Быстрое автоматическое дифференцирование

Ю. Г. Евтушенко, М. А. Посыпкин, В. И. Зубов, А. Ф. Албу
Федеральный исследовательский центр
"Информатика и управление"
Вычислительный Центр им. А.А. Дородницына РАН

23 мая 2016 г.

Пусть векторы $x \in \mathbb{R}^m$ и $u \in \mathbb{R}^r$, дифференцируемая вектор-функция $G(x, u)$ задает отображение $G : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^r \to \mathbb{R}^m$ и определяет систему, состоящую из m нелинейных скалярных уравнений:

$$G(x, u) = 0_m, \tag{1}$$

где 0_s есть s-мерный нулевой вектор.
Введем квадратную матрицу Якоби порядка m:

$$G_{x^\top}(x, u) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial G^1(x, u)}{\partial x^1} & \dots & \dfrac{\partial G^1(x, u)}{\partial x^m} \\ \dfrac{\partial G^2(x, u)}{\partial x^1} & \dots & \dfrac{\partial G^2(x, u)}{\partial x^m} \\ \dots & \dots & \dots \\ \dfrac{\partial G^m(x, u)}{\partial x^1} & \dots & \dfrac{\partial G^m(x, u)}{\partial x^m} \end{bmatrix}.$$

При определенных предположениях из системы (1) можно определить функцию $x(u)$ (в общем случае многозначную) такую, что

$$G(x(u), u) = 0_m. \qquad (2)$$

Из условия (2) следует, что полная производная функции G по u должна быть равна нулю, т.е.

$$\frac{dG(x(u), u)}{du^\top} = G_{x^\top}(x(u), u) x_{u^\top}(u) + G_{u^\top}(x(u), u) \equiv 0_{mr}, \qquad (3)$$

где $0_{\gamma\beta}$ — прямоугольная нулевая матрица $\gamma \times \beta$. Транспонированная к ней матрица размера $r \times m$ обозначается $x^\top{}_u(u)$. В некоторых случаях удобно использовать формулу (3) в транспонированной форме; тогда

$$\frac{dG^\top(x(u), u)}{du} = x_u^\top(u) G_x^\top(x(u), u) + G_u^\top(x(u), u) = 0_{rm}. \qquad (4)$$

Теорема (о неявной функции)

Пусть выполнены следующие условия:
а) существует пара $[x_*, u_*] \in \mathbb{R}^{m \times r}$ *такая, что* $G(x_*, u_*) = 0_m$*;*
б) вектор-функция $G(x, u)$ *непрерывно дифференцируема в окрестности точки* $[x_*, u_*]$*;*
в) квадратная матрица $G_x^\top(x_*, u_*)$ *не вырождена.*
Тогда найдутся окрестности $\Gamma(x_*) \subset \mathbb{R}^m$ *и* $\Gamma(u_*) \subset \mathbb{R}^r$ *соответственно точек* x_* *и* u_* *такие, что на* $\Gamma(x_*) \times \Gamma(u_*)$ *система* (1) *однозначно определяет неявную дифференцируемую функцию* $x(u)$*, которая является решением системы* (1)*, и матрица первых производных* $x_{u^\top}(u)$ *удовлетворяет линейной системе* (3) *при всех* $u \in \Gamma(u_*)$*.*

Из невырожденности $G_x^\top(x_*, u_*)$ следует, что матрица $G_x^\top(x(u), u)$ также не вырождена в некоторой окрестности точки u_*, где система (3) однозначно разрешима:

$$x_{u^\top}(u) = -\left[G_{x^\top}(x(u), u)\right]^{-1} G_{u^\top}(x(u), u).$$

Определенную в теореме 1 функцию $x(u)$ подставим в функцию $W(x,u)$, в результате получим сложную функцию $\Omega(u) = W(x(u),u)$.

$$\nabla\Omega(u) = \frac{d\Omega(u)}{du} = W_u(x(u),u) -$$
$$\overbrace{G_u^\top(x(u),u)\left[G_x^\top(x(u),u)\right]^{-1}}^{-N(u)} \underbrace{\left[G_x^\top(x(u),u)\right]^{-1} W_x(x(u),u)}_{-p(u)}. \tag{5}$$

Если квадратная матрица $G_x^\top(x(u),u)$ не вырождена, то можно определить матрицу $N(u)$ и вектор $p(u)$ по формулам

$$\underbrace{N(u)}_{r\times m} = x_u^\top(u) = [x_{u^\top}(u)]^\top = \underbrace{-G_u^\top(x(u),u)}_{r\times m} \underbrace{\left[G_x^\top(x(u),u)\right]^{-1}}_{m\times m} \tag{6}$$

$$\underbrace{p(u)}_{m\times 1} = -\underbrace{\left[G_x^\top(x(u),u)\right]^{-1}}_{m\times m} \underbrace{W_x(x(u),u)}_{m\times 1}. \tag{7}$$

Используя эти представления, формулу (5) перепишем двумя различными способами:

$$\nabla\Omega(u) = W_u(x(u),u) + N(u)W_x(x(u),u), \qquad (8)$$

$$\nabla\Omega(u) = W_u(x(u),u) + G_u^\top(x(u),u)p(u). \qquad (9)$$

Здесь и ниже в ряде мест удобно объединять два вектора x и u в один вектор $z \in \mathbb{R}^n$, где $n = m + r$. Будем использовать следующие обозначения:

$$\begin{array}{c} z = \left[\begin{array}{c} x \\ u \end{array}\right], \quad z(u) = \left[\begin{array}{c} x(u) \\ u \end{array}\right], \\ \begin{array}{rclrcl} G(z) & = & G(x,u), & G_{z^\top} & = & [G_{x^\top} \mid G_{u^\top}], \\ W(z) & = & W(x,u), & W_{z^\top} & = & [W_{x^\top} \mid W_{u^\top}]. \end{array} \end{array} \qquad (10)$$

Задачу нелинейного программирования (НЛП) запишем в виде

$$W_* = \min_{z \in Z} W(z). \tag{11}$$

Для задачи (11) введем вектор множителей Лагранжа $p \in \mathbb{R}^m$ и функцию Лагранжа

$$L(z, p) = W(z) + p^\top G(z) = L(x, u, p). \tag{12}$$

Согласно принятым обозначениям можно записать

$$\begin{aligned} L_x(x(u), u, p) &= W_x(x(u), u) + G_x^\top(x(u), u)p(u), \\ L_u(x, u, p) &= W_u(x, u) + G_u^\top(x, u)p. \end{aligned}$$

Используя формулу (9), получим

$$\nabla\Omega(u_*) = W_u(x_*, u_*) + G_u^\top(x_*, u_*)p_* = L_u(x_*, u_*, p_*). \tag{13}$$

Вычисление первых производных в случае многошаговых процессов

В многошаговых задачах векторы x и u обычно состоят из наборов k векторов меньших размерностей, чем векторы x и u:

$$\begin{gathered} x^\top = [x_1^\top, x_2^\top, \ldots, x_k^\top], \quad u^\top = [u_1^\top, u_2^\top, \ldots, u_k^\top], \\ x_i \in \mathbb{R}^s, \quad u_i \in \mathbb{R}^\rho, \quad 1 \le i \le k, \\ x \in \mathbb{R}^m, \quad u \in \mathbb{R}^r, \quad m = ks, \quad r = k\rho. \end{gathered} \tag{14}$$

Пусть условие связи (1) расщеплено на k соотношений следующим образом:

$$x_j = F(j, X_j, U_j), \quad j \in D, \tag{15}$$

В многошаговых управляемых процессах обычно x_i — *фазовый вектор*, u_i — *вектор управлений*, x — *полный фазовый вектор*, $x \in \mathbb{R}^m$, u — *полный вектор управлений*, $u \in \mathbb{R}^r$.

Для каждого $j \in D$ введем два индексных набора Q_j и S_j, содержащие индексы всех векторов x_i и u_i, принадлежащих соответственно наборам X_j и U_j:

$$Q_j = \{i \in D : x_i \in X_j\}, \quad S_j = \{i \in D : u_i \in U_j\}.$$

На j-м шаге множество $\overline{Q}_j$ определяет номера всех тех шагов $i \in D$, для которых $x_j \in X_i$. Для каждого j введем сопряженные индексные наборы

$$\overline{Q}_j = \{i \in D : x_j \in X_i\}, \quad \overline{S}_j = \{i \in D : u_j \in U_i\}.$$

С помощью введенных индексных множеств можно записать

$$\begin{array}{rclrcl} X_j & = & \{x_i : i \in Q_j\}, & \overline{X}_j & = & \{x_i : i \in \overline{Q}_j\}, \\ U_j & = & \{u_i : i \in S_j\}, & \overline{U}_j & = & \{u_i : i \in \overline{S}_j\}. \end{array}$$

Функция Лагранжа для многошагового процесса (15) имеет вид

$$L(x,u,p) = W(x,u) + \sum_{j \in D} [F^\top(j, X_j, U_j) - x_j^\top] p_j. \qquad (16)$$

Вместо функции Лагранжа удобно ввести новую вспомогательную функцию

$$E(x,u,p) = W(x,u) + \sum_{j \in D} F^\top(j, X_j, U_j) p_j. \qquad (17)$$

Тогда соотношения (13) представимы в следующей *канонической форме*, весьма удобной для запоминания и расчетов:

$$x_i = E_{p_i}(x,u,p) = F(i, X_i, U_i), \qquad (18)$$

$$p_i = E_{x_i}(x,u,p) = W_{x_i}(x,u) + \sum_{j \in \overline{Q}_i} F_{x_i}^\top(j, X_j, U_j) p_j, \qquad (19)$$

$$\frac{d\Omega(u)}{du_i} = E_{u_i}(x,u,p) = W_{u_i}(x,u) + \sum_{j \in \overline{S}_i} F_{u_i}^\top(j, X_j, U_j) p_j. \qquad (20)$$

Вектор x_i представляет собой *выходной вектор*, если индексное множество $\overline{Q}_i$ пусто. В этом случае согласно (19) вектор p_i явно не зависит от других компонент вектора p и выражается только через x и u по формуле

$$p_i = W_{x_i}(x, u). \tag{21}$$

На последнем шаге явного процесса (15) мы получаем вектор x_k, который не принадлежит ни одному из множеств X_j, $1 \leq j \leq k$; это означает, что x_k — выходной вектор процесса (15). Из формулы (21) имеем

$$p_k = W_{x_k}(x, u). \tag{22}$$

Теорема

Предположим, что:
1) все отображения $F(j, X_j, U_j), \quad 1 \le j \le k$, *и скалярная функция* W *дифференцируемы по* x *и* u;
2) многошаговый процесс (15) явный.
Тогда все векторы p_i *однозначно определяются из рекуррентных соотношений (19) и (22) и*

$$p_i = \frac{\partial W^i(x_1, x_2, \ldots, x_i, u)}{\partial x_i}, \quad 1 \le i \le k. \tag{23}$$

Очевидно, что $Y_{ij} = 0_{ss}$ при $j < i$. Если $i = j$, то $Y_{ij} = -I_s$. Следовательно, Y_{ij} — верхняя треугольная матрица, и уравнение (19) может быть переписано следующим образом:

$$\begin{aligned} p_i \quad = \quad & W_{x_i}(x, u) + \sum_{j=i+1}^{k} F_{x_i}^{\top}(j, X_j, U_j) p_j = \\ & W_{x_i}(x, u) + \sum_{j \in \overline{Q}_j} F_{x_i}^{\top}(j, X_j, U_j) p_j, \quad 1 \le i \le k. \end{aligned} \tag{24}$$

Дифференцируя по x_i и применяя цепное правило дифференцирования, получим

$$\frac{\partial W^i(x_1, x_2, \ldots, x_i, u)}{\partial x_i} = W_{x_i}(x, u) + \sum_{j \in \overline{Q}_i} F_{x_i}^{\top}(j, X_j, U_j) \frac{\partial W^j(x, u)}{\partial x_j}, \quad 1 \le i \le k. \tag{25}$$

Обозначим

$$\bar{E}(x, u, p) = W(x, u) + \sum_{j \in D} \Phi^{\top}(j, X_j, U_j) p_j.$$

Тогда уравнения для определения импульсов и приведенный градиент функции W запишутся в виде

$$\frac{d\Omega(u)}{du_i} = \bar{E}_{u_i}(x, u, p) = \tag{26}$$

$$= W_{u_i}(x, u) + \sum_{j \in \bar{S}_i} \Phi_{u_i}^{\top}(j, X_j, U_j) p_j. \tag{27}$$

Введем вектор $x \in \mathbb{R}^k$ промежуточных (вспомогательных) фазовых переменных. Вычисление значения функции $f(u)$ будем представлять как k-шаговый вычислительный процесс

$$x_1 = F(1, X_1, U_1),\ x_2 = F(2, X_2, U_2), \ldots,\ x_k = F(k, X_k, U_k), \tag{28}$$

Введем скаляры $p_j \in \mathbb{R}^1$, $j \in D$, и определим функцию

$$E(x, p, u) = x_k + \sum_{j=1}^{k} F(j, X_j, U_j) p_j.$$

$$p_i = \sum_{j \in \overline{Q}_i} F_{x_i}^{\top}(j, X_j, U_j) p_j, \quad 1 \le i \le k-1, \quad p_k = 1, \tag{29}$$

$$\frac{\partial f(u)}{\partial u_i} = \sum_{j \in \overline{S}_i} F_{u_i}^{\top}(j, X_j, U_j) p_j, \quad 1 \le i \le k. \tag{30}$$

Теорема

Предположим, что:
1) $f(u)$ – скалярная элементарная дифференцируемая функция векторного аргумента $u \in \mathbb{R}^r$;
2) арифметические действия и вычисление основных элементарных функций и их производных производятся точно;
3) время вычисления производной каждой основной элементарной функции не больше, чем удвоенное время вычисления значения этой функции.
Тогда градиент функции f, найденный по формулам (29) *и* (30)*, определяется точно и отношение $R = T_g/T_0$ ограничено сверху числом* 3*.*

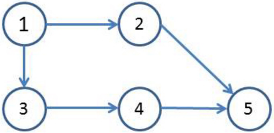
Пример. *Рассмотрим простейшую элементарную функцию*

$$f(u) = e^{u_1+u_2} + \sin(u_1+u_2)^2.$$

Вычисление значения этой функции представляем как многошаговый процесс вида

$$x_j = F(j, X_j, U_j)$$

$$\begin{array}{lll}
x_1 = u_1 + u_2, & X_1 = \varnothing, & U_1 = [u_1, u_2] \\
x_2 = e^{x_1}, & X_2 = [x_1], & U_2 = \varnothing \\
x_3 = (x_1)^2, & X_3 = [x_1], & U_3 = \varnothing \\
x_4 = \sin x_3, & X_4 = [x_3], & U_4 = \varnothing \\
x_5 = x_2 + x_4, & X_5 = [x_2, x_4], & U_5 = \varnothing
\end{array}$$



информационный x-граф

$$W = x_5 = f(u).$$

Введем множители Лагранжа $p_1, \dots, p_5$ и определим функцию

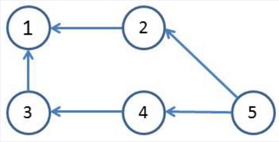
$E(x, u, p) = x_5 + p_1(u_1 + u_2) + p_2 e^{x_1} + p_3(x_1)^2 + p_4 \sin x_3 + p_5(x_2 + x_4)$.

Согласно

$$p_i = W_{x_i}(x, u) + \sum_{j \in \overline{Q}_i} F_{x_i}^{\top}(j, X_j, U_j) p_j$$

множители Лагранжа находятся из следующих условий:

$$\begin{aligned} p_1 &= p_2 e^{x_1} + 2p_3 x_1, \\ p_2 &= p_5, \\ p_3 &= p_4 \cos x_3, \\ p_4 &= p_5, \\ p_5 &= 1. \end{aligned}$$



расчетный p-граф

Поэтому формула (30) приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned} E_{u_1} = p_1 = e^{u_1+u_2} + 2(u_1 + u_2) cos(u_1 + u_2)^2 = \\ = \partial f(u)/\partial u_1 = \partial f(u)/\partial u_2. \end{aligned} \quad (31)$$

Пусть управляемый процесс описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\dot{x} = f(t, x, u), \qquad T_1 \leq t \leq T_2, \tag{32}$$

где фазовый вектор $x \in \mathbb{R}^n$, вектор управления $u \in \mathbb{R}^r$. Рассмотрим задачу Майера об отыскании на фиксированном интервале движения $\widetilde{T}$ допустимого кусочно-непрерывного управления $u(t) \in U \subset \mathbb{R}^r$, доставляющего минимум терминальному функционалу

$$J = \min_{u \in U} W(x(T_2)), \tag{33}$$

где $W(x)$ – заданная функция.

Введем вектор $p \in \mathbb{R}^n$, удовлетворяющий системе обыкновенных дифференциальных уравнений (сопряженной системе)

$$\dot{p} = -f_x^\top(t, x, u)p \tag{34}$$

с граничным условием

$$p(T_2) = W_x(x(T_2)), \tag{35}$$

где $p(t)$ – импульс (сопряженный вектор). Определим функцию Понтрягина

$$H(t, x, u, p) = \langle f(t, x, u), p \rangle.$$

В случае, когда f не зависит явно от t (система автономная), будем писать $H(x, u, p) = \langle f(x, u), p \rangle$. В подробной форме записи приведенные формулы имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} p^i(t) &= -\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f^j(t, x, u)}{\partial x^i} p^j(t), \qquad 1 \leqslant i \leqslant n, \\ H(t, x, u, p) &= \sum_{j=1}^{n} f^j(t, x, u) p^j. \end{aligned}$$

Теорема (принцип максимума Понтрягина)

Пусть вектор-функция $f(t,x,u)$ непрерывна по совокупности аргументов и непрерывно дифференцируема по x на $\widetilde{T}\times\mathbb{R}^n\times U$, функция $W(x)$ непрерывно дифференцируема по x на $\mathbb{R}^m$. Пусть $u_*(t)$ — оптимальное управление в задаче (33), $x_*(t)$, $p_*(t)$ — соответствующие траектория и импульс, удовлетворяющие дифференциальным уравнениям (32) и (34) и краевым условиям. Тогда при всех $t\in\widetilde{T}'$ выполнены следующие условия:
1) в точке $u_*(t)$ достигается минимум функции $H(t,x_*(t),w,p_*(t))$ по $w\in U$, т.е.

$$u_*(t)\in \operatorname{Arg}\min_{w\in U} H(t,x_*(t),w,p_*(t)); \tag{36}$$

2) если система (32) автономная, то функция $H(x_*(t),u_*(t),p_*(t))$ принимает постоянное значение при всех $t\in\widetilde{T}$.

Рассмотрим дискретный вариант системы. Воспользуемся простейшей схемой интегрирования по методу Эйлера

$$x_{i+1} = x_i + hf(t_i, x_i, u_i). \tag{37}$$

Если вектор-функция f и функция W дифференцируемы по x, то

$$p_i = p_{i+1} + hf^{\top}{}_x(t_i, x_i, u_i)p_{i+1}, \quad p_k = W_x(x_k), \quad 1 \leq i \leq k-1.$$

Если функция f дифференцируема по u, то по правилу дифференцирования сложной функции находим

$$\frac{d\widetilde{W}(x_{i+1}(u_i))}{du_i} = \frac{\partial x_{i+1}^{\top}}{\partial u_i} \frac{d\widetilde{W}(x_{i+1}(u_i))}{dx_{i+1}} =$$
$$= hf^{\top}{}_{u_i}(t_i, x_i, u_i)p_{i+1}(x_{i+1}(u_i)) = H_{u_i}(t_i, x_i, u_i, p_{i+1}(x_{i+1})),$$

где $H(t_i, x_i, u_i, p_{i+1}) = hf^{\top}(t_i, x_i, u_i)p_{i+1}$.

Пусть управляемый процесс описывается системой (32). Составим сопряженную систему (34). Попытаемся на основе принципа максимума решить простейшую задачу Майера. При фиксированном наборе $x_*(t)$, $p_*(t)$ из условия (36) найдем точечно-множественное отображение

$$u_* = \theta(t, x_*(t), p_*(t)), \tag{38}$$

на котором функция Понтрягина $H(t, x_*, u, p_*)$ достигает минимума по $u \in U$. После подстановки (38) в уравнения (32) и (34) получим систему из $2n$ обыкновенных дифференциальных уравнений для n-мерных вектор-функций $x_*(t)$, $p_*(t)$:

$$\begin{aligned} \dot{x}_* &= f(t, x_*, \theta(x_*, t, p_*)), \\ \dot{p}_* &= -f^{\top}{}_x(t, x_*, \theta(x_*, t, p_*))p_*. \end{aligned} \tag{39}$$

Для этой системы n условий задано в начальный момент T_1 (на левом конце траектории) и n условий в конечный момент T_2 (на правом конце траектории):

$$x_*(T_1) = x_1, \qquad p_*(T_2) = W_x(x_*(T_2)). \tag{40}$$

Таким образом, решение исходной задачи формально сведено к решению краевой задачи для системы из $2n$ дифференциальных уравнений. Если решить эту задачу, т.е. определить функции $x_*(t)$, $p_*(t)$, удовлетворяющие системе (39) и условиям (40), то оптимальное управление $u_*(t)$ для исходной задачи должно находиться среди функций, представимых в виде (38).

Базисная задача ОУ может быть записана следующим образом. Управляемый процесс описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x, u, \xi), \quad T_1 \le t \le T_2, \tag{41}$$

где вектор состояния $x \in \mathbb{R}^n$, управлением является кусочно-непрерывная функция u, принимающая значения из допустимого множества $U \subset \mathbb{R}^r$.

Начальное условие в (41) фиксировано, поэтому $x(t)$ будет обозначать решение дифференциального уравнения (41) с начальным условием $x(T_1) = x_1$. Считаем, что U — компактное множество в пространстве $\mathbb{R}^r$. Вектор параметров $\xi \in V \subset \mathbb{R}^s$. Если выбор T_1, T_2 и начального состояния x_1 следует оптимизировать, то мы включаем их в вектор ξ.
Задача ставится следующим образом: найти управление $u(t) \in U$ и вектор параметров $\xi \in V$, которые минимизируют функционал $W(x(T_2), \xi)$, при наличии "смешанных" ограничений на векторы состояния, управления и вектор параметров:

$$g(t, x(t), u(t), \xi) = 0_\alpha, \quad q(t, x(t), u(t), \xi) \leq 0_\beta, \quad T_1 \leq t \leq T_2.$$

От непрерывной системы (41) перейдем к дискретной системе. Воспользуемся самой простой дискретной аппроксимацией системы (41), которая задается формулой Эйлера

$$x_{i+1} = x_i + h_i f(t_i, x_i, u_i, \xi) = F(t_i, x_i, u_i, \xi), \qquad (42)$$

где $\sum_{i=1}^{k-1} h_i = T_2 - T_1,\ 0 < h_i,\ t_1 = T_1,\ t_k = T_2,\ t_{i+1} = t_i + h_i,$ $1 \le i \le k-1$. При этом непрерывное управление $u(t)$ заменяется кусочно-постоянным, ограничения вдоль траектории (42) учитываются только в точках дискретизации:

$$g(t_i, x_i, u_i, \xi) = 0_\alpha, \qquad q(t_i, x_i, u_i, \xi) \le 0_\beta, \qquad 1 \le i \le k \quad (43)$$

и в конечный момент движения (43).

Полный фазовый вектор $x^\top = [x_1^\top, \ldots, x_k^\top]$ является функцией полного вектора управлений $u^\top = [u^\top{}_1, u^\top{}_2, \ldots, u^\top{}_{k-1}]$ и вектора параметров ξ. Эту зависимость, определяемую формулой (42), обозначим через $x(u, \xi)$. Функционал исходной задачи $W(x(T_2))$ заменяется функцией $W(x_k)$, где x_k есть сложная функция u и ξ. Каждому i-му шагу процесса (42) ставим в соответствие вектор p_i. Вспомогательная функция E имеет вид

$$E(t, x, u, \xi, p) = W(x_k, \xi) + \sum_{i=1}^{k-1} F^\top(t_i, x_i, u_i, \xi) p_{i+1}.$$

Дискретный вариант задачи состоит в минимизации $W(x_k, \xi)$ по $u_i \in U$, $1 \le i < k$, и $\xi \in V$ при наличии смешанных ограничений (43). Чтобы применить градиентные методы НЛП, необходимо найти формулы дифференцирования целевой функции. Находим, что все векторы $p_i \in \mathbb{R}^n$ и производные сложной функции $\Omega(u, \xi) = W(x_k, \xi)$ вычисляются по формулам

$$\begin{cases} p_i = p_{i+1} + h_i {f^\top}_{x_i}(t_i, x_i, u_i, \xi) p_{i+1}, \\ p_k = W_{x_k}(x_k, \xi), \quad 1 \le i \le k-1, \\ \dfrac{d\Omega}{du_i} = h_i {f^\top}_{u_i}(t_i, x_i, u_i, \xi) p_{i+1}, \quad 1 \le i \le k-1, \quad \dfrac{d\Omega}{du_k} = 0, \\ \dfrac{d\Omega}{d\xi} = W_\xi(x_k, \xi) + \sum\limits_{i=1}^{k-1} h_i {f^\top}_{\xi}(t_i, x_i, u_i, \xi) p_{i+1}. \end{cases} \tag{44}$$

Переходя к пределу при $h_i \to 0$, $k \to \infty$, из (44) находим, что функция $p\,(t)$ удовлетворяет следующим дифференциальным уравнениям:

$$\dot{p} = -f^{\top}{}_x(t, x, u, \xi)p, \quad p(T_2) = W_x\left(x(T_2), \xi\right). \qquad (45)$$

Мы приходим к *сопряженному уравнению*. Это уравнение интегрируется в обратном направлении от $t = T_2$ до $t = T_1$. Если система (41) жесткая, тогда целесообразно использовать неявные схемы интегрирования. Например, применение неявной схемы Эйлера приводит к формуле

$$x_i = x_{i-1} + h_i f(t_i, x_i, u_i, \xi), \quad 2 \le i \le k. \qquad (46)$$

Здесь приходится решать систему нелинейных уравнений на каждом шаге интегрирования, тем не менее шаг интегрирования h_i в (46) можно брать много больший, чем в (42). Из (19) получаются следующие дискретные сопряженные уравнения:

$$\begin{aligned} p_i &= p_{i+1} + h_i f^{\top}{}_{x_i}(t_i, x_i, u_i, \xi) p_i, \quad 2 \leq i \leq k-1, \\ p_k &= W_{x_k}(x_k, \xi) + h_k f^{\top}{}_{x_k}(t_k, x_k, u_k, \xi) p_k. \end{aligned}$$

Следовательно, все векторы p_i находятся из неявной системы линейных алгебраических уравнений, и формулы для вычисления градиента принимают вид

$$\frac{d\Omega}{du_i} = h_i f^{\top}{}_{u_i}(t_i, x_i, u_i, \xi) p_i, \quad 2 \leq i \leq k, \quad \frac{d\Omega}{du_1} = 0.$$

В пределе при $h_i \to 0$, $k \to \infty$ мы получаем ту же сопряженную систему, что и (45).

В некоторых публикациях градиенты находятся из необходимых условий оптимальности путем дискретизации исходной и сопряженной систем. В этом случае, однако, могут возникнуть некоторые погрешности. Действительно, если мы одновременно по схеме Эйлера дискретизируем системы обыкновенных дифференциальных уравнений (41) и (45), то получим (42) и

$$p_{i+1} = p_i - h_i f^{\top}{}_{x_i}(t_i, x_i, u_i, \xi) p_i, \quad 1 \le i \le k-1.$$

Тогда искомая производная будет иметь вид

$$\frac{d\Omega}{du_i} = h_i f^{\top}{}_{u_i}(t_i, x_i, u_i, \xi) p_i.$$

Эти выражения не совпадают с (44) и, следовательно, градиент, полученный по этим формулам, неверен. Если шаг интегрирования h_i мал, то различие между этим и точным выражением (44) является величиной порядка $O(h_i^2)$. Но погрешность в вычислении градиента нежелательна, особенно в случаях, когда используются чувствительные алгоритмы минимизации или когда величина шага h_i недостаточно мала.