arXiv:2304.00595v1 [math.OC] 2 Apr 2023

欧拉方程上的最优质量输运

Charlie Yan、Iman Nodozi、Abhishek Halder

摘要——我们研究受欧拉方程所描述的角速度动力学约束的联合状态概率分布的有限时域最优引导。该问题及其解归结为通过反馈控制刚体的自旋，在实际应用中具有重要意义，例如，在初始状态和终端状态均为随机的情况下实现航天器的角稳定。我们阐明了这一问题如何构成具有双线性先验漂移的最优质量输运（OMT）问题的一个实例。我们推导了欧拉型最优质量输运的静态和动态版本，并给出了最优控制器综合设计的解析结果和数值结果。

I. 引言

旋转刚体（例如航天器）的受控角速度动力学由著名的欧拉方程给出：

$$\boldsymbol{J}\dot{\boldsymbol{\omega}} = -[\boldsymbol{\omega}]^{\times}\boldsymbol{J}\boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\tau}, \tag{1}$$

其中，正对角矩阵 $\boldsymbol{J} := \mathrm{diag}(J_1, J_2, J_3)$由主转动惯量构成，向量$\boldsymbol{\omega} := (\omega_1, \omega_2, \omega_3)^{\top} \in \mathbb{R}^3$ 表示刚体沿其主轴方向的角速度（单位：rad/s），向量 $\boldsymbol{\tau} :=(\tau_1, \tau_2, \tau_3)^{\top} \in \mathbb{R}^3$ 表示施加于主轴周围的力矩输入，且

$$[\boldsymbol{\omega}]^{\times} := \begin{pmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix} \in \mathfrak{so}(3).$$

通常， $\mathfrak{so}(3)$ 表示三维旋转群 SO(3) 的李代数。受在给定时间范围内引导角速度的概率不确定性这一问题的启发，我们考虑欧拉方程上的最优质量输运（OMT）[1]–[3] 的确定性和随机变体，并将其称为 OMT-EE。

具体而言，令 $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^3)$ 表示支撑在 $\mathbb{R}^3$ 上且具有有限二阶矩的概率测度流形。给定两个概率测度 μ_0, $\mu_T \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^3)$，与式 (1) 相关的确定性最优质量传输-欧拉方程（OMT-EE）是一个随机最优控制问题：

$$\inf_{\boldsymbol{u}\in\mathcal{U}} \int_0^T \mathbb{E}_{\mu^{\boldsymbol{u}}}\left[q(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}) + r(\boldsymbol{u})\right] \mathrm{d}t \tag{2a}$$

$$\text{subject to} \quad \dot{\boldsymbol{x}}^{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{\alpha} \odot \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}) + \boldsymbol{\beta} \odot \boldsymbol{u},\ i \in [\![3]\!] := \{1, 2\ 3\}, \tag{2b}$$

$$\mu^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}, t = 0) = \mu_0 \text{ (given)},\ \mu^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}, t = T) = \mu_T \text{ (given)}, \tag{2c}$$

其中，固定时间范围为 $[0, T]$，其中 $T > 0$ 为给定值；$\mathbb{E}_{\mu^{\boldsymbol{u}}}[\cdot]$ 表示关于受控状态概率测度 $\mu^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}},\ t)$ 的期望，$t \in [0, T]$，即 $\mathbb{E}_{\mu^{\boldsymbol{u}}}[\cdot] := \int(\cdot)\, \mathrm{d}\mu^{\boldsymbol{u}}$。变量的上标 $\boldsymbol{u}$ 表示该变量取决于控制 $\boldsymbol{u}$ 的选择。符号 $\odot$ 表示逐元素（Hadamard）向量积。

通过注意到受控状态 $\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}} \equiv$ 受控 $\boldsymbol{\omega}$、控制 $\boldsymbol{u} \equiv \boldsymbol{\tau}$、向量场，可以得到 (1) 与 (2b) 之间的对应关系

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{z}) := (z_2 z_3, z_3 z_1, z_1 z_2)^{\top} \text{ for } \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^3, \tag{3}$$

且参数向量 $\boldsymbol{\alpha}$，$\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^3$ 的分量为

$$\alpha_i := (J_{i+1 \mod 3} - J_{i+2 \mod 3})/J_i,\ \beta_i := 1/J_i,\ i \in [\![3]\!]. \tag{4}$$

(2a) 中的代价到达函数由加性状态代价 $q(\cdot)$ 和严格凸且超线性（即 1-强制）的控制代价 $r(\cdot)$ 构成。特别值得关注的是 $q(\cdot) \equiv 0$ 且 $r(\cdot) = \frac{1}{2}\|\cdot\|_2^2$ 的情形，这对应于最小控制能量控制。我们假设 $q + r$ 有下界。

令 Ω 为连续函数 η：$[0, T] \mapsto \mathbb{R}^3$ 所构成的空间，它是完备可分度量空间，并赋予在紧时间区间上一致收敛的拓扑。与 Ω 相关联的是 σ-代数 $\mathscr{F} = \sigma\{\eta(s) \,|\, 0 \le s \le T\}$，并考虑完备滤过概率空间 $(\Omega, \mathscr{F}, \mathbb{P})$，其滤过为 $\mathscr{F}_t = \sigma\{\eta(s) \mid 0 \le s \le t \le T\}$。因此，$\mathscr{F}_0$ 包含所有 $\mathbb{P}$-零测集，且 $\mathscr{F}_t$ 右连续。(2) 中的随机初始条件 $\boldsymbol{x}^u(t = 0)$ 是 $\mathscr{F}_0$ 可测的。对于给定的控制策略 $\boldsymbol{u}$，受控状态 $\boldsymbol{x}^u(t)$ 对所有 $t \in [0, T]$ 都是 $\mathscr{F}_t$-适应的（即非预见的）。

在式（2）中，可行马尔可夫控制策略的集合

$$\mathcal{U} := \{\boldsymbol{u} : \mathbb{R}^3 \times [0, T] \mapsto \mathbb{R}^3 \,|\, \int_0^T \mathbb{E}_{\mu^{\boldsymbol{u}}}[r(\boldsymbol{u})]\, \mathrm{d}t < \infty\}. \tag{5}$$

因此，求解（2）相当于设计一种可容许的马尔可夫控制策略 $\boldsymbol{u} \in \mathcal{U}$，使随机角速度状态在受控样本路径动力学约束（2b）和硬性截止时间约束下，从给定的初始概率测度转移到给定的终端概率测度。初始和终端测度可分别解释为估计的和允许的统计不确定性规格，因此，问题（2）要求直接以非参数意义[4]控制或重塑不确定性。本文旨在研究问题（2）及其

Charlie Yan 和 Iman Nodozi 任职于美国加利福尼亚州圣克鲁兹市 95064 邮编的加州大学圣克鲁兹分校电气与计算机工程系，{cyan140,inodozi}@ucsc.edu。Abhishek Halder 任职于美国加利福尼亚州圣克鲁兹市 95064 邮编的加州大学圣克鲁兹分校应用数学系，ahalder@ucsc.edu。本研究部分获得美国国家科学基金会 2112755 号资助。

随机版本，其中（2b）可能含有加性过程噪声（见第五节讨论）。为避免可能的混淆，我们在 ∇ 上添加下标，以明确梯度是相对于哪个变量求取的；否则省略下标。我们用 $\mathcal{N}(\boldsymbol{m},\ \boldsymbol{\Sigma})$表示均值向量为 $\boldsymbol{m}$ 、协方差矩阵为 $\boldsymbol{\Sigma}$的联合正态概率密度函数。符号 $\boldsymbol{I}_3$ 表示 3×3 单位矩阵。

贡献： 本文的具体贡献如下。

- 我们从静态和动态两个视角，阐明了欧拉方程下最优质量传输与经典最优质量传输之间的联系与区别。`
- 我们提出了一种数值方法，利用 Sinkhorn 损失和神经网络求解最小能量控制问题，并满足概率密度函数（PDF）层面的非参数边界条件。

结构安排： 本文结构安排如下。第二节回顾最优质量传输的预备知识；第三节研究确定性最优质量传输—欧拉方程，即欧拉方程中没有加性过程噪声的情形。第四节讨论受（确定性）欧拉方程支配的无驱动概率密度函数演化。第五节聚焦于受含加性过程噪声的欧拉方程支配的最小能量最优质量传输—欧拉方程；随后，第六节详细介绍一个用于求解相应最优性必要条件的神经网络框架。第七节给出一个案例研究的数值仿真结果。第八节总结全文。

相关研究： 已有多项研究探讨了受欧拉方程描述的角速度动力学下的连续时间确定性最优控制。在有限时域情形下，Athans 等人 [5]推导了最短时间、最小燃料（假设终端时间自由）和最小能量（假设终端时间固定）控制器，这些控制器均可将任意初始角速度向量引导至零。考虑自由终端状态且没有终端代价时，Kumar [6] 证明，针对二次状态代价和二次控制代价到达函数，双曲正切反馈是有限时域问题的最优解。同样考虑自由终端状态时，Dwyer [7] 推导了针对二次状态代价和二次控制代价到达函数以及二次终端代价的有限时域最优控制器。文献 [8]研究了针对二次状态代价和控制目标的无限时域最优控制问题。

除控制设计外，关于系统 (1) 的理论性质也已有所研究。由于无控制运动具有周期性，系统 (1) 具有全局可控性保证；已有研究[9, 定理 4 及其后的讨论], [10, 第 895] 页的备注 $\mathbb{R}^3$ 指出，受控动力学在整个 [11]上均可达。

结合先验动力学来表述并求解最优质量传输是相对较新的研究方向，参见例如 [12]–[15]。据作者所知，此前尚未研究过基于欧拉方程的最优质量传输。

符号说明：我们用粗体小写字母表示向量，用粗体大写字母表示矩阵。当概率测度 μ 绝对连续时，它存在概率密度函数 ρ，且 $\mathrm{d}\mu(\cdot) = \rho\mathrm{d}(\cdot)$。我们用 $\sharp$ 表示概率测度或概率密度函数的推前（当该测度绝对连续时）。符号 $\sim$ 是“服从该概率分布”的简写。我们分别用 $\langle\cdot,\cdot\rangle$、$\nabla$ 和 Δ表示标准欧几里得内积、欧几里得梯度和欧几里得拉普拉斯算子。

II. 最优质量传输预备知识

为便于后续展开，我们现在概述经典最优质量传输的基础知识。关于这一主题的知名参考文献见 [2], [3]；简要概述可参见例如 [16]。

最优质量传输的静态表述 可追溯至 Gaspard Monge 于1781年提出的工作，其关注的是寻找一个保质量的传输映射 $\boldsymbol{\theta}:\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R}^n$ ，将给定测度μ_0 推送至另一测度 μ_T ，同时使传输代价$\int_{\mathbb{R}^n} c(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{x}))\mathrm{d}\mu_0$ 最小，其中 c 是某个基础代价泛函。 c 的常见选择是欧氏距离平方的一半，但一般而言，泛函 c的选择对于保证极小化解 $\boldsymbol{\theta}^{\mathrm{opt}}(\cdot)$的存在唯一性至关重要。

即使能够保证最优传输映射 $\boldsymbol{\theta}^{\mathrm{opt}}(\cdot)$ 的存在唯一性，Monge 的表述仍要求在所有可测推前映射 $\boldsymbol{\theta}$ 上求解一个非线性、非凸问题： $\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R}^n$ 将μ_0映射到 μ_T。对于 $c(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\equiv\frac{1}{2}\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2^2$, $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n$， $\mathrm{d}\mu_0(\boldsymbol{x})=\rho_0(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}$， $\mathrm{d}\mu_T(\boldsymbol{x})=\rho_T(\boldsymbol{y})\mathrm{d}\boldsymbol{y}$，已知 [17] $\boldsymbol{\theta}^{\mathrm{opt}}$存在且唯一，并且可表示为某个凸函数 ψ。即便如此，直接计算 ψ 在数值上仍颇具挑战，因为这归结为求解一个二阶非线性椭圆型 Monge-Amp`ère 偏微分方程 [2, p.126]: $\det\left(\nabla^2\psi(\boldsymbol{x})\right)\rho_T(\nabla\psi(\boldsymbol{x}))=\rho_0(\boldsymbol{x})$，其中 det 和 ∇^2 分别表示行列式和海森矩阵。

静态最优质量传输的一种更易处理的重新表述归功于列昂尼德·康托罗维奇 1942 [18]，该表述不再寻求求出最优传输映射 $\boldsymbol{\theta}^{\mathrm{opt}}$，而是寻求计算给定测度之间的最优耦合 π^{opt}， μ_0， μ_T 其满足

$$\underset{\pi\in\Pi_2(\mu_0,\mu_T)}{\arg\inf}\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} c(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\mathrm{d}\pi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \tag{6}$$

其中， $\Pi_2(\mu_0,\ \mu_T)$表示所有联合概率测度的集合 π，这些联合概率测度支撑于乘积空间 $\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n$ 上，其中 $\boldsymbol{x}$边缘分布为 μ_0，且 $\boldsymbol{y}$ 边缘分布为 μ_T。注意，(6)是一个无限维线性规划。映射 $\boldsymbol{\theta}^{\mathrm{opt}}$ 恰好是最优耦合 π^{opt}的支撑集。反过来，我们可以由 π^{opt} 通过 $\boldsymbol{\theta}^{\mathrm{opt}}$ 恢复 $\pi^{\mathrm{opt}}=(\mathrm{Id}\times\boldsymbol{\theta}^{\mathrm{opt}})\ \sharp\,\mu_0$，其中 Id 表示恒等映射。

Benamou 和 Brenier 提出的最优质量传输的动态表述 [1] 出现在 21 世纪之交。当$c(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\equiv\frac{1}{2}\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2^2$ 和 μ_0,μ_T分别具有概率密度函数ρ_0,ρ_T时，动态表述对应以下随机最优控制问题：

$$\underset{(\rho^{\boldsymbol{u}},\boldsymbol{u})\in\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)\times\mathcal{U}}{\arg\inf}\int_0^T\int_{\mathbb{R}^n}\frac{1}{2}\|\boldsymbol{u}\|_2^2\,\rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}},t)\mathrm{d}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}\mathrm{d}t \tag{7a}$$

$$\frac{\partial\rho^{\boldsymbol{u}}}{\partial t}+\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\cdot(\rho^{\boldsymbol{u}}\boldsymbol{u})=0, \tag{7b}$$

$$\rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}},t=0)=\rho_0,\quad \rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}},t=T)=\rho_T. \tag{7c}$$

约束 (7b) 是刘维尔偏微分方程（例如参见 [19]），它描述了在可行控制策略 $\boldsymbol{u} \in \mathcal{U}$ 下状态概率密度函数 $\rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}, t)$ 的演化。因此，(7) 是一个问题：使用一组单积分器，在时间范围 $[0, T]$ 内将给定的联合概率密度函数 ρ_0 最优地引导至另一个 ρ_T，即在 $\mathcal{U}$ 中拥有完全控制权。对于 (7)，其解 $(\rho^{\mathrm{opt}}, \boldsymbol{u}^{\mathrm{opt}})$ 满足

$$\rho^{\mathrm{opt}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}, t) = \boldsymbol{\theta}_t \sharp \rho_0, \quad \boldsymbol{\theta}_t := \left(1 - \frac{t}{T}\right)\mathrm{Id} + \frac{t}{T}\boldsymbol{\theta}^{\mathrm{opt}}, \tag{8a}$$

$$\boldsymbol{u}^{\mathrm{opt}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}, t) = \nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}, t), \quad \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{2}\|\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi\|_2^2 = 0. \tag{8b}$$

因此，(8a) 表明，最优控制概率密度函数是通过一个映射将初始概率密度函数推前得到的，而该映射是恒等映射与最优传输映射之间的线性插值。因此，概率密度函数 ρ^{opt} 本身是 ρ_0 与 ρ_T之间的（非线性）McCann 位移插值 [20] 。式 (8b) 中的最优控制是 *Hamilton-Jacobi-Bellman*（*HJB*）偏微分方程解的梯度。

静态 OMT 中的 $\psi(\boldsymbol{x})$ 与动态 OMT 中的 $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ 通过定理 5 [2, 中的 ***Hopf-Lax*** 表示公式51] 相关联

$$\phi(\boldsymbol{x}, t) = \inf_{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n}\left(\phi(\boldsymbol{y}, 0) + \frac{1}{2t}\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_2^2\right), \; t \in (0, T], \tag{9a}$$

$$\phi(\boldsymbol{y}, 0) = \psi(\boldsymbol{y}) - \frac{1}{2}\|\boldsymbol{y}\|_2^2, \tag{9b}$$

也就是说，$\phi(\boldsymbol{x}, t)$ 是 $\phi(\boldsymbol{y}, 0)$ 的 Moreau-Yosida 近端包络 [21,第 3 章1] $= \psi(\boldsymbol{y}) - \frac{1}{2}\|\boldsymbol{y}\|_2^2$，因此，$\phi(\boldsymbol{x}, t)$ 关于 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ 连续可微。

经典最优质量传输允许定义一种距离度量，称为 ***Wasserstein*** 度量 W，它定义在概率测度流形或概率密度函数上。具体而言，当 $c(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \equiv \frac{1}{2}\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_2^2$ 时，式 (6) 中取得的下确界值为 μ_0 与 μ_T之间的 Wasserstein 度量平方的一半，即，

$$W^2(\mu_0, \mu_T) := \inf_{\pi \in \Pi_2(\mu_0, \mu_T)} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_2^2 \, \mathrm{d}\pi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}), \tag{10}$$

若 μ_0，μ_T 绝对连续，则该值也等于式 (7) 中取得的下确界值。元组 $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n), W)$ 构成一个完备可分度量空间，即一个波兰空间。这为利用度量 W 对概率测度关于弱收敛的拓扑进行度量化提供了一种自然方式。

对于正则化参数 $\varepsilon > 0$，我们将式 (10) 的熵正则化版本称为***Sinkhorn*** 散度

$$W_\varepsilon^2(\mu_0, \mu_T) := \inf_{\pi \in \Pi_2(\mu_0, \mu_T)} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} \big\{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_2^2 + \varepsilon \log \pi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\big\} \mathrm{d}\pi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}). \tag{11}$$

当 $\varepsilon \downarrow 0$ 时，Sinkhorn 散度 (11) 趋近于 Wasserstein 度量 (10)。

III. 确定性最优质量传输—欧拉方程

我们假设（2）中的端点测度 $\mu_0, \mu_T \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^3)$ 绝对连续，其相应的概率密度函数为 ρ_0, ρ_T，并将（2）改写为

$$\inf_{(\rho^{\boldsymbol{u}}, \boldsymbol{u}) \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^3) \times \mathcal{U}} \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} (q(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}) + r(\boldsymbol{u})) \; \rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}, t) \mathrm{d}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}} \mathrm{d}t \tag{12a}$$

$$\frac{\partial \rho^{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}} \cdot (\rho^{\boldsymbol{u}} (\boldsymbol{\alpha} \odot \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}) + \boldsymbol{\beta} \odot \boldsymbol{u})) = 0, \tag{12b}$$

$$\rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}, t = 0) = \rho_0, \quad \rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}, t = T) = \rho_T. \tag{12c}$$

问题 (12) 从两个方面推广了 (7)。首先，与 (7b) 不同，约束 (12b) 包含由 (3) 给出的先验非线性漂移项 $\boldsymbol{f}$。其次，代价 (12a) 比 (7a) 更一般。我们将 (12) 称为动态 *OMT-EE*。

这里说明，刘维尔偏微分方程 (12b) 的解是在弱意义下理解的，即对于所有紧支撑光滑测试函数 $\zeta(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}, t) \in C_c^\infty([0, T] \times \mathbb{R}^3)$，函数 $\rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}, t)$ 满足 $\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \Big(\rho^{\boldsymbol{u}} \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \rho^{\boldsymbol{u}} \langle \boldsymbol{\alpha} \odot \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}) + \boldsymbol{\beta} \odot \boldsymbol{u}, \nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}} \zeta \rangle\Big) \mathrm{d}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}} \mathrm{d}t + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_0(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}) \zeta(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}, t = 0) \mathrm{d}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}} = 0$。

A. 静态 *OMT-EE*

此时，一个自然的问题随之而来：如果 (12) 是动态 OMT (7) 的欧拉方程推广，那么静态 OMT (6) 对应的推广是什么?

为回答这个问题，我们稍微推广一下设定：将 (6) 中的 $\mathbb{R}^n$ 替换为一个 n 维黎曼流形 $\mathcal{M}$。考虑一条绝对连续曲线 $\boldsymbol{\gamma}(t) \in \mathcal{M}, t \in [0, T]$，以及 $(\boldsymbol{\gamma}, \dot{\boldsymbol{\gamma}}) \in \mathcal{TM}$ (切丛)。那么对于 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathcal{M}$，我们认为 (6) 中的 $c(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 是由拉格朗日量 L：$[0, T] \times \mathcal{TM} \mapsto \mathbb{R}$ 导出的，即将 c 表示为作用量积分

$$c(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \inf_{\boldsymbol{\gamma}(\cdot) \in \Gamma_{\boldsymbol{xy}}} \int_0^T L(t, \boldsymbol{\gamma}(t), \dot{\boldsymbol{\gamma}}(t)) \, \mathrm{d}t, \tag{13}$$

其中

$$\Gamma_{\boldsymbol{xy}} := \{\boldsymbol{\gamma} : [0, T] \mapsto \mathbb{R}^n \mid \boldsymbol{\gamma}(\cdot) \text{ is absolutely continuous}, \; \boldsymbol{\gamma}(0) = \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\gamma}(1) = \boldsymbol{y}\}.$$

特别地，取 $\mathcal{M} \equiv \mathbb{R}^n$ 和 $L(t, \boldsymbol{\gamma}, \dot{\boldsymbol{\gamma}}) \equiv \frac{1}{2}\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|_2^2$，可得 $c(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_2^2$，即标准的欧几里得 OMT。

对于最优质量传输-EE，$\mathcal{M} \equiv \mathbb{R}^3$ 并且我们有拉格朗日量

$$L(t, \boldsymbol{\gamma}, \dot{\boldsymbol{\gamma}}) \equiv q(\boldsymbol{\gamma}) + r((\dot{\boldsymbol{\gamma}} - \boldsymbol{\alpha} \odot \boldsymbol{f}) \oslash \boldsymbol{\beta}) \tag{14}$$

其中 $\oslash$ 表示向量逐元素（Hadamard）除法。特别地，(14) 中的 L 不显式依赖于 t，即 L： $\mathcal{TM} \mapsto \mathbb{R}$。

这一对应关系使我们能够将静态 *OMT-EE*定义为以下线性规划

$$\inf_{\pi \in \Pi_2(\mu_0, \mu_T)} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} c(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \mathrm{d}\pi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \tag{15}$$

其中，c 由 (13)-(14) 给出，$\Pi_2(\mu_0, \mu_T)$ 表示所有支撑于乘积空间 $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ 上、边缘分布为 μ_0 和边缘分布为 μ_1 的联合概率测度 π 的集合。接下来我们将说明，确定 (14) 也有助于证明 (12) 的解存在唯一性。

B. 回到动态 *OMT-EE*

对于问题 (12)，我们有以下结果。

定理 1. *(*存在唯一性*)* 设 $r:\mathbb{R}^3\mapsto\mathbb{R}_{\geq 0}$ 是严格凸的超线性函数。那么，问题 (12) 的极小化元组 $(\rho^{\mathrm{opt}},\boldsymbol{u}^{\mathrm{opt}})$ 存在且唯一。

证明. 由于 r 是严格凸的，因此 (14) 中的 L 作为 $\dot{\boldsymbol{\gamma}}\in\mathbb{R}^3$的函数，是严格凸函数与仿射映射的复合。因此， L关于 $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$是严格凸的。

接下来证明 (14) 中的 L 关于 $\dot{\boldsymbol{\gamma}}\in\mathbb{R}^3$也是超线性的。为此，注意到

$$\begin{aligned}\lim_{\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|_2\to\infty}\frac{L}{\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|_2}&=\lim_{\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|_2\to\infty}\frac{r((\dot{\boldsymbol{\gamma}}-\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f})\oslash\boldsymbol{\beta})}{\|\dot{\boldsymbol{\gamma}}\|_2}\\&=\lim_{\|\boldsymbol{z}\|_2\to\infty}\frac{r(\boldsymbol{z})}{\|\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}+\boldsymbol{\beta}\odot\boldsymbol{z}\|_2}.\end{aligned}\tag{16}$$

利用三角不等式：$\|\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}+\boldsymbol{\beta}\odot\boldsymbol{z}\|_2\leq\|\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}\|_2+\|\boldsymbol{\beta}\odot\boldsymbol{z}\|_2\leq\|\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}\|_2+\|\boldsymbol{\beta}\|_\infty\|\boldsymbol{z}\|_2$，因此

$$\frac{r(\boldsymbol{z})}{\|\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}+\boldsymbol{\beta}\odot\boldsymbol{z}\|_2}\geq\frac{r(\boldsymbol{z})}{\|\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}\|_2+\|\boldsymbol{\beta}\|_\infty\|\boldsymbol{z}\|_2}.$$

对上述两边取极限 $\|\boldsymbol{z}\|_2\to\infty$，得到

$$\begin{aligned}(16)&\geq\lim_{\|\boldsymbol{z}\|_2\to\infty}\frac{r(\boldsymbol{z})}{\|\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}\|_2+\|\boldsymbol{\beta}\|_\infty\|\boldsymbol{z}\|_2}\\&=\lim_{\|\boldsymbol{z}\|_2\to\infty}\frac{r(\boldsymbol{z})/\|\boldsymbol{z}\|_2}{\|\boldsymbol{\beta}\|_\infty}=+\infty,\end{aligned}$$

因为 r是超线性的，且 $\|\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}\|_2$， $\|\boldsymbol{\beta}\|_\infty>0$。因此，(16) 本身等于 $+\infty$，从而证明 L 确实是超线性的。

拉格朗日量 (14) 关于 $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$既严格凸又超线性，因此是弱托内利拉格朗日量 [3, p. 118],[22,Ch. 6.2],，并由此保证 [22,Thm. 1.4.2] 使问题 (12) 的极小化对 (ρ^{opt}, $\boldsymbol{u}^{\mathrm{opt}}$) 存在且唯一。■

注 1。 <*style*>代价 c 由弱托内利拉格朗日量 (13) 导出，(14)如上文证明所示，因此等价地保证静态 *OMT-EE* (15)的解存在且唯一。

C. $q(\cdot)\equiv 0$, $r=\frac{1}{2}\|\cdot\|_2^2$–

（12）的一个具有实际意义的特例是最小能量角速度引导，即

$$q(\cdot)\equiv 0,\quad r=\frac{1}{2}\|\cdot\|_2^2.$$

因此，（12）类似于贝纳穆-布雷尼耶动态 OMT（7），但受控刘维尔偏微分方程（12b）包含先验双线性漂移项，而（7b）中没有。

定理 2. *(*无过程噪声时角速度概率密度函数最小能量引导的最优性必要条件*)* 求解问题(12) 的最优元组 $(\rho^{\mathrm{opt}},\boldsymbol{u}^{\mathrm{opt}})$ 在 $q(\cdot)\equiv 0$, $r=\frac{1}{2}\|\cdot\|_2^2$ 下满足以下一阶最优性必要条件：

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}+\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\beta}\odot\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi\|_2^2+\langle\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi,\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}})\rangle=0,\tag{17a}$$

$$\frac{\partial\rho^{\mathrm{opt}}}{\partial t}+\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\cdot\left(\rho^{\mathrm{opt}}\left(\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}})+\boldsymbol{\beta}^2\odot\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi\right)\right)=0,\tag{17b}$$

$$\rho^{\mathrm{opt}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}},t=0)=\rho_0,\quad\rho^{\mathrm{opt}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}},t=T)=\rho_T,\tag{17c}$$

$$\boldsymbol{u}^{\mathrm{opt}}=\boldsymbol{\beta}\odot\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi,\tag{17d}$$

其中， $\boldsymbol{\beta}^2$ 表示向量逐元素平方。

证明。 考虑问题（12），其中 $q\equiv 0$, $r(\cdot)=\frac{1}{2}\|\text{-}\|_2^2$, 以及其对应的拉格朗日量

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\rho^{\boldsymbol{u}},\boldsymbol{u},\phi):=\int_0^T\int_{\mathbb{R}^3}\Big\{&\frac{1}{2}\|\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}},t)\|_2^2\,\rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}},t)+\phi(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}},t)\\&\left(\frac{\partial\rho^{\boldsymbol{u}}}{\partial t}+\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\cdot(\rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}})+\boldsymbol{\beta}\odot\boldsymbol{u}))\right)\Big\}\mathrm{d}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}\mathrm{d}t\end{aligned}\tag{18}$$

其中拉格朗日乘子为 $\phi\in C^1\left(\mathbb{R}^3;\ [0,T]\right)$。令 $\mathcal{P}_{0T}$ 表示满足（17c）的 $[0,T]$ 上的概率密度函数值曲线族。我们对 $\mathcal{P}_{0T}\times\mathcal{U}$ 上的（18）进行无约束最小化。

对 (18) 右侧进行分部积分，并假设 $\|\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}\|_2\to\infty$ 的边界项为零，我们得到如下无约束最小化问题

$$\begin{aligned}\int_0^T\int_{\mathbb{R}^3}\Big(&\frac{1}{2}\|\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}},t)\|_2^2-\frac{\partial\phi}{\partial t}-\langle\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi,\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}})\\&+\boldsymbol{\beta}\odot\boldsymbol{u}\rangle)\,\rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{u},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}\,\mathrm{d}t.\end{aligned}\tag{19}$$

对于 $\mathcal{P}_{0T}$ 中每一条固定的概率密度函数曲线，对 (19) 的被积函数关于 $\boldsymbol{u}$ 进行逐点最小化，得到

$$\boldsymbol{u}^{\mathrm{opt}}=\mathrm{diag}\,(\boldsymbol{\beta})\,\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi,$$

这与 (17d) 相同。将上述最优控制表达式代回 (19)，并令所得表达式等于零，可得动态规划方程

$$\begin{aligned}\int_0^T\int_{\mathbb{R}^3}\Big(&-\frac{\partial\phi}{\partial t}-\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\beta}\odot\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi\|_2^2-\langle\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi,\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}})\rangle\Big)\\&\rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{u},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}\,\mathrm{d}t=0.\end{aligned}\tag{20}$$

要使 (20) 对任意可行的 $\rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}^{u},\ t)$ 成立，括号内的表达式必须为零，由此得到 HJB偏微分方程 (17a)。

由于 ρ^{opt} 必须满足可行性条件 (12b)- (12c)，将 (17d) 代入其中即可得到 (17b)- (17c)。■

注 2。方程 (17d) 和 (17a) 推广了经典动态 *OMT* 中的条件 (8b) 。耦合系统 *HJB*偏微分方程 (17a) 和刘维尔偏微分方程 (17b)在边界条件(17c) 下的解给出了最优概率密度函数 ρ^{opt}。

IV. 无控制概率密度函数演化

在深入探讨最优控制概率密度函数演化的近似数值解之前，我们先简要讨论一下无控制概率密度函数演化。具体而言，接下来我们将证明，欧拉动力学 (2b) 中漂移向量场的双线性结构使得我们能够对无控制概率密度函数进行解析处理，这对之后比较

随机状态的最优控制演化与无控制演化时将很有帮助。

在没有控制的情况下，我们将非受控状态向量记为 $\boldsymbol{x}$，将非受控联合状态概率密度函数记为 ρ（即不带 $\boldsymbol{u}$ 上标）。此时，(12b) 特化为非受控刘维尔偏微分方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\nabla_{\boldsymbol{x}}\cdot(\rho\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}))=0. \tag{21}$$

由于 (2b) 中的漂移项散度为零，因此给定已知初始条件 $\rho(\boldsymbol{x},\ t=0)=\rho_0$，我们可以显式求解 (21)，得到

$$\rho(\boldsymbol{x},t)=\rho_0\left(\boldsymbol{x}_0(\boldsymbol{x},t)\right) \tag{22}$$

其中，$\boldsymbol{x}_0(\boldsymbol{x},\ t)$ 是与无外力初值问题相关的逆流映射：

$$\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}),\quad \boldsymbol{x}(t=0)=\boldsymbol{x}_0. \tag{23}$$

对于非对称刚体，我们有 $J_1\neq J_2\neq J_3$，相应的流映射 $\boldsymbol{x}(\boldsymbol{x}_0,\ t)$ 对于 (23) 可按分量表示为（例如参见 [23,方程 (37.10)]）

$$x_1=\overline{x}_{10}\,\mathrm{cn}\left(\omega_p t+\lambda_1,\lambda_2\right), \tag{24a}$$
$$x_2=\overline{x}_{20}\,\mathrm{sn}\left(\omega_p t+\lambda_1,\lambda_2\right), \tag{24b}$$
$$x_3=\overline{x}_{30}\,\mathrm{dn}\left(\omega_p t+\lambda_1,\lambda_2\right), \tag{24c}$$

其中，cn（椭圆余弦）、sn（椭圆正弦）和 dn（增量振幅）是雅可比椭圆函数，而变量 $x_{i0}\forall i\in[\![3]\!]$、$\omega_p$、$\lambda_1$，$\lambda_2$ 仅依赖于 $\boldsymbol{x}_0$。在第 VII 节中，我们对与 (24) 相关的逆流映射 $\boldsymbol{x}_0(\boldsymbol{x},\ t)$ 进行数值计算。

对于轴对称刚体，我们有 $J_1=J_2\neq J_3$，而式 (23) 的逆流映射 $\boldsymbol{x}_0(\boldsymbol{x},\ t)$ 可以按分量解析地计算为

$$\gamma:=\frac{x_2-x_1\tan(\alpha_2x_3t)}{x_1+x_2\tan(\alpha_2x_3t)}, \tag{25a}$$
$$x_{10}=\left(\frac{x_1^2+x_2^2}{1+\gamma^2}\right)^{\frac{1}{2}}, \tag{25b}$$
$$x_{20}=\gamma\,x_{10}=\gamma\left(\frac{x_1^2+x_2^2}{1+\gamma^2}\right)^{\frac{1}{2}}, \tag{25c}$$
$$x_{30}=x_3, \tag{25d}$$

因此，式 (22) 可写成

$$\rho(x_1,x_2,x_3,t)=\rho_0\left(\left(\frac{x_1^2+x_2^2}{1+\gamma^2}\right)^{\frac{1}{2}},\gamma\left(\frac{x_1^2+x_2^2}{1+\gamma^2}\right)^{\frac{1}{2}},x_3\right).$$

为简洁起见，我们省略计算细节。

V. 最小能量随机最优质量传输-欧拉方程

为便于对第 III-C 节讨论的动态 OMT-EE 进行数值求解，即求解满足 $q\equiv0$, $r(\cdot)\equiv\frac{1}{2}\|\cdot\|_2^2$ 的式 (12)，我们在样本路径动力学 (2b) 中加入加性过程噪声，从而得到 Itˆo 随机微分方程 (SDE)：

$$\mathrm{d}\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}=(\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}})+\boldsymbol{\beta}\odot\boldsymbol{u})\,\mathrm{d}t+\sqrt{2\delta}\,\mathrm{d}\boldsymbol{w},\ \delta>0. \tag{26}$$

(26) 中的 $\boldsymbol{w}$ 表示 $\mathbb{R}^3$ 中的标准维纳过程。由于存在过程噪声，一阶刘维尔偏微分方程 (12b) 被二阶 Fokker-Planck-Kolmogorov (FPK) 偏微分方程所取代

$$\frac{\partial\rho^{\boldsymbol{u}}}{\partial t}+\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\cdot(\rho^{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}})+\boldsymbol{\beta}\odot\boldsymbol{u}))=\delta\Delta_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\rho^{\boldsymbol{u}}, \tag{27}$$

其中同时包含平流和扩散。相应的最优性必要条件可变换如下。

定理 3. *(含过程噪声时角速度概率密度函数最小能量转向的最优性必要条件)* 设 $\delta>0$。求解问题 (12) 且满足 $q(\cdot)\equiv0$, $r=\frac{1}{2}\|\cdot\|_2^2$，并将 (12b) 替换为 (27) 的最优组 $(\rho^{\mathrm{opt}},\boldsymbol{u}^{\mathrm{opt}})$ 满足以下一阶最优性必要条件：

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}+\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\beta}\odot\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi\|_2^2+\langle\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi,\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}})\rangle=-\delta\Delta_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi, \tag{28a}$$
$$\frac{\partial\rho^{\mathrm{opt}}}{\partial t}+\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\cdot\left(\rho^{\mathrm{opt}}\left(\boldsymbol{\alpha}\odot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}})+\boldsymbol{\beta}^2\odot\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi\right)\right)=\delta\Delta_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\rho^{\mathrm{opt}}, \tag{28b}$$
$$\rho^{\mathrm{opt}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}},t=0)=\rho_0,\quad \rho^{\mathrm{opt}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}},t=T)=\rho_T, \tag{28c}$$
$$\boldsymbol{u}^{\mathrm{opt}}=\boldsymbol{\beta}\odot\nabla_{\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{u}}}\phi, \tag{28d}$$

其中 $\boldsymbol{\beta}^2$ 表示向量逐元素平方。

证明。 证明的论证思路与定理 2 的证明相同，只需做相应调整。另见 [24,命题 1], [25,p. 275]的证明。■

注 3。 在极限 $\delta\downarrow0$下，条件 (28) 化为条件(17)。

注 4。 定理 *3* 中所考虑的最优质量传输随机动态版本，在文献中称为广义 *Schr¨odinger* 桥问题。这类问题源于 *Erwin Scr¨odinger [26]–[28]* 的研究，因此早于随机过程和反馈控制的数学理论。“广义”这一限定词指的是存在先验的（在本文情形下为双线性的）漂移项，而 *Schr¨odinger* 最初的研究 *[26], [27]*并未考虑这一点。近年来，*Schr¨odinger* 桥问题及其与最优质量传输的联系在控制 *[24], [25], [29]–[33]* 和机器学习 *[34]–[36]* 领域都备受关注。

虽然式（28）对任意（不一定很小的）$\delta>0$都成立，但我们尤其关注在 δ 较小时对式（28）进行数值求解，因为此时，其解可保证 [37]⇃[38] 近似于式（17）的解。事实上，式（28）中的二阶项有助于得到更平滑的数值解，也就是说，从计算角度看，它们起到了随机动态正则化的作用。利用 OMT 的随机版本来近似求解相应的确定性动态 OMT，这一思路已见于例如 [39]。

VI. 使用改进的物理信息神经网络求解最优性条件

我们拟利用神经网络计算框架的最新进展，在 $\delta > 0$ 较小时对式（28）进行数值求解。具体而言，我们拟训练一种经过修改的物理信息神经网络（PINN） [40], [41] ，以数值求解式（28a）至（28c）；这组方程由两个二阶耦合偏微分方程以及端点概率密度函数边界条件构成。

这里指出，也可以使用 Hopf-Cole [42], [43] （又称 Fleming对数变换） [44], 将系统 (28a)-(28c) 改写为一个前向和后向 Kolmogorov 偏微分方程组，其未知量为所谓的“Schr¨odinger 因子”。与 (28) 不同，这些偏微分方程通过非线性边界条件相互耦合；例如参见 [24,第 II、III.B 节], [25,第 5] 节。然而，对所得方程组进行数值求解，取决于是否有两种初值问题求解器可用：一种用于前向 Kolmogorov 偏微分方程，另一种用于后向Kolmogorov 偏微分方程。尽管可以针对某些类别的先验非线性漂移设计专用求解器 [24], [45]，但通常会采用基于粒子的方法，例如蒙特卡洛方法和 Feynman-Kac求解器。正如本文所采用的方法，通过调整物理信息神经网络直接求解最优性条件，提供了一种替代性的计算方法。

与 [46], 相同，本研究中的物理信息神经网络训练需要最小化四项损失之和：其中两项对式（28a）—（28b）中的方程误差进行编码，另外两项则对式（28c）中的边界条件误差进行编码。不过，与[46], 不同，我们使用通过压缩 Sinkhorn迭代 [47]计算的 Sinkhorn 散度（11）的离散版本，对边界条件损失进行惩罚。

由于 Sinkhorn 迭代包含一系列可微的线性运算，因此 PyTorch 可自动求导，支持反向传播。与通过涉及 Wasserstein 损失的大型线性程序进行求导这一计算开销巨大的任务相比，用于端点边界条件的 Sinkhorn 损失能够以低得多的计算代价提供近似解，使我们能够在非平凡问题上训练物理信息神经网络。

所提出的物理信息神经网络架构如图 1 所示。在我们的问题中，$\boldsymbol{\xi} := (\omega_1,\ \omega_2,\ \omega_3,\ t)$ 是输入物理信息神经网络的特征，而物理信息神经网络的输出为 $\boldsymbol{\eta} := (\phi,\ \rho^{\mathrm{opt}})$。我们通过 $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^D$ 对全连接前馈神经网络的输出进行参数化，即:

$$\boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{\xi}) \approx \mathcal{N}_{\text{Schrödinger Bridge}}(\boldsymbol{\xi}; \boldsymbol{\theta}), \tag{29}$$

其中 $\mathcal{N}_{\text{Schrödinger Bridge}}(\cdot; \boldsymbol{\theta})$ 表示由 $\boldsymbol{\theta}$ 参数化的神经网络近似函数，D 是参数空间的维数（即该网络待训练的权重、偏置和缩放参数总数）。

网络的总体损失函数记为$\mathcal{L}_{\mathcal{N}_{\text{Schrödinger Bridge}}}$，由方程误差损失和与边界条件相关的损失之和构成。具体而言，令 $\mathcal{L}_\phi$ 表示 HJB偏微分方程 (28a) 的均方误差（MSE）损失项，令 $\mathcal{L}_{\rho^{\mathrm{opt}}}$ 表示均方误差损失项，对应 FPK偏微分方程 (28b)。对于 (28c)，我们考虑 Sinkhorn正则化损失 $\mathcal{L}_{\rho_0}$ 和 $\mathcal{L}_{\rho_T}$。于是，

$$\mathcal{L}_{\mathcal{N}_{\text{Schrödinger Bridge}}} := \mathcal{L}_\phi + \mathcal{L}_{\rho^{\mathrm{opt}}} + \mathcal{L}_{\rho_0} + \mathcal{L}_{\rho_T}, \tag{30}$$

其中，式 (30) 中的每个损失项都在特征空间 Ω 的定义域内的一组 n 配点 $\{\boldsymbol{\xi}_i\}_{i=1}^n$ 上计算：$= \mathcal{X} \times [0, T]$ 对于某个 $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^3$，即 $\{\boldsymbol{\xi}_i\}_{i=1}^n \subset \Omega$。

我们使用基于 PyTorch 的后端训练物理信息神经网络，以计算最优训练参数

$$\boldsymbol{\theta}^* := \underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^D}{\operatorname{argmin}}\, \mathcal{L}_{\mathcal{N}_{\text{Schrödinger Bridge}}}(\{\boldsymbol{\xi}_i\}_{i=1}^n; \boldsymbol{\theta}). \tag{31}$$

下一节将详细介绍仿真设置并报告数值结果。

VII. 数值仿真

我们考虑满足 $\delta = 0.1$ 的随机动力学 (26)。向量场 $\boldsymbol{f}$: $\mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3$ 见式 (3)。对于式 (4) 中的参数向量，我们考虑 $J_1 = 0.45$、$J_2 = 0.50$ 和 $J_3 = 0.55$。

控制目标是在满足（26）的条件下，将初始条件的给定联合概率密度函数 $\boldsymbol{x}(t = 0) \sim \rho_0 = \mathcal{N}(\boldsymbol{m}_0,\ \boldsymbol{\Sigma}_0)$ 在 $t \in [0, T]$ 上引导至终端条件的给定联合概率密度函数 $\boldsymbol{x}(t = T) \sim \rho_T = \mathcal{N}(\boldsymbol{m}_T,\ \boldsymbol{\Sigma}_T)$，同时最小化（12a），其中 $q(\cdot) \equiv 0$, $r = \frac{1}{2}\|\cdot\|_2^2$。这里，我们将最终时间固定为 $T = 4$ s，并且

$$\boldsymbol{m}_0 = (2, 2, 2)^\top,\ \boldsymbol{m}_T = (0, 0, 0)^\top,\ \boldsymbol{\Sigma}_0 = \boldsymbol{\Sigma}_T = 0.5\boldsymbol{I}_3.$$

由于存在先验非线性漂移项，即使端点的联合状态概率密度函数为高斯分布，最优控制下的瞬态联合状态概率密度函数预计也将是非高斯分布。

为训练 $\mathcal{N}_{\text{Schrödinger Bridge}}$，我们使用一个包含 3 个隐藏层的网络，每层有 70 个神经元。激活函数选为 tanh(·)。网络的输入输出结构如第 VI 节所述。

我们固定状态-时间配点域 $\Omega = \mathcal{X} \times [0, T] = [-5, 5]^3 \times [0, 4]$。使用 Adam 优化器 [48]和学习率 10^{-3}对物理信息神经网络进行了 80,000 个训练轮次。训练时，我们在 $t = 0$ 和 $t = T$ 处的端点边界条件之间使用了 $n = 100,000$ 个伪随机样本（采用 Hammer-sley 分布）。此外，为满足计算资源限制，每经过 40,000 个训练轮次，我们都会均匀随机抽取 35,000 个样本。计算端点边界条件处的 Sinkhorn 损失时，我们使用熵正则化参数（见式 (11)） $\varepsilon = 0.1$。

图2展示了该仿真的五十条最优控制状态样本轨迹。这些样本轨迹是通过闭环仿真获得的，所用的最优控制策略 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{opt}}$由物理信息神经网络训练得到。

图3展示了上述数值仿真中，最优控制下的单变量边缘概率密度函数快照，以及无控制时的对应结果。按照第 IV 节，对于确定性动力学（即 $\delta = 0$），计算无控制概率密度函数需要对式（24）求逆。我们使用特征线法 [19] 求解相应的无外力李乌维尔偏微分方程，从而获得无控制联合概率密度函数快照。图3中的边缘分布 $\rho_i^{\mathrm{unc}},\ i \in [\![3]\!]$是通过对这些无控制联合概率密度函数进行数值积分得到的。

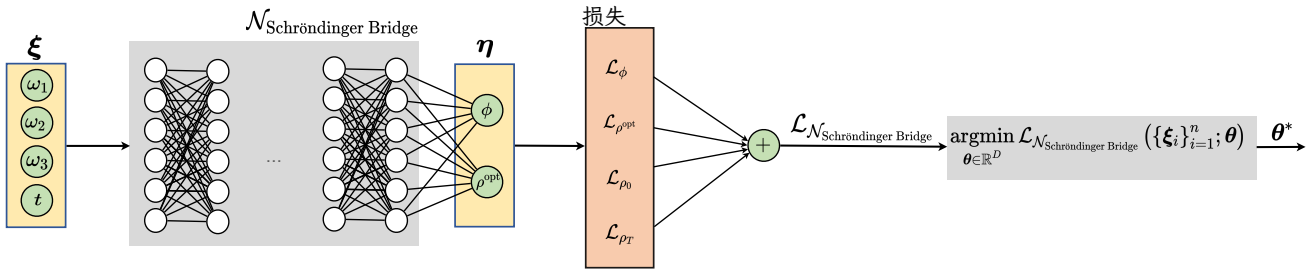


图1：以 $\boldsymbol{\xi} := (\omega_1,\ \omega_2,\ \omega_3,\ t)$ 为输入特征的物理信息神经网络架构。物理信息神经网络的输出 $\boldsymbol{\eta}$ 包括价值函数和最优控制概率密度函数，即 $\boldsymbol{\eta} := (\phi,\ \rho^{\text{opt}})$。

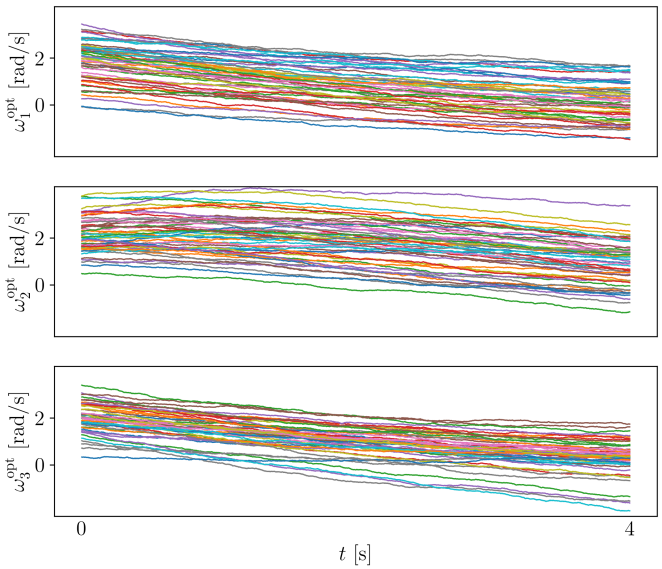


图2：第VII节所报告的仿真中，50条最优控制闭环状态样本路径$\omega_i^{\text{opt}}(t),\ \ i \in [\![3]\!]$。

VIII. 结论

我们研究了由描述角速度动力学的欧拉方程所支配的最优质量输运问题。我们探讨了该问题的确定性和随机动态变体，并阐释了它们与经典最优质量输运理论之间的联系。我们详细说明了解的存在唯一性以及最优性条件。我们给出了一个说明性数值示例，展示如何使用改进的物理信息神经网络实现最优控制综合。我们提出的改进方法涉及通过 Sinkhorn 损失进行微分，以最小化端点联合概率密度函数中的边界条件误差。

参考文献

[1] J.-D. Benamou 和 Y. Brenier，“Monge-Kantorovich质量转移问题的计算流体力学解法”，*Numerische Mathematik*，第84卷，第3期，第375–393页，2000年。[2] C. Villani，*Topics in OptimalTransportation*。美国数学学会，2003年，第58号。[3] C. Villani，*Optimal transport: old and new*。Springer，2009年，第338卷。[4] Y. Chen、T. T. Georgiou 和 M. Pavon，“控制不确定性”，*IEEE*控制系统杂志，第41卷，第4期，第82–94页，2021年。

[5] M. Athans、P. Falb 和 R. Lacoss，“非线性范数不变系统的时间、燃料和能量最优控制”，IEEE 自动控制汇刊，第 8 卷第 3 期，第 196–202 页，1963 年。[6] K. Kumar，“关于卫星的最优稳定”，IEEE 航空航天与电子系统汇刊，第 2 期，第 82–83 页，1965 年。[7] T. Dwyer，“非对称刚体的角动量控制”，IEEE 自动控制汇刊，第 27 卷第 3 期，第 686–688 页，1982 年。[8] P. Tsiotras、M. Corless 和 M. Rotea，“具有二次代价的刚体角速度最优控制”，优化理论与应用杂志，第 96 卷，第 507–532 页，1998 年。[9] R. W. Brockett，“非线性系统与微分几何”，IEEE 会议录，第 64 卷第 1 期，第 61–72 页，1976 年。[10] J. Baillieul，“齐次多项式动力系统的几何学”，非线性分析：理论、方法与应用，第 4 卷第 5 期，第 879–900 页，1980 年。[11] P. Crouch，“航天器姿态控制与稳定：几何控制理论在刚体模型中的应用”，IEEE 自动控制汇刊，第 29 卷第 4 期，第 321–331 页，1984 年。[12] Y. Chen、T. T. Georgiou 和 M. Pavon，“线性动力系统上的最优传输”，IEEE 自动控制汇刊，第 62 卷第 5 期，第 2137–2152 页，2016 年。[13] K. Elamvazhuthi、P. Grover 和 S. Berman，“利用随机反馈律在确定性离散时间非线性系统上实现最优传输”，IEEE 控制系统快报，第 3 卷第 1 期，第 168–173 页，2018 年。[14] K. F. Caluya 和 A. Halder，“多输入状态反馈可线性化系统的有限时域密度引导”，载于《2020年美国控制会议（ACC）》。IEEE，2020 年，第 3577–3582 页。[15] K. Ito 和 K. Kashima，“Sinkhorn 模型预测控制：动力系统上的模型预测最优输运”，载于《2022年美国控制会议（ACC）》。IEEE，2022 年，第 2057–2062 页。[16] A. Halder 和 R. Bhattacharya，“应用于数据驱动建模的测地线密度跟踪”，载于《2014年美国控制会议》。IEEE，2014 年，第 616–621 页。[17] Y. Brenier，“向量值函数的极分解与单调重排”，《纯粹与应用数学通讯》，第 44 卷第 4 期，第 375–417 页，1991 年。[18] L. V. Kantorovich，“关于质量转移”，载于《苏联科学院通报》（新系列），第 37 卷，1942 年，第 199–201 页。[19] A. Halder 和 R. Bhattacharya，“利用随机刘维尔方程分析行星进入过程中高超音速飞行的色散”，制导、控制与动力学杂志，第 34 卷第 2 期，第 459–474 页，2011 年。[20] R. J. McCann，“相互作用气体的凸性原理”，数学进展，第 128 卷第 1 期，第 153–179 页，1997 年。[21] N. Parikh 和 S. Boyd，“近端算法”，优化领域的基础与趋势®，第 1 卷第 3 期，第 127–239 页，2014 年。[22] A. Figalli，“最优输运与作用量极小化测度”，博士论文，里昂，´高等师范学院（科学），2007 年。[23] L. Landau 和 E. Lifshitz，《理论物理学教程。第 1 卷：力学》，第 3 版。Butterworth-Heinemann，1976 年。[24] K. F. Caluya 和 A. Halder，“Schrödinger桥问题的Wasserstein近端算法：非线性漂移下的密度控制”，IEEE 自动控制汇刊，第 67 卷第 3 期，第 1163–1178 页，2021 年。[25] Y. Chen、T. T. Georgiou 和 M. Pavon，“随机控制联结：Richard Sinkhorn 与 Gaspard Monge 在 Schrödinger 桥上相遇”，SIAM 评论，第 63 卷第 2 期，第 249–313 页，2021 年。

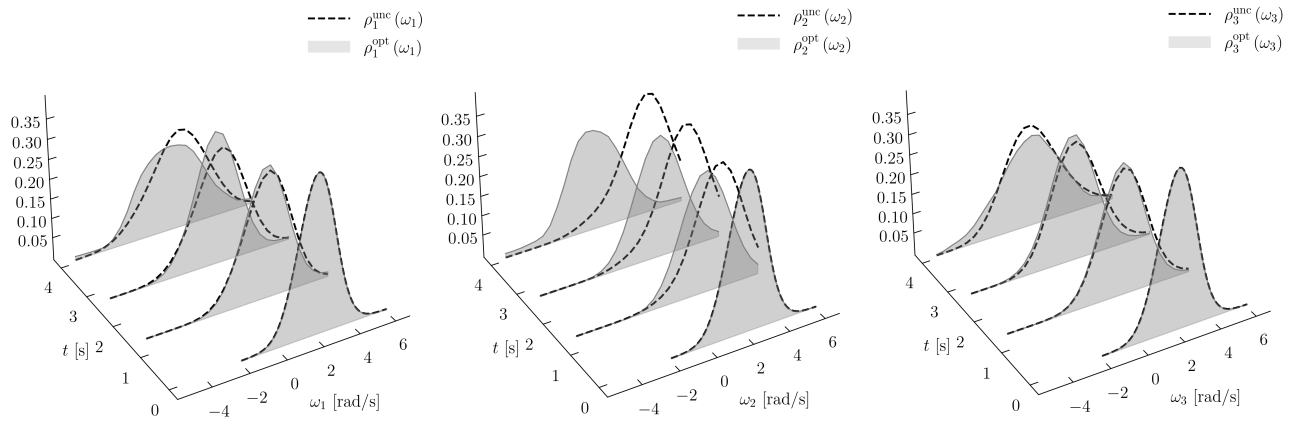


图3：第VII节数值仿真中， ρ_i^{opt} 单变量边缘分布的最优控制结果和ρ_i^{unc}, $i \in [\![3]\!]$相应的未控制单变量边缘分布的四个快照。

[26] E. Schr¨odinger，“¨论自然规律的逆转”，《普鲁士科学院物理数学班会议报告》，第 10 卷，第 144–153 页，1931 年。[27] E. Schr¨odinger，“论电子相对论理论及量子力学的解释”，载于《亨利·庞加莱研究所年刊》，第 2 卷第 4 期，1932 年，第 269–310 页。[28] A. Wakolbinger，“1931 至 1991 年的 Schrödinger 桥”，载于《第四届拉丁美洲概率与数理统计大会论文集》，墨西哥城，1990 年，第 61–79 页。[29] Y. Chen、T. T. Georgiou 和 M. Pavon，“将线性随机系统最优引导至终端概率分布，第一部分”，IEEE 自动控制汇刊，第 61 卷，1169，2015 5，1158 第 期。[30] Y. Chen、T. T. Georgiou 和 M. Pavon，“最优输运与 Schrödinger桥的关系：随机控制视角”，优化理论与应用杂志，第 169 卷，第 671–691 页，2016 年。[31] K. Bakshi、D. D. Fan 和 E. A. Theodorou，“利用 Schrödinger 方法对大规模群体进行最优控制”，IEEE 自动控制汇刊，第 66 卷第 5 期，第 2372–2378 页，2020 年。[32] K. F. Caluya 和 A. Halder，“反射 Schrödinger 桥：具有路径约束的密度控制”，载于《2021年美国控制会议（ACC）》。IEEE，2021 年，第 1137–1142 页。[33] I. Nodozi 和 A. Halder，“Schrödinger 借助 Feynman–Kac 与 Kuramoto 相遇：噪声非均匀 Kuramoto 振子的最小努力分布引导”，载于《2022年 IEEE 第 61 届决策与控制会议（CDC）》。IEEE，2022 年，第 2953–2960 页。[34] V. De Bortoli、J. Thornton、J. Heng 和 A. Doucet，“扩散 Schrödinger 桥及其在基于分数的生成建模中的应用”，《神经信息处理系统进展》，第 34 卷，第 17 695–17 709 页，2021 年。[35] G. Wang、Y. Jiao、Q. Xu、Y. Wang 和 C. Yang，“通过 Schrödinger 桥进行深度生成式学习”，载于《国际机器学习会议》。PMLR，2021 年，第 10 794–10 804 页。[36] T. Chen、G.-H. Liu 和 E. A. Theodorou，“利用前向–后向随机微分方程理论训练 Schrödinger 桥的似然”，arXiv 预印本 arXiv:2110.11291，2021 年。[37] T. Mikami，“通过 h-路径过程的零噪声极限求解具有二次代价的 Monge 问题”，概率论及其相关领域，第 129 卷第 2 期，第 245–260 页，2004 年。´C. L´eonard，“从 Schrödinger 问题到 Monge–Kantorovich 问题”，泛函分析杂志，第 262 卷第 4 期，第 1879–1920 页，2012 年。[39] S. Haddad、K. F. Caluya、A. Halder 和 B. Singh，“面向安全自动驾驶的概率密度函数预测与最优反馈引导”，IEEE 控制系统快报，第 5 卷第 6 期，第 2168–2173 页，2020 年。[41] M. Raissi、P. Perdikaris 和 G. E. Karniadakis，“物理信息神经网络：用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题与反问题的深度学习框架”，计算物理学杂志，第 378 卷，第 686–707 页，2019 年。[42] L. Lu、X. Meng、Z. Mao 和 G. E. Karniadakis，“DeepXDE：用于求解微分方程的深度学习库”，SIAM 评论，第 63 卷第 1 期，第 208–228 页，2021 年。 $u_t + uu_x = \mu_{xx}$E. Hopf，“偏微分方程 $u_t + uu_x = \mu_{xx}$”，《纯粹与应用数学通讯》，第3卷，第3期，第201–230页，1950 年。[43] J. D. Cole，“关于空气动力学中出现的拟线性抛物方程”，《应用数学季刊》，第9卷，236，1951 3，225第。 – 。[44] W. H. Fleming，“对数变换与随机控制”，载于《滤波与最优随机控制进展》。Springer，1982年，第131–141页。[45] K. F. Caluya 和 A. Halder，“随机系统中密度传播的梯度流算法”，*IEEE* 自动控制汇刊，第65卷，第10期，第3991–4004页，2019年。[46] I. Nodozi、J. O’Leary、A. Mesbah 和 A. Halder，“一种用于胶体自组装最小努力随机控制的物理信息深度学习方法”，*arXiv* 预印本 *arXiv:2208.09182*，2022年。[47] M. Cuturi，“Sinkhorn 距离：快速计算最优传输”，《神经信息处理系统进展》，第26卷，2013年。[48] D. P. Kingma 和 J. Ba，“Adam：一种随机优化方法”，*arXiv* 预印本 *arXiv:1412.6980*，2014 年。