arXiv:2303.00385v1 [math.OC] 1 Mar 2023

基于最优控制理论探测高维系统的最可能转变路径

Jianyu Chen[1], *__Ting Gao__[1], †__Yang Li__[2], ‡__Jinqiao Duan__[3], §

[1]数学科学中心，华中科技大学，[2]自动化学院，南京理工大学，南京 210094，中华人民共和国[3]应用数学与物理系，伊利诺伊理工学院，美国伊利诺伊州芝加哥 60616。

摘要

许多自然系统都会发生相变，即外部环境条件会促使系统转变为一种新的、有时截然不同的状态。因此，探测随机动力系统的行为（例如最可能转变路径）具有重要意义。

我们研究由布朗运动驱动的随机动力系统。基于变分原理和Onsager-Machlup作用泛函理论，将变分问题转化为确定性最优控制问题。不同于传统的变分法，最优控制理论能够较好地处理高维问题。本文描述以下三个系统：加性噪声驱动的双势阱系统、乘性噪声驱动的 Maire-Stein 系统，以及营养盐–浮游植物–浮游动物系统。

在数值计算中，我们基于庞特里亚金极大值原理，采用逐次逼近法计算最优解路径；从 Onsager-Machlup 的意义上说，该路径就是最可能转变路径。

关键词和短语：最可能转变路径、最优控制、庞特里亚金极大值原理、逐次逼近法

1 引言

最优控制理论是经典变分法理论在两个主要方向上的重要拓展：动力学情形和非光滑情形。这一理论建立在 Weierstrass 等人的重要贡献之上，并沿着两个相互关联的方向发展：庞特里亚金极大值原理和哈密顿-雅可比-贝尔曼理论。关于这一领域发展的有趣历史记述可见于著作 [19]。

动力系统中的随机波动可能导致意想不到的稀有事件。多稳态系统的转变会反映现实世界中的剧烈变化。随机微分方程广泛应用于物理学 [23], 生物学 [7], 工程学和金融学[14]等诸多领域。这类方程将环境随机波动纳入考量，因此成为模拟真实现象和预测稀有事件的重要模型。

在噪声存在的情况下，随机微分方程描述的动力学行为与确定性微分方程截然不同。 [10] 跃迁

*电子邮件：jianyuchen@hust.edu.cn
†电子邮件：tgao0716@hust.edu.cn
‡电子邮件：liyangbx5433@163.com§电子邮件：duan@iit.edu

对于确定性微分方程，向量场的平衡态之间不允许发生跃迁。然而，无论噪声有多小，随机微分方程中的向量场平衡态之间都会发生跃迁。

研究随机微分方程的文献大多致力于研究高斯动力学，即由布朗运动驱动的随机微分方程。这一研究已应用于多个领域。Biswas 等人重点通过数值方法刻画加性白噪声激发的动力系统状态空间中的吸引域体积 [3]。Wang 研究了受时滞和相关高斯有色噪声作用的元种群系统中繁荣状态与灭绝状态之间的状态转变行为，以及随机共振现象 [24]。由此可见，高斯噪声驱动的动力系统在自然界中十分常见，大量文献也表明，这项研究具有重要的实际意义。

优化问题是动力系统的一个衍生问题。求解优化问题的主要方法之一，是推导出一组任何最优解都必须满足的必要条件。最优控制问题可视为无限维空间中的优化问题，因此求解难度很大。尽管文献 [19]，提出了关于一阶和二阶优化的充分必要条件，但数值计算仍面临巨大挑战。庞特里亚金及其团队在 20 世纪 50 年代提出并推导出的极大值原理，堪称最优控制理论中的一座里程碑。该原理指出，任何最优控制及其对应的最优状态轨迹，都必须满足所谓的（扩展）哈密顿系统 [19] 。这是一个两点边值问题（也可称为前向—后向微分方程，以便与随机情形进行比较），此外还必须满足一个称为哈密顿量的函数的极大值条件。极大值原理的数学意义在于，对哈密顿量求极大值，远比求解原本的无限维控制问题容易。这使得某些类别的最优控制问题（包括线性二次型问题）能够得到闭式解。极大值原理已在多个学科中得到应用。Bartholomew-Biggs [2] 运用庞特里亚金极大值原理对航天器轨道机动进行了优化。

昂萨格-马赫卢普泛函的背景及计算最优转变路径的问题。昂萨格-马赫卢普泛函是处理转变行为的有力工具。粗略地说，昂萨格-马赫卢普泛函原理用于衡量稀有事件的最大概率，而该概率对应于连接两端的路径作用量的极小值。许多文献将这一极小值所对应的路径视为最可能转变路径。Hu 等人 [11] 已经将昂萨格-马赫卢普泛函理论应用于计算噪声诱导随机系统的最可能转变路径。

本文旨在利用庞特里亚金极大值原理计算随机系统的最可能转变路径。常用的变分法可以处理这一问题。Hu 等人 [11] 通过推导欧拉-拉格朗日方程并结合神经网络打靶法，采用变分法计算最优轨道。该方法旨在计算具有亚稳态的随机微分方程的最可能转变路径。基于变分原理的基本思路是求出系统对应的欧拉-拉格朗日方程并对其进行求解。然而，对于高维系统而言，问题会变得有些棘手。我们一直在寻找替代方法。

庞特里亚金极大值原理的背景。最优控制理论是经典变分法理论的一项重要扩展。这一理论建立在Weierstrass等人的重要贡献之上，并沿着两个相互关联的方向发展：庞特里亚金极大值原理和哈密顿-雅可比-贝尔曼理论。有关这些发展的有趣历史记载可见于 [19]。

极大值原理由苏联的庞特里亚金学派于20世纪50年代末提出。 [19] 它在1960年于莫斯科举行的首届IFAC世界大会上向更广泛的研究界介绍，并发表于那部著名的著作中。值得注意的是，本书迄今所介绍的发展历程 [19]——从欧拉-拉格朗日方程开始，继而发展到哈密顿表述，最终达到极大值原理——跨越了200多年。这一时期取得的进展相当惊人，但极大值原理的起源显然可以追溯到变分法的早期工作。

与计算最可能转变路径相关的约束极小化问题，可以自然地视为一个最优控制问题。最优控制理论领域已有大量相关方法，包括时间或空间推进法、 [5], 神经网络 [1], 随机过程、霍普夫公式 [20]等。对于由布朗运动驱动的随机系统，根据昂萨格-马赫卢普泛函，最可能转变路径正是一个一般最优控制问题的解。

介绍机器学习方法及其优势。近年来，机器学习方法对涉及计算的领域产生了巨大影响。它们可用于数值求解偏微分方程，并摆脱维数灾难。它们还可用于加快获取最优控制问题极小值点的过程。其应用包括自动驾驶 [17], 自动编码，甚至自动证明。我们将机器学习方法的优势应用于本问题，以寻找最可能转变路径。

我们的方法和结果简介。 我们将寻找最可能转变路径的问题表述为一个约束极小化问题。构造适当的损失函数后，可以自然地利用神经网络的训练过程来寻找满足约束的极小值解。

文章结构。 本文结构如下。第 2 节中，我们首先在第 2.1 小节简要介绍 Onsager-Machlup理论，以及寻找最可能转变路径时涉及的相关极小化问题。随后，我们在第 4.7 节将这类问题从变分法视角转化为最优控制视角。最后，我们在第 2.4 小节陈述庞特里亚金极大值原理的一般形式。第 3 节特别着重于构建用于数值求解我们问题的算法。第 4 节将给出数值计算结果。

2 从变分法到最优控制

从变分法的角度来看，迄今为止，我们研究的是在给定轨迹族上使代价泛函最小化的问题。而最优控制理论研究的是类似的问题，但采用了更加动态的视角。

2.1 基于变分法检测最可能转变路径的方法

欧拉和拉格朗日给出的一项经典结果 [19] 提供了最优性的必要条件，使我们能够求解此类问题。我们简要介绍昂萨格-马赫卢普定理和最可能转变路径。

我们考虑如下含乘性高斯噪声的广义随机微分方程$\mathbb{R}^d$:

$$dX(t) = \tilde{b}(X(t))dt + \sigma(X(t))dB(t), t \in [0, t_f], \tag{2.1}$$

满足初始条件 $X(0) = x_0 \in \mathbb{R}^d$，其中 $\tilde{b}: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ 是一个正则函数， $\sigma: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d\times k}$是一个 $d \times k$ 矩阵值函数，而 B 是 $\mathbb{R}^k$中的布朗运动。关于

随机微分方程 (2.1) 的适定性已得到广泛研究 [16]。我们关注两个亚稳态之间的跃迁现象（若存在，则将其视为相应确定性系统的稳定平衡态）。

为研究跃迁现象，应估计解路径在小管域上的概率。随机动力系统（2.1）的Onsager-Machlup理论给出了该概率的一个近似

$$\mathbb{P}(\{\|X-z\|_{t_f}\leqslant\delta\})\propto C(\delta,t_f)\exp\{-S(z,\dot{z})\}, \tag{2.2}$$

其中 δ 为正且足够小， $C(\delta,\ t_f)=\mathbb{P}(\{\|B\|_{t_f}\leqslant\delta\})$ 表示布朗运动在 δ-管域中的概率， $\|\cdot\|_{t_f}$ 是时间区间 $[t_0,t_f]$ 上所有连续函数所构成空间的一致范数， z 是该空间中的函数，而 Onsager-Machlup作用泛函为

$$S(z,\dot{z})=\frac{1}{2}\int_0^{t_f}[(\dot{z}-b(z))V(z)(\dot{z}-b(z))+\operatorname{div}b(z)-\frac{1}{6}R(z)]dt, \tag{2.3}$$

其中 $V(z)=(\sigma(z)\sigma^*(z))^{-1}$， $R(z)$ 是相对于由 $V(z)$ 诱导的黎曼度量的标量曲率，而 $b^i(z)=\tilde{b}^i(z)-\frac{1}{2}\sum_{l,j}(V^{-1}(z))^{lj}\Gamma^i_{lj}$ 是 i 分量，属于 b。这里， Γ^i_{lj} 是与该黎曼度量相关联的Christoffel符号，其满足

$$\Gamma^i_{lj}=\frac{1}{2}\sum_m g^{im}(\frac{\partial}{\partial x^j}g_{lm}+\frac{\partial}{\partial x^l}g_{jm}-\frac{\partial}{\partial x^m}g_{lj}), \tag{2.4}$$

其中，$(g^{ij})(z)$ 是黎曼度量 $(g_{ij})(z)=V(z)$ 的逆。散度 $\operatorname{div}b(z)$ 定义为

$$\mathtt{div}b(z)=\frac{1}{\sqrt{|V(z)|}}\sum_i\frac{\partial}{\partial z_i}\left(b^i(z)\sqrt{|V(z)|}\right), \tag{2.5}$$

其中， $|V(z)|$ 是黎曼度量的行列式。Onsager-Machlup作用泛函可视为一个拉格朗日量的积分

$$L(z,\dot{z})=\frac{1}{2}[(\dot{z}-b(z))V(z)(\dot{z}-b(z))+\operatorname{div}b(z)-\frac{1}{6}R(z)]. \tag{2.6}$$

作用泛函（2.3）的最小值意味着小管域内解路径的最大概率。通过最小化Onsager-Machlup作用泛函，我们可以研究最可能转变路径。它捕捉了其邻域内具有最大概率的样本路径。

为了获得问题（2.3）的极小值，如果采用变分原理，则两个亚稳态之间的最可能转变路径满足经典的欧拉-拉格朗日方程

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial\dot{z}}L(z,\dot{z})=\frac{\partial}{\partial z}L(z,\dot{z}) \tag{2.7}$$

初始状态为 $z(t_0)$，最终状态为 $z(t_f)$。

欧拉-拉格朗日方程的证明并非后续讨论所必需，可在变分法相关内容中找到 [9]。Chen等人 [6] 近期计算了碳循环系统的最可能转变路径。面对高维系统时，求解类似方程（2.1）的欧拉-拉格朗日方程数值解会变得棘手，尽管打靶法是求解两点

边值问题的一种高效方法。最优控制是看待变分法问题的另一种方式，因为我们从动力学的角度来看待问题。具体来说，我们可以将轨迹$x(t)$重新参数化为控制形式。

从数学上讲，拉格朗日量 L 与哈密顿量 H 通过一种称为 $Legendre\ transformation$ 的构造相互关联。由于这种变换是经典的，并且应用于许多不同领域（优化、几何、物理学），我们现在将对其进行介绍。不过，我们将看到，它并不能为后续讨论提供恰当的视角，因此这里主要是出于历史原因而将其纳入。

2.2 检测最可能转变路径的问题表述与假设

最优控制理论的研究实际上源自经典的变分法，其开端可追溯至 18 世纪欧拉和拉格朗日的开创性工作。这些工作最终形成了所谓的 $Lagrangian\ Mechanics$ ，并以极值原理的形式重新表述了 $Newtonian\ Mechanics$ 。简言之，变分法研究的是关于“曲线”的优化问题，可将其视为传统优化问题在无限维空间中的推广。

2.2.1 最优控制问题的一般形式

现在，我们将在一般情形下精确表述最优控制问题。我们讨论的是对可容许轨迹施加等式约束的情形。考虑最一般的常微分方程

$$\dot{x}(t) = f(t, x(t), \theta(t)), \quad t \in [t_0, t_f], \quad x(t_0) = x_0$$

其中， t 是自变量， $x(t) = (x_1, ..., x_d)^T \in \mathbb{R}^d$ 是（依赖于时间的）状态变量， $\theta = (\theta_1, ...\theta_m)^T \in \Theta \subset \mathbb{R}^m$ 是控制，其中 Θ 为控制集。我们假设控制集 Θ 是闭集（但不必有界）。并且假设 f 满足以下条件： $\begin{cases} f(t, x, \theta)\text{关于 } t \text{ 连续，并且对所有 } x\text{关于 } \theta \text{ 连续} \\ f(t, x, \theta) \text{ 关于 } x \text{ 连续可微，对所有 } t, \theta \end{cases}$

提出上述两个条件是为了确保方程()是适定的。[26] **备注：** 这里有两个关键点：(i) 假设 f 关于 θ 可微。(ii) $t \longmapsto \theta(t)$是正规的。或者在一般情形下，考虑 θ 为 t的本质有界函数。

代价泛函下面定义目标泛函。现在考虑如下形式的泛函

$$J[\theta] = \int_{t_0}^{t_f} L(t, x(t), \theta(t))dt + \Phi(t_f, x(t_f)) \tag{2.8}$$

这里， $L: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \times \Theta \to \mathbb{R}$ 称为运行代价，而 $\Phi: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 称为终端代价。我们将这类最优控制问题称为 $Bolza$ 最优控制问题。
注： 在 $Mayer$ 问题中，我们没有运行代价项，(t_f, x_f)是总成本达到最小值的点；如果该最小值唯一，则无需预先定义目标集。[19]

可容许目标集 我们用 S 表示可容许目标集，尤其考虑系统在两个亚稳态之间发生跃迁现象的情形。目标集$S = \{t_1\} \times \{x_1\}$ 对应于 $fixed-time$ 和 $fixed-endpoint$问题中限制最严格的情形。对此部分感兴趣的读者可参阅[19] ，了解更多类型的目标集。

现在，我们可以表述如下形式的最优控制问题：

$$\begin{cases} \inf_\theta J[\theta] = \int_{t_0}^{t_f} L(t, x(t), \theta(t))dt + \Phi\left(t_f, x\left(t_f\right)\right) \\ \text{subject to} \\ \dot{x}(t) = f(t, x(t), \theta(t)), \quad t \in [t_0, t_f], \quad x\left(t_0\right) = x_0. \end{cases} \tag{2.9}$$

这里， t_0 是初始时间， x_0 是初始状态。根据最优控制理论，我们通常将这两者视为固定值。这也是本文后续部分所要考虑的情形。下面通过一个启发性的例子来说明这种方法。

2.3 从变分法到最优控制

我们主要考虑如下关于 $\mathbb{R}^d$ 的广义随机微分方程：

$$dX(t) = \tilde{b}(X(t))dt + \sigma(X(t))dB(t), t \in [0, t_f], \tag{2.10}$$

其初始条件为 $X(0) = x_0 \in \mathbb{R}^d$，其中 $\tilde{b}: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ 是一个正则函数， $\sigma: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d\times k}$是一个 $d \times k$ 矩阵值函数，而 B 是 $\mathbb{R}^k$ 中的布朗运动。随机微分方程 (2.10) 的适定性已得到广泛研究 [16]。这里，我们关注两个亚稳态之间的跃迁现象（若存在，则将其视为相应确定性系统的稳定平衡态）。

任何有意研究跃迁现象的人，都应估计解路径在小管域内的概率。随机动力系统 (2.1) 的 Onsager-Machlup理论给出了概率 (2.2) 的近似。根据我们在第 2.1 节中的分析，从变分法的角度来看，Onsager-Machlup作用泛函可表示为方程 (2.3)。为了找出动力系统中最可能的转变路径，我们将其归结为如下无约束最小化问题：

$$S_{t_f}^{BM}(z) = \inf\left\{\frac{1}{2}\int_0^{t_f}[(\dot{z} - b(z))V(z)(\dot{z} - b(z)) + \operatorname{div} b(z) - \frac{1}{6}R(z)]dt \text{ for all } t \in [0, t_f]\right\}. \tag{2.11}$$

可以简化为 （相关参数的详细说明请参见第 2.1 节） s)

$$S_{t_f}^{BM}(z) = \inf\left\{\int_0^{t_f} L(z, \dot{z})dt \text{ for all } t \in [0, t_f]\right\}, \tag{2.12}$$

其中， $L(z, \dot{z})$ 表示拉格朗日量（2.6）。参考方程（2.13）和方程（2.1），上述问题可以重新表述为一个带有状态变量约束的确定性最优控制问题：

$$\begin{cases} \underset{\theta\in\Theta}{\text{minimize}} & \frac{1}{2}\int_0^{t_f}[\theta^2 + \operatorname{div} b(z) - \frac{1}{6}R(z)]dt + \Phi(z(t_f)), \\ \text{subject to} & \dot{z}(t) = \tilde{b}(z(t)) + \sigma(z(t))\theta(t), \\ & z(0) = x_0. \end{cases} \tag{2.13}$$

这里， $z: [0, t_f] \to \mathbb{R}^d$ 是状态， $\theta \in \Theta$ 是反馈控制。函数 $\Phi(x)$ 是终端代价，其定义为

$$\left\{\Phi(x) = \frac{(x - x_{t_f})^2}{(x - x_{t_f})^2 + 1}. \right. \tag{2.14}$$

显然，变分方法（2.11）会使我们陷入过于严格的正则性假设之中。相反，我们希望更直接地建立哈密顿量最大化性质，而不是通过导数来实现。正如我们很快将看到的，采用更丰富的扰动族对于获得更精确的最优性必要条件至关重要。

2.4 庞特里亚金极大值原理（PMP）的表述

庞特里亚金极大值原理是最优控制理论和变分法中的标志性成果。它为最优性提供了一个必要条件。我们之所以研究这一原理，是因为庞特里亚金极大值原理（PMP）以极其非平凡的方式推广了欧拉-拉格朗日方程。此外，它还在最优控制理论与深度学习之间架起了一座自然的桥梁。一个颇具代表性的研究可参见 [18]。下面我们陈述庞特里亚金极大值原理的一般形式。首先，我们需要给出一些定义。

哈密顿量

$$H : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \Theta \to \mathbb{R},$$
$$H(t, x, p, \theta) = p^\top f(t, x, \theta) - L(t, x, \theta).$$

对于控制 $\boldsymbol{\theta} = \{\theta(t) : t \in [t_0, t_f]\}$，若对所有 $t \in [t_0, t_f]$ 都有 $\theta(t) \in \Theta$，则称其为可容许控制。我们可以用哈密顿量重写代价泛函（2.8）：

$$J(\theta) = \int_{t_0}^{t_f} (\langle p(t), \dot{x}(t) \rangle - H(t, x(t), \theta(t), p(t)))dt + \Phi\left(x\left(t_f\right)\right) \tag{2.15}$$

结合方程（2.13），我们只需进行哈密顿量最大化。设 $\theta^*(.)$ 为一个最优控制；这里我们暂且认为它能达到全局最小值：对于所有分段连续控制 θ，都有 $J(\theta^*) \leq J(\theta)$。下面陈述庞特里亚金极大值原理，以便有效地处理这一问题。

庞特里亚金极大值原理

设 $\theta^*(t)$: $[t_0, t_f] \mapsto \Theta$ 是一个有界、可测且可容许的控制，它使（2.13）达到最优；$x^*(t)$: $[t_0, t_f] \mapsto \mathbb{R}^n$ 是其对应的最优状态轨迹。由方程（2.14）得到的 $\Phi(t, (t_f))$ 表示终端代价。那么，存在函数 p^*: $[t_0, t_f] \mapsto \mathbb{R}^n$ 和常数 $p_0^* \leq 0$，满足 $(p_0^*, p_t^*) \neq (0, 0)$。它们具有以下性质：1） x^* 与 p^* 的联合演化由以下哈密顿正则方程所支配。

$$\begin{cases} \dot{x}^*(t) = \nabla_p H\left(t, x^*(t), p^*(t), \theta^*(t)\right), \quad x^*\left(t_0\right) = x_0 \\ \dot{p}^*(t) = -\nabla_x H\left(t, x^*(t), p^*(t), \theta^*(t)\right), \quad p^*\left(t_f\right) = -\nabla_x \Phi\left(x^*\left(t_f\right)\right) \end{cases} \tag{2.16}$$

2) 对于每个固定的 t，哈密顿量在 $\theta = \theta^*$ 处取得全局最大值，即

$$H\left(t, x^*(t), p^*(t), \theta^*(t)\right) \geq H\left(t, x^*(t), p^*(t), \theta^(t)\right) \tag{2.17}$$

$\forall \theta \in \Theta$ 且几乎处处有 $\in [t_0, t_f]$

必须沿最优轨迹上的每一点作出最优控制决策。也就是说，我们致力于求解方程 (2.16) 和方程 (2.17) 的全局最优解。此外，我们假设控制不受实际因素的限制，否则可容许轨迹的空间将变得难以处理。庞特里亚金极大值原理由方程 (2.16)–(2.17) 构成。当然，PMP 还有许多其他形式，感兴趣的读者可参阅[19] 了解更多详情。此处不再深入探讨，因为正如前文所预示，本文余下部分将研究固定时间和固定端点情形下的控制问题。

备注：

• 方程（2.16）称为正则方程。方程(a)是 $state\ equation$，其描述了最优控制过程中状态的演化。方程(b)称为

所述 $co-state\ equation$，其中 p^* 为 $co-state$。协态方程的作用是反向传播最优性条件，并且它是变分方程的伴随方程。
• 最大化条件 2.17 是极大值原理的关键。它要求最优控制 θ^* 必须使哈密顿量达到全局最大值。

2.5 通过庞特里亚金极大值原理计算最可能转变路径

在本小节中，我们将聚焦于第 2.3 小节末尾提出的形式为 (2.13) 的问题。我们首先引入变量 $p(t)$，它表示动力系统 (2.1) 中状态 $x(t)$ 的协态。借助 (2.15)，我们将把问题 (2.6) 重新表述为:

$$\inf J(\theta) = \int_0^{t_f} (\langle p(t), \dot{x}(t) \rangle - H(t, x(t), \theta(t), p(t)))dt. \tag{2.18}$$

.
因此，目标问题现在变成了根据庞特里亚金极大值原理 2.4 求解哈密顿量最大化任务。

至此，我们已成功完成从变分法到最优控制的转换。我们不再求解复杂的欧拉-拉格朗日方程 (2.1)，而是使用庞特里亚金极大值原理求解优化问题 (2.13)。得到最优反馈控制 θ^* 后，我们便可以通过方程 (2.13) 的最后两项计算最可能转变路径。

3 庞特里亚金极大值原理的数值算法

针对随机系统的基于模型的深度学习最优控制方法在[22] 中首次提出。在此方法中，最优控制律通过神经网络进行近似。与问题 2.1 相关的重新表述的庞特里亚金极大值原理可表示为:

$$\begin{cases} \dot{x}^*(t) = f(t, x^*(t), \theta^*(t)) = \tilde{b}(x^*(t))dt + \sigma(x^*(t))\theta^*, \quad x^*(t_0) = x_0 \\ \dot{p}^*(t) = -\nabla_x H\left(t, x^*(t), p^*(t), \theta^*(t)\right), \quad p^*(t_f) = -\nabla_x \Phi\left(x^*(t_f)\right) \\ H\left(t, x^*(t), p^*(t), \theta^*(t)\right) \geq H\left(t, x^*(t), p^*(t), \theta^(t)\right) \\ \forall \theta \in \Theta \text{and a.e.t} \in [t_0, t_f] \end{cases} \tag{3.1}$$

上述系统称为（扩展）哈密顿系统。它部分刻画了问题的最优性。在满足某些凸性条件的情况下，上述形式的哈密顿系统能够完全刻画一个最优控制。下文中，若（x^*，θ^*）是一个最优对，且 p^* 是相应的伴随函数，则（x^*，p^*，θ^*）称为一个最优三元组。

3.1 庞特里亚金极大值原理（PMP）的重述

欧拉-拉格朗日方程是基本变分问题中最优性的必要条件。在该问题中，边界点固定，但曲线不受其他约束 [19]。请注意，方程 (3.1) 中的边界条件规定了区间 $[t_0, t_f]$末端处 p 的值，因此它是终端条件，而非初始条件。我们知道，最优性一阶条件 [19] 蕴含 $H_\theta\mid_* \equiv 0$。将其写成详细形式，即

$$H_\theta\left(t, x^*(t), \theta^*(t), p^*(t)\right) = 0 \quad \forall t \in [t_0, t_f]. \tag{3.2}$$

上述方程表明，哈密顿函数 $H(t,\ x^*(t)\ \theta^*(t)\ p^*(t))$ 在所有 $t \in [t_0, t_f]$处都在 $\theta^*(t)$ 处取得驻点。这就是哈密顿驻定条件。读者可参阅[19] ，了解最优性的二阶条件为 **Legendre-Clebsch条件**；如果该驻点是极值点，那么它必然是一个 $maximum$。

我们强调，PMP 只是最优性的必要条件，因此可能出现满足 PMP 的解实际上并非全局最优解的情况。尽管如此，在实践中，PMP 通常足以提供良好的候选解；在满足某些凸性假设时，PMP 就成为充分条件 [4]。

看来我们首先必须处理一个两点边值问题。PMP (2.16) 中最优性必要条件所涉及的这类两点边值问题，可以使用射击法或前向-后向扫描法进行数值求解。求解此类问题的计算算法经过数十年的研究，已有大量相关文献。MATLAB 和 Python 等多种编程语言和计算平台都提供了求解器。

备注：

• 应始终牢记，庞特里亚金极大值原理仅提供最优性的必要条件。换句话说，它帮助我们筛选出最优控制候选解，而每个候选解都需要进一步确认是否确实为最优解。

• 读者应谨记，最优控制可能并不存在。但幸运的是，大多数有趣的问题确实存在最优控制，因为庞特里亚金极大值原理所给出的条件足够强。哈密顿最大化条件 (2.17) 比典型的一阶条件 (3.2) 更强。

• H 不仅是驻点，而且在最优控制处取得全局最大值；如果 H 不具凹性，这一结论就强得多。此外，PMP 对参数空间 Θ 的假设很少；即使 f 关于 θ 非光滑，PMP 依然成立；即使 Θ 是 $\mathbb{R}^m$ 的离散子集，也依然成立。

• 当以 x 的 $0-form$ 和 θ 的 $\mathcal{L}_1\ norm$ 来度量（x, θ) 空间中的邻近程度时，极大值原理实际上是局部最优性的必要条件。尽管如此，我们强调，哈密顿最大化条件仍然是全局性的。文中陈述了最优性的充分条件及相应的证明。详情请参阅 [27,定理 2.5]。

3.2 Bac基于反向传播的逐次逼近法 s

从这一点起，我们完全在连续时间下推导并分析算法，这使我们能够以更直观的方式刻画误差估计和收敛性。Chernousko 和 Lyubushin [8] 提出了一种基于交替传播和优化步骤的迭代方法：逐次逼近法（MSA）。我们将基于该方法设计算法。连续平均算法的主要思想是在迭代过程中对一系列辅助点取平均，其中每个迭代点均通过求解辅助规划问题获得。

庞特里亚金极大值原理由两个主要部分组成：前向—后向哈密顿动力学，以及每个时刻最优参数的最大化。请注意，方程 (3.1) 的第一个方程与协态 p 无关，而第二个方程是深度学习中最耗时的步骤。与 Frank Wolf 算法相比，该方法的优点在于，在每次迭代过程中，无需通过求解线性搜索问题来确定迭代步长；迭代步长是预先确定的，因此 MSA 算法较为简单。然而，由于迭代过程中缺乏调整，该算法在大型道路网络中的收敛速度较慢。由于 θ^* 没有显式解，需要在

数值最大化算法中进行评估，因此计算负荷会增加。基于上述原因，我们提出了一种基于反向传播的逐次逼近法，其总结见算法1。

算法： 基于反向传播的扩展 MSA 1 给出 $\theta^0 \in \Theta$ 的初始猜测；
2 对于 k=0到 $iterations$，求解 $\dot{x}^*(t) = \nabla_p H(t,\ x^*(t)\ p^*(t)\ \theta^*(t))$
$x^*(t_0) = x_0$求解 $\dot{p}^*(t) = -\nabla_x H(t,\ x^*(t)\ p^*(t)\ \theta^*(t))$ $p^*(t_f) = -\nabla_x \Phi(x^*(t_f))$ 训练 $u_{optimal} = MLP(u)$；

3 当损失函数收敛时，操作停止。并且 x^* 是我们求得的最可能转变路径。

一个挑战在于，边值问题求解器对初始猜测很敏感。初始猜测 θ^0 不佳时，求解往往会发散。当前最紧迫的事情是对其发散行为进行修正。Li 等人 [18] 通过对基本 MSA 进行误差估计和收敛性分析，为解决这一问题作出了重要贡献。

4 应用 PMP 计算最可能的转变路径

4.1 双阱系统

为了引起读者的注意，我们用一个简单的一维模型验证算法。考虑如下双阱系统

$$dx = (x - x^3 -)dt + \sigma dW(t) \quad t \in [0, T] \tag{4.1}$$

其中 σ 是噪声强度， $W(t)$ 是维纳过程。根据图 1，我们考虑加性布朗噪声下两个亚稳态之间的转变。图 2 展示了数值计算的结果。从图 2(a) 可以看出，数值计算得到的转变路径与随机抽样得到的路径实际上相同。图 2(a) 很好地验证了数值计算结果，因为我们将其与经典的蒙特卡罗模拟进行了比较。

4.2 Maier-Stein 系统

到目前为止，我们似乎已经对庞特里亚金极大值原理的数值计算有了一定的直观认识。无细致平衡的过阻尼系统出现在无序材料、远离平衡态的化学反应以及理论生态学的研究中。作为过阻尼系统的典型例子，我们选取了迈尔-斯坦系统 4.2 来说明我们的结果。我们将考虑以下受乘性布朗噪声驱动的迈尔-斯坦系统。

$$\begin{aligned} dx &= (x - x^3 - \gamma x y^2)dt + \sigma_1(x, y)dW_1(t) \\ dy &= -(1 + x^2)y dt + \sigma_2(x, y)dW_2(t) \end{aligned} \tag{4.2}$$

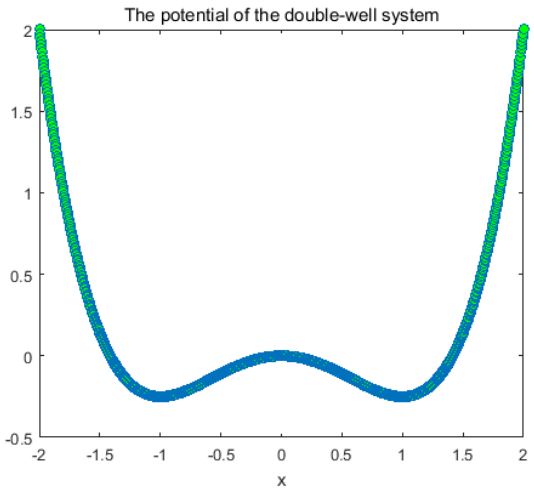


图 1：系统的势　和参数 $\sigma = 1$。有两个稳定吸引盆：$(-1,\ 0)$ 和 $(1,\ 0)$.

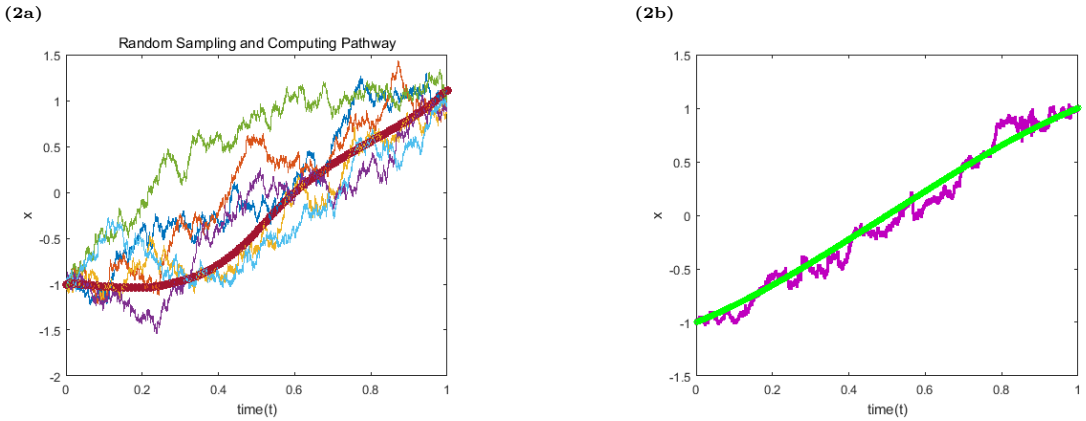


图 2：最可能转变路径及其验证。(2a)：转变路径的随机抽样结果，以及根据庞特里亚金极大值原理计算出的路径。(2b)：分别通过蒙特卡罗方法和庞特里亚金极大值原理计算出的最可能转变路径。

其中，　$W_1(t)$ 和　$W_2(t)$ 是两个独立噪声变量，此处我们不要求它们服从相同的分布。我们研究乘性布朗噪声驱动的系统在两个亚稳态之间的最可能转变路径。在我们的参数设置中，　$\sigma_1(x, y)$ $=1+\epsilon x^2$，其中 ϵ 是一个常数，且 $\sigma_2(x, y) = 1$，由此可得到一个对角扩散矩阵。根据庞特里亚金极大值原理 3.1，我们得出如下结论。与迈尔-斯坦系统相关的庞特里亚金极大值原理为

$$
\begin{aligned}
\dot{x}^*(t) &= x^* - (x^*)^3 - \gamma x^*(y^*)^2 + (1+\epsilon(x^*)^2)\theta_1^* \\
\dot{y}^*(t) &= -(1+(x^*)^2)y^* + \theta_2^* \\
\dot{p_1}^*(t) &= p_1^*(3(x^*)^2 + \gamma(y^*)^2 - 2\epsilon x^*\theta_1^* - 1) + 2p_2 x^* y^* + \frac{\partial L}{\partial x} \\
\dot{p_2}^*(t) &= 2p_1^*\gamma x^* y^* + p_2^*(1+(x^*)^2) - 2\gamma y^* \\
\theta^* &= argmax H\left(t, x^*(t), p^*(t), \theta^*(t)\right)
\end{aligned}
\tag{4.3}
$$

求解方程 (4.3) 后，图 3 直观地展示了基于昂萨格-马赫卢普泛函的最可能转变路径，这与此前通过

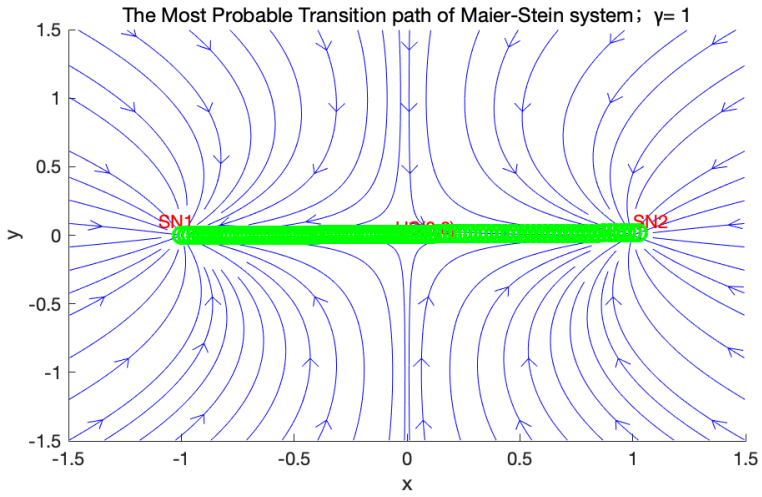


图3：Maire-Stein 系统的最可能转变路径。红点表示平衡点，而绿色管线表示最可能转变路径。

[12] 的打靶法得到的结果一致。事实上，我们还可以基于不同的 γ 得到更多结果，从而避免势函数存在所带来的影响。

4.3 营养盐–浮游植物–浮游动物系统

水生环境（如湖泊、河流、海洋）中有大量浮游生物。浮游生物分为两类：浮游植物（即植物性浮游生物），它们通过光合作用获取能量，并需要必需元素（营养物，如氮）；以及浮游动物（即动物性浮游生物），它们以浮游植物为食。许多浮游植物种群的一个显著特征是会迅速形成大规模水华 [21]。浮游植物水华发生时，浮游植物的数量会在短时间内急剧增加又减少，随后恢复到原来的较低水平。

由于浮游植物在地球生态系统中发挥着重要作用，因此探究浮游植物水华的形成机制十分重要。浮游生物会影响海洋—大气动力学、气候变化等全球大尺度过程。我们引入以下模型来描述这种演化关系。

4.3.1 模型介绍与稳定性

本节将应用庞特里亚金极大值原理方法，计算三维动力系统的最可能转变路径。为简便起见，与论文 [13] 中一样，省略浮游植物和浮游动物向营养物的循环再生过程。令 N 表示可供吸收的营养物浓度，以海洋单位表面积质量计； P 表示浮游植物浓度， Z 表示浮游动物浓度。那么，描述营养盐-浮游植物-浮游动物动力学的模型如下：

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = D\left(N_0 - N\right) - f(N)P, \\ \frac{dP}{dt} = \alpha f(N)P - d_1 P - g(P)Z - w_1 P, \\ \frac{dZ}{dt} = \beta g(P)Z - d_2 Z - w_2 Z, \end{cases} \tag{4.4}$$

其中

$$f(N)=\begin{cases}\frac{b}{a}N, & 0\leqslant N\leqslant a,\\ b, & N>a,\end{cases}$$

$$g(P)=\frac{cP}{1+dP}.$$

且所有参数均为正。在方程（4.4）中， N_0 是营养物的恒定输入速率， D、w_1 和 w_1 分别是营养物、浮游植物和浮游动物的冲刷率， d_1 和d_2 分别是浮游植物和浮游动物的死亡率， a 和 b 分别是营养物向浮游植物以及浮游植物向浮游动物的转化率。令 $d_1+w_1=D_1$、 $d_2+w_2=D_2$。则系统（4.4）变为

$$\begin{cases}\frac{dN}{dt}=D\left(N_0-N\right)-f(N)P,\\ \frac{dP}{dt}=\alpha f(N)P-g(P)Z-D_1P\\ \frac{dZ}{dt}=\beta g(P)Z-D_2Z.\end{cases}\tag{4.5}$$

该参数的含义如上所述。

根据 [25], ，我们将参数值设为相同，从而使系统呈现如图4所示的双稳态现象。为进一步展示参数 N_0与系统动力学行为之间的关系，我们保持其他所有参数不变，如图所示。然而，Tianran Zhang 并未考虑水生环境中的随机波动。自然界中存在许多外部扰动，例如气候变化和人类活动。为了探究噪声扰动对营养物–浮游植物–Nooplan系统动力学行为的影响，我们纯粹从数学模型的角度考虑一种高斯噪声。我们将考虑一般的随机波动，而非无穷小的随机扰动。为此，原始系统（4.5）转变为如下随机营养物–浮游植物–Nooplan模型

$$\begin{cases}\frac{dN}{dt}=D\left(N_0-N\right)-f(N)P+\sigma_1dW_t^1,\\ \frac{dP}{dt}=\alpha f(N)P-g(P)Z-D_1P+\sigma_2dW_t^2\\ \frac{dZ}{dt}=\beta g(P)Z-D_2Z+\sigma_3dW_t^3.\end{cases}\tag{4.6}$$

其中 σ_i 是表示噪声强度的非负常数， W_t^i 是布朗运动。

4.3.2 N-P-Z系统的庞特里亚金极大值原理

为了更好地说明 我们的方法，我们首先将系统（4.6）重新整理为如下问题

$$\begin{cases}\inf_\theta J[\theta]=\int_{t_0}^{t_f}L(t,x(t),\theta(t))dt+\Phi\left(t_f,x\left(t_f\right)\right)\\ \text{subject to}\\ \dot{x}(t)=f(t,x(t),\theta(t)),\quad t\in\left[t_0,t_f\right],\quad x\left(t_0\right)=x_0.\end{cases}\tag{4.7}$$

其中 $L(t,\ x(t)\ \theta(t))$ 表示系统（4.6）的拉格朗日量。根据加性布朗噪声，我们采用 Onsager-Machlup 泛函理论，并且

$$OM(X,\dot{X})=\frac{1}{2}\int_0^{t_f}[(\frac{\dot{X}-F}{\Sigma})^2+\operatorname{div}F(X)]dt,\tag{4.8}$$

其中 $X=(N,\ P,\ Z)^T$, $\Sigma=(\sigma_1,\ \sigma_2,\ \sigma_3)^T$，关键变换是 $^{\dot{X}-F}_{\Sigma})^2=W_t^2$, $\underline{W_t}=(W_1,\ W_2,\ W_3)$ [2]。现在，我们准备好如下给出与问题（4.6）相关的庞特里亚金极大值原理

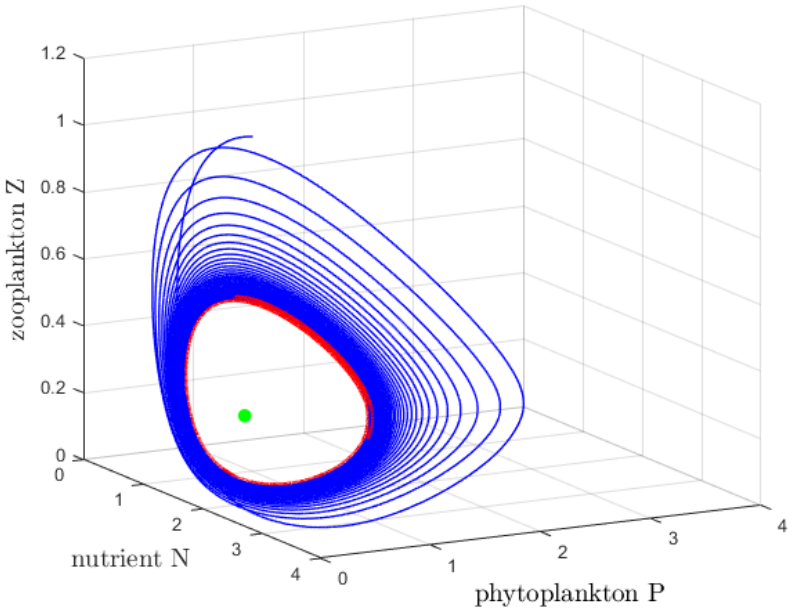


图 4：双稳态现象：(1) 一个稳定平衡点（中心的绿色点）和一个稳定极限环（红色曲线）。(2) 蓝色圆形曲线是该系统的渐近解。(3) 参数设置如下： $D = 0.1$, $a = 1$,$b = 1$ $\alpha = 1$ $c = 5$, , , $D_1 = 0.2$, $\beta = 0.5$, $d = 0.1$, $D_2 = 2.1$, $N_0 = 9.96$。

(i) $0 \leqslant x \leqslant a$

$$\begin{aligned}
\dot{x}^*(t) &= D\left(N_0 - x^*\right) - \frac{b}{a}x^*y^* + \sigma_1\theta_1^* \\
\dot{y}^*(t) &= \alpha\frac{b}{a}x^*y^* - \frac{cy^*}{1+dy^*}z^* - D_1y^* + \sigma_2\theta_2^* \\
\dot{z}^*(t) &= \beta\frac{cy^*}{1+dy^*}z^* - D_2z^* + \sigma_3\theta_3^*
\end{aligned} \tag{4.9}$$

$$\begin{aligned}
\dot{p_1}^*(t) &= p_1^*(D + \frac{b}{a}y^*) + p_2^*\alpha\frac{b}{a}y^* + \frac{\alpha b}{2a} \\
\dot{p_2}^*(t) &= p_1^*\frac{b}{a}x^* + p_2^*(D_1 + z^*\frac{c}{(1+dy^*)^2} - \alpha\frac{b}{a}x^*) \\
&\quad - p_3^*\beta z^*\frac{c}{(1+dy^*)^2} + \frac{1}{2}(\beta\frac{c}{(1+dy^*)^2} - \frac{b}{a} + \frac{2z^*cd(1+dy^*)}{(1+dy^*)^4}) \\
\dot{p_3}^*(t) &= p_2^*\frac{cy^*}{1+dy^*} - p_3^*(\beta\frac{cy^*}{1+dy^*} - D_2) - \frac{c}{2(1+dy^*)^2}
\end{aligned} \tag{4.10}$$

(ii) $x > a$

$$\begin{aligned}
\dot{x}^*(t) &= D\left(N_0 - x^*\right) - by^* + +\sigma_1\theta_1^* \\
\dot{y}^*(t) &= \alpha by^* - \frac{cy^*}{1+dy^*}z^* - D_1y^* + \sigma_2\theta_2^* \\
\dot{z}^*(t) &= \beta\frac{cy^*}{1+dy^*}z^* - D_2z^* + \sigma_3\theta_3^*.
\end{aligned} \tag{4.11}$$

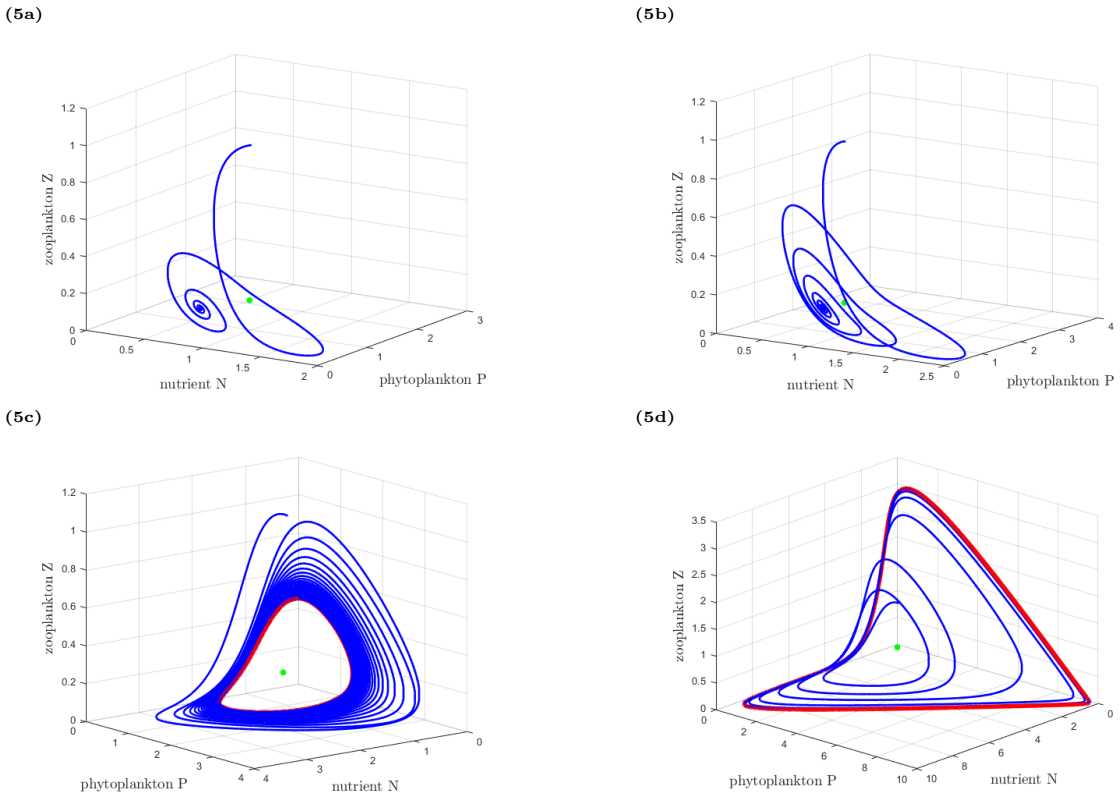


图5：不同参数值 N_0 下的动力学图。(6a) $N_0 = 6.0$；(6b) $N_0 = 8.0$；(6c) $N_0 = 10.0$；(6d) $N_0 = 15.0$。绿色点表示共存平衡态，蓝线表示解路径，红色圆圈表示稳定极限环。

$$
\begin{aligned}
\dot{p_1}^*(t) &= p_1^* D \\
\dot{p_2}^*(t) &= p_1^* b + p_2^*(D_1 + z^* \frac{c}{(1+dy^*)^2} - \alpha b) \\
&\quad - p_3^* \beta z^* \frac{c}{(1+dy^*)^2} + \frac{1}{2}(\beta \frac{c}{(1+dy^*)^2} + \frac{2z^* cd(1+dy^*)}{(1+dy^*)^4}) \\
\dot{p_3}^*(t) &= p_2^* \frac{cy^*}{1+dy*} + p_3^*(D_2 - \beta \frac{cy^*}{1+dy^*}) - \frac{c}{2(1+dy^*)^2}
\end{aligned}
\tag{4.12}
$$

更多详情请参阅附录。

4.3.3 数值结果与分析

根据第3.2节，我们使用 Python 在昂萨格-马赫卢普泛函意义下计算系统的最可能转变路径。

图6(a)描绘了从平衡点到最大 P 值的转变过程，其中 P表示系统中的浮游植物浓度。图6(b - d)展示了最大 N 值的结果，即最大营养物含量状态。我们从三个不同角度展示了最可能转变路径。在固定时间 $T = 1$的情况下，我们可以了解外部随机噪声对系统中各变量浓度的影响。本文中，绿色转变路径并非一条真实路径，而是表示最可能管道。从昂萨格-马赫卢普泛函的推导中不难发现，绿色路径实际上是一个具有

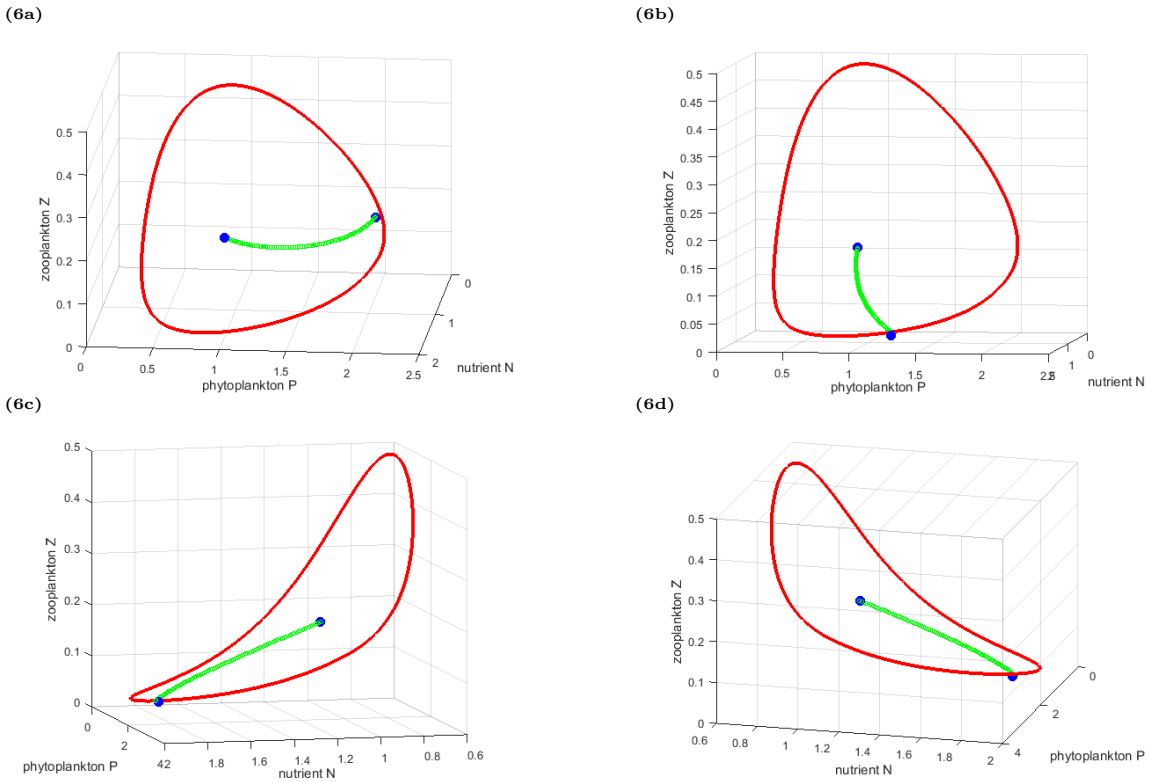


图6：Onsager-Machlup 意义下的最可能转变路径。 $T = 1$。蓝色点表示共存平衡态，绿色曲线表示最可能转变路径，红色圆圈表示稳定极限环。

最高概率的管道；在给定固定的 ϵ时，其中包含数量最多的样本转变路径。

备注： (a) 这里我们仅提供了有限的结果。事实上，我们还可以求解许多其他情形，甚至将三维情形扩展到更高维，这些内容将在我未来的工作中探讨。(b) 我们还可以研究最优转变时间 T，这有助于预防水生河流系统中的藻华。(c) 我们的计算结果只能从数学模型的角度加以解释，对于自然界中的真实水生河流系统可能不具有指导意义，因为我们没有收集真实的实验数据。(d) 这里需要回顾可达集的定义（2.2.1）。允许误差范围内的转变均可接受；由于转变时间固定，存在许多不可达路径。

5 结论与讨论

事实上，最优控制得到了广泛应用，并具有成熟的理论基础。本文主要研究一类固定时间固定端点问题。此外，还存在其他类型的最优控制问题。事实上，最优控制理论是对变分法的有效推广。在前期工作中，我们从泛函分析的角度出发，结合OM泛函原理，通过求解欧拉-拉格朗日方程研究了动力系统的最可能转变路径。然而，在更高维度下，这种方法较为棘手。面对噪声扰动的多样性和复杂性，最优控制理论展现出很强的适应性。考虑到最优控制理论在动力系统中的应用，我们可以进一步求解更具实际意义的问题，例如船舶海洋系统中的追逃问题、

误命中问题　　导弹飞行编队问题，以及行星系统中的天体活动问题。

本文建立的极大值原理并非最一般的情形。我们还可以考虑初始状态 x_0 不是固定的情况。我们可以对 x_0 和x_f 施加独立约束，或者更一般地，要求它们属于 $\mathbb{R}^{2n}$中的某个曲面 $\mathcal{S}_2$ 。或许我们可以将极大值原理应用于流形。

致谢

作者在访问中国武汉华中科技大学数学科学中心期间完成了部分工作。本研究部分获得国家自然科学基金项目（11771449）的资助。

数据可用性

支持本研究发现的数据可在 GitHub 上公开获取。
https://github.com/Cecilia-ChenJY/PMP-for-Optimal-Control

参考文献

[1] M. Abu-Khalaf 和 F. L. Lewis. 使用神经网络HJB方法，为具有饱和执行器的非线性系统设计近似最优控制律。*Automatica*，41(5):779–791，2005。[2] M. C. Bartholomew-Biggs. 航天器轨道机动的优化。II：使用庞特里亚金极大值原理。动力系统数值优化，1979。[3] S. Biswas、A. Rounak、P. Perlikowski 和 S. Gupta. 表征含加性噪声的动力系统中的随机不动点和极限环。非线性科学与数值模拟通讯，101(4):105870，2021。[4] A. G. Butkovsky. 采样数据控制系统的最优性必要且充分条件。*Avtomat. i Telemekh., 1963*，第1056I–1064页，1963。[5] S. C. Chang、X. Y. Wang 和 C. Y. Chow. 时空守恒元与解元方法：在一维和二维时间推进流动问题中的应用。*aiaa journal*，1995。[6] J. Chen、J. Hu、W. Wei 和 J. Duan. 一种数据驱动方法，用于发现随机碳循环系统最可能的转变路径。*Chaos: An InterdisciplinaryJournal of Nonlinear Science*，32(11):113140，2022。[7] M. Chung 和 E. Haber. 生物系统的实验设计。*Siam Journal on ControlI& Optimization*，50(1):471–489，2012。[8] F., L., Chernousko, A., A., 和 Lyubushin. 求解最优控制问题的逐次逼近法。*Optimal Control Applications I& Methods*，1982。[9] I. M. Gelfand、R. A. Silverman 等。变分法。Courier Corporation，2000。

[10] S. Herr、M. Rckner、M. Spitz 和 D. Zhang。三维随机 Zakharov 系统。*arXiv* 电子预印本，2023。

[11] J. Hu 和 J. Chen。一类具有 Lévy 噪声的高维随机动力系统的转变路径。*Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*，31(6):063138，2021。[12] J. Hu 和 J. Chen。一类具有 Lévy 噪声的高维随机动力系统的转变路径，2021。[13] A. L. Huppert。浮游植物水华模型。*The American Naturalist: Devoted to the Conceptual Unification of the Biological Sciences*，159(2)，2002。[14] B. P. Ingalls。生物学、通信、计算与金融中的数学系统理论。生物学、通信、计算与金融中的数学系统理论，2003。[15] J. Jost 和 J. Jost。黎曼几何与几何分析。施普林格，2008。[16] I. Karatzas 和 S. Shreve。布朗运动与随机微积分。Springer Science & Business Media，2012。[17] F. Lethaus。利用机器学习技术，基于眼动追踪预测驾驶操作。发表于第*52*届实验心理学家会议，2010。[18] Q. Li、L. Chen、C. Tai 和 Weinan E. 基于极大值原理的深度学习算法。*Journal of Machine Learning Research*，18，2017。[19] Liberzon 和 Daniel。变分法与最优控制理论。变分法与最优控制理论，2013。[20] L. V. Ma、F. Velasco 和 I. Herrero。具有 Hopf 分岔的最优控制问题：在加的斯湾条纹蛤渔业中的应用。*Fisheries Research*，2004。[21] B. Mukhopadhyay 和 R. Bhattacharyya。具有空间异质性的营养盐－浮游生物模型中的浮游植物化感作用建模。*Ecological Modelling*，198(1-2):163–173，2006。[22] J. Schmidhuber。神经网络中的深度学习。*Neural Netw*，2015。[23]R. Temam。力学与物理学中的无限维动力系统。力学与物理学中的无限维动力系统，1997。[24] S. H. Wang。时滞和交叉相关高斯有色噪声对异质种群系统动力学特征及随机共振的影响。*Fluctuation and Noise Letters: FNL: An Interdisciplinary Scientific Journal on Random Processes in Physical, Biological and Technological Systems*，20(3)，2021。[25] Z. W. Wang。营养盐－浮游植物－浮游动物模型的 Hopf 分岔与双稳态。*Applied Mathematical Modelling*，2012。[26] L. Weiss。控制过程数学理论导论，第 I 卷——线性方程与二次准则。*IEEE Transactions on Automatic Control*，15(3):406–407，2003。[27]J. Yong 和 Y. Z. Xun。随机控制：哈密顿系统与 *HJB*方程。随机控制：哈密顿系统与 HJB方程，1999。

附录　　x 庞特里亚金极大值原理的计算

A.1 乘性噪声驱动的随机 Maire-Stein 系统的庞特里亚金极大值原理

对于随机 Maire-Stein 系统（4.2），我们将详细推导庞特里亚金极大值原理。记扩散矩阵 $\sigma(x,\ y) = \begin{bmatrix} \sigma_1(x\ y & 0\ ,\ ) \\ 0 & \sigma_2\ x \end{bmatrix}(,\ y)$ 以及向量场 $\tilde{b} = (\tilde{b}^1,\ \tilde{b}^2)$，其中

$$\tilde{b}^1(x,y) = x - x^3 - \gamma x y^2,$$
$$\tilde{b}^2(x,y) = -(1+x^2)y.$$

因此，黎曼度量为 $V(x,\ y) = (g_{ij})_{2\times 2}(x,\ y) = \begin{bmatrix} (1+\epsilon x^2)^{\ 2} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$，其逆矩阵为 $(g^{ij})_{2\times 2}(z) = \begin{bmatrix} (1+\epsilon x^2)^{\ 2} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$。$V$的行列式为 $|V(x,\ y)| = {}^{1}\ {}^{(1+\epsilon x^2)\ 2}$。

计算 Christoffel符号

$$\begin{aligned}
\Gamma^1_{11} &= \frac{1}{2}g^{11}\left(\frac{\partial}{\partial x}g_{11} + \frac{\partial}{\partial x}g_{11} - \frac{\partial}{\partial x}g_{11}\right) + \frac{1}{2}g^{12}\left(\frac{\partial}{\partial x}g_{12} + \frac{\partial}{\partial x}g_{21} - \frac{\partial}{\partial x}g_{11}\right) \\
&= \frac{1}{2}(1+\epsilon x^2)^2\left(\frac{-4\epsilon x}{(1+\epsilon x^2)^3}\right) + 0 \\
&= -\frac{2\epsilon x}{1+\epsilon x^2} \\
\Gamma^1_{12} &= \frac{1}{2}g^{11}\left(\frac{\partial}{\partial x}g_{21} + \frac{\partial}{\partial y}g_{11} - \frac{\partial}{\partial x}g_{12}\right) + \frac{1}{2}g^{12}\left(\frac{\partial}{\partial x}g_{22} + \frac{\partial}{\partial y}g_{21} - \frac{\partial}{\partial y}g_{12}\right) \\
&= 0 = \Gamma^1_{21}, \\
\Gamma^1_{22} &= \frac{1}{2}g^{11}\left(\frac{\partial}{\partial y}g_{21} + \frac{\partial}{\partial y}g_{12} - \frac{\partial}{\partial x}g_{22}\right) + \frac{1}{2}g^{12}\left(\frac{\partial}{\partial y}g_{22} + \frac{\partial}{\partial y}g_{22} - \frac{\partial}{\partial y}g_{22}\right) \\
&= 0, \\
\Gamma^2_{11} &= \frac{1}{2}g^{21}\left(\frac{\partial}{\partial x}g_{11} + \frac{\partial}{\partial x}g_{11} - \frac{\partial}{\partial x}g_{11}\right) + \frac{1}{2}g^{22}\left(\frac{\partial}{\partial x}g_{12} + \frac{\partial}{\partial x}g_{21} - \frac{\partial}{\partial y}g_{11}\right) \\
&= -\frac{1}{2}\varepsilon^2\mu^2 \cdot \partial y\left(\frac{1}{\varepsilon^2\mu^2 \cdot f^2(x)}\right) \\
&= 0, \\
\Gamma^2_{12} &= \frac{1}{2}g^{21}\left(\frac{\partial}{\partial x}g_{21} + \frac{\partial}{\partial y}g_{11} - \frac{\partial}{\partial x}g_{12}\right) + \frac{1}{2}g^{22}\left(\frac{\partial}{\partial x}g_{22} + \frac{\partial}{\partial y}g_{21} - \frac{\partial}{\partial y}g_{12}\right) \\
&= 0 = \Gamma^2_{21}, \\
\Gamma^2_{22} &= \frac{1}{2}g^{21}\left(\frac{\partial}{\partial x}g_{21} + \frac{\partial}{\partial y}g_{11} - \frac{\partial}{\partial x}g_{12}\right) + \frac{1}{2}g^{22}\left(\frac{\partial}{\partial y}g_{22} + \frac{\partial}{\partial y}g_{22} - \frac{\partial}{\partial y}g_{22}\right) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

计算散度修正向量场为

$$b^1 = \tilde{b}^1 - \frac{1}{2}\sum_{lj}(V^{-1}(z))^{lj}\Gamma^1_{lj} = \tilde{b}^1 - \frac{1}{2}(1+\epsilon x^2)^2\frac{-2\epsilon x}{1+\epsilon x^2} = \tilde{b}^1 + \epsilon x(1+\epsilon x^2)$$

$$
\begin{aligned}
&= x - x^3 - \gamma x y^2 + \epsilon x(1+\epsilon x^2),\\
b^2 &= \tilde{b}^2 - \frac{1}{2}\sum_{lj}(V^{-1}(z))^{lj}\Gamma^2_{lj} = \tilde{b}^2\\
&= -(1+x^2)y.
\end{aligned}
$$

因此，修正向量场的散度为

$$
\begin{aligned}
\mathtt{div} b(x,y) &= (1+\epsilon x^2)(\frac{\partial}{\partial x}(b^1\frac{1}{1+\epsilon x^2}) + \frac{\partial}{\partial y}(b^2\frac{1}{1+\epsilon x^2}))\\
&= -4x^2 - \gamma y^2 + \epsilon + 3\epsilon^2 x^2\\
&\quad + \frac{-2\epsilon x(x - x^3 - \gamma x y^2 + \epsilon x + \epsilon^2 x^3)}{1+\epsilon x^2}.
\end{aligned}
$$

计算标量曲率在以下计算中，我们采用爱因斯坦求和记号。标量曲率定义为里奇曲率张量相对于黎曼度量的迹

$$
R = g^{ij}R_{ij},
$$

其中 R_{ij} 是 里奇曲率张量。由 [15,式 4.1.32、式 4.3.6、式 4.3.18]，可得

$$
\begin{aligned}
R &= g^{ik}R_{ik} = g^{ik}(g^{jl}R_{ijkl}) = g^{ik}(g^{jl}(g_{im}R^m_{jkl}))\\
&= g^{ik}(g^{jl}(g_{im}(\frac{\partial}{\partial x^k}\Gamma^m_{lj} - \frac{\partial}{\partial x^l}\Gamma^m_{kj} + \Gamma^m_{ka}\Gamma^a_{lj} - \Gamma^m_{la}\Gamma^a_{kj}))).
\end{aligned}
$$

由于 $g^{jl}g_{im} = \delta_{i=j,\ l=m}$，可得

$$
R = g^{ik}R^m_{ikm} = g^{ik}(\frac{\partial}{\partial x^k}\Gamma^m_{im} - \frac{\partial}{\partial x^m}\Gamma^m_{ki} + \Gamma^m_{ka}\Gamma^a_{mi} - \Gamma^m_{ma}\Gamma^a_{ki}).
$$

由于 $\Gamma^1_{11} = -\frac{2\epsilon x}{1+\epsilon x^2}$、$\Gamma^i_{jk} = 0$（其他）、 $g^{11} = (1+\epsilon x^2)^2$、 $g^{22} = 1$和 $g^{12} = g^{21} = 0$，可得

$$
\begin{aligned}
R =& g^{11}(\frac{\partial}{\partial x}\Gamma^m_{1m} - \frac{\partial}{\partial x^m}\Gamma^m_{11} + \Gamma^m_{1a}\Gamma^a_{m1} - \Gamma^m_{ma}\Gamma^a_{11})\\
&+ g^{22}(\frac{\partial}{\partial y}\Gamma^m_{2m} - \frac{\partial}{\partial x^m}\Gamma^m_{22} + \Gamma^m_{2a}\Gamma^a_{m2} - \Gamma^m_{ma}\Gamma^a_{22})\\
=& g^{11}(\frac{\partial}{\partial x}\Gamma^1_{11} - \frac{\partial}{\partial x}\Gamma^1_{11} + \Gamma^1_{11}\Gamma^1_{11} - \Gamma^1_{11}\Gamma^1_{11})\\
=& 0.
\end{aligned}
$$

计算拉格朗日量 根据前面的计算，随机 Maire-Stein 系统的 (2.11) 问题的拉格朗日量可简化为

$$
\begin{aligned}
L(z,\dot{z}) =& (\dot{z} - b(z))V(z)(\dot{z} - b(z)) + \mathtt{div} b(z) - \frac{1}{6}R(z)\\
=& \Theta^2 + \mathtt{div} b(z) - \frac{1}{6}R(z)\\
=& \theta_1^2 + \theta_2^2 + \mathtt{div} b(x,y) + \epsilon^2 x^2 - 2\epsilon x\theta_1.
\end{aligned}
$$

其中 $z=(x,\ y)$，$\mathrm{div}b(x,\ y)$ 的计算方法如上。进一步可得哈密顿量的表达式为

$$H=p_1(x-x^3-\gamma xy^2+(1+\epsilon x^2)\theta_1)+p_2(-(1+x^2)y+\theta_2)-L.$$

求解庞特里亚金极大值原理

1.

$$\begin{aligned}\dot{x}^*(t)&=x^*-(x^*)^3-\gamma x^*(y^*)^2+(1+\epsilon(x^*)^2)\theta_1^*\\ \dot{y}^*(t)&=-(1+(x^*)^2)y^*+\theta_2^*\end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned}\dot{p_1}^*(t)&=p_1^*(3(x^*)^2+\gamma(y^*)^2-2\epsilon x^*\theta_1^*-1)+2p_2x^*y^*+\frac{\partial L}{\partial x}\\ \dot{p_2}^*(t)&=2p_1^*\gamma x^*y^*+p_2^*(1+(x^*)^2)-2\gamma y^*\end{aligned}$$

A.1 加性噪声驱动下 NPZ系统的庞特里亚金极大值原理

首先，我们将随机三维模型（4.5）统一写为

$$\begin{aligned}&\dot{X}=Fdt+\Sigma dW_t,\\ &X=(x,y,z)^T,F=(f_1,f_2,f_3)^T,W_t=(w_1,w_2,w_3)^T,\Sigma=(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)^T.\end{aligned}$$

根据昂萨格-马赫卢普泛函定理，可得加性噪声驱动下系统（4.5）的拉格朗日量为

$$\begin{aligned}L(X,\dot{X})&=\frac{1}{2}((\frac{\dot{X}-F}{\Sigma})^2+\mathtt{div}F(X)).\\ \mathtt{div}F(X)&=\frac{\partial f_1}{\partial x}+\frac{\partial f_2}{\partial y}+\frac{\partial f_3}{\partial z}\\ &=-D-\frac{b}{a}y+\alpha\frac{b}{a}x-D_1-z\frac{c}{(1+dy)^2}+\beta\frac{cy}{1+dy}-D_2\end{aligned}$$

对于 (i) $0\leqslant x\leqslant a$。

$$\begin{aligned}\mathtt{div}F(X)&=\frac{\partial f_1}{\partial x}+\frac{\partial f_2}{\partial y}+\frac{\partial f_3}{\partial z}\\ &=-D+\alpha b-D_1-z\frac{c}{(1+dy)^2}+\beta\frac{cy}{1+dy}-D_2\end{aligned}$$

对于 (ii) $x>a$。

哈密顿量为 $H=P^T\dot{X}-L(X,\dot{X})$，其中 $P=(p_1,p_2,p_3)^T$。由此得到庞特里亚金极大值原理。