数学模型 Lecture Notes

Zhennan Zhou

2022 年 3 月 28 日

PRELIMINARY DRAFT. NOT FOR WIDE CIRCULATION.

参考：教材二第3章。

拓展：教材四第2章。(拓展材料除了讲义中包含的内容之外，不属于作业、考试范围。)

4 变分原理与优化简介

For since the fabric of the universe is most perfect, and is the work of a most wise Creator, nothing whatsoever takes place in the universe in which some relation of maximum and minimum does not appear.

——Leonhard Euler

皮埃尔·德·费马（Pierre de Fermat）于1662年发表了费马原理。该原理阐明：光传播的正确路径，所需的时间必定是极值。这原理在物理学界造成了很大的震撼。不同于牛顿运动定律的机械性，现今，一个物理系统的运动拥有了展望与目标。

1744年，皮埃尔·莫佩尔蒂发表了最小作用量原理：光选择的传播路径，作用量最小。他定义作用量为移动速度与移动距离的乘积。用这原理，他证明了费马原理：光传播的正确路径，所需的时间是极值；他也计算出光在反射与同介质传播时的正确路径。莱昂哈德·欧拉（Leonhard Euler）在同年发表了一篇论文，表明物体的运动遵守某种物理量极值定律。

从数学模型的角度来看，很多物理运动规模满足某种极值性，因而模型的建立可以由，“构造目标函数（和限制）”，“推导最优解满足的方程”这两步完成。事实上，这也提供给了我们一个一般性的建模思路。

我们需要注意，这种基于优化的建模思路和前两章的基于时间微小变化的建模思路是非常不同的。但是，有时候我们用这两种建模方式也能得到相同的数学模型。

4.1 引言：微积分中的极值问题和泛函

我们回忆一下微积分中的极值问题，对于光滑的目标函数 $f(\boldsymbol{x}) \in \mathbb{R}$，$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m$，它在 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}*$ 取到极值点，即存在一个 $\boldsymbol{x}*$ 的邻域 $U(\boldsymbol{x}^*)$，使得

$$f(\boldsymbol{x}) \leq (\geq) f(\boldsymbol{x}^*), \quad \forall \boldsymbol{x} \in U(\boldsymbol{x}^*).$$

它的必要条件是，

$$\nabla f(\boldsymbol{x}*) = \mathbf{0}. \tag{4.1}$$

而充分性则需要考虑目标函数的高阶导数等其他条件。

那么，如果自变量是一个函数呢？比如，如果目标仍然是一个标量，而我们需要在一个元素为函数的集合中挑选出一些特殊的函数，使得目标达到极值呢？为了做这个推广，我们首先引入 **泛**

函 的概念。简单的说，泛函就是把函数映成标量的映射。一些泛函是以积分的形式给出的。例如，对于任意一个给定的函数 $y(x)$，$0 \le x \le 1$，曲线下面面积和曲线的弧长，

$$A(y) = \int_0^1 y(x)dx, \quad S(y) = \int_0^1 \sqrt{1 + (y'(x))^2}dx.$$

我们主要考虑如下形式的泛函，它是一个函数及其导数的定积分，

$$J(y) = \int_a^b L(x, y(x), y'(x), y''(x), \cdots)dx. \tag{4.2}$$

这里，被积函数称为拉格朗日量（named after Joseph Lagrange (1736–1813)）。

现在，考虑目标泛函的极小化问题：泛函 $J(y)$ 于函数 $y_*(x)$ 取极小值，如果对于 $\varepsilon \to 0$ 和所有“可容许的”扰动函数 $h(x)$，总有

$$J(y_*(x)) \le J(y_*(x) + \varepsilon h(x)).$$

这里，$h(x)$ 是待指明的，用来刻画最优解 $y_*(x)$ 的在函数空间中的邻域。

4.2 从优化到模型：极值解满足的方程

4.2.1 欧拉-拉格朗日方程（Euler-Lagrange equation）

哈密顿变分原理或最小作用量原理（*least action principle*）：一个力学系统中，设动能为$T(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{v})$，势能为$U(t, \boldsymbol{q})$，质点在 t_1 时刻始于 $\boldsymbol{q}_1$，在 t_2 时刻止于 $\boldsymbol{q}_2$，则运动轨迹取作用量积分

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(t, \boldsymbol{q}(t), \boldsymbol{v}(t))dt$$

的极值点。其中，（在常见的经典系统里面）$L(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{v}) = T - U$ 为系统的拉格朗日量（Lagrangian function）。这里，t表示时间，$\boldsymbol{q} = (q_1, \cdots, q_s)$ 表示系统质点的坐标，$\boldsymbol{v} = \dot{\boldsymbol{q}} := d\boldsymbol{q}/dt$表示速度。

注意，运动轨迹是 S 的极值点和经典力学系统中 $L(t, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{v}) = T - U$ 是两个模型假设，我们不需要了解原因。（但是如果你接受了这个事实之后，你可能会觉得这是一件不可思议的事情，如果只规定了一条运动轨迹的初始位置和最终位置，这条运动轨迹仍然是自由自由的，但是这个世界似乎只向你展式了一条轨迹，而且是某种意义上最优的轨迹。）

我们接下来会做一些数学演算，大家会发现通过优化推导模型的数学思想其实是一个全体到局部的过程（或者说积分到微分的过程）。

为了求作用量 S 的极值问题，我们学习一下泛函导数 (functional derivative) 的基本知识：

考虑一个元素为函数 ρ 的空间 M （也就是说空间的每一个元素是一个函数，我们不妨假设 $\boldsymbol{\rho}: \mathbb{R} \to \mathbb{R}^s$，也就是说，$\boldsymbol{\rho}$ 是单变量函数，取值可以是标量，也可以是向量）, 和定义在上面的泛函

$$J: \quad M \to \mathbb{R} \quad \text{or} \quad \mathbb{C}.$$

需要提醒大家的是，我们不讨论一般的函数空间和泛函的定义，虽然泛函可以很抽象，但是在很多具体的问题中，泛函其实是一些我们熟悉的映射，比如，一个函数在某一点的赋值，一个函数的定积分，或者函数的函数的定积分，等等。

$J(\rho)$ 的泛函导数，表示为 $\frac{\delta J}{\delta \boldsymbol{\rho}}: \mathbb{R} \to \mathbb{R}^s$，是如下定义的

$$\int_a^b \frac{\delta J}{\delta \boldsymbol{\rho}}(x) \cdot \boldsymbol{h}(x)dx = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{J[\boldsymbol{\rho} + \varepsilon \boldsymbol{h}] - J[\boldsymbol{\rho}]}{\varepsilon} = \left[\frac{d}{d\varepsilon} J[\boldsymbol{\rho} + \varepsilon \boldsymbol{h}] \right]_{\varepsilon = 0},$$

如果已知 $\boldsymbol{\rho}(a)$ 和 $\boldsymbol{\rho}(b)$固定，那么我们取 $\boldsymbol{h}(x)\in\mathbb{R}^s$ 是在端点为 $\mathbf{0}$ 的任意函数，即 $\boldsymbol{h}(a)=\boldsymbol{h}(b)=\mathbf{0}$，而 $\varepsilon\boldsymbol{h}$ 称为 $\boldsymbol{\rho}$ 的变分。在形式演算中，我们可以通过泰勒展开来求泛函导数。

回到最小作用量原理的例子中，由于初态和终态中位置的确定，则我们要求 $\boldsymbol{h}(t_1)=\boldsymbol{h}(t_2)=0$。回忆到 $S=\int_{t_1}^{t_2}L(t,\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}})dt$ （注意，$\dot{\boldsymbol{q}}=\boldsymbol{v}$），我们可以进行如下的运算

$$\begin{aligned}\int_{t_1}^{t_2}\frac{\delta S}{\delta q}(t)\cdot\boldsymbol{h}(t)dt&=\left[\frac{d}{d\varepsilon}S[\boldsymbol{q}+\varepsilon\boldsymbol{h}]\right]_{\varepsilon=0}\\&=\left[\frac{d}{d\varepsilon}\int L(t,\boldsymbol{q}+\varepsilon\boldsymbol{h},\dot{\boldsymbol{q}}+\varepsilon\dot{\boldsymbol{h}})dt\right]_{\varepsilon=0}\\&=\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{h}+\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{v}}\cdot\dot{\boldsymbol{h}}\right)dt\\&=\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{h}-\left(\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{v}}\right)_t\cdot\boldsymbol{h}\right)dt\\&=\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{q}}-\left(\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{v}}\right)_t\right)\cdot\boldsymbol{h}dt.\end{aligned}$$

这里，分部积分的边界项消失了，因为 h 在边界处为0。最终，我们通过最小作用量原理和变分函数的任意性（Fundamental Lemma of the Calculus of Variations），推导出了著名的 Euler-Lagrange equation

$$\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{q}}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{v}}\right)=\mathbf{0}.$$

注意，这里 $\boldsymbol{q}\in\mathbb{R}^s$ 是 t 的单变量向量值函数。

如果自变量也是多维的，我们也可以类似的推导 Euler-Lagrange 方程。基于之前的假设，如果把 $\boldsymbol{q}\in\mathbb{R}^s$ 改为是 $x=(x_1,\cdots,x_d)$ 的函数，即 $\boldsymbol{q}:\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}^s$，那么对应的 Euler-Lagrange 方程为

$$\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{q}}-\sum_{j=1}^{d}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{q}_{x_j}}\right)=0.$$

注意，这里的 $\boldsymbol{q}_{x_j}=\partial\boldsymbol{q}/\partial x_j$.

我们先看两个泛函导数相关的例子：

Example 1 考虑连接 $(0,0)$ $(1,b)$ 两点的最短路径。令 $y(x),0\le x\le 1$ 满足

$$y(0)=0,\quad y(1)=b.$$

我们考虑弧长

$$J(y)=\int_0^1\sqrt{1+(y')^2}dx$$

的极值。我们求变分易得

$$\int_0^1\frac{\delta J}{\delta y}hdx=\int_0^1-\left(\frac{y'}{\sqrt{1+(y')^2}}\right)'hdx.$$

令 $\frac{\delta J}{\delta y}=0$，我们得到 y' 恒等于一个常数。最后，由边界条件，我们得到，连接 $(0,0)$ $(1,b)$ 两点的最短路径是 $y=bx$ 上的线段。

Example 2. 考虑电子之间的经典作用模型，Thomas 和 Fermi 采用了如下的基于库伦势能的能量泛函

$$J[\rho]=\frac{1}{2}\int\int\frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|}drdr'.$$

根据泛函导数的定义，我们有

$$\begin{aligned}\int \frac{\delta J}{\delta \rho} h dr &= \left[\frac{d}{d\varepsilon} J[\rho+\varepsilon h]\right]_{\varepsilon=0} \\ &= \left[\frac{d}{d\varepsilon}\frac{1}{2}\int\int \frac{(\rho(r)+\varepsilon h(r))(\rho(r')+\varepsilon h(r'))}{|r-r'|} dr dr'\right]_{\varepsilon=0} \\ &= \frac{1}{2}\int\int \frac{h(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr' + \frac{1}{2}\int\int \frac{\rho(r)h(r')}{|r-r'|} dr dr' \\ &= \int\left(\int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr'\right) h(r) dr.\end{aligned}$$

于是我们得到

$$\frac{\delta J}{\delta \rho} = \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr'.$$

4.2.2 绳索的微小振动

考虑在时间t距离平衡位置x的位移$u = u(x,t)$的微分方程。这里，$x \in \mathbb{R}$。我们仅考虑微小振动，$u(x,t)$及其导数的高阶项将被忽略。不妨假设，$x \in [a,b]$ 且端点固定，$t \in [0,T]$ 且已知初态终态，记 $D = [0,T] \times [a,b]$。

令$\rho(x)$表示绳索的线密度，在时间t在位置x的动能密度为（形式上，可以把 u_t 看作速度）

$$T = \frac{1}{2}\rho(x) u_t^2.$$

微积分我们知道绳索微元长度 $ds = \sqrt{1+u_x^2}dx$, 所以形变长度为

$$ds - dx = (\sqrt{1+u_x^2} - 1)dx \approx \frac{1}{2}u_x^2 dx.$$

所以（根据弹性理论）势能密度的表达式是

$$U = \frac{1}{2}\mu u_x^2,$$

这里μ是弹性系数。

动能和势能模型的建立过程需要更多的物理知识，我们只是把它们当作模型假设，不做深究。

绳索的作用量积分为

$$S = \int_a^b \int_0^T L dt dx = \int_a^b \int_0^T (T-U) dt dx = \int_a^b \int_0^T \left(\frac{1}{2}\rho(x)u_t^2 - \frac{1}{2}\mu u_x^2\right) dt dx.$$

对应的 Euler-Lagrange equation 为

$$\frac{\partial L}{\partial u} - \left(\frac{\partial L}{\partial u_t}\right)_t - \left(\frac{\partial L}{\partial u_x}\right)_x = 0.$$

经过计算，我们得到

$$\frac{\partial L}{\partial u} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial u_t} = \rho(x)u_t, \quad \frac{\partial L}{\partial u_x} = -\mu u_x,$$
$$\left(\frac{\partial L}{\partial u_t}\right)_t = \rho(x)u_{tt}, \quad \left(\frac{\partial L}{\partial u_x}\right)_x = -\mu u_{xx}.$$

于是我们得到一维波动方程

$$\rho(x)u_{tt} = \mu u_{xx}.$$

如果绳索收到外力$f(x,t)$, 那么动能密度不变，势能密度变为

$$U = \frac{1}{2}\mu u_x^2 - f(x,t)u,$$

（势能模型的建立需要更多的物理知识，所以我们只是把它当作一个模型假设。）于是，我们可以得到一维受迫振动方程

$$\rho(x)u_{tt} = \mu u_{xx} + f(x,t).$$

类似地，如果我们考虑一个边缘固定的振动膜，我们用 $u = u(t,x,y)$ 表示在时间 t 时距离平衡位置(x,y)的位移，而其他参数意义不变，那么振动膜满足的方程为

$$\rho u_{tt} = \mu u_{xx} + \mu u_{yy} + f.$$

4.2.3 极小曲面

考虑一个边界固定的弹性膜 $(x,y,u(x,y)),\ \ (x,y) \in V \subset \mathbb{R}^2$，当这个膜的表面积

$$\int_V \sqrt{1+u_x^2+u_y^2}\,dxdy$$

有最小值的时候，极小曲面问题需要在所有可能的膜外形中挑出膜表面积最小的。注意，这里边界固定的意思是，如果 $\Gamma = \partial V$ 表示区域 V 的边界，那么我们规定弹性膜在边界上和一个已知的函数 $f(x,y)$ 相等，即

$$u(x,y) = f(x,y), \quad x \in \Gamma.$$

这个问题对应的拉格朗日量

$$L = \sqrt{1+u_x^2+u_y^2}.$$

为了得到对应的Euler-Lagrange equation，我们计算

$$\frac{\partial L}{\partial u} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial u_x} = \frac{u_x}{\sqrt{1+u_x^2+u_y^2}}, \quad \frac{\partial L}{\partial u_y} = \frac{u_y}{\sqrt{1+u_x^2+u_y^2}}.$$

于是我们得到

$$\left(\frac{u_x}{\sqrt{1+u_x^2+u_y^2}}\right)_x + \left(\frac{u_y}{\sqrt{1+u_x^2+u_y^2}}\right)_y = 0,$$

或者化简为

$$(1+u_y^2)u_{xx} - 2u_x u_y u_{xy} + (1+u_x^2)u_{yy} = 0.$$

我们可以线性化此方程（扔掉高阶项），得到拉普拉斯方程（Laplace equation）：

$$u_{xx} + u_{yy} = 0.$$

我们注意到，拉普拉斯方程方程的解，可以看作是微小振动膜方程的平衡解。

4.3 边界条件的影响：自然边界条件

我们回顾一下，在用变分法推导 Euler-Lagrange 方程的时候，边界条件所产生的作用。例如，在最小作用量原理中，我们考虑的泛函和边界条件是，

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(t,\boldsymbol{q}(t),\dot{\boldsymbol{q}}(t))\,dt, \quad \boldsymbol{q}(t_1) = \boldsymbol{q}_1, \quad \boldsymbol{q}(t_2) = \boldsymbol{q}_2.$$

边界条件的影响主要表现在下面三个方面

- 给出了 Euler-Lagrangian 方程的边界条件。（$\boldsymbol{q}(t_1) = \boldsymbol{q}_1, \quad \boldsymbol{q}(t_2) = \boldsymbol{q}_2$）

- 给出了扰动函数 $\boldsymbol{h}(t)$ 的边界条件。（$\boldsymbol{h}(t_1)=\mathbf{0},\quad \boldsymbol{h}(t_2)=\mathbf{0}$）
- 在求变分的过程中，使分部积分中产生的边界项消失。

其中，第三条尤为关键，否则我们不能由变分推出微分方程。

我们在上面的例子中考虑的边界条件被称为 Dirichlet 边界条件（第一类边界条件）。下面我们考虑一些其他的边界条件，和它们产生的影响。

4.3.1 有一个自由边界的问题

我们考虑一个稍微修改后的最短路径问题：寻找从原点 $(0,0)$ 出发，到达竖直直线 $x=1$ 的最短路径。令 $y(x), 0\le x\le 1$ 为连接 $(0,0)$ 和 $x=1$ 的曲线，我们仍然要考虑弧长

$$J(y)=\int_0^1 \sqrt{1+(y')^2}dx$$

的极值问题。但是，根据题目我们只有在 $x=0$ 处的边值条件 $y(0)=0$，而我们在 $x=1$ 处，我们没有对 y 有具体的要求，所以这一端称为自由边界。相应的，我们得到对扰动函数的约束 $h(0)=0$，而 $h(x)$ 在 $x=1$ 处是无限制的。

在这些条件下，通过变分，我们得到

$$\int_0^1 \frac{\delta J}{\delta y}hdx=\frac{y'(1)h(1)}{\sqrt{1+(y'(1))^2}}+\int_0^1 -\left(\frac{y'}{\sqrt{1+(y')^2}}\right)'hdx.$$

为了令边界项的贡献完全消失，我们令

$$\frac{y'(1)h(1)}{\sqrt{1+(y'(1))^2}}=0.$$

由于 $h(1)$ 的任意性，我们推导出来最优解需要满足一个 **自然边界条件**：$y'(1)=0$。

总结来看，最优解满足 Euler-Lagrange 方程和边值条件

$$-\left(\frac{y'}{\sqrt{1+(y')^2}}\right)'=0,\quad y(0)=0,\quad y'(1)=0.$$

而我们可以求解得到，最优解为 $y(x)=0$。

4.3.2 有一个变化边界的问题

另一个版本的最短路径问题是，寻找从原点到曲线 $y=f(x)$ 的最短路径。对于连接路径，在 $x=0$ 处的边界条件 $y(0)=0$ 依然成立，但是另外一个端点可能是落在 $y=f(x)$ 的任意一点。我们设这个未知的端点在 $x=b$ 处，因而，这里的边界条件为

$$y(b)=f(b). \tag{4.3}$$

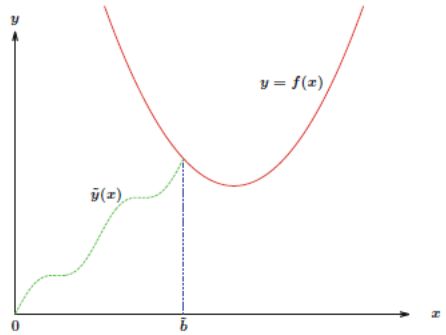


Fig. 3.3 A trial solution, $\tilde{y}(x)$ on $0\le x\le \tilde{b}$, for the "shortest path to a given *curve*" variable endpoint problem (3.26)

我们的目标泛函仍然为

$$J(y)=\int_0^b \sqrt{1+(y')^2}dx,$$

但是，现在 y 和 b 都是未知量。于是，我们需要对每一个未知量引入相应的扰动

$$\tilde{y}(x)=y(x)+\varepsilon h(x),\quad \tilde{b}=b+\varepsilon c.$$

这里，$h(x)$ 满足 $h(0)=0$，而 c 是一个待定的常数。于是，经过扰动的目标泛函是

$$J^\varepsilon=\int_0^{b+\varepsilon c} \sqrt{1+(y'+\varepsilon h')^2}dx,$$

通过计算我们得到

$$\frac{dJ^\varepsilon}{d\varepsilon}|_{\varepsilon=0}=c\sqrt{1+(y'(b))^2}+\frac{y'(b)h(b)}{\sqrt{1+(y'(b))^2}}+\int_0^b -\left(\frac{y'}{\sqrt{1+(y')^2}}\right)' h dx.$$

注意到，现在有两个边界项，其中一个是由于变动边界得来的。我们仍然希望选取最优解使得边界项消失，然后通过积分项推出 Euler-Lagrange 方程。

这时候，我们考虑对边界条件 (4.3) 的扰动

$$y(b+\varepsilon c)+\varepsilon h(b+\varepsilon c)=f(b+\varepsilon c),$$

通过 Taylor 展开，匹配 $O(1)$ 项，我们得到 $y(b)=f(b)$。再通过匹配 $O(\varepsilon)$ 项，我们得到，

$$y'(b)c+h(b)=f'(b)c,$$

于是求解得到

$$c=\frac{h(b)}{f'(b)-y'(b)}.$$

于是，代入泛函导数中，我们得到边界项化简为

$$\left(\frac{y'(b)}{\sqrt{1+(y'(b))^2}}+\frac{\sqrt{1+(y'(b))^2}}{f'(b)-y'(b)}\right)h(b).$$

由于 $h(b)$ 的任意性，我们令上式中括号内的部分为 0，并化简得到如下的自然边界条件

$$y'(b)=-\frac{1}{f'(b)}.$$

这也说明，最短路径与给定曲线 $y=f(x)$ 垂直相交。

总结来看，最优解满足 Euler-Lagrange 方程和边值条件

$$-\left(\frac{y'}{\sqrt{1+(y')^2}}\right)'=0,\quad y(0)=1,\quad y(b)=f(b),\quad y'(b)=-\frac{1}{f'(b)}.$$

看起来，二阶方程配有三个边界条件并不自然，而实际上这个问题不是超定的（overdetermined），因为 b 也是一个待求解的未知量。

4.4 带约束的优化问题简介

4.4.1 Lagrange Multiplier 和带约束的优化

现实问题中，我们常需要求满足约束条件的最优解。对于一些约束条件，我们可以之间将它代入目标函数中，而对于另外一些约束条件，我们会用到 Lagrange Multiplier。变分学中的 Lagrange Multiplier 方法可以看作是微积分中 Lagrange Multiplier 方法的拓展。它主要适用于如下几类的问题

- 等周问题（Isoperimetric problem）：给定解的积分的条件，优化目标泛函。
- 完整系统（Holonomic systems）：给定解逐点满足的条件，优化目标泛函。
- 优化控制（Optimal Control）：给定解逐点满足的微分方程，优化目标泛函。

在约束优化问题中，可行解只属于所有可能解的一个子集。 Lagrange Multiplier 方法引入了增广目标函数（augmented objective function）$\mathscr{L}$，它包含了原目标函数和约束条件，而所有的关键点依然通过如下的梯度条件给出

$$\nabla\mathscr{L}=\mathbf{0} \quad \Leftrightarrow \quad \text{all critical point solutions.}$$

我们这里只讨论等周问题和优化控制中 Lagrange Multiplier 方法的使用，感兴趣的同学可以参考教材二的3.7等章节学习其他一类问题。

4.4.2 等周问题

我们考虑如下的优化问题

$$\max_y\left(J=\int_a^b L(x,y,y')dx\right), \quad \text{subject to} \quad G\equiv\int_a^b g(x,y,y')dx=0.$$

这类问题之所以被称为等周问题，是因为它来源于古老的几何问题：在固定周长的情况下，如何使得曲线包围的面积最大。

在约束 $G\equiv 0$ 的条件下，求泛函 J 的极值，可以表示成一个如下的增广泛函的的极值问题

$$I(y,\lambda)=J-\lambda G,$$

而这里的常数 λ 即为 Lagrange Multiplier。我们也可以相应的引入增广的 Lagrangian 函数 $\mathscr{L}$，满足

$$I=\int_a^b\mathscr{L}dx, \quad \text{where} \quad \mathscr{L}(x,y,y',\lambda)=L(x,y,y')-\lambda g(x,y,y').$$

这样，我们就可以按照之前的方法，对所有的未知量引入扰动

$$\tilde{y}(x)=y(x)+\varepsilon h(x), \quad \tilde{\lambda}=\lambda+\varepsilon\gamma.$$

这里我们假设由于边界条件的选取，泛函导数中的边界项都已经消失，因为令泛函导数为0，我们得到

$$\int_a^b\left[\frac{\partial L}{\partial y}-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial L}{\partial y'}\right)-\lambda\left(\frac{\partial g}{\partial y}-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial g}{\partial y'}\right)\right)\right]hdx+\gamma\int_a^b g(x,y,y')dx=0.$$

由于 $h(x)$ 和 γ 的任意性，我们得到 Euler-Lagrange 方程和约束条件

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial y}-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial y'}\right)=0, \quad \int_a^b g(x,y,y')dx=0.$$

下面我们考虑一个具体的例子：寻找函数 $y(x)>0, 0<x<1$，满足边界条件 $y(0)=0$ 和 $y(1)=0$，其对应的弧长 $S=\int_0^1\sqrt{1+(y')^2}dx$ 为固定值，而曲线和坐标轴包围的面积 $A=\int_0^1 ydx$ 达到最大值。

这里的弧长约束为

$$G\equiv\int_0^1 gdx=0, \quad \text{where} \quad g=\sqrt{1+(y')^2}-S.$$

所以，相应的增广的目标泛函和 Lagrange 函数为

$$I=A-\lambda G=\int_0^1\mathscr{L}dx, \quad \text{where} \quad \mathscr{L}=y-\lambda g=y-\lambda\left(\sqrt{1+(y')^2}-S\right).$$

于是，我们得到 Euler-Lagrange 方程和约束条件

$$1+\lambda\left(\frac{y'}{\sqrt{1+(y')^2}}\right)'=0,\quad \int_0^1\left(\sqrt{1+(y')^2}-S\right)dx=0.$$

通过求解方程，并结合边界条件 $y(0)=0$ 和 $y(1)=0$，我们得到

$$y=\sqrt{\lambda^2-(x-\frac{1}{2})^2}-\sqrt{\lambda^2-\frac{1}{4}}.$$

此时，相应的面积和弧长为

$$A=\lambda^2\arcsin\left(\frac{1}{2\lambda}\right)-\sqrt{\lambda^2-\frac{1}{4}},\quad S=2\lambda\arcsin\left(\frac{1}{2\lambda}\right).$$

最终，为了完成求解，我们先通过弧长的式子算出 λ，就可以得出最优解 $y(x)$ 的表达式和此时的面积 A。

4.4.3 微分方程约束：优化控制

本节中，我们希望最小化如下的泛函

$$J=\int_0^T L(t,x(t),u(t))dt$$

使得 $x(t)$，$t\in[0,T]$ 满足约束微分方程（被称为状态方程）

$$\frac{dx}{dt}=f(t,x(t),u(t))$$

并且如下的初始、终止条件成立

$$x(0)=x_0\quad x(T)=x_1.$$

这里，$x(t)$ 是状态函数，x_0 和 x_1 分别是给定的初值和目标值，$u(t)$ 是控制函数，而 T 是终止时间，它在优化过程中也是一个自由度。而泛函 J 一般可以解读为成本或者花费。注意，对于一个可行的控制，当 $u(t)$ 给定时，$x(t)$ 会在有限时间内达到目标值 x_1，其对应的花费 J 也就被决定了。

这类问题常见于最优控制（optimal control）中，它的目标是寻求控制函数 $u(t)$，使得一方面使得状态函数 $x(t)$ 能够在某时刻 T 达到目标值 x_1，另一方面，这个控制函数对应的花费是所有通过控制达成目标的过程所对应的花费（即所有可行控制对应的花费）中最少的。

这类问题有很多常见的应用。比如，通过控制某些化学物质的输入，使得某个化学反应系统有持续的输出；再比如，药物的定时递送控制的设计，等等。

如上的最有控制问题需要我们决定状态函数 $x(t)$，控制函数 $u(t)$和最优的终止时间 T。为了保证状态函数时时满足约束方程，我们需要通过一个含时的 Lagrange multiplier 来建立增广目标函数，即

$$\mathscr{L}\left(x,x',u,\lambda\right)=L(t,x,u)-\lambda(t)\left(\frac{dx}{dt}-f(x,u,t)\right)$$

而其对应的增广泛函为

$$I=\int_0^T\mathscr{L}\left(x,x',u,\lambda\right)dt.$$

再次提醒读者，这里的终止时间 T 也是未知的。

我们引入对所有未知量的扰动

$$\tilde{x}=x_*+\varepsilon h(t)\quad \tilde{u}=u_*+\varepsilon v(t)\quad \tilde{\lambda}=\lambda_*+\varepsilon\gamma(t)\quad \tilde{T}=T_*+\varepsilon S$$

相应地，经过扰动的增广泛函为

$$\tilde{I} = \int_0^{T_*+\varepsilon S} \mathscr{L}\left(x_* + \varepsilon h, x_*' + \varepsilon h', u_* + \varepsilon v, \lambda_* + \varepsilon\gamma\right) dt.$$

对上述泛函求变分，得

$$\int_0^{T_*} \left[\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial x} h + \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial x'} h' + \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial u} v + \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \lambda}\gamma\right] dt + \mathscr{L}\big|_{t=T_*} S.$$

通过对 h 的部分进行分部积分（利用 $h(0)=0$），我们得到

$$= \int_0^{T_*} \left[\left\{\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial x} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial x'}\right)\right\} h + \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial u} v + \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \lambda}\gamma\right] dt + \left(\mathscr{L} S + \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial x'} h\right)\Big|_{t=T_*}.$$

这里的边界项仍需要额外处理。

经过引入扰动，状态函数在终止时间满足 $\tilde{x}(T) = x_1$, 即

$$x_*(T_* + \varepsilon S) + \varepsilon h(T_* + \varepsilon S) = x_1.$$

通过泰勒展开，和依次比较方程两端的同阶项，我们得到

$$O(1): \quad x_*(T_*) = x_1; \qquad O(\varepsilon): \quad h(T_*) = -x_*'(T_*) S.$$

将 $O(\varepsilon)$ 阶的式子代入泛函变分的边界项，我们得到

$$\left(\mathscr{L} - x' \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial x'}\right)\Big|_{t=T_*} S.$$

上式的变换（被称为 Legendre transform）使得我们可以定义新的函数（被称为 Hamiltonian）

$$\mathscr{H} \equiv \mathscr{L} - x' \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial x'} = L + \lambda f.$$

最后，再由各个独立的扰动函数的任意性，我们得到

$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial x} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial x'}\right) = 0, \quad \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial u} = 0, \quad \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \lambda} = 0, \quad \mathscr{H}(T_*) = 0.$$

下面我们具体讨论一下这四个方程。最后一个方程是在终止时间的约束。可以证明，当 $\mathscr{L}$ 不显含时间 t 时，上面的最后一个条件可以推广为当 $t \in [0, T_*]$时，$\mathscr{H}(t) = 0$ （作业）。

现在考虑第一个和第三个方程。第三个方程正好对应着状态方程

$$\frac{dx_*}{dt} = f(t, x_*, u_*).$$

而第一个方程可以看作是Lagrange multiplier所满足的方程

$$\left(\frac{\partial L}{\partial x} + \lambda_* \frac{\partial f}{\partial x}\right) + \frac{d\lambda_*}{dt} = 0,$$

这个方程被称为协态方程（co-state equation），而 $\lambda_*(t)$ 在控制论中也被称为协态(co-state)函数。

最后，第二个方程可以看作是当 $t \in [0, T_*]$时的几何约束

$$\frac{\partial L}{\partial u} + \lambda_* \frac{\partial f}{\partial u} = 0.$$

我们来考虑一个具体的例子

$$\frac{dx}{dt} = -3x + u \quad x(0) = 2.$$

我们发现，如果系统没有控制的话，即 $u \equiv 0$ 时，我们只能得到一个指数型下降的解 $x(t) = 2e^{-3t}$。如果我们定一个目标，在未来某个时间，$T > 0$，我们达到终态

$$x(T) = 5,$$

显然，这在没有控制的时候是不能成功的。如果我们在控制中，希望最小化如下行如能量的一个泛函

$$\min J = \min \frac{1}{2} \int_0^T u^2 dt.$$

那么，我们可以立即得到 Lagrange 函数 $L = \frac{1}{2}u^2$，从状态方程得到变化率函数 $f = -3x + u$，那么增广的 Lagrange 函数为

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}u^2 - \lambda\left(x' + 3x - u\right)$$

而相应的 Hamiltonian 函数为

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2}u^2 + \lambda(u - 3x).$$

于是，我们得到如下的 Euler-Lagrange 方程

$$-3\lambda + \frac{d\lambda}{dt} = 0, \quad u + \lambda = 0, \quad \frac{dx}{dt} + 3x - u = 0.$$

我们观察到，上式中正好有三个未知数和三个方程。而方程的定解条件将由边界条件给出。

解方程，我们得到

$$u(t) = Ae^{3t}, \quad x(t) = Be^{-3t} + \frac{1}{6}Ae^{3t}.$$

将 $x(t), u(t)$ 代入 Hamiltonian 函数，我们得到

$$\mathscr{H} = 3AB = 0.$$

即 A 或者 B 是 0。如果 $A = 0$，那么我们又回到了无控制的情况 $u \equiv 0$，这显然是不可行的。如果 $B = 0$，那么根据初值条件得到 $A = 12$，即有

$$u(t) = 12e^{3t}, \quad x(t) = 2e^{3t}.$$

我们也可以算出终止时间 $T_* = \frac{1}{3}\ln\left(\frac{5}{2}\right)$。

4.4.4 从最优控制到 Hamilton-Jacobi(-Bellman) 方程*

Hamilton-Jacobi-Bellman（HJB）方程是最优控制、强化学习（reinforcement learning）等领域中最核心的数学模型之一。为了推导这个模型，我们考虑一个状态函数 $y(s) : [t, T] \to \mathbb{R}^d$，它的演化满足如下的变化率模型

$$\dot{y}(s) = f(y(s), \alpha(s)), \quad s \in [t, T].$$
$$y(t) = x \in \mathbb{R}^d.$$

这里，$\alpha(s) \in \mathbb{R}$ 是控制函数，我们用 $\mathscr{A}$ 来表示所有可行控制的集合。

考虑如下的收益泛函

$$J_{x,t}(\alpha) = \int_t^T r(y(s), \alpha(s))ds + g(y(T)).$$

其中，$g(x) : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 代表了终止时刻的收益，而 $r(x, \alpha) : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ 代表了过程中的收益。注意，与上一节的假设不同，现在终止时间 T 是给定的，但是 x 和 t 是变量。

为了找到不同 x 和 t 对应的最佳收益，我们定义此控制问题的价值函数

$$u(x, t) = \sup_{\alpha(\cdot) \in \mathscr{A}} J_{x,t}(\alpha) = \max_{\alpha(\cdot) \in \mathscr{A}} \left[\int_t^T r(y(s), \alpha(s))ds + g(y(T)) \right].$$

显然，$u(x,T)=g(x)$，即我们限定了价值函数的终态条件（不同于之前的大部分问题，我们会给出状态变量的初态条件）。

为了求解终止时刻之前的价值函数 $u(x,t)$，我们需要下面的**动态规划原理（Dynamic Programming Principle，简称DPP）**：

定理. 令 $u(x,t)$ 为如上定义的价值函数，那么当 $t<\tau\le T$ 时，我们有

$$u(x,t)=\max_{\alpha(\cdot)\in\mathscr{A}}\left[\int_t^\tau r(y(s),\alpha(s))ds+u(y(\tau),\tau)\right]$$

我们略过这定理的证明（感兴趣的同学可以自行查找）。

这个定理告诉我们，如果我们已知某个 τ 时刻的价值函数，且 $\tau>t$，那么我们在决定 t 时刻的价值函数时，只需要将 $u(\cdot,\tau)$ 当作最终收益，而去求解时刻 t 到时刻 τ 的优化问题即可。从某种意义上说，如果已知 $u(x,\tau)$，我们就可以决定 $t<\tau$ 时的价值函数，而不需要这个控制问题在时间 $[\tau,T]$ 内的更多信息。

下面我们推导价值函数 $u(x,t)$ 所满足的方程。由 DPP 我们知道

$$u(x,t)=\max_{\alpha(\cdot)\in\mathscr{A}}\left[\int_t^\tau r(y(s),\alpha(s))ds+u(y(\tau),\tau)\right].$$

那么，对于 $h\in(0,T-t)$ 我们令 $\tau=t+h<T$，则有

$$u(x,t)=\max_{\alpha(\cdot)\in\mathscr{A}}\left[\int_t^{t+h} r(y(s),\alpha(s))ds+u(y(t+h),t+h)\right].$$

对于 $u(y(t+h),t+h)$，我们做泰勒展开，并利用控制方程，得

$$\begin{aligned}u(y(t+h),t+h) &= u(y(t),t)+hy'(t)\cdot\nabla u(y(t),t)+hu_t(y(t),t)+o(h)\\ &= u(y(t),t)+hf(y(t),\alpha(t))\cdot\nabla u(y(t),t)+hu_t(y(t),t)+o(h)\\ &= u(x,t)+hf(x,\alpha(t))\cdot\nabla u(x,t)+hu_t(x,t)+o(h).\end{aligned}$$

这里 ∇u 表示 u关于 y 求梯度。将这个展开代入，我们得到

$$u(x,t)=\max_{\alpha(\cdot)\in\mathscr{A}}\left[\int_t^{t+h} r(y(s),\alpha(s))ds+u(x,t)+hf(x,\alpha(t))\cdot\nabla u(x,t)+hu_t(x,t)+o(h)\right]$$

在等式两边除以 h，我们整理得

$$0=u_t(x,t)+\frac{o(h)}{h}+\max_{\alpha(\cdot)\in\mathscr{A}}\left[\frac{1}{h}\int_t^{t+h} r(y(s),\alpha(s))ds+f(x,\alpha(t))\cdot\nabla u(x,t)\right].$$

如果 $\alpha(s)$ 在 $s=t$ 处连续，我们就有

$$\lim_{h\to0}\frac{1}{h}\int_t^{t+h} r(y(s),\alpha(s))ds=r(y(t),\alpha(t))=r(x,\alpha(t)).$$

于是，令 $h\to0$，我们推导出了Hamilton-Jacobi-Bellman （HJB）方程

$$u_t(x,t)+\max_{\alpha\in A}[r(x,\alpha)+f(x,\alpha)\cdot\nabla u(x,t)]=0,\quad x\in\mathbb{R}^d,t<T.$$

此方程的解要满足终态条件 $u(x,T)=g(x)$。

对HJB方程的分析和求解也超出了本课程的范围。感兴趣的同学可以阅读如下讲义的第二章：

`https://math.stanford.edu/~ryzhik/STANFORD/MEAN-FIELD-GAMES/notes-mean-field.pdf`