2025–2026 学年秋冬学期
优化理论与算法研讨：动态优化专题

Lec 01: 变分法

吴一航　　yhwu_is@zju.edu.cn

浙江大学计算机科学与技术学院

CONTENT

目录

从静态优化到动态优化

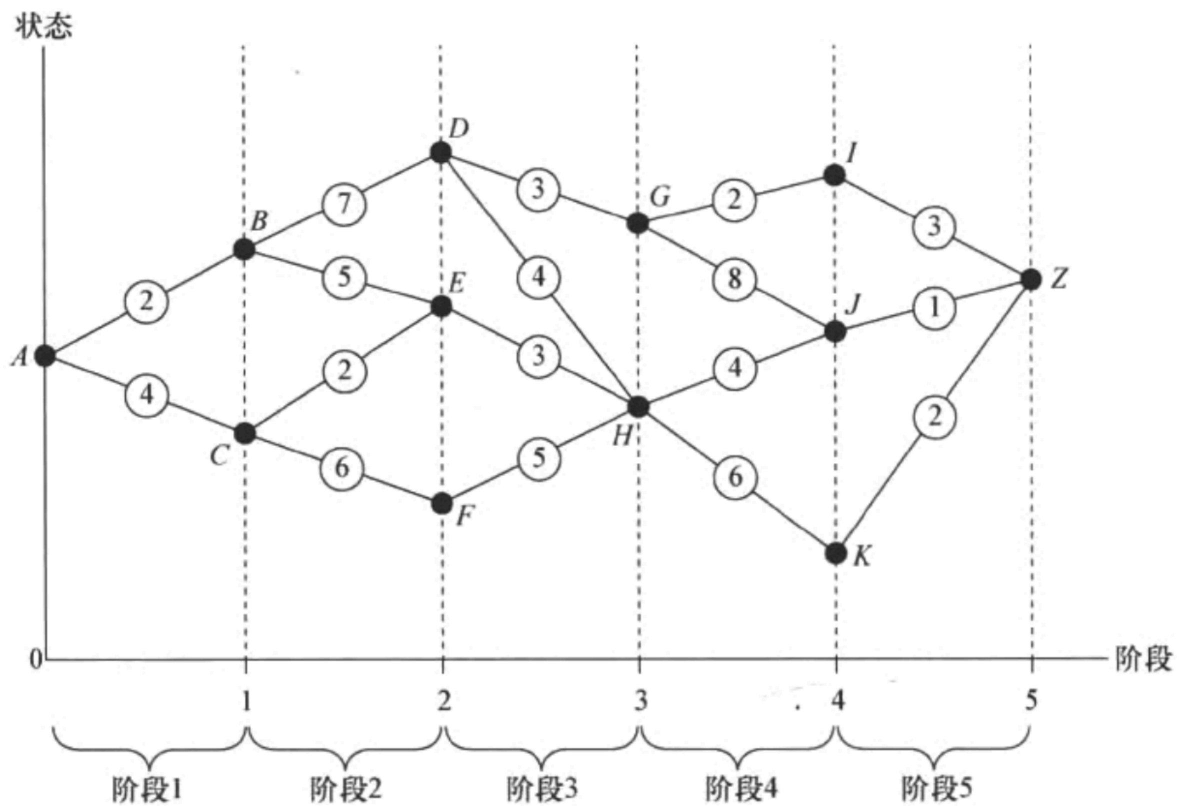
此前研究的优化问题通常是静态优化问题，静态最优化问题的解通常是由**每个选择变量的单个最优值**组成的，例如产品最优定价（连续优化问题），背包问题（组合优化问题）中的 x_i（是否选择某个物品）的值只有一个。

这种静态问题不涉及最优序列行动，相反，动态最优化涉及的问题通常为在计划期间的**每个时段**（离散时间情形）上或给定时间区间比如 $[0, T]$ （T 可以是 ∞）中的**每个时点**上，选择变量的最优值是多少。因此，动态最优化问题的解通常表现为选择变量的**最优时间路径**形式，通常用 $y^*(t)$ 表示变量 y 在时间 t 上的最优取值。

离散时间动态优化问题

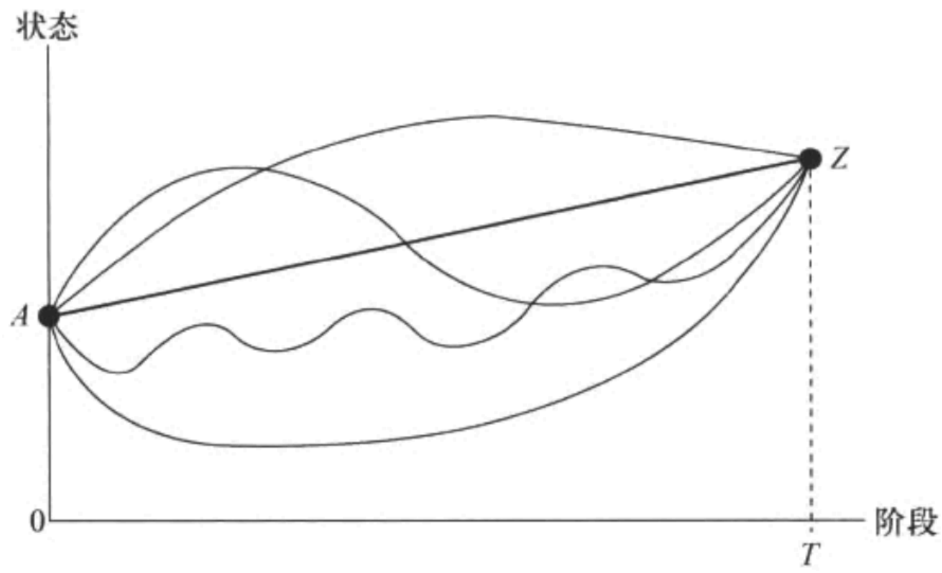
假设某个企业打算将一些物质从初始状态 A（原材料状态）开始，经过五个阶段的生产过程转化为终止状态 Z（成品状态）。在每个阶段，企业面临在若干可能子过程中进行选择的问题，每个子过程伴随一个既定成本。

问题是：为使总成本最小，企业如何选择子过程序列？也就是说，它在每个阶段应该如何选择才能使总成本最小？



连续时间动态优化问题

下图可以看成一开阔地带的地图，其中阶段变量代表经度，状态变量代表纬度。任务是把一车货物从 A 地运到 Z 地，求使得距离最小的运输路径。当然，线段解非常有名——“两点之间，线段最短”，本讲将使用**变分法（calculusof variations）**证明这个结果，变分法是求连续型动态最优化问题的古典方法。



注：这一例子也表明阶段不一定是时间变量，之后会看到最速降线等经典问题也是如此。

动态优化的基本要素

从上面的讨论可知，不管变量是离散型还是连续型，简单类型的动态最优化问题应该包含下列基本要素：

1. 一个给定的初始点和一个给定的终止点；
2. 从初始点到终止点的一组可行路径；
3. 一组路径值，这些值与相应路径相伴，起着业绩指标（时间、成本、利润等）的作用；
4. 一个既定目标，通过选择最优路径使得路径值或业绩指标最大或最小。

在之后的讨论中基本围绕连续时间动态优化问题展开，离散时间交由强化学习部分展开介绍。

无限维优化

根据之前的讨论，动态优化需要在每一个阶段做出一个决策，因此动态优化的优化目标是一个从任意阶段 t 到决策 $y(t)$ 的函数 $y(t)$，而静态优化的优化目标则只是一个单一的值。而函数空间（一般记为线性空间 V）通常是无限维的，因此动态优化问题属于无限维优化问题。

自然地，考虑优化就需要考虑一阶条件，考虑一阶条件就需要定义一阶微分，而一阶微分的定义需要引入邻域的概念，也就是需要定义两个函数之间的距离，这一距离则是范数诱导的。注意，下面的定义都是针对 $\mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ 的函数空间 V。

定义

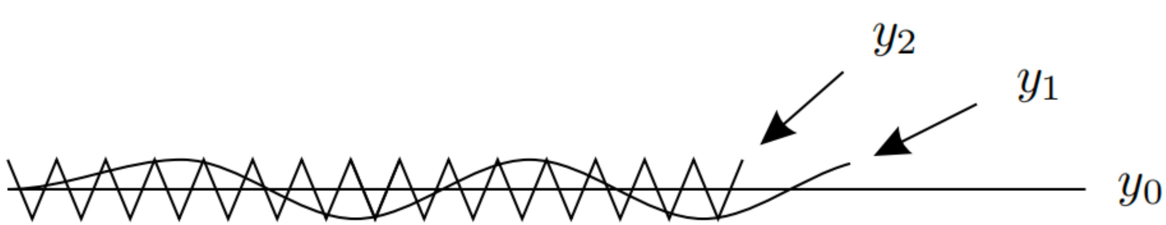
在空间 $V = C^0([a,b],\mathbb{R}^n)$ 中，通常使用范数

$$\|y\|_0 = \max_{x\in[a,b]} \|y(t)\|,$$

其中 $\|\cdot\|$ 是 $\mathbb{R}^n$ 上的欧几里得范数。在空间 $V = C^1([a,b],\mathbb{R}^n)$ 中，也可以定义范数

$$\|y\|_1 = \max_{x\in[a,b]} \|y(t)\| + \max_{x\in[a,b]} \|y'(t)\|.$$

由此可见，0-范数只考虑函数值之间的差异，而 1-范数还考虑了函数导数之间的差异。



基于范数的定义，若 y^* 是一个泛函 $J: V \to \mathbb{R}$ 的局部极小值点，则存在 $\varepsilon > 0$，使得对所有满足 $\|y - y^*\| < \varepsilon$ 的 $y \in V$，都有 $J(y) \geqslant J(y^*)$。显然这一定义不适用于验证局部极小性，因此需要类似于有限维优化的一阶条件，故首先定义泛函的一阶微分，也称为一阶**变分（variation）**。

定义

一个线性函数 $\delta J|_y : V \to \mathbb{R}$ 称为泛函 $J: V \to \mathbb{R}$ 在点 $y \in V$ 处的**一阶变分**，如果对任意 $\eta \in V$ 和 $\alpha \in \mathbb{R}$ 有

$$J(y + \alpha\eta) = J(y) + \delta J|_y\,(\eta)\alpha + o(\alpha).$$

其中线性函数指 $\delta J|_y\,(\alpha_1\eta_1 + \alpha_2\eta_2) = \alpha_1\delta J|_y\,(\eta_1) + \alpha_2\delta J|_y\,(\eta_2)$ 对任意 $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}$ 和 $\eta_1, \eta_2 \in V$ 成立，使用 $\delta J|_y\,(\eta)$ 是因为求出的一阶变分与 y 和 η 都有关。事实上上述一阶变分定义也就是**加托导数（Gâteaux derivative）**的形式：

$$\delta J|_y\,(\eta) = \lim_{\alpha \to 0} \frac{J(y + \alpha\eta) - J(y)}{\alpha}.$$

例

定义 $y : [0,1] \to \mathbb{R}$ 连续，求泛函 $J(y) = \int_0^1 y(t)^2 \mathrm{d}t$ 的变分 $\delta J|_y(\eta)$。

$$
\begin{aligned}
J(y+\alpha\eta) - J(y) &= \int_0^1 (y(t)+\alpha\eta(t))^2 \mathrm{d}t - \int_0^1 y(t)^2 \mathrm{d}t \\
&= \int_0^1 (y(t)^2 + 2\alpha y(t)\eta(t) + \alpha^2\eta(t)^2 - y(t)^2) \mathrm{d}t \\
&= \int_0^1 (2\alpha y(t)\eta(t) + \alpha^2\eta(t)^2) \mathrm{d}t.
\end{aligned}
$$

则有

$$
\delta J|_y(\eta) = \lim_{\alpha\to 0} \frac{J(y+\alpha\eta) - J(y)}{\alpha} = \int_0^1 2y(t)\eta(t) \mathrm{d}t.
$$

无限维优化

在给出了泛函的一阶变分定义后，可以给出无限维优化的一阶必要条件。事实上与有限维优化的情形类似，故证明略去。

定理

设 $y^* \in V$ 是泛函 $J : V \to \mathbb{R}$ 的局部极小值点，且 J 在 y^* 处可微，则对任意 $\eta \in V$，都有 $\delta J|_{y^*}(\eta) = 0$。

无限维优化

在给出了泛函的一阶变分定义后，可以给出无限维优化的一阶必要条件。事实上与有限维优化的情形类似，故证明略去。

定理

设 $y^* \in V$ 是泛函 $J : V \to \mathbb{R}$ 的局部极小值点，且 J 在 y^* 处可微，则对任意 $\eta \in V$，都有 $\delta J|_{y^*}(\eta) = 0$。

有了如上一阶必要条件后，要求解泛函极值，还需要如下简单引理：

引理

如果一个连续函数 $\xi : [a, b] \to \mathbb{R}$ 满足

$$\int_a^b \xi(t)\eta(t)\mathrm{d}t = 0$$

对任意满足 $\eta(a) = \eta(b) = 0$ 的函数 $\eta \in C^1([a, b], \mathbb{R})$ 都成立，则 $\xi(t) \equiv 0$。

例

定义 $y:[0,1]\to\mathbb{R}$ 连续且满足 $y(0)=y(1)=0$，求泛函 $J(y)=\int_0^1 y(t)^2\mathrm{d}t$ 的极值。

根据一阶条件，对任意的 $\eta\in V$，都有

$$\delta J|_y(\eta)=\int_0^1 2y(t)\eta(t)\mathrm{d}t=0.$$

由引理可知，$y(t)\equiv 0$，即 $y^*(t)=0$ 是该泛函的唯一极值点。事实上，题目中泛函表示函数 $y(t)$ 在区间 $[0,1]$ 上的平方积分，因此很显然可以看出该泛函在 $y^*(t)=0$ 处取得最小值 0。

无限维优化

类似于有限维优化，无限维优化也有相应的二阶条件，但由于篇幅关系并且技术性较强，本讲不做展开。在结束无限维优化的基本理论介绍前，我们最后来介绍一个很重要的结论：**无穷维空间的有界闭集不一定是紧集**，这与有限维空间的情形不同。

例

考虑无穷维空间中的单位球面 $S = \{y \in l^2 \mid \|y\| = 1\}$，其中 l^2 是所有平方可和的数列空间。显然 S 是有界闭集，但它不是紧集，因为 S 中的序列 $y_n = (0, 0, ..., 0, 1, 0, ...)$（第 n 个位置为 1，其余位置为 0）没有收敛子列。

进一步地，考虑 $V = C[0,1]$ 上的泛函 $J(y) = \int_0^1 |y(t)| \, \mathrm{d}t$，其在单位球面 $S = \{y \in V \mid \|y\| = 1\}$（其中 $\|y\| = \sup_{t\in[0,1]}|y(t)|$）上下确界为 0，但没有达到该上下确界的函数。这表明，无穷维空间中的有界闭集上连续泛函不一定存在极值。

CONTENT

目录

最速降线问题

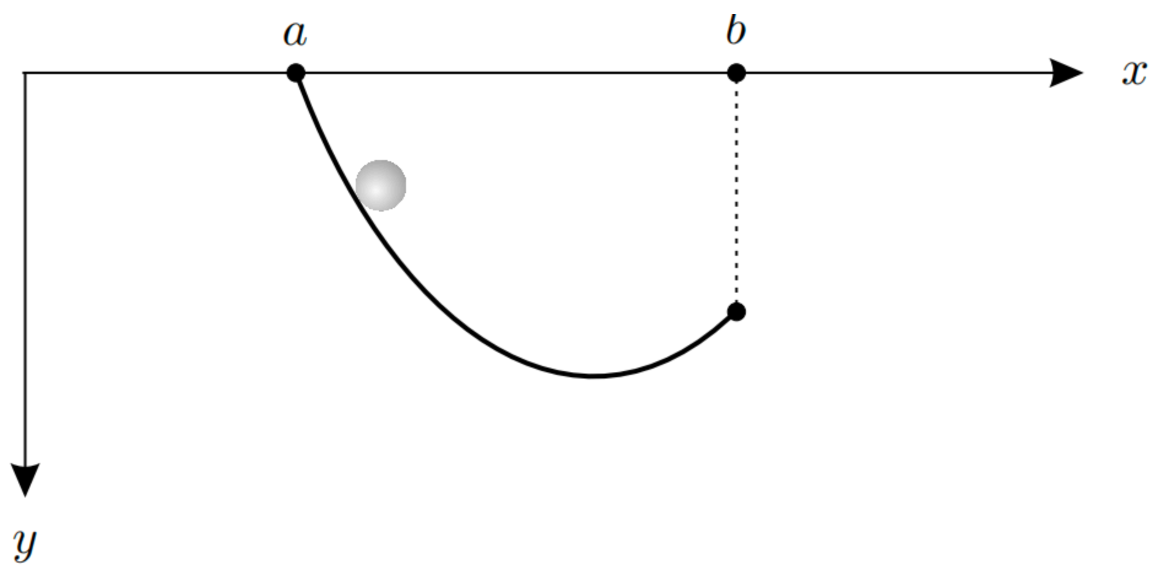
目前，促进变分法诞生的第一个问题公认为是伯努利兄弟打赌的**最速降线问题（brachistochrone curve problem）**。除了与哥哥雅各布·伯努利（Jacob Bernoulli，1654-1705）学术竞争等因素外，约翰·伯努利（Johann Bernoulli，1667-1748）意识到了最速降线问题的挑战性与新颖性，最终以“新问题——向数学家们征解”为题，于 1696 年 6 月在《教师学报》（Acta Eruditorum）杂志上发表了该问题。

> 我只提醒大家注意伯努利提出的“最速降落线”问题，在公开宣布这一问题时，伯努利说：经验告诉我们，正是摆在面前的那些困难而同时也是有用的问题，引导着有才智的人们为丰富人类的知识而奋斗。以默森、帕斯卡、费马、维维安尼等人为榜样，伯努利在当时杰出的分析学家面前提出了一个问题，这个问题好比一块试金石，通过它，分析学家们可以检验其方法的价值，衡量他们的能力。 伯努利因此而博得数学界的感谢。变分法的起源应归功于这个伯努利问题和相类似的一些问题。
>
> – 大卫·希尔伯特，1900 年巴黎数学家大会上的讲话

最速降线问题

最速降线问题

已知垂直平面内不在同一垂线上的两点 A 和 B，现有一物体从静止开始在重力作用下沿一条光滑曲线从 A 点滑向 B 点，求使物体从 A 点滑到 B 点所用时间最短的曲线。



这里的变量是平面上的光滑曲线 $y(x)$，因此属于无穷维优化问题。

最速降线问题

边值条件:

$$\begin{cases} y(a) = 0 \\ y(b) = y_1 \end{cases}$$

在 x 坐标处，物体的速度 v 可由能量定律得到为 $v = \sqrt{2gy(x)}$，为了简化计算，设重力加速度 $g = \frac{1}{2}$，则

$$v = \sqrt{y(x)}.$$

而在 x 坐标处的充分小弧长等于

$$\mathrm{d}s = \sqrt{1 + (y'(x))^2}\mathrm{d}x.$$

因此，物体从 A 点沿着 $y(x)$ 滑到 B 点所用时间为

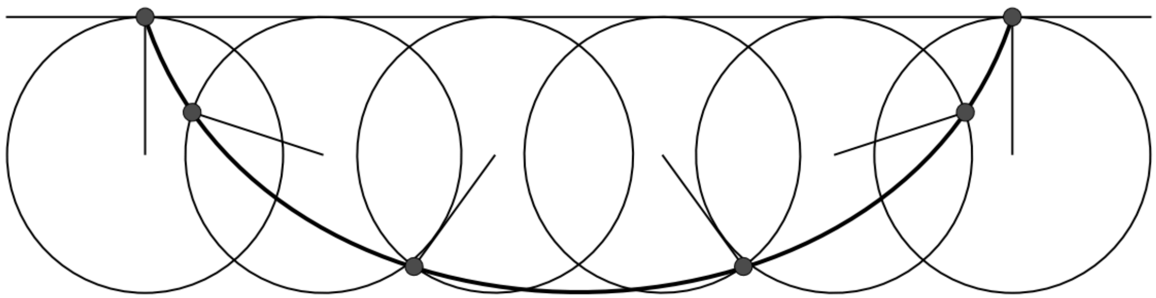
$$J(y) = \int_a^b \frac{\sqrt{1 + (y'(x))^2}}{\sqrt{y(x)}}\mathrm{d}x.$$

最速降线问题

除伯努利本人外，莱布尼茨、牛顿以及他的哥哥雅各布·伯努利等学者也都独立给出了正确解答。这类最优曲线被称为**摆线（cycloid）**，其参数方程为

$$\begin{cases} x = a + c(\theta - \sin\theta) \\ y = c(1 - \cos\theta) \end{cases}$$

其中 $c > 0$ 是常数，$\theta \in [0, 2\pi]$ 是参数。上述方程描述了半径为 c 的圆在水平轴上滚动时，圆周上某一点所描绘的轨迹。



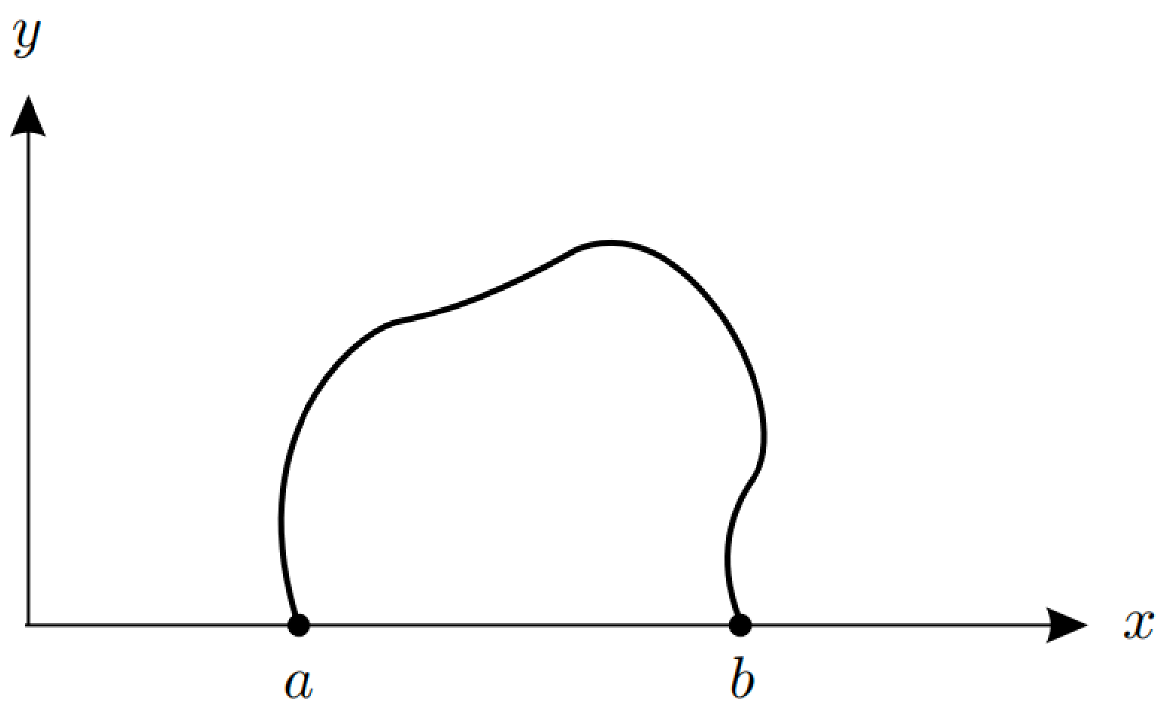
狄多等周问题

结束最速降线打赌的伯努利两兄弟的赌约再次升级，据记载，此次的赌约导致兄弟两人由学术竞争演变为充满敌意的争吵，一直持续到 1705 年哥哥雅各布去世。此次的赌约内容是**狄多等周问题（Dido's isoperimetric problem）**，雅各布在 1697 年 5 月给弟弟约翰的公开挑战中写道：如果他弟弟 3 个月内接受挑战并于年底前给出正确答案，那么一位不愿透露姓名的绅士愿意给他提供 50 金币的奖金。

传说等周问题源于古希腊时期的迦太基女王狄多。据说狄多女王逃离家乡到了北非岸边的一个地方。她被分封了一块极小的地方——只有一张牛皮铺开来那么大。狄多女王没有气馁，她将这张牛皮切成许多段，然后缝制起来，做成一条长约一英里的皮带。然后，她利用海岸线作为边界，让她的支持者帮她尽可能地将一张普通牛皮拉成一个最大的半圆。就是用这样的方法，她成功地用一张普通的牛皮圈住了大约 25 英亩的土地。狄多女王就是从这个地方起步，建造了举世闻名的城市迦太基。

狄多等周问题

假设海岸线是一条直线，而绑在一起的牛皮则对应一条固定长度的曲线 $y(x)$，目标是使这条曲线下的面积最大化。



形式化而言，我们的目标是最大化

$$J(y)=\int_a^b y(x)\mathrm{d}x,$$

长度固定表明这一优化问题有约束条件

$$\int_a^b \sqrt{1+(y'(x))^2}\mathrm{d}x=L.$$

此外，这一问题可以添加一个边界条件 $y(a)=0$，即起点固定（不固定可以平移），但终点 $y(b)$ 可以变化。

正是由于没有认识到积分约束带来的变化，约翰给出了错误的解答。1700 年 6 月，雅各布在《教师学报》上简单介绍了他的解法和正确答案，并于 1701 年 5 月在该期刊进一步给出了详细解答。最终，1718 年约翰基于雅各布 1701 年论文的思想以更直观简单的方式求解了该问题。

基本变分问题

最速降线问题代表了一类最简单的变分问题，称为**基本变分问题（basic calculus of variations problem）**。

基本变分问题

设 C^1 函数 $y:[a,b]\to\mathbb{R}^n$ 且满足边值条件

$$\begin{cases} y(a)=y_0 \\ y(b)=y_1 \end{cases}$$

其中 $y_0,y_1\in\mathbb{R}$ 是给定常数，求 $y(x)$，使得泛函

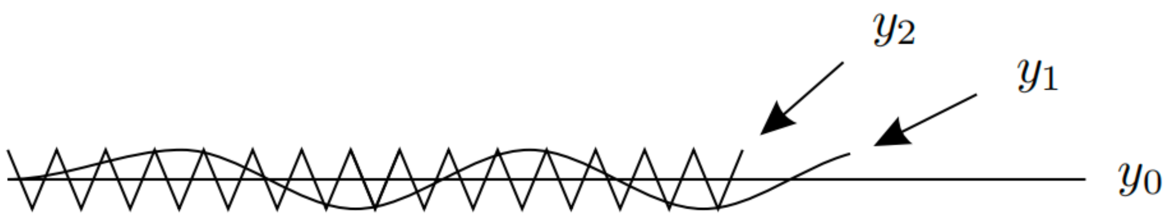
$$J(y)=\int_a^b L(x,y(x),y'(x))\mathrm{d}x$$

取得极值，其中函数 $L:\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 被称为**拉格朗日量（Lagrangian）**，或**运行成本（running cost）**，且 $L\in C^1$。

- 下面的证明都只针对 $n=1$ 的情形展开，$n>1$ 的情形类似；
- $y\in C^1$ 的条件可以放宽为分片连续可微，技术性较强不做展开。

强极值与弱极值

根据此前的讨论我们知道，无限维函数空间上通常考虑的范数有 0-范数和 1-范数两种，而不同范数下的邻域定义不同。



不难理解，任意 y^* 在 0-范数下的 ε-邻域都包含在 1-范数下的 ε-邻域，反之不然。因此 y^* 在 0-范数下的局部极值点一定也是在 1-范数下的局部极值点。基于此，定义 0-范数下的局部极值点为**强极值（strong extremum）**，1-范数下的局部极值点为**弱极值（weak extremum）**。

由此可知，弱极值的必要条件一定是强极值的必要条件，故接下来的讨论都基于弱极值展开。

欧拉-拉格朗日方程的推导

接下来推导基本变分问题极值的必要条件，即著名的**欧拉-拉格朗日方程（Euler-Lagrange equation）**。根据无限维优化的一阶必要条件，首先需要求出泛函 J 在任意函数 y 处的一阶变分 $\delta J|_y(\eta)$：

$$J(y+\alpha\eta)=\int_a^b L(x,y(x)+\alpha\eta(x),y'(x)+\alpha\eta'(x))\mathrm{d}x.$$

其中 $y+\alpha\eta$ 仍然满足边值条件并属于 C^1，故 $\eta\in C^1$ 且 $\eta(a)=\eta(b)=0$。使用链式法则展开有

$$\begin{aligned}J(y+\alpha\eta)=\int_a^b \Big[&L(x,y(x),y'(x))+L_y(x,y(x),y'(x))\alpha\eta(x)\\&+L_z(x,y(x),y'(x))\alpha\eta'(x)+o(\alpha)\Big]\mathrm{d}x.\end{aligned}$$

由此可得

$$\delta J|_y(\eta)=\int_a^b\Big[L_y(x,y(x),y'(x))\eta(x)+L_z(x,y(x),y'(x))\eta'(x)\Big]\mathrm{d}x.$$

欧拉-拉格朗日方程的推导

化简 $\delta J|_y\,(\eta)$ 的表达式，使用分部积分公式对第二项进行处理，有

$$\delta J|_y\,(\eta) = \int_a^b \left[L_y(x,y(x),y'(x))\eta(x) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}L_z(x,y(x),y'(x))\eta(x)\right]\mathrm{d}x$$
$$+L_z(x,y(x),y'(x))\eta(x)|_a^b.$$

根据边值条件 $\eta(a)=\eta(b)=0$，可知最后一项为零，因此根据无限维优化的一阶必要条件，若 y 是泛函 J 的弱极值点，则对任意 $\eta \in C^1$ 且 $\eta(a)=\eta(b)=0$，都有

$$\int_a^b \left[L_y(x,y(x),y'(x)) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}L_z(x,y(x),y'(x))\right]\eta(x)\mathrm{d}x = 0.$$

根据此前的一个引理，若括号内函数连续，则括号内函数恒等于零，即

$$L_y(x,y(x),y'(x)) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}L_z(x,y(x),y'(x)) = 0, \forall x \in [a,b].$$

欧拉-拉格朗日方程

欧拉-拉格朗日方程

设 $y^* : [a,b] \to \mathbb{R}$ 是基本变分问题的弱极值点，则 y^* 满足欧拉-拉格朗日方程

$$L_y = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} L_z.$$

当 $n > 1$ 时，不难推广欧拉-拉格朗日方程为 $\nabla L_y = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \nabla L_z$。

上述证明中最关键的一步就是**应用引理去除了积分号，使得原先的求解积分最大值的问题转化为逐点微分条件**，简化了问题的求解。

上述方程最初由欧拉于 1740 年前后推导得出，他采用了离散化处理，通过优化经过 N 个点的分段线性曲线来近似一般曲线（故是有限维优化），当 N 趋近于无穷大时，即可得到上述方程。1755 年，年仅 19 岁的拉格朗日提出了一个无需几何考量、仅凭分析即可得出相同结果的替代方法。他在给欧拉的信中阐述了这一论证，欧拉对此印象深刻，随后为拉格朗日的方法创造了“变分法”这一术语。

技术细节

一个重要的技术细节是，前面的推导基于

$$L_y(x, y(x), y'(x)) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} L_z(x, y(x), y'(x))$$

连续，然而这就要求 $L \in C^2$ 以及 $y \in C^2$，比我们的假设更强。事实上只要对证明过程进行一些修正就可以避免这一要求。回忆

$$\delta J|_y(\eta) = \int_a^b \left[L_y(x, y(x), y'(x))\eta(x) + L_z(x, y(x), y'(x))\eta'(x) \right] \mathrm{d}x.$$

这次对第一项使用分部积分，得到

$$\begin{aligned} \delta J|_y(\eta) = & \int_a^b \left[L_z(x, y(x), y'(x))\eta'(x) - \eta'(x) \int_a^x L_y(t, y(t), y'(t)) \mathrm{d}t \right] \mathrm{d}x \\ & + \eta(x) \int_a^x L_y(t, y(t), y'(t)) \mathrm{d}t \,\Big|_a^b. \end{aligned}$$

技术细节

根据边值条件 $\eta(a)=\eta(b)=0$ 可知最后一项为零，因此极值 y 满足

$$\int_a^b \left[L_z(x,y(x),y'(x)) - \int_a^x L_y(t,y(t),y'(t))\mathrm{d}t\right]\eta'(x)\mathrm{d}x = 0.$$

引理

如果一个连续函数 $\xi:[a,b]\to\mathbb{R}$ 满足

$$\int_a^b \xi(t)\eta'(t)\mathrm{d}t = 0$$

对任意满足 $\eta(a)=\eta(b)=0$ 的函数 $\eta\in C^1([a,b],\mathbb{R})$ 都成立，则 ξ 是一个常值函数。

根据引理可知 $L_z(x,y(x),y'(x)) = \int_a^x L_y(t,y(t),y'(t))\mathrm{d}t + C$ 对任意 $x\in[a,b]$ 成立，其中 C 是常数。对上式两边对 x 求导，得到欧拉-拉格朗日方程，无需 L 和 y 具有二阶连续可微性。

例：两点之间线段最短

考虑平面上两点 $A(a, y_0)$ 和 $B(b, y_1)$ 之间的最短路径问题。设路径为 $y(x)$，则路径长度为

$$J(y) = \int_a^b \sqrt{1 + (y'(x))^2}\mathrm{d}x.$$

由欧拉-拉格朗日方程可知

$$L_y = 0 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}L_z = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{y'(x)}{\sqrt{1+(y'(x))^2}}\right) = 0.$$

因此 $\frac{y'(x)}{\sqrt{1+(y'(x))^2}} = C$，其中 C 是常数。解出 $y'(x) = \frac{C}{\sqrt{1-C^2}}$，即 $y(x)$ 的导数为常数，因此 $y(x)$ 是一条直线，并且显然这一极值是极小值。

例：最速降线问题

回忆最速降线问题中，物体从 $A(a,0)$ 点滑到 $B(b,y_1)$ 点所用时间为

$$J(y)=\int_a^b \frac{\sqrt{1+\left(y'(x)\right)^2}}{\sqrt{y(x)}}\mathrm{d}x.$$

一个观察是，拉格朗日量不直接与 x 相关。此外，$y(x)$ 为常值一定不是极值点，故对欧拉-拉格朗日方程两边同时乘以 $y'(x)$，得到

$$y'\cdot L_y-y'\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}L_z=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(L-y'\cdot L_z)=0.$$

因此 $L-y'\cdot L_z$ 是常数。代入具体的 L，整理得到

$$y\left(1+(y')^2\right)=C,$$

其中 C 是常数。参数法解微分方程，令 $y'(x)=\tan\alpha$（只要 $y'(x)$ 不会两次取同一个值即可），则有

$$y(x)=\frac{C}{1+(\tan\alpha)^2}=C\cos^2\alpha.$$

例：最速降线问题

进一步有

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\alpha} = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\alpha} = -2C\cos^2\alpha = -C(\cos 2\alpha + 1) := -C(\cos\beta + 1),$$

其中 $\beta = 2\alpha$。因此

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\beta} = -\frac{C}{2}(\cos\beta + 1),$$

故可以解得

$$x = -\frac{C}{2}(\sin\beta + \beta) + D,$$

其中 D 是常数。令 $a := D - C\pi/2$，$c := C/2$，$\theta = \pi - \beta$，则有

$$\begin{cases} x = a + c(\theta - \sin\theta) \\ y = c(1 - \cos\theta) \end{cases}$$

欧拉-拉格朗日方程只是必要条件

前面的问题通过欧拉-拉格朗日方程这一必要条件直接得到了唯一解，并且唯一解显然是前两个问题的极小值。然而有的时候，欧拉-拉格朗日方程的解可能有多个，此时其中的部分解可能不再是极值点。

考虑如下泛函

$$J(y)=\int_0^1 y(x)(y'(x))^2\mathrm{d}x,$$

边值条件 $y(0)=y(1)=0$。欧拉-拉格朗日方程为

$$(y')^2=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(2yy'),$$

故显然 $y(x)\equiv 0$ 是欧拉-拉格朗日方程的解，但显然不是原问题的极小值或极大值点。

CONTENT

目录

哈密顿正则方程

欧拉-拉格朗日方程是二阶偏微分方程，因此求解起来比较困难。哈密顿（William Rowan Hamilton，1805-1865）提出了一种将欧拉-拉格朗日方程转化为一阶偏微分方程组的方法，称为**哈密顿正则方程（Hamilton's canonical equations）**。

设 $y:[a,b]\to\mathbb{R}^n$，定义**动量（conjugate momentum）**为

$$p = L_z(x,y,y').$$

进一步定义**哈密顿量（Hamiltonian）**为

$$H(x,y,y',p) = p\cdot y' - L(x,y,y').$$

其中 $\cdot$ 表示内积。虽然哈密顿量被表示为四元函数，但本质上而言还是 x 的函数。根据上述定义以及欧拉-拉格朗日方程可知

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = y'(x) = H_p(x,y,y',p),$$

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}L_z(x,y,y') = L_y(x,y,y') = -H_y(x,y,y',p).$$

基于此我们便可以给出与欧拉-拉格朗日方程等价的哈密顿正则方程。

哈密顿正则方程

设 $y : [a, b] \to \mathbb{R}^n$ 是基本变分问题的弱极值点，且定义动量 $p(x) = L_z(x, y(x), y'(x))$，则 $(y(x), p(x))$ 满足哈密顿正则方程

$$\begin{cases} y' = H_p \\ p' = -H_y \end{cases}$$

- 动量 p 作为新引入的辅助变量，也称为**协态变量（co-state variable）**；
- 哈密顿量是拉格朗日量的**勒让德变换（Legendre transformation）**；
- $H_z(x, y, y', p) = p - L_z(x, y, y') = 0$，即最优解还有一个必要条件是 H 作为 y' 的函数在最优解上是驻点；
- 哈密顿正则方程将原先的二阶微分方程转化为了两个一阶微分方程组，求解起来相对简单一些。

最小作用量原理

考虑保守力做功情况下的牛顿运动定律

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\dot{q}) = -U_q,$$

其中 $q = (x, y, z)^{\mathrm{T}}$ 是坐标变量，$\dot{q}$ 是速度，m 是质量，$U = U(q)$ 是势能函数。定义拉格朗日量为

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{q} \cdot \dot{q}) - U(q) = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - U(q),$$

即动能 T 与势能 U 之差，即 $L = T - U$。则欧拉-拉格朗日方程为

$$L_q = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}L_{\dot{q}} \Leftrightarrow -U_q = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\dot{q}),$$

即牛顿运动定律。因此牛顿运动定律是使得能量泛函随着时间积分最小化的必要条件，这也就是哈密顿的**最小作用量原理（principle of least action）**：实际路径是使得作用量取值最小的那一条。

最小作用量原理

考虑势能恒等于 0 的情况，此时不难解得沿各个方向的加速度均为 0，因此速度不变，因此运动轨迹为直线。而当考虑引力场时，物体的运动轨迹应当是在一个扭曲的空间中沿直线运动，这就是爱因斯坦的**广义相对论（general relativity）**的基本思想。

回顾动量 p 和哈密顿量 H 的定义，此时有

$$p = L_{\dot{q}} = m\dot{q},$$

$$H = p \cdot \dot{q} - L = \frac{1}{2}m(\dot{q} \cdot \dot{q}) + U(q) = T + U.$$

- 由此可见为什么 p 称之为动量，而 H 的物理意义也就是系统的总能量；
- 上述推导也可以推广至有 N 个质点运动的情况，只需要将 $q \in \mathbb{R}^3$ 推广至 $q \in \mathbb{R}^{3N}$ 即可。

守恒定律

在一个保守系统中，势能只与位置有关而与时间无直接关联，动能也只与速度有关而与时间无直接关联，因此拉格朗日量 L 不显含时间 t，因此系统具有时间平移对称性。根据欧拉-拉格朗日方程，有

$$0 = L_{\dot{q}q}\dot{q} + L_{\dot{q}\dot{q}}\ddot{q} - L_q.$$

左右两边同时乘以 $\dot{q}$，得到

$$0 = L_{\dot{q}q}(\dot{q})^2 + L_{\dot{q}\dot{q}}\dot{q}\ddot{q} - L_q\dot{q} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\big(L_{\dot{q}}\dot{q} - L\big).$$

因此有

$$L_{\dot{q}}\dot{q} - L = H = \text{constant}.$$

即此时最优解对应的哈密顿量不变，即系统的总能量不变，这就是**能量守恒定律（law of conservation of energy）**。

考虑一个闭合系统，即无外力作用的系统，此时势能不变，因此拉格朗日量 L 等于动能，而动能与位置无关，因此系统具有空间平移对称性。根据欧拉-拉格朗日方程可知，此时动量 $p = L_{\dot{q}} = m\dot{q}$ 不变，这就是**动量守恒定律（law of conservation of momentum）**。类似地，如果系统无外力矩作用，则具有旋转对称性，则系统的**角动量守恒（conservation of angular momentum）**。

事实上，上述三条守恒定律都是**诺特定理（Noether's theorem）**的直接推论，诺特定理指出每一个连续对称性都对应着一个守恒量。

CONTENT

目录

非积分约束问题

考虑如下问题：有边值条件 $y(a) = y_0$ 和 $y(b) = y_1$，以及约束条件

$$M(x, y(x), y'(x)) = 0, \forall x \in [a, b],$$

求 $y(x)$，使得泛函

$$J(y) = \int_a^b L(x, y(x), y'(x)) \mathrm{d}x$$

取得极值，其中 $L, M \in C^1$。解决此类问题的办法是使用熟知的拉格朗日乘数法，将约束条件并入目标泛函，构造新的泛函

$$\tilde{J}(y) = \int_a^b [L(x, y(x), y'(x)) + \lambda(x) M(x, y(x), y'(x))] \mathrm{d}x,$$

其中 $\lambda : [a, b] \to \mathbb{R}$ 是拉格朗日乘子函数。然后对新的泛函使用欧拉-拉格朗日方程，即可得到极值必要条件。

积分约束问题

若约束条件为积分形式：

$$\int_a^b M(x, y(x), y'(x))\mathrm{d}x = C,$$

此时可令

$$\xi(x) = \int_a^x M(t, y(t), y'(t))\mathrm{d}t, x \in [a, b],$$

则有

$$\xi'(x) - M(x, y(x), y'(x)) = 0, x \in [a, b].$$

则上式以及边值条件 $\xi(a) = 0, \xi(b) = C$ 共同将原问题从积分约束转化为了非积分约束，从而可以用前面的方法进行求解。此时的新的泛函为

$$\tilde{J}(y, \xi) = \int_a^b [L(x, y(x), y'(x)) + \lambda(x)(\xi'(x) - M(x, y(x), y'(x)))]\mathrm{d}x.$$

积分约束问题

因此新的拉格朗日量为

$$\tilde{L}(x,y,y',\xi,\xi') = L(x,y(x),y'(x)) + \lambda(x)(\xi'(x) - M(x,y(x),y'(x))).$$

因此可以认为是函数 y 增加了一个维度 ξ，从而可以使用欧拉-拉格朗日方程进行求解：

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\tilde{L}_y = \tilde{L}_{y'} \\ \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\tilde{L}_\xi = \tilde{L}_{\xi'} \\ \xi' = M \end{cases}$$

其中第二条展开就是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\lambda(x) = 0,$$

即拉格朗日乘子函数是常数。最后结合 y 和 ξ 的边值条件即可求解。

例：固定端点等周问题

例

有边值条件 $y(-a)=y(a)=0(a>0)$，求长度为 $l>2a$ 的曲线 $y(x)$ 使其与 x 轴围成的面积最大化。

形式化表达问题：

$$
\begin{aligned}
&\max J(y)=\int_{-a}^{a} y(x)\mathrm{d}x \\
&\text{s.t.} \int_{-a}^{a}\sqrt{1+(y'(x))^2}\mathrm{d}x=l \\
&y(-a)=0, y(a)=0
\end{aligned}
$$

引入新变量

$$
\xi(x)=\int_{-a}^{x}\sqrt{1+(y'(t))^2}\mathrm{d}t, x\in[-a,a],
$$

则有 $\xi'(x)=\sqrt{1+(y'(x))^2}=0$，且 $\xi(-a)=0,\xi(a)=l$。

例：固定端点等周问题

构造拉格朗日量（其中 λ 已默认为常数）

$$\tilde{L}(x, y, y', \xi, \xi') = y(x) + \lambda\left(\xi'(x) - \sqrt{1 + (y'(x))^2}\right).$$

根据欧拉-拉格朗日方程，可以整理得到

$$x = \frac{\lambda y'(x)}{\sqrt{1 + (y'(x))^2}} + C_1,$$

其中 C_1 是待定常数。令 $y'(x) = \tan\alpha$，则有

$$x = \frac{\lambda \tan\alpha}{\sqrt{1 + \tan^2\alpha}} + C_1 = \lambda \sin\alpha + C_1.$$

进一步有 $\mathrm{d}y = \tan\alpha \mathrm{d}x = \lambda \sin\alpha \mathrm{d}\alpha$，故

$$y = -\lambda \cos\alpha + C_2,$$

其中 C_2 是待定常数。

例：固定端点等周问题

综上可以得到

$$(x-C_1)^2+(y-C_2)^2=\lambda^2.$$

将边值条件 $y(-a)=y(a)=0$ 代入上式，可以解得

$$C_1=0, C_2=\pm\sqrt{\lambda^2-a^2}.$$

进一步可以对 $\xi(a)=l$ 做变量替换

$$\begin{aligned} l=\xi(a)&=\int_{-a}^{a}\sqrt{1+\left(y'(x)\right)^2}\mathrm{d}x=\int_{-\arcsin(a/\lambda)}^{\arcsin(a/\lambda)}\lambda\mathrm{d}\alpha \\ &=2\lambda\arcsin(a/\lambda). \end{aligned}$$

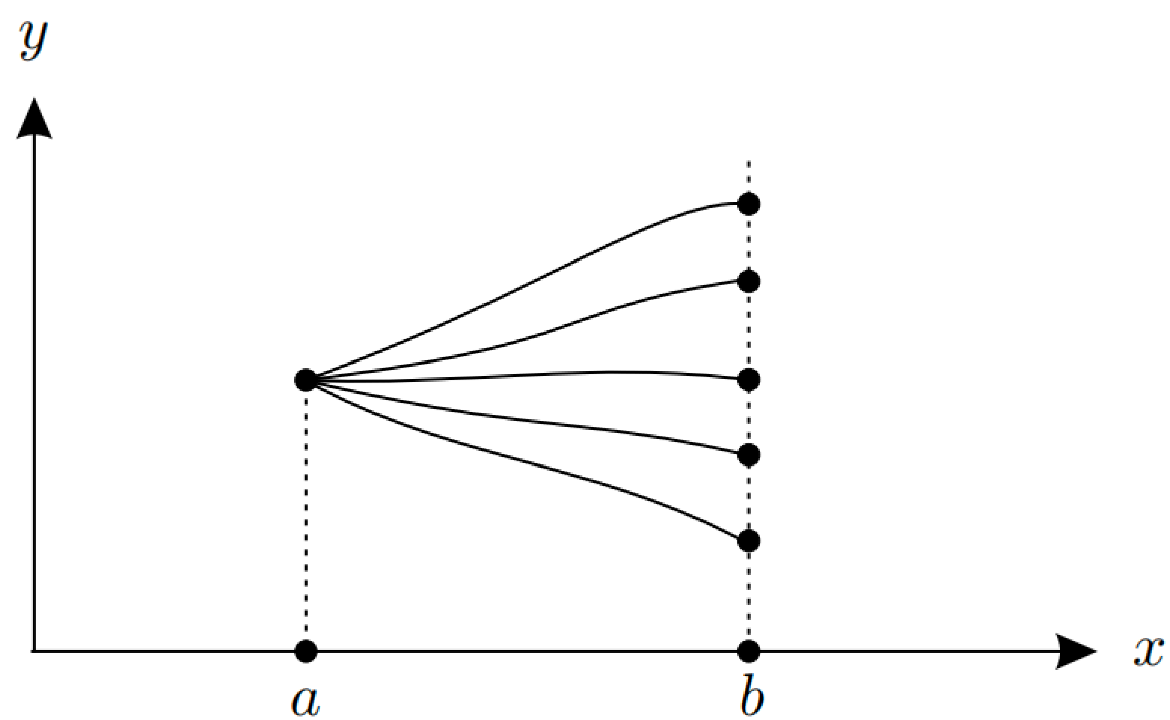
由此可以解得 λ，从而得到最终解

$$x^2+\left(y\pm\sqrt{\lambda^2-a^2}\right)^2=\lambda^2.$$

终端垂直约束

上述等周问题显然是“阉割版”的，因为实际上狄多女王并没有将终点固定在某一点上，而是让终点在海岸线上自由移动，这就需要扩展之前有两个终端约束的情况，变为只有一个终端约束的情况。

首先考虑一个简单的情况，即终端约束在 $x = b$ 处，如下图所示：



终端垂直约束

在这一情况下，扰动 $\eta(a)=0$，但 $\eta(b)$ 不再有约束，因此在推导欧拉-拉格朗日方程时，分部积分后得到的结果应当写为

$$\begin{aligned}\delta J\big|_y(\eta) = &\int_a^b \left[L_y(x, y(x), y'(x)) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} L_z(x, y(x), y'(x)) \right] \eta(x) \mathrm{d}x \\ &+ L_z(b, y(b), y'(b)) \eta(b).\end{aligned}$$

由于此时 $\eta(b)=0$ 的扰动仍然是允许的，故欧拉-拉格朗日方程仍然是必要条件。将欧拉-拉格朗日方程代回上式，有

$$L_z(b, y(b), y'(b)) \eta(b) = 0.$$

由于 $\eta(b)$ 是任意的，故有

$$L_z(b, y(b), y'(b)) = 0.$$

因此此时最优解还应满足上述边界条件，我们可以认为这是对失去的边值条件 $y(b)=y_1$ 的替代补充。

例：推广的两点之间线段最短

考虑从点 $A(a, y_0)$ 到直线 $x = b$ 的最短路径问题。此时拉格朗日量仍然为

$$L(x, y, y') = \sqrt{1 + (y'(x))^2},$$

故此前的欧拉-拉格朗日方程仍然成立，解得 $y(x)$ 是一条直线。进一步地，最优解还应满足边界条件

$$L_z(b, y(b), y'(b)) = \frac{y'(b)}{\sqrt{1 + (y'(b))^2}} = 0,$$

即 $y'(b) = 0$，故最优路径为从点 A 到直线 $x = b$ 上点 (b, y_0) 的水平线段。

终端一般约束

考虑更一般的终端约束情况，此时目标泛函为

$$J(y)=\int_a^{x_f} L(x,y(x),y'(x))\mathrm{d}x,$$

其中 $y(a)=y(0)$ 固定，但 x_f 不固定，且终端 $y(x_f)=\varphi(x_f)$，其中 $\varphi:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ 是已知的 C^1 函数。

设 $y:[a,x_f]\to\mathbb{R}$ 为最优解，考虑扰动 $x_f+\alpha\Delta x$ 和 $y(x)+\alpha\eta(x)$，其中 $\eta(a)=0$ 且 $y(x_f+\alpha\Delta x)+\alpha\eta(x_f+\alpha\Delta x)=\varphi(x_f+\alpha\Delta x)$。则有

$$J(y+\alpha\eta)=\int_a^{x_f+\alpha\Delta x} L(x,y(x)+\alpha\eta(x),y'(x)+\alpha\eta'(x))\mathrm{d}x.$$

不难计算出此时的一阶变分等于

$$\begin{aligned}\delta J|_y(\eta,\Delta x)&=\int_a^{x_f}\left[L_y\eta+L_z\eta'\right]\mathrm{d}x+L(x_f,y(x_f),y'(x_f))\Delta x\\&=\int_a^{x_f}\left[L_y-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}L_z\right]\eta\mathrm{d}x+L_z\eta\,\Big|_a^{x_f}+L(x_f,y(x_f),y'(x_f))\Delta x.\end{aligned}$$

终端一般约束

由于 $\Delta x = 0$ 的扰动仍然是允许的，故欧拉-拉格朗日方程仍然成立。将欧拉-拉格朗日方程代回上式，并代入 $\eta(a) = 0$，有

$$L_z(x_f, y(x_f), y'(x_f))\eta(x_f) + L(x_f, y(x_f), y'(x_f))\Delta x = 0.$$

注意约束条件

$$y(x_f + \alpha\Delta x) + \alpha\eta(x_f + \alpha\Delta x) = \varphi(x_f + \alpha\Delta x),$$

两边对 α 求导并令 $\alpha = 0$，得到

$$y'(x_f)\Delta x + \eta(x_f) = \varphi'(x_f)\Delta x,$$

结合本页第一式和第三式，并根据 Δx 的任意性得到

$$L(x_f, y(x_f), y'(x_f)) + L_z(x_f, y(x_f), y'(x_f))(\varphi'(x_f) - y'(x_f)) = 0.$$

终端一般约束

这一条件称为**横截条件（transversality condition）**，它是终端约束不固定时的必要条件。

可以再次利用推广的两点之间距离问题理解横截条件的几何含义。此时

$$L(x,y,y')=\sqrt{1+\left(y'(x)\right)^2},$$

$$L_z(x,y,y')=\frac{y'(x)}{\sqrt{1+\left(y'(x)\right)^2}},$$

代入横截条件，得到

$$1+y'(x_f)\varphi'(x_f)=0.$$

即最短路径在终点处与约束曲线垂直相交。

例：等周问题

例

求解长度为 l 的曲线 $y(x)$，使其与 x 轴上区间 $[0,b]$（$b>0$ 且自由）围成的面积最大。已知 $y(0)=y(b)=0$，且假定 $l>b$。

首先与此前固定端点等周问题类似，可以对任意 b 解得最优 $y(x)$ 满足

$$(x-C_1)^2+(y-C_2)^2=\lambda^2.$$

代入边界条件 $y(0)=y(b)=0$，可以解得 λ 满足此前给出的表达式以及

$$C_1=b/2, C_2=\pm\sqrt{\lambda^2-b^2/4}.$$

接下来利用横截条件确定 b，不难得到横截条件为

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

由于 $\lambda \neq 0$，故 $y'(b) = \infty$，即最优曲线在终点处与 x 轴垂直相交，故必有 $\lambda^2 = b^2/4$，从而 $C_2 = 0$。

进一步由 $\xi(b) = l$ 的约束可以解得

$$b = \frac{2l}{\pi},$$

从而最终解为

$$\left(x - \frac{l}{\pi}\right)^2 + y^2 = \left(\frac{l}{\pi}\right)^2.$$

即以 $(l/\pi, 0)$ 为圆心，l/π 为半径的半圆，结论十分完美。