Prof. Dr. Daniel Matthes
Optimaler Transport - Geometrie und Anwendungen

Manuela Lambacher
09.12.2015

Zeit-Diskretisierung von Gradientenflüssen

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

Betrachte

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

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

Variationelle Konstruktion des **approximierten Gradientenflusses** $(\bar{X}_\tau)$ mit der euklidischen Metrik:
Sei $\tau > 0$ die zeitliche Schrittweite, $n \in \mathbb{N}_0$, dann ist die Folge $(X_\tau^n)_{n\geq 0}$ definiert durch:

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

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

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

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

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

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

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 $\bar{X}_\tau$)**.**
Für $s < t$ gilt:

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

Corollar 1.5.

$$\bar{X}_{\tau_i}(t) \overset{\tau_i \to 0}{\longrightarrow} X \in \mathcal{C}^{\frac{1}{2}}([0,\infty);\mathbb{R}^k) \text{ gleichmäßig bzgl. } t \geq 0,$$

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

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

2 Der approximierte Gradientenfluss der linearen Fokker-Planck-Gleichung

Die **lineare Fokker-Planck-Gleichung** mit Potential $V \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^d)$ und Anfangswert $\rho_0 \in P_{ac,2}(\mathbb{R}^d)$ 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 $T > 0$. $\rho(\cdot,t) \in P_{ac,2}(\mathbb{R}^d)$ erfüllt die (LFP) im schwachen Sinne, falls für alle $\psi \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ gilt:

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

Definition 2.1. *Für eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x) \in P_{ac,2}(\mathbb{R}^d)$ und ein Potential $V \in L^1(\mathbb{R}^d)$ ist das **Freie Energie Funktional** $H(\rho)$ gegeben durch:*

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

Interpretation: (FP) entspricht $\dfrac{\partial \rho}{\partial t} = -\operatorname{grad}_{W_2} H(\rho)$

Theorem 2.2. *Sei $V \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^d)$ ein Potential, sodass $V(x) = O(|x|^2)$ für $x \to \infty$.*
Sei $\rho_0 \in P_{ac,2}(\mathbb{R}^d)$ 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:

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

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

Der approximierte Gradientenfluss $\bar{\rho}_\tau : (0,\infty) \times \mathbb{R}^d \to [0,\infty)$ 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) $\rho_\tau^0 := \rho^0$;

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