließend zum Limes überzugehen, müssen wir ein dem letzten Beweis ähnliches Prozedere unterlaufen: Kleine Perturbationen, ω beliebig lassen. Eine approximierte Euler-Lagrange-Gl finden. siehe nächstes kapitel.

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

(Notation in diesem Abschnitt: $\rho(t) = \rho(\cdot, x)$ u.Ä.)

Die hergeleitete Strategie wurde zum ersten Mal am Beispiel der linearen Fokker-Plank-Gleichung angewandt.

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

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

Alle Lösungen $\rho(x, t)$ sind ebenfalls Wahrscheinlichkeitsdichten auf \mathbb{R}^n für fast alle t fest, d.h. $\rho(x, t) \geq 0$ für fast alle $(x, t) \in \mathbb{R}^n \times (0, \infty)$ und $\int_{\mathbb{R}^n} \rho(x, t) dx = 1$ für fast alle $t \in (0, \infty)$. Eine Wahrscheinlichkeitsdichte ρ erfüllt die (LFP) im schwachen Sinne, falls für alle Testfunktionen ζ gilt:

$$\int_X \int_T (\rho \Delta \zeta + \rho \nabla V \cdot \nabla \zeta - \rho \zeta_t) dt dx = \int \rho_0 \zeta(x, 0) dx \quad (2.2)$$

Die Fokker-Planck Gleichung beschreibt die zeitabhängige Entwicklung einer Wahrscheinlichkeitsdichte für einen stochastischen Prozess. Sie wird verwendet, um die Wahrscheinlichkeitsdichte für Ort oder Geschwindigkeit eines Partikels zu beschreiben, das verschiedenen Kräften ausgesetzt ist.

Bemerkung 2.2. Wenn V geeignete Wachstumsbedingungen erfüllt, existiert eine eindeutige stationäre Lösung zur (LFP).

Auch wenn die explizite Lösung der Gleichung bereits bekannt war, liefert die Anwendung des hier zu zeigenden Approximationsverfahren interessante Einblicke in die Methode, die auch für andere Diffgleichungen und in numerischer Implementierung Anwendung findet.

Wir konstruieren ein zeitlich diskretisiertes, iteratives variationelles Verfahren (d.h. die Lösung minimiert ein bestimmtes konvexes Funktional), dessen Lösungen gegen die Lösung der linearen Fokker-Planck-Gleichung konvergiert.

Definition 2.3. Für eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho \in P(\mathbb{R}^n)$ und ein hinreichend glattes Potential V sei das **Freie Energie Funktional** $E(\rho)$ gegeben durch:

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

Bemerkung 2.4. • Das Freie Energie Funktional ist wohldefiniert für Lösungen $\rho(x, t)$ der (LFP), falls $E(\rho_0) < \infty$.

- $E(\rho(x, t))$ ist für Lösungen des (LFP) bzgl. der Zeit monoton abnehmend.

Wir wollen die Beziehung zwischen Fokker-Planck und dem freien Energie-Funktional zeigen, d.h. dass die Dynamik als Gradientenfluss interpretiert werden kann für die Frei Energie mit der Wassersteinmetrik, d.h. die Lösung der Gleichung folgt der Richtung des steilsten Abstieges des Funktionals. Die für dieses Setting benötigte Metrik wird die bereits eingeführte Wassersteinmetrik sein.

Wiederholung:

Definition 2.5. Seien $f, g \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ zwei Wahrscheinlichkeitsmaße (Notation: bzw. ihre assoziierten Wahrscheinlichkeitsdichten.)

$$W_2(f, g) := \inf_{\pi \in \Pi(f, g)} \left\{ \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} |x - y|^2 d\pi(x, y) \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (2.4)$$

$\Pi(f, g)$: Menge aller multivariaten Wahrscheinlichkeitsmaße auf $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ mit Randverteilungen f und g .

Da die Wassersteinmetrik zusammen mit dem Raum aller Wahrscheinlichkeitsmaße aber keine Riemann'sche Mannigfaltigkeit ist, müssen wir zeitlich analog zum ersten Teil des Vortrags diskretisieren, damit der Gradient Sinn macht.

Theorem 2.6. Sei $V(x)$ ein glattes Potential, das folgende Wachstumsbedingung erfüllt:

$V(x) = O(|x|^2)$ für $x \rightarrow \infty$.

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 $\tau \rightarrow 0$ für alle $t \in (0, \infty)$ schwach in $L^1(\mathbb{R}^n)$ gegen die eindeutige Lösung $\rho(x, t) \in C^\infty((\mathbb{R}^n \times (0, \infty)))$ der linearen Fokker-Planck-Gleichung (2.1) mit Anfangswert ρ_0 .

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

$$\rho_\tau(t) := \rho_\tau^n \quad \text{für } t \in [n\tau, (n+1)\tau) \quad (2.5)$$

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

$$\rho \mapsto E(\rho) + \frac{W_2(\rho_\tau^n, \rho)^2}{2\tau}, \quad (2.6)$$

Damit gilt: Die Fokker-Planck-Gleichung ist der Gradientenfluss für das Freie-Energie Funktional mit der Wassersteindistanz.

Beweis. 1. Da E strikt konvex im üblichen Sinne ist, ebenso wie die Wassersteinmetrik, ist der Minimierer in (2.6) eindeutig.

2. Analog zu (1.4) erhält man eine obere Grenze für unser Funktional: $\sup_{t \geq 0} E(\rho_\tau(t)) = \sup_n E(\rho_\tau^n) \leq E(\rho_0)$ Dies garantiert die Straffheit der Familie $(\rho_\tau)_{\tau > 0}$ in der x -Variable sowie schwache L^1 -Kompaktheit-

3. Die approximate Hölder 1/2 Ungleichung (1.6) hinsichtlich der Wassersteindistanz sichert die approximative uniforme equikontinuität in zeit von $(\rho_\tau)_\tau$.

\Rightarrow All dies ist hinreichend, damit (betrachte falls nötig Teilfolge $(\tau_k)_k$) $(\rho_\tau)_\tau$ zu einer Funktion $\rho : \mathbb{R}_+ \mapsto P_{ac}(\mathbb{R}^n)$ konvergiert, stetig falls $P_{ac}(\mathbb{R}^n)$ mit der schwachen L^1 -Topologie verknüpft ist.

4. Erfüllt nun dieser Grenzwert den Satz, d.h. die (LFK)?

Wir betrachten eine geeignete Variation von ρ_τ^{n+1} .

Sei ξ ein glattes Vektorfeld mit kompaktem Träger, und T_ε eine Familie von Kurven verknüpft mit dem Vektorfeld $\text{Id} + \varepsilon \xi$. Dann definiere folgende Interpolation (\rightarrow Verbindung zu Vortrag Alex Book)

$$\tilde{\rho}_\varepsilon = T_\varepsilon \# \rho_\tau^{n+1}$$

Pushforward: $(\tilde{\rho}_\varepsilon \mathcal{L}^k)(B) = (\rho_\tau^{n+1} L^k)(T_\varepsilon^{-1}(B))$

Für ε klein genug ist T_ε ein C^1 -diffeomorphismus (fixed point theoren und $\det(\nabla T_\varepsilon) > 0$) und invertierbar.

5. Es gilt aufgrund der Invertierbarkeit von T_ε und Dichtheit von ρ_τ^{n+1} mithilfe von Substitution (siehe Skript Optimal Transport, Savaré, und Vortrag Alex Book)

$$E(\tilde{\rho}_\varepsilon) = \int \tilde{\rho}_\varepsilon \log \tilde{\rho}_\varepsilon + \int \tilde{\rho}_\varepsilon V \quad (2.7)$$

$$= \int \rho_\tau^{n+1} \log \frac{\rho_\tau^{n+1}}{\det(I_k \varepsilon \nabla \xi)} + \int \rho_\tau^{n+1}(x) V(x + \varepsilon \xi(x)) dx. \quad (2.8)$$

6. Aus der energy estimate folgt andererseits, dass $\rho_\tau^n, \rho_\tau^{n+1}$ absolut stetig (bzgl. Lebesgue-maß)) sind. Damit (Brenier?) existiert eine bzgl. der Wassersteinmetrik optimale Abbildung $\nabla \phi$ s.t. $\nabla \phi \# \rho_\tau^n = \rho_\tau^{n+1}$, also gilt

$$W_2(\rho_\tau^n, \rho_\tau^{n+1})^2 = \int \rho_\tau^n(x) |x - \nabla \phi(x)|^2 dx. \quad (2.9)$$

Dann können wir $\tilde{\rho}_\varepsilon$ auch in Abhängigkeit von ρ_τ^n statt ρ_τ^{n+1} schreiben: $\tilde{\rho}_\varepsilon = [(\text{Id} + \varepsilon \xi) \circ \nabla \phi] \# \rho_\tau^n$. Wir verwenden nun nach der Definition der Wassersteinmetrik analog zum letzten Schritt die bestimmte Abbildung $[(\text{Id} + \varepsilon \xi) \circ \nabla \phi]$ zwischen $\tilde{\rho}_\varepsilon$ und ρ_τ^n , diesmal haben wir allerdings keinen Anspruch darauf, dass dies tatsächlich die optimale wäre, und erlangen so folgende Ungleichung:

$$W_2(\rho_\tau^n, \tilde{\rho}_\varepsilon)^2 \leq \int |x - \underbrace{\nabla \phi(x) - \varepsilon \xi \circ \nabla \phi(x)}_{[(\text{Id} + \varepsilon \xi) \circ \nabla \phi](x)}|^2 \rho_\tau^n(x) dx$$

Damit kommen wir auf

$$0 \leq \frac{W_2(\rho_\tau^n, \tilde{\rho}_\varepsilon)^2}{2\tau} + E(\tilde{\rho}_\varepsilon) - \frac{W_2(\rho_\tau^n, \rho_\tau^{n+1})^2}{2\tau} - E(\rho_\tau^{n+1}) \quad (2.10)$$

$$\stackrel{\log(\frac{a}{b}) = \log a - \log b}{\leq} \int \rho_\tau^n(x) \left(\frac{|x - \nabla \phi(x) - \varepsilon \xi \circ \nabla \phi(x)|^2 - |x - \nabla \phi(x)|^2}{2\tau} \right) dx \quad (2.11)$$

$$+ \int \rho_\tau^{n+1}(x) [V(x + \varepsilon \xi(x)) - V(x)] dx - \int \rho_\tau^{n+1}(x) \log(\det(I_k + \varepsilon \nabla \xi(x))) dx \quad (2.12)$$

wobei die Nichtnegativität aus der Minimierungseigenschaft von ρ_τ^{n+1} folgt.

Dividiere durch ε und lasse dieses gegen 0^+ gehen, so bekommen wir (Differenzenquotienten! Ableitung an der Stelle $\varepsilon = 0!$):

$$0 \leq \frac{1}{\tau} \int \rho_\tau^n(x) \langle \nabla \phi(x) - x, \xi \circ \nabla \phi(x) \rangle dx + \int \rho_\tau^{n+1}(x) \langle \nabla V(x), \xi(x) \rangle dx \\ - \int \rho_\tau^{n+1}(x) (\nabla \cdot \xi)(x) dx$$

Da dies genauso für $-\xi$ gilt, bekommen wir Gleichheit. Umformuliert:

$$\frac{1}{\tau} \int \rho_\tau^n(x) \langle \nabla \phi(x) - x, \xi \circ \nabla \phi(x) \rangle dx = \int \rho_\tau^{n+1}(x) [(\nabla \cdot \xi)(x) - \langle \nabla V(x), \xi(x) \rangle] dx \quad (2.13)$$

7. Jetzt sei ξ derart, dass für ein $\zeta \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$ gilt $\xi = \nabla \zeta$. Es gilt (erweiterung):

$$\zeta(\nabla \phi(x)) - \zeta(x) = \langle \nabla \phi(x) - x, \nabla \zeta \circ \nabla \phi(x) \rangle + O(|x - \nabla \phi(x)|^2) \quad (2.14)$$

und damit kann die linke Seite von (2.13) ersetzt werden durch

$$\frac{1}{\tau} \left(\int \rho_\tau^n(x) \zeta \circ \nabla \phi(x) dx - \int \rho_\tau^n(x) \zeta(x) dx \right) + O\left(\frac{1}{\tau} \int \rho_\tau^n(x) |x - \nabla \phi(x)|^2 dx\right) \\ = \frac{1}{\tau} \left(\int \rho_\tau^{n+1} \zeta - \int \rho_\tau^n \zeta \right) + O\left(\frac{W_2(\rho_\tau^n, \rho_\tau^{n+1})^2}{\tau}\right)$$

8. Setzt dies in (2.13) ein und nun wird aufsummiert von $n_1 = \lfloor t_1/\tau \rfloor$ bis zu $n_2 = \lfloor t_2/\tau \rfloor + 1$ für $t_1, t_2 \in [0, \infty)$ beliebige Zeiten (Grenzen: siehe Beweis der Energy Gradient Estimate):

$$\int \rho_\tau(t_2) \zeta - \int \rho_\tau(t_1) \zeta + O\left(\sum_{n=n_1}^{n_2} W_2(\rho_\tau^n, \rho_\tau^{n+1})^2\right) \quad (2.15)$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \int \rho_\tau(t) (\Delta \zeta - \nabla V \cdot \nabla \zeta) dt + O(\tau) \quad (2.16)$$

Wobei wir benutzt haben, dass $\Delta \zeta$ und $\nabla V \cdot \nabla \zeta$ beschränkte Funktionen sind und $\rho_\tau(t) = \rho_\tau(t, \cdot)$ Wahrscheinlichkeitsmaß auf \mathbb{R}^n .

9. Jetzt benutzen wir die total square estimate wrt W_2 und deduzieren für alle fixed t_1, t_2 :

$$\int \rho_\tau(t_2) \zeta - \int \rho_\tau(t_1) \zeta + O(\tau) = \int_{t_1}^{t_2} \int \rho_\tau(t) (\Delta \zeta - \nabla V \cdot \nabla \zeta) dt + O(\tau) \quad (2.17)$$

10. Grenzwert $\tau \rightarrow 0$:

$$\int \rho(t_2) \zeta - \int \rho(t_1) \zeta = \int_{t_1}^{t_2} \int \rho(t) (\Delta \zeta - \nabla V \cdot \nabla \zeta) dt \quad (2.18)$$

die schwache Formulierung der linearen Fokker-Planck-Gleichung mit Potential V , d.h.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \Delta \rho + \nabla \cdot (\rho \nabla V) \quad (2.19)$$

Diese Gleichung ist erfüllt bei jedem "weak cluster point" der Folge (ρ_τ) ; da es eine eindeutige Lösung annimmt, muss diese Lösung der Grenzwert für $\tau \rightarrow 0$ sein.

Damit ist der Beweis erbracht. □

Bemerkung 2.7.

3 stuff