วารสารวิชาการด้านวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี
ปีที่ 3 ฉบับที่ 1 มกราคม – ธันวาคม 2563

Journal of Science and Technology
Vol. 3 No. 1 January – December 2020

# อนุพันธ์เชิงอัตโนมัติ

# Automatic Differentiation

พีระพงษ์ พรมจันทร์[1]

Perapong Promchant[1]

Received: April 19, 2020
Revised: May 28, 2020
Accepted: June 27, 2020

**บทคัดย่อ**

การหาอนุพันธ์ของฟังก์ชันนั้นในศาสตร์ทางด้านคณิตศาสตร์สามารถหาค่าได้ตามนิยามด้วยสูตรที่เรียกว่า Symbolic Differentiation และการคำนวณประมาณค่าของอนุพันธ์เชิงตัวเลขใช้วิธีการที่เรียกว่า Numerical Differentiation แต่การเขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อสร้างซอฟต์แวร์ประยุกต์ที่ต้องมีการหาค่าอนุพันธ์มาเกี่ยวข้องนั้นไม่สามารถหาอนุพันธ์โดยใช้สูตรและนิยามทางด้านอนุพันธ์มาคำนวณในขั้นตอนของการประมวลผลโปรแกรมได้ จึงมีวิธีการคำนวณหาค่าอนุพันธ์ที่เรียกว่า การหาอนุพันธ์เชิงอัตโนมัติ (Automatic Differentiation) ซึ่งสามารถเขียนเป็นขั้นตอนวิธีเพื่อเขียนเป็นคำสั่งตามไวยากรณ์ของภาษาคอมพิวเตอร์ประมาณค่าของอนุพันธ์ในโปรแกรมที่สร้างขึ้นได้ ทำให้หลักการของการหาอนุพันธ์เชิงอัตโนมัติมีประโยชน์มากต่อการเรียนรู้ในศาสตร์ของวิทยาศาสตร์ด้านการคำนวณโดยใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ประมาณค่า

*คำสำคัญ* : การประมาณค่าของอนุพันธ์เชิงตัวเลข ขั้นตอนวิธี การหาอนุพันธ์เชิงอัตโนมัติ

1 ผู้ช่วยศาสตราจารย์ กองวิชาคณิตศาสตร์ ฝ่ายศึกษา โรงเรียนนายเรือ
Assistant Professor, Department of Mathematics, Education Branch, Royal Thai Naval Academy
Email: perapongp@hotmail.com

**Abstract**

Finding the derivative of function in mathematical science can be determined by definition. Formula called Symbolic differentiation and calculating the estimation of numerical derivatives using a method called Numerical differentiation but computer programming to create application software that requires the determination of derivative values cannot be calculated by using derivative formulas to calculate in the process of program processing. Therefore, there is a way to find the calculation of the derivative called Automatic Differentiation, which can be written as an algorithm to write as a command, according to the syntax of a computer language. Making the principle of automatic derivative is very useful for learning in the science of computational science using computer program estimation.

***Keywords*:** Numerical Differentiation, Algorithm, Automatic Differentiation

**บทนำ**

การหาอนุพันธ์ของฟังก์ชันในวิชาแคลคูลัสมีนิยามและสูตรการหาค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชันมูลฐานทุกฟังก์ชันที่ชัดเจน ส่วนการคำนวณการประมาณค่าของอนุพันธ์เชิงตัวเลขใช้วิธีการที่เรียกว่า Divided Difference ปัจจุบันนักคณิตศาสตร์ประยุกต์ได้คิดค้นการเขียนขั้นตอนวิธี เพื่อหาค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชันที่เรียกว่า อนุพันธ์เชิงอัตโนมัติ (Automatic Differentiation) [1] เหมาะสำหรับงานเขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อสร้างซอฟต์แวร์ประยุกต์ [2] ที่ต้องมีการหาค่าอนุพันธ์มาเกี่ยวข้อง ซึ่งเป็นวิธีการหาอนุพันธ์ในลักษณะของพีชคณิตเชิงคอมพิวเตอร์ คือแยกฟังก์ชันที่ซับซ้อนออกเป็นฟังก์ชันมูลฐาน และใช้หลักวิธีการของกฎลูกโซ่มาหาอนุพันธ์ของฟังก์ชันมูลฐาน กระทำซ้ำในลักษณะเดียวกันไปเรื่อยๆจนได้คำตอบ โดยขั้นตอนการหาค่าอนุพันธ์สามารถเขียนเป็นอัลกอริธึมในเชิงคอมพิวเตอร์ได้ และสามารถนำอัลกอริธึมนั้นมาเขียนเป็นไวยากรณ์ของภาษาได้ง่าย สะดวกต่อการพัฒนาโปรแกรมเพื่อประยุกต์กับงานที่ต้องใช้การหาค่าอนุพันธ์ คำนวณหาผลเฉลยทางด้านวิทยาศาสตร์หรือวิศวกรรมศาสตร์

**การหาอนุพันธ์เชิงอัตโนมัติ**

ฟังก์ชันมูลฐานคือฟังก์ชันทางคณิตศาสตร์ที่อยู่ในรูปของ ฟังก์ชันค่าคงที่ ฟังก์ชันกำลัง ฟังก์ชันเลขชี้กำลัง ฟังก์ชันลอการิทึม ฟังก์ชันตรีโกณมิติ ฟังก์ชันตรีโกณมิติผกผัน ฟังก์ชันไฮเพอร์โบลิก และฟังก์ชันไฮเพอร์โบลิกผกผัน ซึ่งฟังก์ชันมูลฐานเหล่านี้มีสูตรการหาค่าอนุพันธ์ตามนิยามทางคณิตศาสตร์ที่ชัดเจน ถ้าเป็นฟังก์ชันที่ซับซ้อนการหาค่าอนุพันธ์โดยตามสูตรของคณิตศาสตร์เป็นเรื่องยากสลับซับซ้อน แต่สามารถหาได้ด้วยวิธีการหาอนุพันธ์เชิงอัตโนมัติ (Automatic Differentiation) โดยอาศัยหลักการแยกฟังก์ชันที่ซับซ้อนออกเป็นฟังก์ชันมูลฐานที่มีสูตรคำนวณชัดเจน แล้วใช้กฎลูกโซ่มารวมค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชันมูลฐานที่แยกออกมา ได้ผลลัพธ์เป็นค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชันซับซ้อนที่ต้องการหาผลเฉลย ซึ่งเป็นค่าอนุพันธ์ที่แท้จริงไม่ใช่การประมาณค่า โดยมีวิธีการ

หาอนุพันธ์เชิงอัตโนมัติอยู่ 2 รูปแบบคือ Forward Mode และ Reverse Mode ดังจะได้กล่าวโดยละเอียดต่อไปนี้

1. วิธี Forward Mode

การหาค่าเกรเดียนต์ของฟังก์ชันที่มีตัวแปรอิสระ $n$ ตัว คือ $f\left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right)$ โดยที่ฟังก์ชัน $f$ ไม่เป็นฟังก์ชันมูลฐาน เริ่มต้นด้วยการแยกฟังก์ชันที่ซับซ้อน $f\left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right)$ ออกเป็นฟังก์ชันมูลฐาน โดยกำหนดฟังก์ชันมูลฐานแต่ละฟังก์ชันที่ประกอบเป็น $f$ ออกมาทีละฟังก์ชัน

เริ่มต้น กำหนดให้ $i = n+1$

กำหนดตัวแปรระหว่างกลาง (Intermediate Variable) $x_i$ ให้มีเท่ากับฟังก์ชันมูลฐานที่แยกออกมา นั่นคือ

$$x_i = f_i\left(x_k, k \in J_i\right)$$

เมื่อ $J_i$ คือเซตดรรชนีที่บอกว่า $x_k$ เป็นตัวแปรอิสระของฟังก์ชันมูลฐาน $f_i$

เมื่อแยกฟังก์ชันมูลฐานออกมาแล้ว ใช้กฎลูกโซ่หาค่าเกรเดียนต์ของฟังก์ชันมูลฐานนั้น

จะได้ว่า $\nabla x_i = \sum_{j \in J_i} \frac{\partial f_i\left(x_k, k \in J_i\right)}{\partial x_j} \nabla x_j$ เมื่อ $\nabla x_j = e_j$ คือเวกเตอร์หนึ่งหน่วยในแนวแกน $x_j$

กำหนดให้ $i = n+2$

กำหนดตัวแปรระหว่างกลาง $x_i$ ให้มีค่าเท่ากับฟังก์ชัน มูลฐาน นั่นคือ $x_i = f_i\left(x_k, k \in J_i\right)$

โดยกฎลูกโซ่ จะได้ว่า $\nabla x_i = \sum_{j \in J_i} \frac{\partial f_i\left(x_k, k \in J_i\right)}{\partial x_j} \nabla x_j$

เพิ่มค่า $i$ กระทำในลักษณะแยกฟังก์ชันมูลฐาน และ การบวก ลบ คูณ หาร ของตัวแปรระหว่างกลาง จนกระทั่งตัวแปรระหว่างกลางตัวสุดท้ายเท่ากับฟังก์ชัน ที่ต้องการหาค่าเกรเดียนต์ $f\left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right)$ สมมติว่าขั้นสุดท้าย กำหนดให้ $i = m$ เมื่อ $m$ คือจำนวนเต็มบวกที่ทำให้ตัวแปรระหว่างกลาง $x_m = f_m\left(x_k, k \in J_m\right) = f\left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right)$

ทำให้ สรุปได้ว่า ค่าเกรเดียนต์ของฟังก์ชัน $f\left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right)$ คือ

$$\nabla f = \nabla x_m = \sum_{j \in J_m} \frac{\partial f_m\left(x_k, k \in J_m\right)}{\partial x_j} \nabla x_j$$

ดังจะสรุปเป็นขั้นตอนวิธี (Algorithm) ได้ดังนี้

<u>ขั้นตอนวิธี Forward Mode</u>

กำหนดให้ $f:R^n \to R$ ต้องการหาค่าเกรเดียนต์ของ $f\left(x_1,x_2,...,x_n\right)$

<u>ขั้นเริ่มต้น</u> กำหนดให้ $i=n+1$

<u>ขั้นหลัก</u>

1. สมมติให้ $x_i$ เป็นตัวแปรระหว่างกลาง

2. แยก $f\left(x_1,x_2,...,x_n\right)$ ออกเป็นฟังก์ชันมูลฐาน

   โดยเลือกฟังก์ชันมูลฐานที่อยู่ในฟังก์ชัน $f$ หรือผลบวก ลบ คูณ หาร ของตัวแปรระหว่างกลางที่กำหนดให้ก่อนหน้านี้ กำหนดให้ $x_i = f_i\left(x_k, k \in J_i\right)$ เมื่อ $J_i$ คือเซตดรรชนีที่บอกว่า $x_k$ เป็นตัวแปรอิสระของฟังก์ชันมูลฐาน $f_i$ โดยกฎลูกโซ่ จะได้ว่า

$$\nabla x_i = \sum_{j \in J_i} \frac{\partial f_i\left(x_k, k \in J_i\right)}{\partial x_j} \nabla x_j$$

3. ตรวจสอบว่า

$$x_i = f_i\left(x_k, k \in J_i\right) = f\left(x_1,x_2,...,x_n\right) \text{หรือไม่}$$

4. ถ้า $x_i \neq f\left(x_1,x_2,...,x_n\right)$ แล้ว กำหนดให้ $i=i+1$ และ กลับไปขั้นตอนที่ 1 , 2

ถ้า $x_i = f\left(x_1,x_2,...,x_n\right)$ แล้ว กำหนดให้ $m=i$ จะได้ว่า $\nabla f = \nabla x_m$ แล้วหยุดการคำนวณ เพื่อให้การใช้ขั้นตอนวิธีคำนวณหาค่าเกรเดียนต์ของฟังก์ชันที่ซับซ้อนโดยวิธี Forward Mode ชัดเจนยิ่งขึ้นจะยกตัวอย่างประกอบดังนี้

กำหนดให้ $f\left(x_1,x_2\right)=\left(x_1+x_2\right)x_1+\sin\left(x_2\right)$

จะเห็นได้ว่า $f$ ไม่เป็นฟังก์ชันมูลฐาน จะทำการแยก $f$ ออกเป็นฟังก์ชันมูลฐานดังนี้

กำหนดตัวแปรระหว่างกลา $x_3 = f_3\left(x_1,x_2\right)=x_1+x_2$ เพราะฉะนั้น $J_3=\{1,2\}$ โดยกฎลูกโซ่ จะได้ว่า

$$\nabla x_3 = \frac{\partial f_3}{\partial x_1}\nabla x_1 + \frac{\partial f_3}{\partial x_2}\nabla x_2 = \nabla x_1 + \nabla x_2$$

กำหนดตัวแปรระหว่างกลาง $x_4 = f_4\left(x_1,x_3\right)=x_3x_1$ เพราะฉะนั้น $J_4=\{1,3\}$ โดยกฎลูกโซ่ จะได้ว่า

$$\nabla x_4 = \frac{\partial f_4}{\partial x_1}\nabla x_1 + \frac{\partial f_4}{\partial x_3}\nabla x_3 = x_3\nabla x_1 + x_1\nabla x_3$$

กำหนดตัวแปรระหว่างกลาง $x_5 = f_5(x_2) = \sin(x_2)$ เพราะฉะนั้น $J_5 = \{2\}$ โดยกฎลูกโซ่ จะได้ว่า

$$\nabla x_5 = \frac{\partial f_5}{\partial x_2}\nabla x_2 = \cos(x_2)\nabla x_2$$

กำหนดตัวแปรระหว่างกลา $x_6 = f_6(x_4, x_5) = x_4 + x_5$

เพราะฉะนั้น $J_6 = \{4,5\}$ โดยกฎลูกโซ่ จะได้ว่า $\nabla x_6 = \frac{\partial f_6}{\partial x_4}\nabla x_4 + \frac{\partial f_6}{\partial x_5}\nabla x_5 = \nabla x_4 + \nabla x_5$

จะเห็นได้ว่า $x_6 = f_6(x_4, x_5) = x_4 + x_5$

$= f(x_1, x_2) = (x_1 + x_2)x_1 + \sin(x_2)$ เท่ากับฟังก์ชันที่ต้องการหาค่าเกรเดียนต์แล้ว

เพราะฉะนั้น $\nabla f(x_1, x_2) = \nabla x_6 = \nabla x_4 + \nabla x_5$

$$\begin{aligned}
&= x_1\nabla x_3 + x_3\nabla x_1 + \cos(x_2)\nabla x_2 \\
&= x_1(\nabla x_1 + \nabla x_2) + x_3\nabla x_1 + \cos(x_2)\nabla x_2 \\
&= (x_1 + x_3)\nabla x_1 + (x_1 + \cos(x_2))\nabla x_2 \\
&= (2x_1 + x_2)\nabla x_1 + (x_1 + \cos(x_2))\nabla x_2 \\
&= (2x_1 + x_2)e_1 + (x_1 + \cos(x_2))e_2 \\
&= (2x_1 + x_2, x_1 + \cos(x_2))
\end{aligned}$$

2. วิธี Reverse Mode

ในการหาค่าเกรเดียนต์โดยวิธี Reverse Mode นั้น เป็นวิธีที่ใช้ขั้นตอนวิธีหาค่าเกรเดียนต์ของฟังก์ชัน $f(x_1, x_2, x_3, \ldots, x_n)$ และเป็นฟังก์ชันซับซ้อนที่ไม่เป็นฟังก์ชันมูลฐาน เริ่มต้นด้วยการแยกฟังก์ชันซับซ้อนที่ต้องการหาค่าเกรเดียนต์ออกเป็นฟังก์ชันมูลฐาน กำหนดตัวแปรระหว่างกลางให้มีค่าเท่ากับฟังก์ชันมูลฐานที่แยกออกมาหรือผลบวก ลบ คูณ หารของตัวแปรระหว่างกลางที่กำหนดไว้ก่อนหน้า กระทำการแยกไปเรื่อยๆ จนกระทั่งตัวแปรระหว่างกลางตัวสุดท้ายคือฟังก์ชันที่ต้องการหาค่าเกรเดียนต์ สามารถอธิบายในรูปของสัญลักษณ์ได้ดังนี้

กำหนดให้ $i=n+1$ กำหนดตัวแปรระหว่างกลาง $x_i$ ให้มีจำนวนเท่ากับฟังก์ชันมูลฐานที่แยกออกมา นั่นคือ $x_i = f_i\left(x_k, k \in J_i\right)$

เมื่อ $J_i$ คือเซตดรรชนีที่บอกว่า $x_k$ เป็นตัวแปรอิสระของฟังก์ชันมูลฐาน $f_i$

กำหนดให้ $i=n+2$ กำหนดตัวแปรระหว่างกลาง $x_i$ ให้มีจำนวนเท่ากับฟังก์ชันมูลฐานที่แยกออกมา นั่นคือ $x_i = f_i\left(x_k, k \in J_i\right)$

แล้วเพิ่มค่า $i$ กระทำในลักษณะแยกฟังก์ชันมูลฐาน และการบวก ลบ คูณ หาร ของตัวแปรระหว่างกลางไปเรื่อยๆ จนกระทั่ง ตัวแปรระหว่างกลางตัวสุดท้ายคือฟังก์ชันที่ต้องการหาค่าเกรเดียนต์ $f$

สมมติว่า $i=m$ ได้

$$x_i = f_i\left(x_k, k \in J_i\right) = f\left(x_1, x_2, ..., x_n\right)$$

นั่นคือ $x_m = f_m\left(x_k, k \in J_m\right) = f\left(x_1, x_2, ..., x_n\right)$

เมื่อแยกฟังก์ชันที่ซับซ้อนออกเป็นฟังก์ชันมูลฐานทั้งหมดแล้ว ขั้นตอนหาค่าเกรเดียนต์ โดยการกำหนดตัวแปรผูกพัน (Adjoint Variable)

$y_i, i=1,2,3,...,m$ คือค่าอนุพันธ์ย่อยของ $f\left(x_1, x_2, ..., x_n\right)$ เทียบกับ $x_i$

นั่นคือ $y_i = \dfrac{\partial f}{\partial x_i}$ ; $i=1,2,3,...,m$ จะได้ว่า $y_m = \dfrac{\partial f}{\partial x_m} = \dfrac{\partial x_m}{\partial x_m} = 1$

เพราะฉะนั้น เริ่มต้น กำหนดให้ $y_m = 1$ และ $y_i = 0$ สำหรับ $i=1,2,3,...,m-1$

คำนวณหาค่า $y_i$ ; $i=1,2,3,...,m$ โดยใช้กฎลูกโซ่

เริ่มต้น $i=m$

$$\text{จะได้} \quad y_j = y_j + \left[\frac{\partial f_m\left(x_k, k \in J_m\right)}{\partial x_j}\right] y_m \quad \text{สำหรับทุก} \quad j \in J_m$$

เริ่มต้น $i=m-1$

$$\text{จะได้} \quad y_j = y_j + \left[\frac{\partial f_{m-1}\left(x_k, k \in J_{m-1}\right)}{\partial x_j}\right] y_{m-1} \quad \text{สำหรับทุก} \quad j \in J_{m-1}$$

กระทำซ้ำไปเรื่อยๆ

เริ่มต้น $i=n+1$

จะได้ $y_j = y_j + \left[\dfrac{\partial f_{n+1}\left(x_k, k \in J_{n+1}\right)}{\partial x_j}\right] y_{n+1}$ สำหรับทุก $j \in J_{n+1}$

แล้วสรุปผลรวมค่าของ $y_i$ ; $i=1,2,3,...,m$

ผลลัพธ์สุดท้าย จะได้ค่าเกรเดียนต์ของฟังก์ชัน $f\left(x_1, x_2, ..., x_n\right)$ คือ

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, ...., \frac{\partial f}{\partial x_n}\right) = \left(y_1, y_2, ..., y_n\right)$$

ดังจะสรุปเป็นขั้นตอนวิธี(Algorithm) ได้ดังนี้

<u>ขั้นตอนวิธี Reverse Mode</u>

กำหนดให้ $f : R^n \to R$ ต้องการหาค่าเกรเดียนต์ของ $f\left(x_1, x_2, ..., x_n\right)$

<u>ขั้นเริ่มต้น</u> กำหนดให้ $i=n+1$

<u>ขั้นหลัก</u>

1. กำหนดให้ $x_i$ เป็นตัวแปรระหว่างกลาง

2. แยก $f\left(x_1, x_2, x_3, ..., x_n\right)$ ออกเป็นฟังก์ชันมูลฐาน โดยเลือกฟังก์ชันมูลฐานที่อยู่ในฟังก์ชัน $f$ หรือผลบวก ลบ คูณ หาร ของตัวแปรระหว่างกลางที่กำหนดให้ก่อนหน้านี้ กำหนดให้ $x_i = f_i\left(x_k, k \in J_i\right)$ เมื่อ $J_i$ คือเซตดรรชนีที่บอกว่า $x_k$ เป็นตัวแปรอิสระ

   ของฟังก์ชันมูลฐาน $f_i$

3. ตรวจสอบว่า $x_i = f_i\left(x_k, k \in J_i\right) = f\left(x_1, x_2, ..., x_n\right)$ หรือไม่

   ถ้าเป็นจริง แล้ว กำหนดให้ $m=i$ กระทำที่ขั้นตอนที่ 4

   ถ้าเป็นเท็จ แล้ว กำหนดให้ $i=i+1$ และกลับไปกระทำขั้นตอนที่ 2

4. กำหนดตัวแปรผูกพัน $y_i, i = 1,2,3,...,m$ เมื่อ $y_i$ คือค่าอนุพันธ์ย่อยของ $f$ เทียบกับ $x_i$

นั่นคือ $y_i = \dfrac{\partial f}{\partial x_i}$ กำหนดค่า $y_i = 0$ สำหรับ $i = 1,2,3,...,m-1$ และ $y_m = 1$

5. สำหรับค่า $i = m$ ลดลงจนถึง $n+1$

คำนวณหาค่า $y_j = y_j + \left[\dfrac{\partial f_i\left(x_k, k \in J_i\right)}{\partial x_j}\right] y_i$ สำหรับทุก $j \in J_i$

6. จะได้ $\nabla f = \left(y_1, y_2, ..., y_n\right)$

เพื่อให้การใช้ขั้นตอนวิธีคำนวณหาค่าเกรเดียนต์ของฟังก์ชันที่ซับซ้อนโดยวิธี Reverse Mode ชัดเจนยิ่งขึ้น มีตัวอย่างประกอบดังนี้

กำหนดให้ $f\left(x_1, x_2\right) = \left(x_1 + x_2\right)x_1 + \sin\left(x_2\right)$

จะเห็นได้ว่า $f$ ไม่เป็นฟังก์ชันมูลฐาน จะทำการแยก $f$ ออกเป็นฟังก์ชันมูลฐานดังนี้

กำหนดตัวแปรระหว่างกลาง $x_3 = f_3\left(x_1, x_2\right) = x_1 + x_2$ เพราะฉะนั้น $J_3 = \{1,2\}$

$x_4 = f_4\left(x_1, x_3\right) = x_3 x_1$ เพราะฉะนั้น $J_4 = \{1,3\}$

$x_5 = f_5\left(x_2\right) = \sin\left(x_2\right)$ เพราะฉะนั้น $J_5 = \{2\}$

$x_6 = f_6\left(x_4, x_5\right) = x_4 + x_5$ เพราะฉะนั้น $J_6 = \{4,5\}$

จะเห็นได้ว่า $x_6 = f_6\left(x_4, x_5\right) = f\left(x_1, x_2\right) = \left(x_1 + x_2\right)x_1 + \sin\left(x_2\right)$

ทำให้หยุดการแยก $f$ ออกเป็นฟังก์ชันมูลฐาน

กำหนดตัวแปรผูกพัน $y_i$ ; $i = 1,2,3,4,5,6$ เมื่อ $y_i$ คือค่าอนุพันธ์ย่อยของ $f$ เทียบกับ $x_i$

นั่นคือ $y_i = \dfrac{\partial f}{\partial x_i}$ เริ่มต้นกำหนดให้ $y_1 = y_2 = y_3 = y_4 = y_5 = 0$ และ $y_6 = 1$

คำนวณหาค่า $y_i$ ; $i = 1,2,3,4,5,6$ โดยใช้กฎลูกโซ่จากฟังก์ชันมูลฐานที่แยกออกมา

เริ่มต้น $i=6$ จาก $x_6 = f_6(x_4, x_5) = x_4 + x_5$ , เมื่อ $J_6 = \{4,5\}$

จะได้ $y_4 = y_4 + \left(\dfrac{\partial f_6}{\partial x_4}\right) y_6 = 1$ และ $y_5 = y_5 + \left(\dfrac{\partial f_6}{\partial x_5}\right) y_6 = 1$

เมื่อ $i=5$ จาก $x_5 = f_5(x_2) = \sin(x_2)$ , $J_5 = \{2\}$ จะได้ $y_2 = y_2 + \left(\dfrac{\partial f_5}{\partial x_2}\right) y_5 = \cos(x_2)$

เมื่อ $i=4$ จาก $x_4 = f_4(x_1, x_3) = x_3 x_1$ , $J_4 = \{1,3\}$

จะได้ $y_1 = y_1 + \left(\dfrac{\partial f_4}{\partial x_1}\right) y_4 = x_3$ และ $y_3 = y_3 + \left(\dfrac{\partial f_4}{\partial x_3}\right) y_4 = x_1$

เมื่อ $i=3$ จาก $x_3 = f_3(x_1, x_2) = x_1 + x_2$ , $J_3 = \{1,2\}$

จะได้ $y_1 = y_1 + \left(\dfrac{\partial f_3}{\partial x_1}\right) y_3 = x_3 + x_1$ และ $y_2 = y_2 + \left(\dfrac{\partial f_3}{\partial x_2}\right) y_3 = \cos(x_2) + x_1$

หยุดการคำนวณแล้วสรุปผล

จะได้ค่าเกรเดียนต์ของฟังก์ชัน $f(x_1, x_2)$ คือ

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}\right) = (y_1, y_2)$$

$$= (x_3 + x_1, \cos(x_2) + x_1)$$

$$= (2x_1 + x_2, \cos(x_2) + x_1)$$

**บทสรุป**

การหาอนุพันธ์เชิงอัตโนมัติ เป็นการหาอนุพันธ์ของฟังก์ชันที่ซับซ้อน โดยใช้หลักการแยกเป็นฟังก์ชันมูลฐาน และกำหนดตัวแปรระหว่างกลางเพื่อช่วยในการเก็บฟังก์ชันมูลฐานที่แยกออกมา และใช้กฎลูกโซ่หาผลรวมของอนุพันธ์ฟังก์ชันมูลฐาน รวมเป็นอนุพันธ์ของฟังก์ชันซับซ้อนที่ต้องการ ซึ่งเป็นอัลกอริทึมใหม่ แตกต่างจากการหาอนุพันธ์โดยใช้สูตรและนิยามทางคณิตศาสตร์ พร้อมทั้งสามารถพัฒนาเป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์ได้ง่ายตามขั้นตอนวิธีของการหาอนุพันธ์เชิงอัตโนมัติทั้งรูปแบบของ Forward Mode หรือ Reverse Mode ซึ่งเหมาะสำหรับงานด้านเขียนโปรแกรมคำนวณที่ประยุกต์ใช้การหาค่าอนุพันธ์ไปหาผลเฉลยของปัญหาด้านวิทยาศาสตร์ หรือ วิศวกรรมศาสตร์ [3][4]

## เอกสารอ้างอิง

[1] Griewank, Andreas; Walther, Andrea (2008). Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation. Other Titles in Applied Mathematics. (2nd ed.). SIAM.

[2] Neidinger, Richard (2010). Introduction to Automatic Differentiation and MATLAB Object-Oriented Programming. SIAM Review. 52 (3): 545-563. CiteSeerX 10.1.1.362.6580.

[3] Antoine, S. (2018). Modern Computational Finance: AAD and Parallel Simulations. Wiley.

[4] Li,X. and Zhong,w.(2001). Applying Extended Automatic Differentiation Technique to Process System Optimization Problem. Proceedings of the American Control Conference, pp. 25-27, America.