



Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Fachbereich Mathematik und Informatik
Institut für Numerische und Angewandte Mathematik

Bachelorarbeit

Douglas-Rachford-Optimierung von dynamischen optimalen Transport mit Masseänderung

Autor: Farina Bolte
Matr.: 406629
Abgabedatum: 17. Oktober 2017
Betreuer: Prof. Dr. Benedikt Wirth

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	3
2. Optimaler Transport	4
3. Die Wassersteindistanz und Kurven im Wassersteinraum	6
3.1. Definition der Wassersteindistanz	6
3.2. Lipschitz-stetige Kurven im \mathbb{W}_p und die Kontinuitätsgleichung	8
3.3. Geodäten mit konstanter Geschwindigkeit im \mathbb{W}_p	10
4. Das Benamou-Brenier Funktional \mathcal{B}_p	13
5. Numerische Lösung des Benamou-Brenier Problems	16
5.1. Diskretisierung	17
5.2. Proximale Operatoren	18
5.2.1. Berechnung von $\text{Prox}_{\gamma\mathcal{J}}$	19
5.2.2. Berechnung von $\text{Prox}_{\gamma\iota_C}$	20
5.3. Douglas-Rachford Algorithmus	21
6. Dynamischer optimaler Transport mit Masseänderung	22
6.1. Diskretisierung	23
6.2. Proximale Operatoren	24
6.3. Numerische Experimente	25
7. Fazit und Ausblick	29
Literaturverzeichnis	30
A. Unbalanced Douglas-Rachford Algorithmus	31

1. Einleitung

In dieser Bachelorarbeit beschäftigen wir uns mit dem Douglas-Rachford Algorithmus zur Lösung des Problems des optimalen Transports, bei dem wir eine Masseänderung während des Transports zulassen. Wenn wir „optimaler Transport“ hören, haben wir sofort ein logistisches Problem vor Augen, z.B. wie man Waren von einer Fabrik am günstigsten zu ihrem Verkaufsstandort befördert. Eine ähnliche Frage stellte sich auch Gaspard Monge vor knapp 240 Jahren, als er das Problem des optimalen Transports zum ersten Mal mathematisch formulierte. Bei ihm handelte es sich um den Rohstoff Sand, der zu den entsprechenden Fabriken transportiert werden musste.

Im Laufe der Zeit beschäftigten sich viele Mathematiker mit dieser Fragestellung und 1942 gelang dem Russen Kantorovich ein Durchbruch, indem er Monges Problemstellung umformulierte, sodass es endlich möglich war die Existenz des optimalen Transports zu beweisen.

Danach kamen Überlegungen auf den optimalen Transport numerisch zu berechnen. Hier haben Jean-David Benamou und Yann Brenier wegweisende Arbeit geleistet, weil es ihnen gelungen ist, das bisher nur lineare Problem in ein konvexes numerisch zu berechnendes Problem umzuschreiben. Diese Entwicklung eröffnete viele weitere Anwendungsgebiete des optimalen Transports. Darunter sind z.B. das maschinelle Sehen und in der Bildverarbeitung die Videorestaurierung, der Farbtransfer, die Textursynthese und die medizinische Bildregistrierung. Weiterhin wird er in der Computergrafik bei Interpolationen, in der algorithmischen Geometrie bei Oberflächenrekonstruktionen und zur Modellierung verschiedener physikalischer Phänomene eingesetzt. Am Ende dieser Arbeit werden wir ein paar Beispiele zur Bildinterpolation sehen, die wir mit dem Douglas-Rachford (DR) Algorithmus erzeugt haben.

Die Arbeit ist wie folgt aufgebaut. Zuerst stellen wir das Problem des optimalen Transports vor und geben sowohl die Monge- als auch die Kantorovichformulierung an. In Kapitel 3 führen wir die Wassersteindistanz ein, dabei handelt es sich um eine Metrik im Wassersteinraum. Abschnitt 3.2 beschäftigt sich mit dem Zusammenhang von Lipschitzstetigen Kurven im Wassersteinraum und Vektorfeldern, die die Kontinuitätsgleichung lösen. Zusammen mit Abschnitt 3.3, der über Geodäten im Wassersteinraum handelt, bildet dieser die Grundlage für Kapitel 4. Dort führen wir das Benamou-Brenier Funktional ein und beweisen die Äquivalenz des Benamou-Brenier Problems zum Monge und Kantorovich Problem. Ab Kapitel 5 beginnt der numerische Teil und wir treffen alle Vorbereitungen den DR Algorithmus zu implementieren. In Kapitel 6 fügen wir dem Benamou-Brenier Funktional einen Term hinzu, der uns eine Masseänderung während des Transports erlaubt, und wiederholen die Schritte des fünften Kapitels mit leichten Änderungen. Schließlich führen wir ein paar numerische Experimente mit dem nun erweiterten DR Algorithmus durch und geben ein Fazit.

2. Optimaler Transport

Zum ersten Mal kam die Frage des Optimalen Transports im Jahre 1781 in Frankreich auf. Gaspard Monge überlegte sich wie er eine vorgegebene Verteilung einer Masse, z.B. Erde, am kostengünstigsten in eine neue gegebene Masseverteilung überführen könnte (z.B. eine Verteilung von Fabriken, die die Erde benötigen). Mathematisch formuliert lautet das Problem wie folgt:

Gegeben seien zwei Dichten $f \geq 0$ und $g \geq 0$ im \mathbb{R}^d mit der Bedingung

$$\int_{\mathbb{R}^d} f(x) dx = \int_{\mathbb{R}^d} g(y) dy = 1.$$

Somit ist sichergestellt, dass weder Masse beim Transport verloren geht noch Neue hinzukommt. Wir suchen nun eine Transportabbildung $T : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ mit

$$\int_A g(y) dy = \int_{T^{-1}(A)} f(x) dx \quad (2.1)$$

für jede Borel-Teilmenge $A \subseteq \mathbb{R}^d$, sodass die Kosten

$$M(T) := \int_{\mathbb{R}^d} |T(x) - x| f(x) dx$$

minimiert werden.

In diesem Fall werden die Kosten mittels der Euklidischen Metrik berechnet. Allerdings lässt sich Monges Formulierung erweitern, sodass wir auch allgemeinere Kostenfunktionen einsetzen und statt mit Dichten mit Maßen arbeiten können.

Bis hier hin orientiert sich der obige Text an der Einleitung zum Optimalen Transport von [1][S.vii-ix]. Die weiteren Problemstellungen in diesem Abschnitt sind dem Kapitel 1 von [1][S.1-2] entnommen.

Zunächst wollen wir die Bedingung (2.1) für Maße umformulieren und benötigen dafür die folgende Definition. Für den Rest des Kapitels seien $X, Y \subseteq \mathbb{R}^d$ und $\mathcal{P}(X)$ sowie $\mathcal{P}(Y)$ Wahrscheinlichkeitsräume.

Definition 2.1. *Pushforward eines Maßes*

Seien $\mu \in \mathcal{P}(X)$ und $\nu \in \mathcal{P}(Y)$ zwei Wahrscheinlichkeitsmaße und $T : X \rightarrow Y$ eine Abbildung, welche in unserem Fall eine Transportabbildung darstellen soll. Dann definieren wir den *Pushforward* $T_{\#}\mu$ von μ unter T für jede messbare Menge A durch

$$(T_{\#}\mu)(A) := \mu(T^{-1}(A))$$

oder für jede messbare Funktion ϕ durch

$$\int_Y \phi \, d(T_{\#}\mu) = \int_X (\phi \circ T) \, d\mu.$$

Verallgemeinert schreibt sich das Problem des Optimalen Transports nach Monge wie folgt:

Problem 2.2. *Monge Formulierung*

Gegeben seien zwei Wahrscheinlichkeitsmaße $\mu \in \mathcal{P}(X)$ und $\nu \in \mathcal{P}(Y)$ sowie eine Kostenfunktion $c : X \times Y \rightarrow [0, \infty]$ und eine Transportabbildung $T : X \rightarrow Y$. Zu lösen ist

$$\inf \left\{ M(T) := \int_X c(x, T(x)) \, d\mu(x) : T_{\#}\mu = \nu \right\},$$

wobei $T_{\#}\mu = \nu$ die umformulierte Bedingung (2.1) ist.

Leider birgt die Monge Formulierung einige Probleme. Es lassen sich nämlich keine allgemeinen Aussagen über die Existenz einer solchen optimalen Transportabbildung T treffen und ein Massensplitting ist ebenfalls nicht möglich.

Abhilfe verschaffte der russische Mathematiker Kantorovich 1942, indem er die Bewegung der einzelnen Teilchen durch ein Maß γ auf $X \times Y$ beschrieb und statt jedem x seinen Zielstandort $T(x)$ zuzuordnen, er jedem Paar (x, y) die Anzahl der Teilchen, die von x nach y gehen, zuordnete. Dies erlaubt uns Masse von einem Punkt x auf verschiedene Zielorte y aufzuteilen. Bevor wir zur mathematischen Formulierung kommen, stellen wir noch eine Definition voran.

Definition 2.3. *Menge der Transportpläne*

Seien $\mu \in \mathcal{P}(X)$ und $\nu \in \mathcal{P}(Y)$. Wir bezeichnen mit $\Pi(\mu, \nu)$ die *Menge der Transportpläne* von μ nach ν , die gegeben ist durch

$$\Pi(\mu, \nu) = \{ \gamma \in \mathcal{P}(X \times Y) : (\text{proj}_X)_{\#}\gamma = \mu, (\text{proj}_Y)_{\#}\gamma = \nu \}.$$

Als Kantorovich Formulierung des Optimalen Transports erhalten wir nun:

Problem 2.4. *Kantorovich Formulierung*

Gegeben seien $\mu \in \mathcal{P}(X)$ und $\nu \in \mathcal{P}(Y)$ sowie eine Kostenfunktion $c : X \times Y \rightarrow [0, \infty]$. Wir betrachten das Problem

$$\inf \left\{ K(\gamma) := \int_{X \times Y} c(x, y) \, d\gamma(x, y) : \gamma \in \Pi(\mu, \nu) \right\}.$$

Da $\int_{X \times Y} c(x, y) \, d\gamma(x, y)$ im Gegensatz zur Monge Formulierung linear ist, können wir beweisen, dass ein optimaler Transportplan γ zwischen μ und ν existiert und das Problem somit eine Lösung besitzt. Siehe [1][S.6] für einen genauen Beweis.

3. Die Wassersteindistanz und Kurven im Wassersteinraum

In diesem Kapitel definieren wir die Wassersteindistanz (auch Monge-Kantorovich-Distanz, L^p Kantorovich-Wasserstein-Distanz oder “Earth Mover’s Distance“ genannt), die eine Metrik zwischen zwei Wahrscheinlichkeitsmaßen darstellt. Sie beschreibt wie bei dem Problem des optimalen Transports die minimalen Kosten, die man aufbringen muss um Masse von einer Verteilung zu einer anderen zu transportieren. Weiter definieren wir den Wassersteinraum und beschäftigen uns mit Lipschitz-stetigen Kurven und Geodäten in diesem Raum.

3.1. Definition der Wassersteindistanz

Wie oben erwähnt geben wir in diesem Abschnitt die Definition der Wassersteindistanz und des Wassersteinraums in $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ für $p \in [1, \infty)$. Analog zum optimalen Transport definieren wir zwei Formulierungen der Wassersteindistanz, da sich manche Beweise leichter in der einen oder in der anderen Formulierung führen lassen. Die nachfolgenden Definitionen und Beweise sind [1][S.161-165] entnommen. Da die Wassersteindistanz als Parameter zwei Wahrscheinlichkeitsmaße erhält und wir verhindern wollen, dass diese den Abstand unendlich zu einander haben, müssen wir unsere Maße zunächst einschränken. Dazu definieren wir

$$\mathcal{P}_p(\Omega) := \left\{ \mu \in \mathcal{P}(\Omega) : \int_{\Omega} |x|^p d\mu(x) < \infty \right\}.$$

Das bedeutet, dass das p -te Moment von μ beschränkt ist. Ist der Raum Ω beschränkt gilt $\mathcal{P}_p(\Omega) = \mathcal{P}(\Omega)$.

Definition 3.1. *Die Wassersteindistanz*

Für $\mu, \nu \in \mathcal{P}_p(\Omega)$ und $p \in [1, \infty)$ definieren wir

$$W_p(\mu, \nu) := \min \left\{ \int_{\Omega \times \Omega} |x - y|^p d\gamma(x, y) : \gamma \in \Pi(\mu, \nu) \right\}^{\frac{1}{p}}$$

als die *Wassersteindistanz* in der Kantorovich Formulierung. Dies ist die p -te Wurzel der minimalen Transportkosten für die Kosten $c(x, y) = |x - y|^p$.

Für die Monge Formulierung der *Wassersteindistanz* benutzen wir Transportabbildungen T und erhalten mit derselben Kostenfunktion c und den gleichen Bedingungen an μ, ν und p

$$W_p(\mu, \nu) := \min \left\{ \int_{\Omega} |T(x) - x|^p d\mu(x) : T_{\#}\mu = \nu \right\}^{\frac{1}{p}}.$$

Bevor wir beweisen, dass W_p eine Metrik ist, geben wir noch folgende Definition aus [2][S.279] an.

Definition 3.2. *Absolut stetiges Maß*

Sei (Ω, P) ein Maßraum und seien $\mu : P \rightarrow (-\infty, \infty]$ und $\nu : P \rightarrow (-\infty, \infty]$ zwei signierte Maße (d.h. sie können auch negative Werte annehmen). Das Maß ν heißt *absolut stetig* bezüglich μ , falls jede μ -Nullmenge eine ν -Nullmenge ist. Wir schreiben $\nu \ll \mu$.

Proposition 3.3. W_p ist eine Metrik über $\mathcal{P}_p(\Omega)$.

Beweis. Es ist zu zeigen:

i) W_p ist größer gleich 0, da $|x-y|^p \geq 0$ und $\gamma \geq 0$ sind (da $\gamma \in \Pi(\mu, \nu)$). Aus $W_p(\mu, \nu) = 0$ für alle $\mu, \nu \in \mathcal{P}_p(\Omega)$ folgt, dass ein $\gamma \in \Pi(\mu, \nu)$ existiert, sodass $\int_{\Omega \times \Omega} |x-y|^p d\gamma = 0$ gilt. So ein $\gamma \in \Pi(\mu, \nu)$ ist konzentriert auf der Menge $\{(x, y) | x = y\}$. Für eine Testfunktion $\phi \in C(\Omega)$ haben wir dann mit $\mu = (\text{proj}_X)_{\#}\gamma$, $\nu = (\text{proj}_Y)_{\#}\gamma$ und mit der Anwendung von Definition 2.1

$$\begin{aligned} \int \phi(x) d\mu(x) &= \int \phi(x) d(\text{proj}_X)_{\#}\gamma = \int \phi(\text{proj}_X(x, y)) d\gamma(x, y) = \int \phi(x) d\gamma \\ &= \int \phi(y) d\gamma = \int \phi(\text{proj}_Y(x, y)) d\gamma(x, y) = \int \phi(y) d(\text{proj}_Y)_{\#}\gamma \\ &= \int \phi(y) d\nu(y). \end{aligned}$$

Daraus folgt, dass μ gleich ν ist.

ii) Es gilt Symmetrie, da

$$\begin{aligned} W_p(\mu, \nu) &= \min \left\{ \int_{\Omega \times \Omega} |x-y|^p d\gamma(x, y) : \gamma \in \Pi(\mu, \nu) \right\}^{\frac{1}{p}} \\ &= \min \left\{ \int_{\Omega \times \Omega} |y-x|^p d\tilde{\gamma}(y, x) : \tilde{\gamma} \in \Pi(\nu, \mu) \right\}^{\frac{1}{p}} = W_p(\nu, \mu). \end{aligned}$$

iii) Für den Beweis der Dreiecksungleichung beschränken wir uns auf den Fall, in dem $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ ist und μ und ρ absolut stetig sind und ν beliebig. Ein allgemeiner Beweis wäre zu umfangreich und wir verweisen auf [1][S.162-164]. Sei T der optimale Transport von

μ nach ρ , S der optimale Transport von ρ nach ν und A eine beliebige messbare Menge. Dann ist $S \circ T$ ein zulässiger Transport von μ nach ν , weil nach Definition 2.1

$$(S \circ T)_{\#}\mu(A) = \mu((S \circ T)^{-1}(A)) = \mu(T^{-1}(S^{-1}(A))) = T_{\#}\mu(S^{-1}(A))$$

gilt und mit $T_{\#}\mu =: \sigma$ haben wir

$$\sigma(S^{-1}(A)) = S_{\#}\sigma(A) = S_{\#}(T_{\#}\mu(A)) = S_{\#}\rho(A) = \nu(A).$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} W_p(\mu, \nu) &\leq \left(\int_{\Omega} |S(T(x)) - x|^p d\mu(x) \right)^{\frac{1}{p}} = \|S \circ T - \text{Id}\|_{L^p(\mu)} \\ &= \|S \circ T - T + T - \text{Id}\|_{L^p(\mu)} \leq \|S \circ T - T\|_{L^p(\mu)} + \|T - \text{Id}\|_{L^p(\mu)}. \end{aligned}$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned} \|S \circ T - T\|_{L^p(\mu)} &= \left(\int_{\Omega} |S(T(x)) - T(x)|^p d\mu(x) \right)^{\frac{1}{p}} \\ &= \left(\int_{\Omega} |S(y) - y|^p d\rho(y) \right)^{\frac{1}{p}} = W_p(\rho, \nu) \end{aligned}$$

und $\|T - \text{Id}\|_{L^p(\mu)} = W_p(\mu, \rho)$, da T und S optimal waren.

Daraus folgt $W_p(\mu, \nu) \leq W_p(\mu, \rho) + W_p(\rho, \nu)$. □

Definition 3.4. *Der Wassersteinraum*

Für $X = \mathbb{R}^d$ und $p \in [1, \infty)$ definieren wir den *Wassersteinraum* $\mathbb{W}_p(X)$ der Ordnung p als den Raum $\mathcal{P}_p(X)$, versehen mit der Metrik W_p .

3.2. Lipschitz-stetige Kurven im \mathbb{W}_p und die Kontinuitätsgleichung

Ziel dieses Abschnitts ist es absolute stetige Kurven im Wassersteinraum $\mathbb{W}_p(\Omega)$ mit Lösungen der Kontinuitätsgleichung $\partial_t \mu_t + \nabla \cdot (\mathbf{v}_t \mu_t) = 0$ mit L^p -Vektorfeldern \mathbf{v}_t zu identifizieren. Des Weiteren wollen wir eine Verbindung zwischen der L^p -Norm von \mathbf{v}_t und dem metrischen Differential $|\mu'|_p(t)$ schaffen. Zunächst geben wir die grundlegende Definition einer Kurve, deren Ableitung und des Begriffs der absoluten Stetigkeit bzgl. Kurven. Die Quelle dieser Definitionen ist [1][S.169].

Eine Kurve ω ist eine stetige Funktion definiert auf einem Intervall, hier $[0, 1]$, in einem metrischen Raum (X, d) . Wenn X ein Vektorraum ist, stellt $\omega'(t)$ die Geschwindigkeit der Kurve dar. Den Betrag der Geschwindigkeit $|\omega'(t)|$ können wir auch außerhalb eines Vektorraumes betrachten.

Definition 3.5. *Metrisches Differential*

Sei $\omega : [0, 1] \rightarrow X$ eine Kurve in einem metrischen Raum (X, d) . Dann definieren wir das *metrische Differential* $|\omega'| (t)$ von ω zum Zeitpunkt t durch

$$|\omega'| (t) := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{d(\omega(t+h), \omega(t))}{|h|},$$

vorausgesetzt dieser Limes existiert.

Mit Hilfe von Rademachers Theorem lässt sich beweisen, dass diese Ableitung für Lipschitz-stetige Kurven fast überall existiert (siehe [1][S.169]).

Definition 3.6. *Absolut stetige Kurve*

Eine Kurve $\omega : [0, 1] \rightarrow X$ heißt *absolut stetig*, wenn ein $g \in L^1([0, 1])$ existiert, sodass

$$d(\omega(t_0), \omega(t_1)) \leq \int_{t_0}^{t_1} g(s) \, ds$$

für jedes $t_0 \leq t_1$ gilt. Die *Menge der absolut stetigen Kurven* auf $[0, 1]$ in X wird mit $AC(X)$ bezeichnet.

Jede absolut stetige Kurve kann durch Umparametrisierung Lipschitz-stetig gemacht werden (siehe [1][S.169]).

Bevor wir Theorem 3.8 formulieren, gehen wir kurz auf das Modell des dynamischen optimalen Transports und die Kontinuitätsgleichung ein. Theorem 3.8 wird uns dann die Gleichheit zwischen der L^p -Norm eines Geschwindigkeitsfelds \mathbf{v}_t und dem metrischen Differential $|\mu'| (t)$ liefern. Der nachfolgende Text orientiert sich an [1][S.110-111].

Beim dynamischen Transport benutzen wir für gewöhnlich zwei Variablen, nämlich die Dichte $\rho(t, x)$ und die Geschwindigkeit $\mathbf{v}_t(x)$. Es ist möglich eine Gleichung aufzustellen, die von der Dichte einer Familie von Teilchen erfüllt wird, die sich dem Geschwindigkeitsfeld \mathbf{v} entsprechend bewegen. Das bedeutet, dass wir eine Anfangsdichte ρ_0 vorgeben und dass die Position der Teilchen, die ursprünglich an der Stelle x waren, durch die Lösung folgender gewöhnlicher Differentialgleichung gegeben ist

$$\begin{cases} y'_x(t) = \mathbf{v}_t(y_x(t)) \\ y_x(0) = x. \end{cases}$$

Wir definieren die Abbildung $Y_t(x) = y_x(t)$ und suchen das Maß $\rho_t := (Y_t)_\# \rho_0$. Zusammen lösen ρ_t und \mathbf{v}_t die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t \rho_t + \nabla \cdot (\rho_t \mathbf{v}_t) = 0.$$

Definition 3.7. *Lösung der Kontinuitätsgleichung im schwachen Sinne*

Wir sagen, dass eine Familie von Maß- und Vektorfeldpaaren (ρ_t, \mathbf{v}_t) mit $\mathbf{v}_t \in L^1(\rho_t; \mathbb{R}^d)$ und $\int_0^T \|\mathbf{v}_t\|_{L^1(\rho_t)} \, dt = \int_0^T \int_\Omega |\mathbf{v}_t| \, d\rho_t \, dt < \infty$ die *Kontinuitätsgleichung* auf dem Intervall

$(0, T)$ im schwachen Sinne löst, wenn für jede Testfunktion $\psi \in C_c^1(\bar{\Omega})$, die Funktion $t \mapsto \int \psi d\rho_t$ absolut stetig in t ist und für fast alle t

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi d\rho_t = \int_{\Omega} \nabla \psi \cdot \mathbf{v}_t d\rho_t$$

gilt.

In [1][S.113] ist nachzulesen, dass die Kontinuitätsgleichung eine eindeutige Lösung besitzt.

Das folgende Theorem aus [1][S.170] wird später in Kapitel 4 gebraucht. Dort werden wir das Optimierungsproblem in der Wassersteindistanz in ein konvexes Problem umformen.

Theorem 3.8. Sei $(\mu_t)_{t \in [0,1]}$ eine absolut stetige Kurve in $\mathbb{W}_p(\Omega)$ mit $p > 1$ und $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ kompakt. Dann existiert für fast alle $t \in [0, 1]$ ein Vektorfeld $\mathbf{v}_t \in L^p(\mu_t; \mathbb{R}^d)$, sodass

- die Kontinuitätsgleichung $\partial_t \mu_t + \nabla \cdot (\mathbf{v}_t \mu_t) = 0$ im schwachen Sinne erfüllt ist,
- für fast alle t gilt $\|\mathbf{v}_t\|_{L^p(\mu_t)} \leq |\mu'| (t)$, wobei $|\mu'| (t)$ das metrische Differential zur Zeit t der Kurve $t \mapsto \mu_t$ bezüglich der Metrik W_p darstellt.

Andersherum, wenn $(\mu_t)_{t \in [0,1]}$ eine Familie von Maßen in $\mathcal{P}_p(\Omega)$ ist und wir für jedes t ein Vektorfeld $\mathbf{v}_t \in L^p(\mu_t; \mathbb{R}^d)$ mit $\int_0^1 \|\mathbf{v}_t\|_{L^p(\mu_t)} dt < \infty$ haben, das die Kontinuitätsgleichung erfüllt, dann ist $(\mu_t)_t$ absolut stetig in $\mathbb{W}_p(\Omega)$ und für fast alle t gilt $|\mu'| (t) \leq \|\mathbf{v}_t\|_{L^p(\mu_t)}$.

Ein Beweis an dieser Stelle wäre zu umfangreich und wir verweisen auf [1][S.173-178].

Bemerkung 3.9.

Als Konsequenz des Theorems muss das oben eingeführte Vektorfeld \mathbf{v}_t a posteriori $\|\mathbf{v}_t\|_{L^p(\mu_t)} = |\mu'| (t)$ erfüllen.

3.3. Geodäten mit konstanter Geschwindigkeit im \mathbb{W}_p

Wir werden in diesem Abschnitt sehen wie Geodäten mit konstanter Geschwindigkeit im Wassersteinraum \mathbb{W}_p in Bezug zu optimalen Transportabbildungen stehen. Am Anfang geben wir mehrere Definitionen, weil sie notwendig sind um die Aussagen der Sätze am Ende dieses Abschnitts zu verstehen. Die Definitionen und Sätze sind [1][S.182-183] entnommen.

Definition 3.10. Länge einer Kurve

Für eine Kurve $\omega : [0, 1] \rightarrow X$, definieren wir

$$\text{Length}(\omega) := \sup \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} d(\omega(t_k), \omega(t_{k+1})) : n \geq 1, 0 = t_0 < t_1 \cdots < t_n = 1 \right\}.$$

Proposition 3.11. Für jede Kurve $\omega \in AC(X)$ gilt

$$\text{Length}(\omega) = \int_0^1 |\omega'(t)| dt.$$

Alle Kurven $\omega \in AC(X)$ erfüllen die Ungleichung $\text{Length}(\omega) \leq \int_0^1 g(t) dt < \infty$.

Definition 3.12. *Geodäte*

i) Eine Kurve $\omega : [0, 1] \rightarrow X$ heißt *Geodäte* zwischen $x_0 \in X$ und $x_1 \in X$, wenn sie die Länge unter allen Kurven mit $\omega(0) = x_0$ und $\omega(1) = x_1$ minimiert.

ii) Ein Raum (X, d) ist ein *Längenraum*, wenn

$$d(x, y) = \inf\{\text{Length}(\omega) : \omega \in AC(X), \omega(0) = x, \omega(1) = y\}$$

vorliegt.

iii) Ein Raum (X, d) ist ein *geodätischer Raum*, wenn gilt

$$d(x, y) = \min\{\text{Length}(\omega) : \omega \in AC(X), \omega(0) = x, \omega(1) = y\},$$

also wenn ein Längenraum vorliegt und Geodäten zwischen beliebigen Punkten existieren.

Definition 3.13. *Geodäte mit konstanter Geschwindigkeit*

In einem Längenraum heißt eine Kurve $\omega : [0, 1] \rightarrow X$ *Geodäte mit konstanter Geschwindigkeit* zwischen $\omega(0)$ und $\omega(1) \in X$, wenn sie

$$d(\omega(t), \omega(s)) = |t - s|d(\omega(0), \omega(1))$$

für alle $t, s \in [0, 1]$ erfüllt. Eine Kurve mit dieser Eigenschaft ist automatisch eine Geodäte.

Die folgende Proposition und der nachfolgende Satz sind Hilfsmittel für den Beweis des zentralen Theorems in Kapitel 4.

Proposition 3.14. Sei $p > 1$ ein fest gewählter Exponent und wir betrachten Kurven von x_0 nach x_1 . Die folgenden drei Aussagen sind äquivalent

1. ω ist eine Geodäte mit konstanter Geschwindigkeit,
2. $\omega \in AC(X)$ und $|\omega'(t)| = d(\omega(0), \omega(1))$ fast überall,
3. ω löst $\min \left\{ \int_0^1 |\omega'(t)|^p dt : \omega(0) = x_0, \omega(1) = x_1 \right\}$.

Satz 3.15. Sei Ω konvex, $\mu, \nu \in \mathcal{P}_p(\Omega)$ und $\gamma \in \Pi(\mu, \nu)$ ein optimaler Transportplan für die Kosten $c(x, y) = |x - y|^p$ ($p \geq 1$). Wir definieren $\pi_t : \Omega \times \Omega \rightarrow \Omega$ durch $\pi_t(x, y) = (1 - t)x + ty$. Dann ist die Kurve $\mu_t := (\pi_t)_\# \gamma$ eine Geodäte mit konstanter Geschwindigkeit in \mathbb{W}_p , die $\mu_0 = \mu$ mit $\mu_1 = \nu$ verbindet. Als eine Konsequenz ist der Raum $\mathbb{W}_p(\Omega)$ ein geodätischer Raum.

Beweis. Es ist hinreichend $W_p(\mu_t, \mu_s) \leq W_p(\mu, \nu)|t - s|$ zu zeigen, da wir daraus Gleichheit ableiten werden und somit nach Definition 3.13 Geodäten in \mathbb{W}_p existieren. Wir nehmen an, dass die obige Ungleichung für jedes $s > t$ bereits bewiesen ist. Dann haben wir nach zweimaligem Anwenden der Dreiecksungleichung

$$W_p(\mu, \nu) \leq W_p(\mu, \mu_t) + W_p(\mu_t, \nu) \leq W_p(\mu, \mu_t) + W_p(\mu_t, \mu_s) + W_p(\mu_s, \nu).$$

Da wir annehmen, dass $W_p(\mu_t, \mu_s) \leq W_p(\mu, \nu)|t - s|$ gilt, folgt

$$W_p(\mu, \mu_t) + W_p(\mu_t, \mu_s) + W_p(\mu_s, \nu) \leq W_p(\mu, \nu)(t + (s - t) + (1 - s)) = W_p(\mu, \nu),$$

was überall Gleichheit und insbesondere $W_p(\mu_t, \mu_s) = W_p(\mu, \nu)|t - s|$ impliziert. Um die vorausgesetzte Ungleichung zu beweisen, setzen wir $\gamma_t^s := (\pi_t, \pi_s)_\# \gamma \in \Pi(\mu_t, \mu_s)$ und rechnen

$$W_p(\mu_t, \mu_s) \leq \left(\int |x - y|^p d\gamma_t^s \right)^{\frac{1}{p}} = \left(\int |\pi_t(x, y) - \pi_s(x, y)|^p d\gamma \right)^{\frac{1}{p}}.$$

Wir benutzen, dass $|(1 - t)x + ty - (1 - s)x - sy| = |(s - t)(x - y)|$ ist und erhalten

$$\begin{aligned} \left(\int |\pi_t(x, y) - \pi_s(x, y)|^p d\gamma \right)^{\frac{1}{p}} &= \left(\int |(s - t)(x - y)|^p d\gamma \right)^{\frac{1}{p}} \\ &= |t - s| \left(\int |x - y|^p d\gamma \right)^{\frac{1}{p}} = |t - s| W_p(\mu, \nu), \end{aligned}$$

da γ optimal war. □

4. Das Benamou-Brenier Funktional \mathcal{B}_p

In diesem Kapitel definieren wir das Benamou-Brenier Funktional \mathcal{B}_p , damit wir mit der geleisteten Vorarbeit in den Abschnitten 3.2 und 3.3 unser noch in der Wassersteindistanz vorliegendes Optimierungsproblem bezüglich der Kosten $|x - y|^p$ in ein konvexes Problem umwandeln können.

Die Definition der Unterhalbstetigkeit aus [1][S.3] und die der Legendre-Fenchel Dualen aus [4][S.91] brauchen wir im darauffolgenden Lemma, das ebenso wie die Definition des Benamou-Brenier Funktionals in [1][S.170-171] zu finden ist.

Definition 4.1. *Unterhalbstetigkeit*

In einem metrischen Raum X ist eine Funktion $f : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ *unterhalbstetig*, wenn für jede Folge $x_n \rightarrow x$ gilt $f(x) \leq \liminf_n f(x_n)$.

Definition 4.2. *Legendre-Fenchel Duale*

Die *Legendre-Fenchel Duale* einer Funktion $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ ist definiert als

$$f^*(y) = \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \{y \cdot x - f(x)\}$$

für $y \in \mathbb{R}^d$.

Lemma 4.3. *Seien p und q Exponenten mit $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$, $p > 1$ und*

$$K_q := \left\{ (a, b) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d : a + \frac{1}{q}|b|^q \leq 0 \right\}.$$

Dann haben wir für $(t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$

$$f_p(t, x) := \sup_{(a, b) \in K_q} \{at + b \cdot x\} = \begin{cases} \frac{1}{p} \frac{|x|^p}{t^{p-1}} & \text{wenn } t > 0, \\ 0 & \text{wenn } t = 0, x = 0, \\ +\infty & \text{wenn } t = 0, x \neq 0, \text{ oder } t < 0. \end{cases}$$

Insbesondere ist f_p konvex und unterhalbstetig.

Beweis. Als ersten Fall nehmen wir $t > 0$ an: Dann sollten wir für a den größtmöglichen Wert wählen, den die Menge K_q zulässt. Daher setzen wir $a = -\frac{1}{q}|b|^q$ und erhalten

$$\sup_b \left\{ -\frac{1}{q}t|b|^q + b \cdot x \right\} = t \left(\sup_b \left\{ -\frac{1}{q}|b|^q + b \cdot \left(\frac{x}{t}\right) \right\} \right).$$

Die Legendre-Fenchel Duale der Funktion $f(b) = \frac{1}{q}|b|^q$ lautet unter den gegebenen Bedingungen $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ und $p > 1$ wie folgt:

$$f^*(y) = \sup_b \left\{ -\frac{1}{q}|b|^q + b \cdot y \right\} = \frac{1}{p}|y|^p$$

für alle $y \in \mathbb{R}^d$. Dies ist in [5][S.50-51] nachzulesen. Dort finden wir auch, dass die Legendre-Fenchel Duale von $tf(b)$ für $t > 0$ gleich $tf^*\left(\frac{x}{t}\right)$ ist und daher gilt

$$\sup \left\{ at + b \cdot x : a \in \mathbb{R}, b \in \mathbb{R}^d, a + \frac{1}{q}|b|^q \leq 0 \right\} = t \frac{1}{p} \left| \frac{x}{t} \right|^p = \frac{1}{p} \frac{|x|^p}{t^{p-1}}.$$

Der Fall $(t, x) = (0, 0)$ ist klar. Wenn $t = 0$ und $x \neq 0$ ist, dann kann jeder Vektor b durch einen genügend großen negativen Wert von a ausgeglichen werden. Wir bekommen

$$\sup \left\{ at + b \cdot x : a \in \mathbb{R}, b \in \mathbb{R}^d, a + \frac{1}{q}|b|^q \leq 0 \right\} = \sup_b b \cdot x = +\infty.$$

Für den letzten Fall $t < 0$ können wir a beliebig negativ und $b = 0$ wählen, sodass

$$\sup \left\{ at + b \cdot x : a \in \mathbb{R}, b \in \mathbb{R}^d, a + \frac{1}{q}|b|^q \leq 0 \right\} \geq \sup_{a < 0} at = +\infty$$

gilt. Die Aussage, dass f_p konvex und unterhalbstetig ist, folgt daraus, dass es ein Supremum von linearen Funktionen ist. \square

Die Funktion f_p wollen wir jetzt benutzen um ein Funktional über Maße zu definieren.

Definition 4.4. *Das Benamou-Brenier Funktional*

Sei ρ aus dem Raum der endlichen Maße $\mathcal{M}(\Omega)$, und $E \in \mathcal{M}^d(\Omega)$, dem Raum der vektoriellen Maße mit Werten im \mathbb{R}^d . Als das *Benamou-Brenier Funktional* bezeichnen wir

$$\mathcal{B}_p(\rho, E) := \int_{\Omega} f_p(\rho, E)$$

mit $f_p : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ wie in Lemma 4.3.

Das folgende Theorem erlaubt uns die Wassersteindistanz in ein konvexes Optimierungsproblem in der Form des Benamou-Brenier Funktionals umzuschreiben. Es wurde [1][S.184] entnommen und mit Anmerkungen aus [1][S.200-201] ergänzt.

Theorem 4.5. *Sei Ω ein konvexes und kompaktes Gebiet und $\mu, \nu \in \mathcal{P}(\Omega)$ und $p > 1$ gegeben. Dann gilt für die Wassersteindistanz*

$$W_p^p(\mu, \nu) = \min\{\mathcal{B}_p(\rho, E) : \partial_t \rho + \nabla \cdot E = 0, \rho_0 = \mu, \rho_1 = \nu\},$$

wobei sowohl ρ als auch E als Maße auf $\Omega \times [0, 1]$ betrachtet werden müssen und Ω den Raum und $[0, 1]$ das Zeitintervall bezeichnet.

Beweis. Da \mathbb{W}_p nach Satz 3.14 ein geodätischer Raum ist, gilt für die darin enthaltene Wassersteindistanz W_p nach Definition 3.11 iii)

$$W_p^p(\mu, \nu) = \left(\min \left\{ \int_0^1 |\rho'(t)| dt, \rho_0 = \mu, \rho_1 = \nu \right\} \right)^p.$$

Das Minimum kann auf Geodäten mit konstanter Geschwindigkeit eingeschränkt werden und dank Proposition 3.13 gilt

$$W_p^p(\mu, \nu) = \min \left\{ \int_0^1 |\rho'(t)|^p dt, \rho_0 = \mu, \rho_1 = \nu \right\}.$$

Dann benutzen wir Theorem 3.7, das uns erlaubt $|\rho'(t)|$ mit $\|\mathbf{v}_t\|_{L^p(\rho_t)}$ zu ersetzen, sodass wir

$$\begin{aligned} W_p^p(\mu, \nu) &= \min \left\{ \int_0^1 \|\mathbf{v}_t\|_{L^p(\rho_t)}^p dt : \partial_t \rho_t + \nabla \cdot (\rho_t \mathbf{v}_t) = 0, \rho_0 = \mu, \rho_1 = \nu \right\} \\ &= \min \left\{ \int_0^1 \int_{\Omega} |\mathbf{v}_t|^p d\rho_t dt : \partial_t \rho_t + \nabla \cdot (\rho_t \mathbf{v}_t) = 0, \rho_0 = \mu, \rho_1 = \nu \right\} \end{aligned}$$

erhalten. Wir setzen $E_t = \rho_t \mathbf{v}_t$ und mit

$$\int_0^1 \int_{\Omega} f_p(\rho_t(x), E_t(x)) dx dt = \int_0^1 \mathcal{B}_p(\rho_t, E_t) dt = \mathcal{B}_p(\rho, E)$$

erhalten wir die Behauptung. Für die letzte Gleichungskette müssen wir allerdings annehmen, dass $\rho_t, E_t \ll \mathcal{L}^d$ sind. \square

Die Variablentransformation von (ρ_t, \mathbf{v}_t) zu (ρ_t, E_t) mit $E_t = \mathbf{v}_t \rho_t$ ist notwendig, da wir sonst nicht lineare Nebenbedingungen hätten (aufgrund des Produkts $\mathbf{v}_t \rho_t$ in der Kontinuitätsgleichung) und unser Funktional nicht konvex wäre (weil $(t, x) \mapsto t|x|^p$ nicht konvex ist).

5. Numerische Lösung des Benamou-Brenier Problems

Das vorherige Kapitel brachte uns auf folgendes konvexes Optimierungsproblem, das es nun zu lösen gilt:

$$\min \left\{ \int_0^1 \int_{\Omega} f_p(\rho_t(x), E_t(x)) \, dx \, dt : \partial_t \rho_t + \nabla \cdot E_t = 0, \rho_0 = \mu, \rho_1 = \nu \right\}.$$

Wir werden dies in Matlab mit dem Douglas-Rachford Algorithmus tun, den wir in Abschnitt 5.3 näher erläutern werden.

Zunächst schränken wir unser Problem auf den Fall $p = 2$ und $\Omega = [0, 1]^2$ ein. Ebenso nehmen wir eine Umbenennung unserer Variablen vor und erhalten mit $m = fv$, wobei v wie zuvor ein Geschwindigkeitsfeld ist, das Problem

$$\min_{(m,f) \in \mathcal{C}} \mathcal{J}(m, f) = \int_{[0,1]^2} \int_0^1 J(m(x, t), f(x, t)) \, dt \, dx, \quad (5.1)$$

$$\text{wobei für alle } (m, f) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}, \quad J(m, f) = \begin{cases} \frac{\|m\|^2}{2f} & \text{wenn } f > 0, \\ 0 & \text{wenn } (m, f) = (0, 0), \\ +\infty & \text{sonst.} \end{cases} \quad (5.2)$$

Die Menge der linearen Nebenbedingungen ist

$$\mathcal{C} = \{(m, f) : \partial_t f + \operatorname{div}_x(m) = 0, f(\cdot, 0) = f_0, f(\cdot, 1) = f_1\}.$$

Diese Formulierung des Problems orientiert sich an [3][S.5].

Wir bemerken, dass dieses konvexe Problem Schwierigkeiten bereitet, da das Funktional $\mathcal{J}(m, f)$ gegen null geht, wenn $f(x, t)$ in manchen Punkten gegen unendlich geht, sodass es nicht koerzitiv ist. Unter koerzitiv verstehen wir, dass, wenn die Eingabewerte gegen unendlich gehen, daraus folgt, dass die Funktionswerte auch gegen unendlich laufen. Diese Tatsache macht den Existenzbeweis von Minimierern nicht trivial. Zweitens läuft das Funktional \mathcal{J} gegen unendlich, wenn $f(x, t)$ in manchen Punkten gegen null geht, was es unmöglich macht ein Gradientenabstiegsverfahren zu benutzen (der Gradient wäre nicht Lipschitz und würde gegen unendlich gehen).

Aus diesem Grund benutzen wir den Douglas-Rachford Algorithmus, eine sogenannte proximale splitting Methode, die den Gradientenabstiegsschritt durch die Anwendung des Proximalen Operators ersetzt, den wir im zweiten Abschnitt dieses Kapitels einführen werden. Das Adjektiv splitting kommt daher, dass wir statt einer Funktion zwei minimieren, einmal das Funktional \mathcal{J} und darauf aufbauend die Nebenbedingungen in \mathcal{C} .

5.1. Diskretisierung

Damit wir das Benamou-Brenier Problem numerisch lösen können, müssen wir zunächst den Raum $[0, 1]^2$ und unser Funktional \mathcal{J} diskretisieren. Dies tun wir in diesem Abschnitt für den eindimensionalen Fall und beziehen uns hierbei auf [3][S.5-6].

Definition 5.1. *Zentriertes Gitter*

Wir bezeichnen mit $N + 1$ die Anzahl der räumlichen diskretisierten Punkte und mit $P + 1$ die diskretisierten Punkte bezüglich der Zeit. Um $[0, 1]^2$ in $(N + 1) \times (P + 1)$ Punkte zu diskretisieren, führen wir das *zentrierte Gitter*

$$\mathcal{G}_c := \left\{ \left(x_i = \frac{i}{N}, t_j = \frac{j}{P} \right) \in [0, 1]^2 : 0 \leq i \leq N, 0 \leq j \leq P \right\}$$

ein. Wir definieren mit

$$V := (m, f) \in \mathcal{E}_c := (m_{i,j}, f_{i,j})_{\substack{0 \leq j \leq P \\ 0 \leq i \leq N}}$$

die auf dem zentrierten Gitter diskretisierten Variablen, wobei $\mathcal{E}_c = (\mathbb{R}^{d+1})^{\mathcal{G}_c} = (\mathbb{R}^2)^{\mathcal{G}_c}$ der endlich dimensionale Raum der zentrierten Variablen ist.

Problem 5.2. *Diskretes konvexes Problem*

Unser Ausgangsproblem (5.1) wird nun auf unserem diskretisierten Gitter approximiert, indem wir folgendes endlich dimensionale konvexe Problem lösen

$$\min_{V \in \mathcal{E}_c} \{ \mathcal{J}(V) + \iota_{\mathcal{C}}(V) \}.$$

Hier ist die dazugehörige Indikatorfunktion $\iota_{\mathcal{C}}$ für eine abgeschlossene konvexe Menge \mathcal{C} definiert als

$$\iota_{\mathcal{C}}(V) = \begin{cases} 0 & \text{wenn } V \in \mathcal{C}, \\ +\infty & \text{sonst.} \end{cases}$$

Das diskrete Funktional \mathcal{J} liest sich für $V = (m, f) \in \mathcal{E}_c$:

$$\mathcal{J}(V) = \sum_{k \in \mathcal{G}_c} J(m_k, f_k), \tag{5.3}$$

wobei $k = (i, j) \in \mathcal{G}_c$ die Indizes auf dem zentrierten Gitter bezeichnet und das Funktional J in (5.2) definiert ist.

Die Menge der linearen Nebenbedingungen lautet

$$\mathcal{C} = \{ V \in \mathcal{E}_c : AV = y \},$$

wobei $AV = (\operatorname{div}_x(m) + \partial_t f, f(\cdot, 0), f(\cdot, 1))$ und $y = (0, f_0, f_1)$ ist.

5.2. Proximale Operatoren

In diesem Abschnitt berechnen wir die Proximalen Operatoren des Funktionals \mathcal{J} und der Indikatorfunktion $\iota_{\mathcal{C}}$, weil wir diese für den Douglas-Rachford Algorithmus benötigen. Für beide Berechnungen brauchen wir natürlich die Definition des Proximalen Operators, die wir aus [3][S.7] haben. Die Definition der Lagrange Funktion (siehe [4][S.215]), die einer orthogonalen Projektion (siehe [4][S.292]) und die des adjungierten Operators (siehe [6][S.94]) brauchen wir erst für die Berechnung des Proximalen Operators von $\iota_{\mathcal{C}}$.

Definition 5.3. Proximaler Operator

Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum. Der *Proximale Operator* $\text{Prox}_{\gamma F} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ eines konvexen, unterhalbstetigen und geeigneten (d.h. der Wert $-\infty$ wird nicht angenommen und die Menge $\{x \in \mathcal{H} : F(x) < \infty\}$ ist nicht leer) Funktionals $F : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ ist definiert als

$$\text{Prox}_{\gamma F}(z) = \underset{\tilde{z} \in \mathcal{H}}{\text{argmin}} \left\{ \frac{1}{2} \|z - \tilde{z}\|^2 + \gamma F(\tilde{z}) \right\}.$$

Wenn F glatt ist, impliziert die Optimalitätsbedingung, dass $\tilde{z} := \text{Prox}_{\gamma F}(z)$ die Gleichung $\tilde{z} = z - \gamma \nabla F(\tilde{z})$ erfüllt, was die Interpretation des Proximalen Operators als Gradientenschritt rechtfertigt.

Definition 5.4. Lagrange Funktion

Wir betrachten ein Optimierungsproblem in seiner Standardform:

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} f_0(x) \quad & \text{unter den Bedingungen} \\ f_i(x) &\leq 0, i = 1, \dots, m \\ h_i(x) &= 0, i = 1, \dots, p. \end{aligned} \tag{5.4}$$

Wir nehmen an, dass das Gebiet $\mathcal{D} = (\bigcap_{i=1}^m \text{dom } f_i) \cap (\bigcap_{i=1}^p \text{dom } h_i)$ nicht leer ist, wobei $\text{dom } f = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) < \infty\}$, und bezeichnen den optimalen Wert des Problems mit p^* .

Die *Lagrange Funktion* $L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ bezüglich des Problems (5.4) ist definiert als

$$L(x, \mu, \lambda) := f_0(x) + \mu^T \sum_{i=1}^m f_i(x) + \lambda^T \sum_{i=1}^p h_i(x),$$

mit $\mu^T = (\mu_1, \dots, \mu_m)$, $\lambda^T = (\lambda_1, \dots, \lambda_p)$ und $\text{dom } L = \mathcal{D} \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p$. Die Variablen μ und λ werden als *Lagrange Multiplikatoren* bezeichnet.

Definition 5.5. *Orthogonale Projektion*

Wir betrachten den Raum unserer Nebenbedingungen \mathcal{C} und einen Punkt $V = (m, f) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$. Eine *orthogonale Projektion* des Punktes V auf den Unterraum \mathcal{C} in der Norm $\|\cdot\|$ ist ein optimaler Punkt in \mathcal{C} des Problems

$$\operatorname{argmin}_{u \in \mathcal{C}} \frac{1}{2} \|u - V\|^2.$$

Definition 5.6. *Adjungierter Operator*

Seien X, Y Hilberträume und $A : X \rightarrow Y$ eine stetige lineare Abbildung. Der zu A *adjungierte Operator* $A^* : Y \rightarrow X$ ist definiert durch

$$\langle x, A^*y \rangle = \langle Ax, y \rangle, \quad x \in X, \quad y \in Y.$$

5.2.1. Berechnung von $\operatorname{Prox}_{\gamma\mathcal{J}}$

Für den Proximalen Operator des diskreten Funktionals \mathcal{J} aus (5.3) gilt für alle $V \in \mathcal{E}_c$:

$$\begin{aligned} \operatorname{Prox}_{\gamma\mathcal{J}}(V) &= \operatorname{argmin}_{\tilde{V} \in \mathcal{E}_c} \left\{ \frac{1}{2} \|V - \tilde{V}\|^2 + \gamma\mathcal{J}(\tilde{V}) \right\} \\ &= \operatorname{argmin}_{\tilde{V} \in \mathcal{E}_c} \left\{ \sum_{k \in \mathcal{G}_c} \left(\frac{1}{2} \|V_k - \tilde{V}_k\|^2 + \gamma J(V_k) \right) \right\} = (\operatorname{Prox}_{\gamma J}(V_k))_{k \in \mathcal{G}_c}. \end{aligned}$$

Wir bezeichnen $(m, f) = \operatorname{Prox}_{\gamma J}(\tilde{m}, \tilde{f})$ und erhalten für alle $(\tilde{m}, \tilde{f}) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} \operatorname{Prox}_{\gamma J}(\tilde{m}, \tilde{f}) &= \operatorname{argmin}_{(m, f)} \left\{ \frac{1}{2} \|(m, f) - (\tilde{m}, \tilde{f})\|^2 + \gamma J(m, f) \right\} \\ &= \operatorname{argmin}_{(m, f)} \underbrace{\left(\frac{1}{2} \left((m - \tilde{m})^2 + (f - \tilde{f})^2 \right) + \gamma \frac{\|m\|^2}{2f} \right)}_{=: F(m, f)}. \end{aligned}$$

Weil $F(m, f)$ aus C^1 und streng konvex auf $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_{>0}$ ist, muss (m, f) notwendigerweise die einzige Lösung von $\nabla F(m, f) = 0$ sein, wenn $f > 0$ ist. Schreiben wir $\nabla F(m, f) = 0$ ausdrücklich hin, haben wir die Gleichungen

$$\begin{aligned} 0 &= m - \tilde{m} + \gamma \frac{m}{f}, \\ 0 &= f - \tilde{f} - \gamma \frac{\|m\|^2}{2f^2}. \end{aligned}$$

Wenn wir die erste Gleichung nach m umstellen und dieses m in die zweite Gleichung einsetzen, bekommen wir

$$\mu(f) := m = \frac{\tilde{m}}{1 + \gamma/f} = \frac{f\tilde{m}}{f + \gamma}$$

und

$$\begin{aligned} P(f) &:= (f - \tilde{f})(f + \gamma)^2 - \frac{\gamma}{2}\|\tilde{m}\|^2 \\ &= f^3 + f^2(2\gamma - \tilde{f}) + f(\gamma^2 - 2\gamma\tilde{f}) - \gamma^2\tilde{f} - \frac{\gamma}{2}\|\tilde{m}\|^2 = 0. \end{aligned}$$

Wir setzen f^* als die Lösung von $P(f) = 0$. Wenn P eine strikt positive reelle Wurzel f^* besitzt, dann ist diese eindeutig und es gilt

$$\text{Prox}_{\gamma J}(\tilde{m}, \tilde{f}) = \begin{cases} (\mu(f^*), f^*) & \text{wenn } f^* > 0, \\ (0, 0) & \text{sonst.} \end{cases}$$

Dabei ist $\mu(f) = \frac{f\tilde{m}}{f+\gamma}$ für alle $f \geq 0$.

5.2.2. Berechnung von $\text{Prox}_{\gamma \iota_C}$

Der proximale Operator der Indikatorfunktion ι_C ist die orthogonale Projektion auf die Nebenbedingungen und hängt nicht von γ ab. Dies gilt, da für alle $\tilde{V} \in \mathcal{E}_C$

$$\begin{aligned} \text{Prox}_{\gamma \iota_C}(\tilde{V}) &= \underset{V \in \mathcal{E}_C}{\text{argmin}} \left\{ \frac{1}{2}\|V - \tilde{V}\|^2 + \gamma \iota_C(V) \right\} \\ &= \underset{V \in \mathcal{C}}{\text{argmin}} \frac{1}{2}\|V - \tilde{V}\|^2 = \text{Proj}_{\mathcal{C}}(\tilde{V}) \end{aligned}$$

ist. Weil uns die Berechnung dieses proximalen Operators auf ein Optimierungsproblem mit den Gleichheitsnebenbedingungen $AV - y = 0$ führt, fahren wir zur Lösung des Problems mit der Lagrange Funktion

$$L(V, \lambda) = \frac{1}{2}\|V - \tilde{V}\|^2 + \lambda^T(AV - y)$$

fort. Wir setzen den Gradienten gleich 0 und erhalten

$$\begin{aligned} V - \tilde{V} + A^T\lambda &= 0 \quad \Leftrightarrow \quad V = \tilde{V} - A^T\lambda, \\ AV - y &= 0 \quad \Leftrightarrow \quad AV = y. \end{aligned}$$

Nun setzen wir die Formel für V in die untere Gleichung ein und erhalten

$$\begin{aligned} V &= \tilde{V} - A^T\lambda, \\ A(\tilde{V} - A^T\lambda) &= y. \end{aligned}$$

Wenn wir die untere Gleichung nach λ auflösen, ergibt dies

$$\begin{aligned} V &= \tilde{V} - A^T\lambda, \\ \lambda &= (AA^T)^{-1}(A\tilde{V} - y). \end{aligned}$$

Das gewonnene λ setzen wir nun in die Gleichung für V ein und bekommen somit unseren gesuchten Minimierer

$$\begin{aligned} V &= \tilde{V} - A^T(AA^T)^{-1}(A\tilde{V} - y) \\ &= \tilde{V} - A^T(AA^T)^{-1}A\tilde{V} + A^T(AA^T)^{-1}y. \end{aligned}$$

Insgesamt erhalten wir also

$$\text{Prox}_{\gamma\iota_C}(\tilde{V}) = \text{Proj}_C(\tilde{V}) = \tilde{V} - A^T(AA^T)^{-1}(A\tilde{V} - y).$$

In [3][S.8] wird dieser Ausdruck mit dem zu A adjungierten Operator A^* statt mit A^T geschrieben, was aber dasselbe ist, da $A^* = A^T$ in \mathcal{E}_c gilt.

5.3. Douglas-Rachford Algorithmus

Der Douglas-Rachford (DR) Algorithmus ist eine proximale splitting Methode, die einem erlaubt

$$\min_{z \in \mathcal{H}} \{G_1(z) + G_2(z)\} \tag{5.5}$$

zu lösen, wobei G_1 und G_2 zwei einfache Funktionen, d.h. ihr Proximaler Operator kann numerisch leicht berechnet werden, in einem Hilbertraum \mathcal{H} sind. Der folgende Algorithmus ist [3][S.8] entnommen.

Die Iterationen des DR Algorithmus definieren eine Sequenz $(z^{(l)}, w^{(l)}) \in \mathcal{H}^2$ mittels einer Initialisierung $(z^{(0)}, w^{(0)}) \in \mathcal{H}^2$ und

$$\begin{aligned} w^{(l+1)} &= w^{(l)} + \alpha \left(\text{Prox}_{\gamma G_1}(2z^{(l)} - w^{(l)}) - z^{(l)} \right), \\ z^{(l+1)} &= \text{Prox}_{\gamma G_2}(w^{(l+1)}). \end{aligned}$$

Wenn $0 < \alpha < 2$ und $\gamma > 0$ ist, kann man zeigen, dass $z^{(l)} \rightarrow z^*$ konvergiert, wobei z^* die Lösung von (5.5) sein soll. Für nähere Details siehe [7]. In unserem Fall ist G_1 das diskrete Funktional \mathcal{J} und G_2 ist die Indikatorfunktion ι_C , durch die sichergestellt wird, dass unsere Nebenbedingungen erfüllt sind.

6. Dynamischer optimaler Transport mit Masseänderung

Bis jetzt haben wir optimalen Transport immer unter der Bedingung betrachtet, dass weder Masse verloren gehen noch Neue hinzukommen durfte. Im medizinischen Bereich kann diese Bedingung aber auch unerwünscht sein, da durch biologische Prozesse manchmal Masse abgebaut werden und auch Neue entstehen kann. Der Artikel [8] hat sich mit dieser Problematik, die optimaler Transport mit Masseänderung (engl. unbalanced optimal transport) genannt wird, beschäftigt und wir beziehen uns in diesem Kapitel auf ihn. Um die obigen Überlegungen in das konvexe Optimierungsproblem von Benamou und Brenier einzubauen, nehmen wir zwei Änderungen vor. Wir führen einen zusätzlichen Term ζ in die Kontinuitätsgleichung und einen Term, der zu großes Wachstum von ζ bestraft, in das Benamou-Brenier Funktional ein. Dies führt uns zu dem Optimierungsproblem

$$\min \left\{ \int_0^1 \left[\int_{\Omega} \frac{|E(t, x)|^2}{2\rho(t, x)} dx + \delta^2 \int_{\Omega} \frac{\zeta(t, x)^2}{2\rho(t, x)} dx \right] dt \right\}$$

unter den Bedingungen

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot E = \zeta, \quad \rho(0, \cdot) = \rho_0, \quad \rho(1, \cdot) = \rho_1,$$

wobei $\delta > 0$ ein Parameter ist und die Maße $\rho, \zeta \in \mathcal{M}(X)$ sind und $E \in \mathcal{M}^d(X)$ ist mit $X = [0, 1] \times \Omega$.

Bevor wir die Schritte aus Kapitel 4 noch einmal für unser neues Problem durchgehen, geben wir die Definition einer homogenen Funktion, die wir [9] entnommen haben.

Definition 6.1. *Homogene Funktion*

Sei $f : V \rightarrow W$ eine Funktion zwischen zwei \mathbb{R} -Vektorräumen und $k \in \mathbb{R}$. Die Funktion f ist *homogen* vom Grad k , wenn $f(\alpha \mathbf{v}) = \alpha^k f(\mathbf{v})$ für alle $\alpha > 0$ und alle $\mathbf{v} \in V$ gilt.

Nun betrachten wir die abgeschlossene konvexe Menge

$$B_{\delta} := \left\{ (a, b, c) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} : a + \frac{1}{2} \left(|b|^2 + \frac{c^2}{\delta^2} \right) \leq 0 \right\},$$

die die Menge K_q aus Lemma 4.3 für $p, q = 2$ mit einer zusätzlichen Variable c darstellt. Die dazugehörige konvexe Indikatorfunktion lautet

$$\iota_{B_{\delta}} : (a, b, c) \in \mathbb{R}^{d+2} \mapsto \begin{cases} 0 & \text{wenn } (a, b, c) \in B_{\delta} \\ +\infty & \text{sonst.} \end{cases}$$

Wir bezeichnen mit f_δ die Legendre-Fenchel Duale von ι_{B_δ} , die folgendermaßen aussieht

$$f_\delta : (t, x, y) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \mapsto \begin{cases} \frac{|x|^2 + \delta^2 y^2}{2t} & \text{wenn } x > 0 \\ 0 & \text{wenn } (t, |x|, y) = (0, 0, 0) \\ +\infty & \text{sonst.} \end{cases}$$

Diese ist durch Konstruktion geeignet, konvex, unterhalbstetig und 1-homogen.

Satz 6.2. (Radon-Nikodým): *Es seien λ ein σ -endliches Maß und $\mu \ll \lambda$ ein signiertes Maß auf dem Maßraum (Ω, P) . Dann existiert eine Dichtefunktion, d.h. ein messbares $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ mit $\mu(A) = \int_A f \, d\lambda$ für alle $A \in P$. Man schreibt $f = \frac{d\mu}{d\lambda}$.*

Für einen Beweis siehe [2][S.281-282].

Für $\mu = (\rho, E, \zeta) \in \mathcal{M}(X) \times \mathcal{M}^d(X) \times \mathcal{M}(X)$ mit $X = [0, 1] \times \Omega$ definieren wir ähnlich zu Definition 4.4 das konvexe Funktional

$$\mathcal{D}_\delta(\mu) := \int_{[0,1] \times \Omega} f_\delta \left(\frac{d\mu}{d\lambda} \right) d\lambda,$$

wobei λ ein beliebiges nicht negatives Borelmaß ist, das $|\mu| \ll \lambda$ erfüllt. Da f_δ homogen ist, ist die Definition von \mathcal{D}_δ eindeutig und hängt nicht vom Referenzmaß λ ab.

6.1. Diskretisierung

Um eine numerische Minimierung des Funktionals \mathcal{D}_δ vornehmen zu können, müssen wir unseren Raum, unser Zeitintervall und das Funktional selbst diskretisieren.

Wir betrachten den Raum $[0, L]$ und das Zeitintervall $[0, 1]$ und bezeichnen mit $N + 1$ die Anzahl der räumlichen diskretisierten Punkte und mit $P + 1$ die diskretisierten Punkte bezüglich der Zeit. Wie beim Benamou-Brenier Funktional in Abschnitt 5.1 betrachten wir den eindimensionalen Fall und benutzen erneut das zentrierte Gitter

$$\mathcal{G}_c = \left\{ \left(x_i = L \frac{i}{N}, t_j = \frac{j}{P} \right) \in [0, 1]^2 : 0 \leq i \leq N, 0 \leq j \leq P \right\}$$

und definieren mit

$$V := (m, f, g) \in \mathcal{E}_c = (\mathbb{R}^3)^{\mathcal{G}_c}$$

die auf dem zentrierten Gitter diskretisierten Variablen.

Problem 6.3. *Diskretes konvexes Problem mit Masseänderung*

Als Approximation an das kontinuierliche Optimierungsproblem lösen wir folgendes diskretes konvexes Problem:

$$\min_{V \in \mathcal{E}_c} \{ \mathcal{D}_\delta(V) + \iota_{\mathcal{CE}}(V) \},$$

wobei \mathcal{D}_δ das diskrete Funktional und $\iota_{\mathcal{CE}}$ die Indikatorfunktion für die Menge \mathcal{CE} darstellt, die wir nun definieren.

Wir beziehen uns auf [8][S.34] und wählen $\delta = 1$, indem wir den Raum neu skalieren, weil uns dies eine leichtere Berechnung des Proximalen Operators erlaubt. Als diskretes konvexes Funktional definieren wir

$$\mathcal{D}(V) := \sum_{k \in \mathcal{G}_c} D(m_k, f_k, g_k) \quad (6.1)$$

mit

$$D(m_k, f_k, g_k) = \frac{\|m_k\|^2 + g_k^2}{2f_k}. \quad (6.2)$$

Die Menge der Nebenbedingungen lautet

$$\mathcal{CE} = \{V \in \mathcal{E}_c : AV = y\},$$

wobei $AV = (\operatorname{div}_x(m) + \partial_t f - g, f(\cdot, 0), f(\cdot, 1))$ und $y = (0, f_0, f_1)$ ist.

6.2. Proximale Operatoren

Das Problem 6.1 wollen wir wieder mit dem in Abschnitt 5.3 vorgestellten Douglas-Rachford Algorithmus lösen. Die Funktion G_1 sei hierbei das diskrete Funktional \mathcal{D} und G_2 die Indikatorfunktion $\iota_{\mathcal{CE}}$. In diesem Abschnitt wollen wir die Proximalen Operatoren dieser Funktionen berechnen, was genau wie in den Abschnitten 5.2.1 und 5.2.2 funktioniert.

Proposition 6.4. *Für alle $V \in \mathcal{E}_c$ gilt*

$$\operatorname{Prox}_{\gamma \mathcal{D}}(V) = (\operatorname{Prox}_{\gamma D}(V_k))_{k \in \mathcal{G}_c},$$

wobei für alle $(\tilde{m}, \tilde{f}, \tilde{g}) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$,

$$\operatorname{Prox}_{\gamma D}(\tilde{m}, \tilde{f}, \tilde{g}) = \begin{cases} (\mu(f^*), f^*, \nu(f^*)) & \text{wenn } f^* > 0, \\ (0, 0, 0) & \text{sonst,} \end{cases}$$

wobei für alle $f \geq 0$

$$\mu(f) = \frac{f\tilde{m}}{f + \gamma} \quad \text{und} \quad \nu(f) = \frac{f\tilde{g}}{f + \gamma}$$

und f^* die größte reelle Wurzel folgender polynomieller Gleichung dritter Ordnung ist

$$\begin{aligned} P(f) &:= (f - \tilde{f})(f + \gamma)^2 - \frac{\gamma}{2}(\|\tilde{m}\|^2 + \tilde{g}^2) \\ &= f^3 + f^2(2\gamma - \tilde{f}) + f(\gamma^2 - 2\gamma\tilde{f}) - \gamma^2\tilde{f} - \frac{\gamma}{2}(\|\tilde{m}\|^2 + \tilde{g}^2) = 0. \end{aligned}$$

Als Beweis nehme man die Berechnung von $\operatorname{Prox}_{\gamma \mathcal{J}}$ in Abschnitt 5.2.1.

Die Berechnung des Proximalen Operators der Indikatorfunktion $\iota_{\mathcal{CE}}$ verläuft analog zu Abschnitt 5.2.2 und wir erhalten

$$\operatorname{Prox}_{\gamma \iota_{\mathcal{CE}}}(\tilde{V}) = \operatorname{Proj}_{\mathcal{CE}}(\tilde{V}) = \tilde{V} - A^T(AA^T)^{-1}(A\tilde{V} - y).$$

6.3. Numerische Experimente

Abschließend wollen wir ein paar Experimente zum Douglas-Rachford Algorithmus mit Masseänderung durchführen. Der dazu verwendete Algorithmus befindet sich im Anhang. Zuerst erstellen wir zwei Gaußverteilungen, von denen wir die eine Verteilung in die Andere überführen möchten. In unserer Implementierung beträgt die Anzahl der räumlichen und der zeitlichen Gitterpunkte $n = p = 32$ und wir setzen $\alpha = 1,98$ und $\gamma = 0,0043$, da wir so eine schnelle Konvergenz für den DR Algorithmus erhalten.

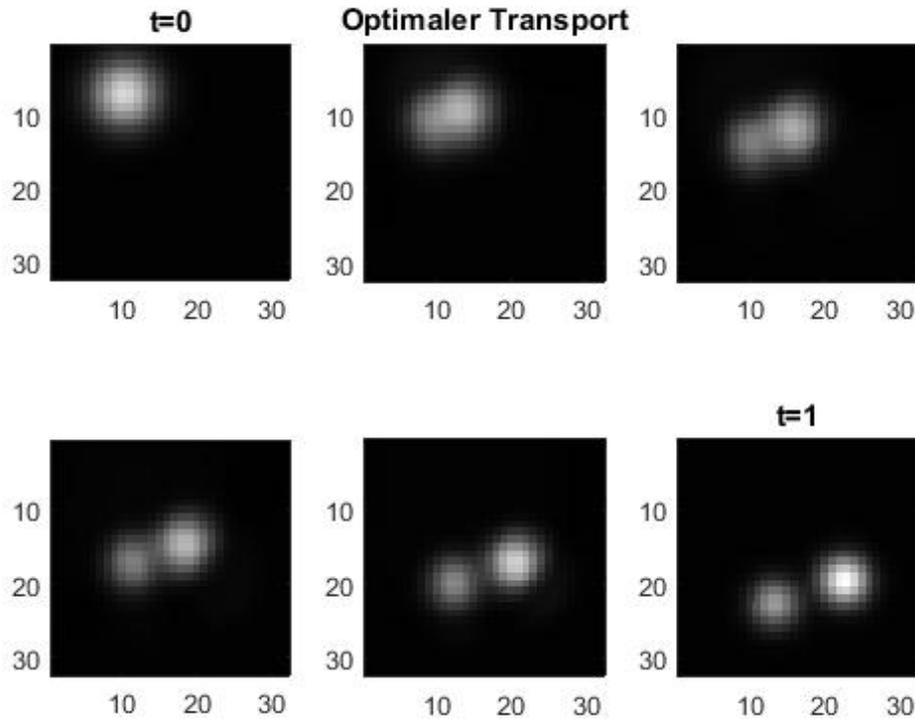


Abbildung 6.1.: Optimaler Transport mit Neumann-Randbedingungen für $L = 1$. Zu den Zeitpunkten $t = 0$ und $t = 1$ sehen wir die vorgegebene Anfangs- und Endverteilung.

Unser Algorithmus durchläuft 150 Iterationen und jedes Mal werten wir unser Funktional \mathcal{D} im Punkt z aus, den wir im zweiten DR Schritt erhalten. Ebenso bestimmen wir den Fehler zu den Nebenbedingungen, wobei wir den Wert von $\text{Prox}_{\gamma\mathcal{D}}(2z^{(l)} - w^{(l)})$ einsetzen, den wir im ersten DR Schritt berechnen. Um verschiedene Varianten des Optimalen Transports zu erhalten, setzen wir unterschiedliche Werte für die Variable L in unseren Raum $[0, L]$ ein. Außerdem betrachten wir zwei Arten von Randbedingungen, einmal periodische und einmal Neumann-Randbedingungen.

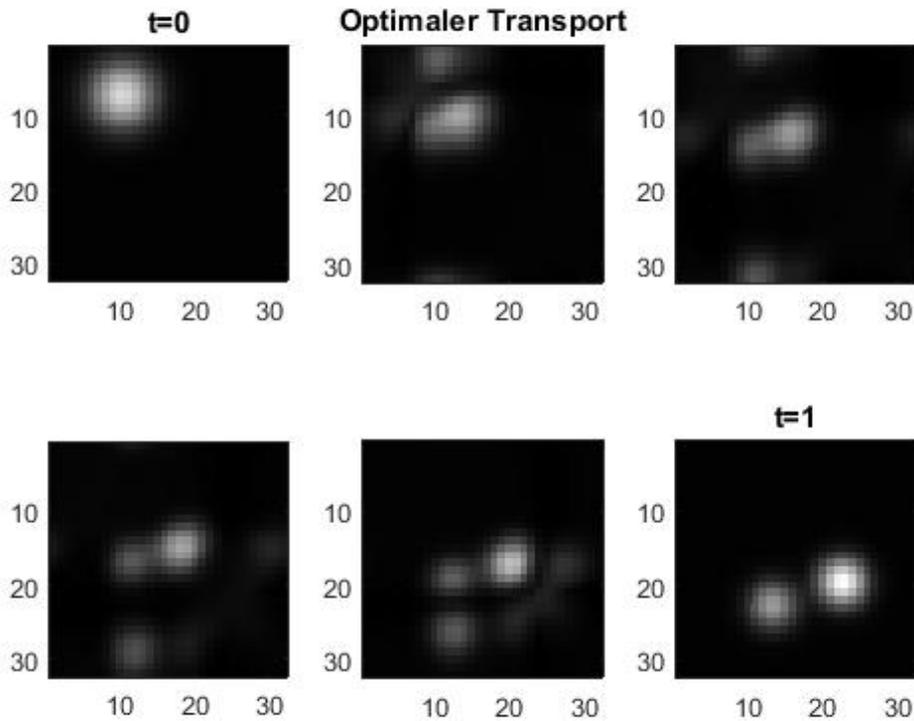


Abbildung 6.2.: Optimaler Transport mit periodischen Randbedingungen für $L = 1$. Zu den Zeitpunkten $t = 0$ und $t = 1$ sehen wir die vorgegebene Anfangs- und Endverteilung.

Bei beiden Randbedingungen lässt sich beobachten, dass bei einer großen Wahl von L , z.B. $L = 20$, ein quadratisches Verschwinden der Masse am Ausgangspunkt und wieder Auftauchen am Zielpunkt geschieht (siehe Abbildung 6.5). Je mehr wir den Wert verkleinern umso mehr Transport und weniger Teleport (d.h. Verschwinden und wieder Auftauchen der Masse) können wir sehen, was die Abbildungen 6.3 und 6.4 verdeutlichen. Ab L kleiner gleich 1 findet nur noch Transport statt, wie wir ihn auch beim nicht mit ζ erweiterten Algorithmus sehen würden (siehe Abbildungen 6.1 und 6.2). Intuitiv ergibt dies auch Sinn. Muss die Masse eine größere Entfernung überbrücken, ist Teleport günstiger als Transport. Bei kurzen Strecken bietet sich einfacher Transport allerdings mehr an. Unterschiedlich zwischen den Randbedingungen ist die Art des Transports. Periodische Randbedingungen bedeuten, dass man sich auf dem Gebiet eines Torus befindet und somit kann hier auch Masse an den Rändern herausfließen und auf der anderen Seite am Rand wieder hineinfließen. Dies ist in den Abbildungen 6.2 und 6.4 auch zu sehen.

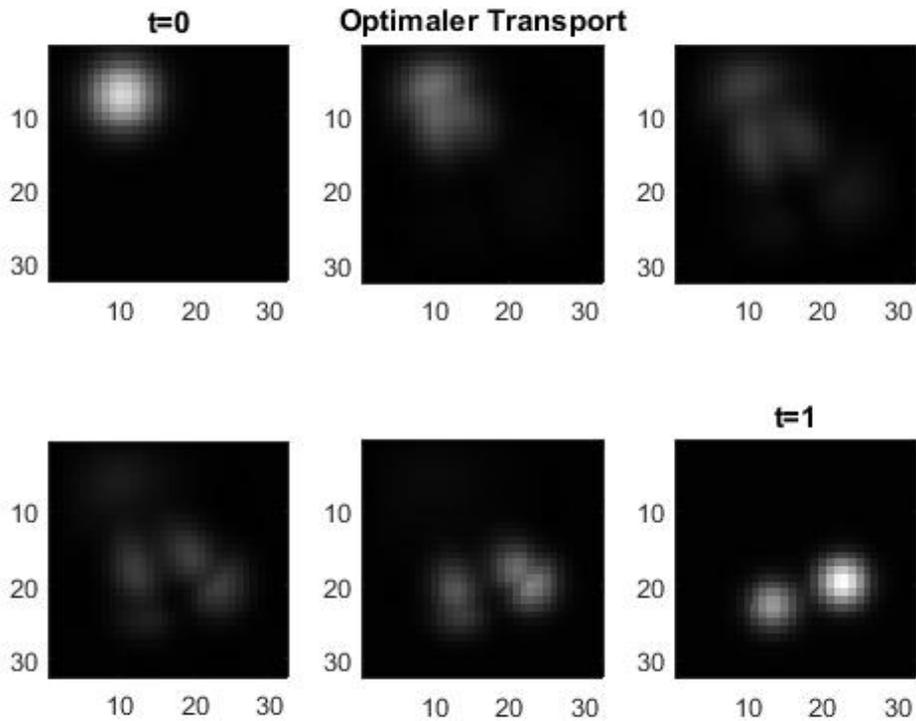


Abbildung 6.3.: Optimaler Transport mit Neumann-Randbedingungen für $L = 5$. Zu den Zeitpunkten $t = 0$ und $t = 1$ sehen wir die vorgegebene Anfangs- und Endverteilung.

Weiterhin beobachten wir, dass der Fehler zu den Nebenbedingungen bei beiden Randbedingungen mit niedrigerem L sinkt und das Funktional ebenfalls abnimmt. So ist der Fehler e bei Neumann-Randbedingungen für $L = 10$ nach der 150. Iteration zum Beispiel $e = 0,3465$ und für $L = 2,5$ lautet er $e = 0,0121$. Bei periodischen Randbedingungen beträgt er $e = 0,2876$ für $L = 10$ und $e = 0,0269$ für $L = 2,5$. Das Funktional $\mathcal{D}(z)$ ausgewertet nach der 150. Iteration sinkt von $63,5546$ (neumann, $L = 10$) und $61,9346$ (periodisch, $L = 10$) auf $3,2961$ (neumann, $L = 1$) und $2,3870$ (periodisch, $L = 1$). Selbst nach mehr Iterationen werden sich diese Werte nur noch gering ändern, da sich das Funktional schon ab der 40. Iteration auf einen Wert einpendelt.

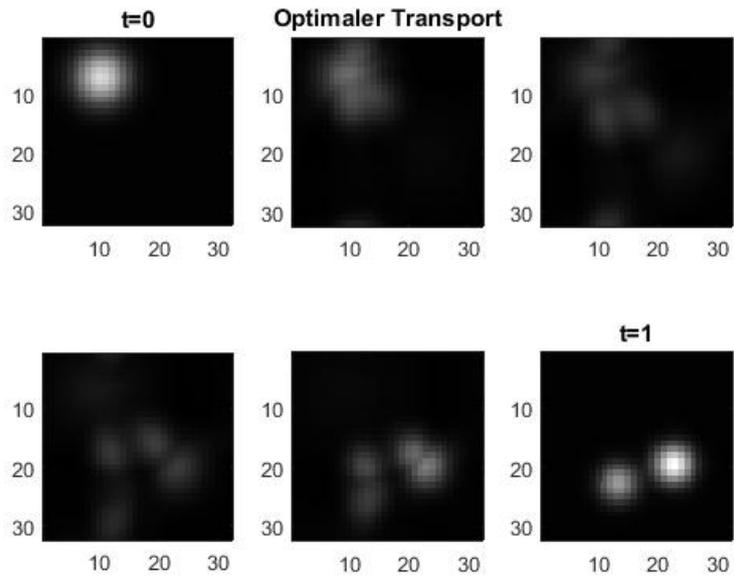


Abbildung 6.4.: Optimaler Transport mit periodischen Randbedingungen für $L = 5$. Zu den Zeitpunkten $t = 0$ und $t = 1$ sehen wir die vorgegebene Anfangs- und Endverteilung.

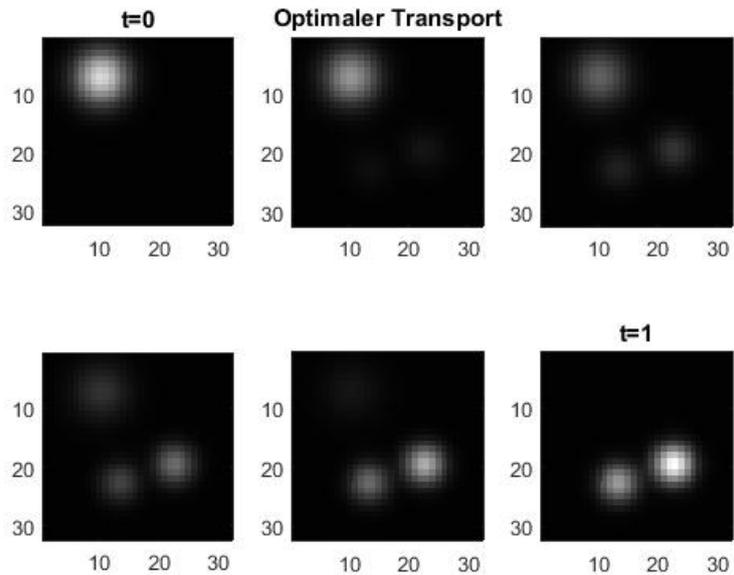


Abbildung 6.5.: Optimaler Transport mit periodischen oder Neumann-Randbedingungen für $L = 20$. Zu den Zeitpunkten $t = 0$ und $t = 1$ sehen wir die vorgegebene Anfangs- und Endverteilung.

7. Fazit und Ausblick

In dieser Bachelorarbeit haben wir uns mit einer Erweiterung des Douglas-Rachford Algorithmus beschäftigt, mit dem wir das Problem des optimalen Transports numerisch lösen wollten. Bevor wir eine Implementierung durchführen konnten, mussten wir das Problem des optimalen Transports nach Monge und nach Kantorovich in ein konvexes Problem umformulieren. Denn solche Probleme haben die Eigenschaft, dass wenn man einen lokalen Minimierer gefunden hat, dieser auch ein globaler Minimierer ist. Hier haben Benamou und Brenier wegweisende Arbeit geleistet, indem sie die Äquivalenz der Wassersteindistanz, die unseren optimalen Transport beschreibt, zum Benamou-Brenier Funktional \mathcal{B}_p bewiesen haben. Dieses zentrale Theorem ist in der Arbeit in Kapitel 4 als Theorem 4.5 zu finden. Daraufhin war es möglich den DR Algorithmus zu implementieren. Weiter arbeitet unser Algorithmus mit Proximalen Operatoren, die auch eine Optimierung mit nicht glatten Funktionen erlauben und wir in Abschnitt 5.2 eingeführt haben. Als letzte Aufgabe blieb uns das Benamou-Brenier Funktional zu erweitern, damit anstatt reinem Transport auch ein Verschwinden der Masse und wieder Auftauchen dieser an anderer Stelle erlaubt war. Mit diesem Modell führten wir schließlich einige numerische Experimente in Abschnitt 6.3 durch und beobachteten wie erwartet, dass auf einem großen Raum ein solches Verschwinden und Neuentstehen von Masse günstiger als Transport ist. Je kleiner das Gebiet wurde umso mehr wurde transportiert statt teleportiert bis der Punkt erreicht war, an dem nur noch Transport stattfand.

Schon in der Einleitung haben wir erwähnt, dass optimaler Transport viele Anwendungen findet. Der Douglas-Rachford Algorithmus ist ebenfalls gut verwendbar, wenn es um nicht glatte Optimierung geht und die Proximalen Operatoren der zu minimierenden Funktionen leicht zu berechnen sind. Der Artikel, der sich mit dem dynamischen optimalen Transport mit Masseänderung befasst, ist gerade einmal aus dem Jahr 2015 und hier eröffnen sich noch viele Möglichkeiten die Forschung und seine Anwendung zu erweitern. Statt wie in dieser Arbeit optimalen Transport zwischen beliebigen Gaußfunktionen zu untersuchen, kann man seine Forschung an ein Institut binden und in der Realität vorkommende biologische Prozesse mit diesem Algorithmus untersuchen.

Literaturverzeichnis

- [1] F. Santambrogio: Optimal Transport for Applied Mathematicians. Calculus of Variations, PDEs and Modeling. 2015
- [2] J. Elstrodt: Maß- und Integrationstheorie. 6., korrigierte Auflage. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2009
- [3] N. Papadakis, G. Peyré, E. Oudet: Optimal Transport with Proximal Splitting. 2013
- [4] S. Boyd, L. Vandenberghe: Convex Optimization. CUP, 2004
- [5] J. Borwein, A. Lewis: Convex Analysis and Nonlinear Optimization: Theory and Examples (2 ed.). Springer, 2006
- [6] F. Hirzebruch, W. Scharlau: Einführung in die Funktionalanalysis. 1971
- [7] P.L. Combettes, J.-C. Pesquet: A Douglas-Rachford splitting approach to nonsmooth convex variational signal recovery. IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing, 1(4):564-574, 2007
- [8] L. Chizat, B. Schmitzer, G. Peyré, F.-X. Vialard: An Interpolating Distance between Optimal Transport and Fisher-Rao. 2015
- [9] M. Hazewinkel: Homogeneous function. Encyclopedia of Mathematics, Springer Science+Business Media B.V. / Kluwer Academic Publishers, ed. (2001) [1994]
- [10] http://www.numerical-tours.com/matlab/optimaltransp_2.benamou_brenier/
(zuletzt besucht am 11.10.2017)

A. Unbalanced Douglas-Rachford Algorithmus

Im Anhang stellen wir eine Implementierung des Douglas-Rachford Algorithmus mit Masseänderung vor. Der Code ist [10] entnommen und wurde zum besseren Verständnis leicht verändert, Fehler wurden verbessert und er wurde erweitert, sodass eine Masseänderung während des Transports erlaubt ist. Sein Aufbau ist dem des sechsten Kapitels nachempfunden.

Wir beginnen mit der Diskretisierung des Raumes. Codezeile 27 erzeugt uns ein $n \times n$ Gitter mit x - und y -Werten aus dem Intervall $[0, L]$. Die Werte haben linearen Abstand zueinander, der $\frac{L}{n-1}$ beträgt. Dann erstellen wir zwei diskretisierte Dichten f_0 und f_1 als Anfangs- und Endverteilung, zwischen denen der optimale Transport gesucht wird. Unsere Dichten sind Gaußfunktionen, also von der Art

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \frac{-(X-a)^2+(Y-b)^2}{2\sigma^2}.$$

Der Faktor vor der Exponentialfunktion ist dafür da, dass das Integral über solche Funktionen gleich 1 ist und wird im Code durch die Funktion *normalize* (Zeile 32) ersetzt. Der minimale Dichtewert *rho* (Zeile 37) sorgt dafür, dass man der null nicht zu nahe kommt, da dies bei der Implementierung zu Problemen führen kann.

```
1 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
2 % Die Optimierung des Benamou–Brenier Funktional mit erlaubter %
3 % Masseänderung mittels Douglas–Rachford Algorithmus           %
4 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
5
6 % Füge die Toolboxen, in denen sich weitere nützliche Funktionen
7 % befinden, dem Pfad hinzu.
8
9 getd = @(p)path(p,path);
10
11 getd('toolbox_signal/');
12 getd('toolbox_general/');
13
14 % Nützliche Funktionen, von denen die erste die 2-Norm eines Vektors und
15 % die zweite ein diskretes Integral berechnen soll.
16
17 mynorm = @(a)norm(a(:));
18 sum3 = @(a)sum(a(:));
19
20 % Die Dichten werden auf einem rechteckigen räumlichen 2-D Gitter
```

```

21 % der Groesse N = n x n diskretisiert .
22 % Das Zeitintervall [0,1] wird mit P Punkten diskretisiert .
23
24 n = 32;
25 p = 32;
26 delta = 0.2;
27 L = 1/delta;
28 [Y,X] = meshgrid(linspace(0,L,n), linspace(0,L,n));
29
30 % Abkuerzungen zur Generierung von Gaussfunktionen
31
32 gaussian = @(a,b,sigma)exp( -(X-a).^2+(Y-b).^2)/(2*sigma^2) );
33 normalize = @(u)u/sum(u(:));
34
35 % Erzeuge zwei diskretisierte Dichten f0 und f1 .
36
37 sigma = .1;
38 rho = .01; % minimaler Dichtewert
39 f0 = normalize(rho + gaussian(.2*L,.3*L,sigma*L));
40 f1 = normalize(rho + gaussian(.6*L,.7*L,sigma*.7*L) ...
41               + .6*gaussian(.7*L,.4*L,sigma*.7*L));
42
43 % Plotte f0 und f1 .
44
45 clf;
46 imageplot({f0 f1},{ 'Anfangsverteilung ', 'Endverteilung ' });

```

Danach definieren wir uns die Funktionen aller notwendigen Ableitungen um später $\text{Prox}_{\gamma_{\mathcal{CE}}}$ und die Nebenbedingungen zu berechnen. Wir benötigen auch die adjungierten Operatoren der Ableitungen und der Matrix A . Da es bei diesen Rechnungen schnell zu Fehlern kommen kann, versichern wir uns mit der Funktion *certify_adjoint* (siehe z.B. Zeile 81), dass der Fehler nicht zu groß ist. Die Funktion berechnet $e = \frac{|\langle A(x),y \rangle - \langle x,AS(y) \rangle|}{|\langle A(x),y \rangle|}$. Schließlich definieren wir die Funktionen unseres diskreten Funktionals \mathcal{D} und der Menge \mathcal{CE} der Nebenbedingungen. Da Matlab nicht über kalligraphische Zeichen verfügt, bezeichnen wir hier mit D das Funktional \mathcal{D} aus (6.1) und mit d die Funktion D aus (6.2).

```

48 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
49 % Berechnungen aller Ableitungen, die fuer die Berechnung des Proximalen
50 % Operators der Indikatorfunktion und der Nebenbedingungen benoetigt werden
51 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
52
53 % Randbedingungen, entweder periodisch oder Neumann
54
55 bound = 'per';
56 bound = 'neum';
57
58 % Wir benutzen Finite Differenzen erster Ordnung mit periodischen
59 % Randbedingungen um die raeumlichen Ableitungen zu approximieren.
60
61 if strcmp(bound, 'per')
62     dx = @(u)(u([2:end 1],:,:) - u)*((n-1)/L);

```

```

63     dy = @(u)(u(:, [2: end 1], :) - u) * ((n-1)/L);
64 else
65     dx = @(u)(u([2: end end], :, :) - u) * ((n-1)/L);
66     dy = @(u)(u(:, [2: end end], :) - u) * ((n-1)/L);
67 end
68
69 % Die adjungierten Operatoren sind Rueckwaertsdifferenzen. Das S steht fuer
70 % das englische Wort star = *.
71
72 if strcmp(bound, 'per')
73     dxS = @(u)(-u+u([end 1: end-1], :, :)) * ((n-1)/L);
74     dyS = @(u)(-u+u(:, [end 1: end-1], :)) * ((n-1)/L);
75 else
76     dxS = @(u)[-u(1, :, :); u(1: end-2, :, :)-u(2: end-1, :, :); u(end-1, :, :)] ...
77             * ((n-1)/L);
78     dyS = @(u)[-u(:, 1, :), u(:, 1: end-2, :)-u(:, 2: end-1, :), u(:, end-1, :)] ...
79             * ((n-1)/L);
80 end
81
82 % Ueberpruefe, ob dxS und dyS wirklich d/dx* und d/dy* implementieren.
83
84 fprintf('Should be 0: %.2e\n', certify_adjoint(dx, dxS, [n n p]));
85 fprintf('Should be 0: %.2e\n', certify_adjoint(dy, dyS, [n n p]));
86
87 % Definiere den raeumlichen Gradienten und die raeumliche Divergenz, wobei
88 % nach partieller Integration und Definition 5.6 div = -Gradient* gilt.
89
90 grad = @(u) cat(4, dx(u), dy(u));
91 div = @(u) -dxS(u(:, :, :, 1)) - dyS(u(:, :, :, 2));
92
93 % Ueberpruefe, ob div wirklich die Divergenz implementiert.
94
95 fprintf('Should be 0: %.2e\n', certify_adjoint(grad, @(v) -div(v), [n n p]));
96
97 % Wir benutzen Finite Differenzen erster Ordnung fuer die Ableitung in
98 % Zeitrichtung. Beachte, dass Nullen an das Ende gegangen werden um die
99 % gleiche Dimensionalitaet zu erhalten.
100
101 dt = @(u)(cat(3, u(:, :, 2: end) - u(:, :, 1: end-1), zeros(size(u, 1), size(u, 2)))) ...
102         *(p-1);
103 dtS = @(u)(cat(3, -u(:, :, 1), u(:, :, 1: end-2) - u(:, :, 2: end-1), u(:, :, end-1))) ...
104         *(p-1);
105
106 % Ueberpruefe den adjungierten Operator von dt.
107
108 fprintf('Should be 0: %.2e\n', certify_adjoint(dt, dtS, [n n p]));
109
110 % Im folgenden ist V = (m, f, g) wie in Abschnitt 6.1 eine Matrix der Groesse
111 % (n, n, p, 4), sodass m in V(:, :, :, 1:2), f in V(:, :, :, 3) und g in V(:, :, :, 4)
112 % untergebracht ist.
113
114 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
115 % Definition des Funktionals D und der Nebenbedingungen %
116 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

```

```

117
118 D = @(V)sum3( (sum(V(:,:,:,1:2).^2,4) + V(:,:,:,4).^2 ) ./ (2*V(:,:,:,3)) );
119 A = @(V) cat(3, div(V(:,:,:,1:2)) + dt(V(:,:,:,3)) - V(:,:,:,4), ...
120         V(:,:,:,1,3), V(:,:,:,end,3));
121 y = cat(3, zeros(n,n,p), f0, f1);
122
123 % Der adjungierte Operator zu A lautet fuer alle r = (s,r0,r1), wobei s aus
124 % R^(N x P) und r0,r1 aus R^N: A*r = (-grad(s), dt*(s) + U(r0,r1), -s).
125 % Definiere A* und den Operator U(r0,r1), der fuer Zeiten zwischen t = 0
126 % und t = 1 Nullen auffuehlt.
127
128 U = @(r0,r1) cat(3, r0, zeros(n,n,p-2), r1);
129 AS = @(r) cat(4, -grad(r(:,:,:,1:p)), ...
130             dtS(r(:,:,:,1:p)) + U(r(:,:,:,end-1),r(:,:,:,end)), -r(:,:,:,1:p));
131
132 % Ueberpruefe, ob AS wirklich A* implementiert.
133
134 fprintf('Should be 0: %.2e\n', certify_adjoint(A,AS,[n n p 4]));

```

Als nächstes folgt die Berechnung der Proximalen Operatoren $\text{Prox}_{\gamma\mathcal{D}}$ (hier ProxD) und $\text{Prox}_{\gamma\mathcal{CE}}$ (hier ProxG), die in Kapitel 6.2 nachzulesen ist. Statt der dort verwendeten Variablen $\tilde{m}, \tilde{f}, \tilde{g}$ und A^T werden im Algorithmus m_0, f_0, g_0 und A^* benutzt.

```

136 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
137 % Berechnung des Proximalen Operators des Funktionals D %
138 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
139
140 % Bilde die Koeffizienten des Polynoms P(f).
141
142 PolyCoef = @(m0,f0,g0,gamma)[ones(length(f0),1), 2*gamma-f0, ...
143             gamma^2-2*gamma*f0, -gamma/2*(sum(m0.^2,2)+g0.^2) - gamma^2*f0];
144
145 % Helfer um die groesste reelle Wurzel eines kubischen Polynoms zu
146 % berechnen. CubicReal berechnet also unsere gesuchte Loesung f*.
147
148 extract = @(A)A(:,1);
149 CubicReal = @(P)real( extract(poly_root(P')) );
150
151 % Definiere den Proximalen Operator von d. Bemerke, dass er parallel ueber
152 % die Arrays m der Groesse k x 2, f der Groesse k x 1 und g der Groesse
153 % k x 1 operieren kann.
154 % Proxd0 steht fuer das Tripel (mu(f),f,nu(f)).
155
156 Proxd0 = @(m0,f,g0,gamma) cat(2, m0 ./ repmat( 1+gamma./f, [1 2]), f, ...
157             g0 ./ (1+gamma./f));
158 Proxd = @(m0,f0,g0,gamma) Proxd0(m0, CubicReal(PolyCoef(m0,f0,g0,gamma)), ...
159             g0, gamma );
160
161 % Definiere den Proximalen Operator von D, indem man den Proximalen
162 % Operator von d benutzt.
163
164 ProxD = @(V,gamma) reshape( Proxd( ...
165             reshape(V(:,:,:,1:2), [n*n*p 2]), ...

```

```

166         reshape(V(:,:,3), [n*n*p 1]), ...
167         reshape(V(:,:,4), [n*n*p 1], gamma), [n n p 4] );
168
169 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
170 % Berechnung des Proximalen Operators der Indikatorfunktion %
171 % ueber explizite Matrix Darstellung von A %
172 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
173
174 AMat = sparse(n*n*(p+2),n*n*p*4);
175 reshV = @(x)reshape(x, [n n p, 4]);
176 flat = @(x)x(:);
177
178 for i=1:n*n*p*4
179     if mod(i,n*n*4) == 0 % Zeigt den Fortschritt von 1 bis p an
180         fprintf( '%d\n',round(i/(n*n*4)));
181     end
182     inputVector = zeros(1,n*n*p*4);
183     inputVector(i) = 1;
184     outputVector = flat(A(reshV(inputVector)));
185     AMat(:,i) = outputVector;
186 end
187
188 ASMat = transpose(AMat);
189 AASMat = AMat*ASMat;
190 ProxG = @(V,gamma)(V - reshV(ASMat*(AASMat\((AMat*flat(V)-flat(y))))));
191
192 V = randn(n,n,p,4);
193 err = @(V)mynorm(A(V)-y)/mynorm(y);
194 fprintf( 'Error before projection: %.2e\n', err(V));
195 fprintf( 'Error before projection: %.2e\n', err(ProxG(V)));

```

Schließlich implementieren wir den DR Algorithmus wie in Kapitel 5.3 beschrieben und plotten einmal das Funktional \mathcal{D} nach jeder Iteration und dann sechs Zwischenbilder des optimalen Transports von der Anfangs- zur Endverteilung (diese eingeschlossen).

```

197 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
198 % Douglas-Rachford Algorithmus %
199 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
200
201 % Setze die Werte von alpha und gamma fest.
202
203 alpha = 1.98;
204 gamma = 1./230.;
205
206 % Anzahl an Iterationen
207
208 niter = 150;
209
210 % Initialisierung mittels linearer Interpolation der Dichten.
211
212 t = repmat( reshape(linspace(0,1,p), [1 1 p]), [n n 1]);
213 f = (1-t) .* repmat(f0, [1 1 p]) + t .* repmat(f1, [1 1 p]);
214 m = zeros(n,n,p,2);

```

```

215 g = zeros(n,n,p,1);
216 w0 = cat(4, m,f,g);
217
218 % Plotten der Initialisierungen.
219
220 sel = round(linspace(1,p,6));
221 clf;
222 imageplot(mat2cell(w0(:,:,sel,3), n, n, ones(6,1)),',',2,3);
223
224 z0 = ProxG(w0,gamma);
225 mynorm(A(w0)-y)/mynorm(y);
226 mynorm(A(z0)-y)/mynorm(y);
227
228 % Implementierung des iterativen DR Algorithmus mit niter Iterationen und
229 % Beobachtung der Entwicklung der Energie D und des Fehlers.
230
231 energy = zeros(1,niter);
232 constr = zeros(1,niter);
233 w = w0;
234 z = z0;
235
236 for i=1:niter
237     if mod(i,10) == 0 % Zeigt den Fortschritt in 10er Schritten an
238         fprintf('%d\n',i);
239     end
240
241     rw = ProxD(2*z-w,gamma);
242     w = w + alpha*rw - alpha*z;
243     z = ProxG(w,gamma);
244
245     energy(i) = D(z);
246     constr(i) = mynorm( A(rw)-y ) / mynorm(y);
247 end
248
249 clf;
250 h = plot(energy);
251 set(h, 'LineWidth', 2);
252 title('D(z)');
253 axis tight;
254 pause
255
256 clf;
257 h = plot(constr);
258 set(h, 'LineWidth', 2);
259 title('Fehler');
260 axis tight;
261 pause
262
263 % Plotte die sich ergebenden Dichten f(x,t) fuer t von 0 bis 1.
264
265 sel = round(linspace(1,p,6));
266 clf;
267 for ii = 1:length(sel)
268     subplot(2,3,ii);

```

```
269 |     imagesc(z(:, :, sel(ii), 3));  
270 |     caxis([0, max([f0(:); f1(:)])]);  
271 |     axis image;  
272 | end
```

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Arbeit mit dem Titel *Douglas-Rachford-Optimierung von dynamischen optimalen Transport mit Masseänderung* selbstständig verfasst worden ist, dass keine anderen Quellen und Hilfsmittel als die angegebenen benutzt worden sind und dass die Stellen der Arbeit, die anderen Werken – auch elektronischen Medien – dem Wortlaut oder Sinn nach entnommenen wurden, auf jeden Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht worden sind.

Münster, 17. Oktober 2017

(Farina Bolte)

Ich erkläre mich mit einem Abgleich der Arbeit mit anderen Texten zwecks Auffindung von Übereinstimmungen sowie mit einer zu diesem Zweck vorzunehmenden Speicherung der Arbeit in eine Datenbank einverstanden.

Münster, 17. Oktober 2017

(Farina Bolte)