合成関数の高階微分の公式について

山中（やまなか） 健（たけし）

1．Faa' di Bruno の公式

二つの関数 $f(y)$，$g(x)$ が微分可能ならば，それらの合成関数 $f(g(x))$ も微分可能で，公式

(1.1) $\dfrac{d}{dx}f(g(x))=f'(g(x))g'(x)$

が成り立つことはよく知られている．もし f と g が2階まで微分可能ならば，公式 (1.1) の両辺を微分することにより，合成関数の2階微分の公式

(1.2) $$\frac{d^2}{dx^2}f(g(x)) = f''(g(x))[g'(x)]^2+f'(g(x))g''(x)$$

が得られる．このような操作を続けていけば，合成関数の3階微分，4階微分，…… の公式を次々に作ることができることは明らかである．しかし，この仕方では一般に合成関数の n 階導関数を表す式がどのようになるかという見通しをたてることは難しいであろう．合成関数の高階微分の公式というようなものは知られているものであろうか？ この問に対する答は幸い YES で，1855年に Faa' di Bruno という人が文献［6］の論文で与えたみごとな公式がある．これは大変有用な公式だと筆者は思うのであるが，世の中で案外知られていないようである．日本語の本では，一松 信教授の書かれた2巻ものの教科書「解析学序説」(文献［1］，上巻，219—221ページ）とか，同じ一松教授が共著者の一人になっている岩波書店の「数学公式」(文献［2］，第Ⅰ巻，6—7ページ）にはこの公式が紹介されているが，証明は載っていない．他に日本語の本でこの公式のことが出ているものを筆者は知らない．外国語の本でもこの公式が出ているものはあまりないのではなかろうか．いわゆる論文の類を除いては，わずかに Goursat という人の3巻ものの解析学の教科書 Cours d'analyse (文献［8］，第1巻，80ページ）にはこの公式が，それを証明せよという演習問題の形で，出ている（解答はなし）ことを筆者は知っているが，それ以外には知らない．

以上のような状況であるので，本誌にスペースをいただいたこの機会に，Faa' di Bruno のみごとなそして有用な公式をここで証明つきで紹介したい．実は Faa' di Bruno 自身はその公式について，それが成り立つことを主張しているだけで，証明は与えていない．それで，文献［6］以後，いろいろな人がいろいろな証明を発表した．本稿で述べる証明は大筋において1890年の Meyer という人の論文（文献［9］）あるいは1926年の Dederick という人の論文（文献［5］）の線に沿ったもので， Taylor の公式を使うものである．筆者は Meyer-Dederick の推論を幾分精密化し，その結果，公式そのものも元のものよりも少し精密化した形で与える．その精密化は筆者の専門（微分方程式）の研究上有用なことがあるのであるが，本稿ではその有用さを示す余裕がないのが残念である．

Faa' di Bruno の公式の証明は次節で与えるが，その前に本節でまず公式そのものを紹介しておこう．

$f(y)$ と $g(x)$ は n 階連続微分可能な関数とし，$g(x)$ の値は $f(y)$ の定義域に入るものとする．このとき，合成関数 $(f\circ g)(x)=f(g(x))$ の第 n 階導関数は下の公式で与えられる：

(1.3) $$(f\circ g)^{(n)}(x) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{(q)} n!\,f^{(i)}(g(x))\prod_{k=1}^{n-i+1}\frac{1}{q_k!}\left[\frac{g^{(k)}(x)}{k!}\right]^{q_k}$$

ただし，そこで $\sum\limits_{(q)}$ は

(1.4) $q_1+q_2+\cdots\cdots+q_{n-i+1}=i$,

(1.5) $1\cdot q_1+2\cdot q_2+\cdots\cdots+(n-i+1)q_{n-i+1}=n$

を満たすようなすべての非負整数の組

$$q=(q_1,\ q_2,\ \cdots\cdots,\ q_{n-i+1})$$

についての総和を表す．

上の (1.3) が精密化された Faa' di Bruno の公式である．(1.3) がもとの Faa' di Bruno の公式

と比べて精密化されている点は，もとの公式では $\prod_{k=1}^{n}$ となっていた所が（1.3）では $\prod_{k=1}^{n-i+1}$ となっている点である．もとのままでも誤りではないのであるが，ただ，もとの公式の証明をよく調べてみると，$n-i+1<k\leqq n$ を満たす q_k はすべて0でなければならないことがわかり，したがって，もとの公式は（1.3)のように書きかえられるのである．kの動く範囲を $1\leqq k\leqq n$ ではなくて $1\leqq k\leqq n-i+1$ と制限してもよいということは(1.2)やそれをもう一度微分して得られる3階微分の公式などを調べてみても納得がいくはずである．

2. Faa' di Bruno の公式の証明

推論を明確にするために，まず，二つの関数 f, g に対する仮定を前節に書いたよりもはっきりした形でしておこう．I と J は数直線上の開区間とする．f は I 上の n 階連続微分可能な実数値関数，g は J 上の，I の中に値をとる，n 階連続微分可能な関数とする．この節では f と g の合成関数を φ で表す．すなわち

$$\varphi(x)=f(g(x)) \qquad (x\in \mathrm{J})$$

である．

J の1点 a を任意にとり，以後固定する．そして

(2.1) $\qquad b=g(a)$

とおく．b は I の点である．I は開区間であるから，数 $r>0$ を十分小さくとれば

$$(b-r,\ b+r)\subset \mathrm{I}$$

となる．更に，J が開区間であることと g の連続性と（2.1）から，数 $s>0$ を十分小さくとって，

$$(a-s,\ a+s)\subset \mathrm{J}$$

かつ

(2.2) $\qquad |h|>s \implies |g(a+h)-b|<r$

となるようにすることができる．

関数 g は開区間（$a-s$, $a+s$）において n 階微分可能であるから，Taylor の定理により，$|h|<s$ を満たす任意の数 h に対して

(2.3) $\qquad g(a+h)$

$$=\sum_{j=0}^{n-1}\frac{g^{(j)}(a)}{j!}h^j+\frac{1}{n!}g^{(n)}(a+\theta h)h^n$$

という等式が成り立つ．ここで θ は $0<\theta<1$ を満たす（一般には h に依存する）或る数である．我々は都合により（2.3）を少し変形する．すなわち，

$$u(h)=\{g^{(n)}(a+\theta h)-g^{(n)}(a)\}/n!$$

とおけば，（2.3）は

(2.4) $\qquad g(a+h)-g(a)$

$$=\sum_{j=1}^{n}\frac{g^{(j)}(a)}{j!}h^j+u(h)h^n$$

と書き直される．そして n 階導関数 $g^{(n)}$ の連続性の仮定により，

(2.5) $\qquad h\longrightarrow 0$ のとき $u(h)\longrightarrow 0$

であることに注意する．同様に，$|k|<r$ を満たす任意の k に対して

(2.6) $\qquad f(b+k)-f(b)$

$$=\sum_{i=1}^{n}\frac{f^{(i)}(b)}{i!}k^i+v(k)k^n$$

という形の等式が成り立つ．ここで

$$v(k)=\{f^{(n)}(b+\rho k)-f^{(n)}(b)\}/n!$$

$$0<\rho<1$$

であり，

(2.7) $\qquad k\longrightarrow 0$ のとき $v(k)\longrightarrow 0$

が成り立つ．

（2.1）と（2.2）により，$|h|<s$ のとき

(2.8) $\qquad k=g(a+h)-g(a)$

とおけば，$|k|<r$ であるので，この k を上の(2.6)に代入することができる．代入した式を簡単に書くため，ここで臨時に

$$F_i=f^{(i)}(b)/i!,\quad G_j=g^{(j)}(a)/j!$$

と書くことにしよう．また（2.8）とおくと

$$f(b+k)-f(b)=\varphi(a+h)-\varphi(a)$$

となることに注意しよう．その上で（2.8）の k を（2.6）に代入すると，途中で二項定理を使って，

(2.9) $\qquad \varphi(a+h)-\varphi(a)$

$$\begin{aligned}&=\sum_{i=1}^{n}F_i\left\{\sum_{j=1}^{n}G_jh^j+u(h)h^n\right\}^i\\&\quad+v(k)\left\{\sum_{j=1}^{n}G_jh^j+u(h)h^n\right\}^n\\&=\sum_{i=1}^{n}F_i\left\{\sum_{j=1}^{n}G_jh^j\right\}^i\\&\quad+\sum_{i=1}^{n}F_i\sum_{p=1}^{i}{}_i\mathrm{C}_p\left\{\sum_{j=1}^{n}G_jh^j\right\}^{i-p}\{u(h)h^n\}^p\\&\quad+v(k)\left\{\sum_{j=1}^{n}G_jh^j+u(h)h^n\right\}^n\end{aligned}$$

と計算される．そこで

$$w_0(h)$$

$$\begin{aligned}&=\sum_{i=1}^{n}F_i\sum_{p=1}^{i}{}_i\mathrm{C}_p\left\{\sum_{j=1}^{n}G_jh^j\right\}^{i-p}\{u(h)h^n\}^{p-1}u(h)\\&\quad+v(k)\left\{\sum_{j=1}^{n}G_jh^{j-1}+u(h)h^{n-1}\right\}^n\end{aligned}$$

と書けば，(2.9) は

$$(2.10)\qquad \varphi(a+h)-\varphi(a)$$
$$=\sum_{i=1}^{n}F_i\left\{\sum_{j=1}^{n}G_jh^j\right\}^i+w_0(h)h^n$$

と書き直される．そして $w_0(h)$ の定義式と u, v の性質 (2.5)，(2.7) と，関数 g の連続性から導かれる，

$$h\longrightarrow 0 \text{ のとき } k=g(a+h)-g(a)\longrightarrow 0$$

という事実とから，

$$(2.11)\qquad h\longrightarrow 0 \text{ のとき } w_0(h)\longrightarrow 0$$

であることがわかる．

次に (2.10) の右辺を h の冪指数について整理することを考えよう．$1\leqq i\leqq r\leqq n$ とすると

$$\left\{\sum_{j=1}^{n}G_jh^j\right\}^i=h^i\left\{\sum_{j=1}^{n}G_jh^{j-1}\right\}^i$$
$$=h^i\left\{\sum_{j=1}^{r-i+1}G_jh^{j-1}+\sum_{j=r-i+2}^{n}G_jh^{j-1}\right\}^i$$
$$=\left\{\sum_{j=1}^{r-i+1}G_jh^j\right\}^i+h^{r+1}P_{ir}(h)$$

と書ける．ここで $P_{ir}(h)$ は h の或る多項式である．ゆえに，k の二つの多項式

$$\left\{\sum_{j=1}^{n}G_jh^j\right\}^i,\ \left\{\sum_{j=1}^{r-i+1}G_jh^j\right\}^i$$

における h^r の係数に等しい．ところが，$r-i+1$ 個の任意の非負整数の組

$$q=(q_1,\ q_2,\ \cdots\cdots,\ q_{r-i+1})$$

に対して

$$|q|=q_1+q_2+\cdots\cdots+q_{r-i+1},$$
$$\|q\|=q_1+2q_2+\cdots\cdots+(r-i+1)q_{r-i+1}$$

と書くことにして，いわゆる多項定理を使えば

$$\left\{\sum_{j=1}^{r-i+1}G_jh^j\right\}^i$$
$$=i\,!\sum_{|q|=i}\prod_{j=1}^{r-i+1}\frac{(G_jh^j)^{q_j}}{q_j!}$$
$$=i\,!\sum_{|q|=i}h^{\|q\|}\prod_{j=1}^{r-i+1}\frac{G_j^{q_j}}{q_j!}$$

と計算される．ゆえにこの多項式の中の h^r の係数は

$$i\,!\sum_{\substack{|q|=i\\ \|q\|=r}}\prod_{j=1}^{r-i+1}\frac{G_j^{q_j}}{q_j!}$$

に等しい．ただしこれは，前に断ったように，$1\leqq i\leqq r\leqq n$ のときの話である．$r<i$ のときは多項式 $\left\{\sum_{j=1}^{n}G_jh^j\right\}^i$ は h^i で割り切れるから，(2.10) の右辺の $i>r$ の部分からは h^r の項は現れない．

以上により，(2.10)の右辺を h の冪指数について整理すれば

$$(2.12)\qquad \varphi(a+h)-\varphi(a)$$
$$=\sum_{r=1}^{n}\left\{\sum_{i=1}^{r}F_ii\,!\sum_{\substack{|q|=i\\ \|q\|=r}}\prod_{j=1}^{r-i+1}\frac{G_j^{q_j}}{q_j!}\right\}h^r$$
$$+P(h)h^{n+1}+w_0(h)h^n$$

という形の等式が成り立つことがわかる．ここで $P(h)$ は h の或る多項式である．

一方，$\varphi(x)$ に対して直接 Taylor の定理を使うと，

$$(2.13)\qquad \varphi(a+h)-\varphi(a)$$
$$=\sum_{r=1}^{n}\frac{\varphi^{(r)}(a)}{r\,!}h^r+w_1(h)h^n,$$
$$w_1(h)=\{\varphi^{(n)}(a+\tau h)-\varphi^{(n)}(a)\}/n\,!,$$
$$0<\tau<1$$

と書ける．そして $w_1(h)$ は

$$(2.14)\qquad h\longrightarrow 0 \text{ のとき } w_1(h)\longrightarrow 0$$

を満たす．

(2.12) と (2.13) を比較すれば

$$(2.15)\qquad \sum_{r=1}^{n}h^n\left\{\frac{\varphi^{(r)}(a)}{r\,!}\right.$$
$$\left.-\sum_{i=1}^{r}F_ii\,!\sum_{\substack{|q|=i\\ \|q\|=r}}\prod_{j=1}^{r-i+1}\frac{G_j^{q_j}}{q_j\,!}\right\}$$
$$=\{P(h)h+w_0(h)-w_1(h)\}h^n$$

という関係が得られる．この関係と $w_0(h)$ 等の性質 ((2.11) 等) を考えれば，(2.15) の左辺の h^r の係数はすべて 0 に等しくなければならないことがわかる．ゆえに $r=1$, …, n に対して

$$(2.16)\qquad \varphi^{(r)}(a)$$
$$=r\,!\sum_{i=1}^{r}F_ii\,!\sum_{\substack{|q|=i\\ \|q\|=r}}\prod_{j=1}^{r-i+1}\frac{G_j^{q_j}}{q_j\,!}$$

という等式が成り立つことがわかった．ここで F_i と G_j の定義をふり返ってみれば，(2.16) において $r=n$ としたものが証明しようとしている Faa' di Bruno の公式 (1.3) で $x=a$ とおいたものに他ならないことは直ちにわかる．

3. 連続微分可能性の条件がゆるめられること

前節の証明では二つの関数 f, g の n 階導関数 $f^{(n)}$, $g^{(n)}$ が連続と仮定していたが，実はこの仮定は不要であることをここで注意しておこう．実際，前節では，"$g^{(n)}$ の連続性により"，$h\longrightarrow 0$ のとき $g^{(n)}(a+\theta h)-g^{(n)}(a)\longrightarrow 0$ となると論じたのであったが，Taylor の定理の証明を吟味してみれば，別

に $g^{(n)}$ の連続性を仮定しなくても，$g^{(n)}$ の存在さえ仮定すれば同じことが成り立つことがわかるはずである．$f^{(n)}$ についても $\varphi^{(n)}$ についても同じことが言える．前節の証明は，したがって，$f^{(n)}$，$g^{(n)}$の連続性を仮定しなくても実は全く不都合なく通用するもので，f，g が n 階まで微分可能であることを仮定しさえすれば Faa' di Bruno の公式（1.3）は成り立つと言ってよいのである．

4．ルーツを辿る

実を言うと，筆者自身も最近まで Faa' di Bruno の公式のことは全然知らなかったのである．ところが筆者の専門である微分方程式の研究上の必要から，合成関数の高階微分の公式が欲しいと思い，しばらくそれを探していた所，一人の物知りの友人が一松教授の「解析学序説」[1] と数学公式集 [2] のことを教えてくれたわけである．おかげで大変有能な Faa' di Bruno の公式というものをはじめて知り，非常に有難かったわけであるが，第1節でも述べたように，[1] にも [2] にも公式の証明は書いてないのが残念であった．筆者は証明も是非知りたいと思い，まず一松教授の本に引用されている Riordan という人の論文 [12] を調べてみた．しかし，その論文には公式の証明はなく，ただ公式中の n が8までの範囲での式の具体形が示されているだけであった．それでも [12] に引用されている Riordan 自身の一つ前の論文 [11] に当たってみると，そこにもまだ公式の証明は書かれていないが，[11] で引用されている Dederick という人の論文 [5] に至って，ようやく Faa' di Bruno の公式の一つの証明に行き当たることができた．Dederick は何をしたかというと，彼は $f(g(x))$ の形の合成関数の高階導関数を与える di Bruno のもとの公式を証明したのではなく，それよりも一般に，複数個の関数の関数，すなわち $f(g_1(x),\ \cdots,\ g_p(x))$ という形の合成関数の高階微分の公式を与えたのである．Dederick はもとの形の di Bruno の公式の一つの証明を与えた Meyer という人の論文 [9] の方法を改良して用いている．Meyer は $f(g(x))$ における f と g が解析的と仮定し，それらの冪級数展開を使って公式を証明した．Meyer はその証明のヒントを Dedekind から得たと述べている．Dederick は Meyer が無限冪級数を使った所を Taylor の公式（すなわち「剰余項」をもつ有限冪級数）で置きかえることができることを注意し，更に，公式自身を一般化して証明したわけである．本稿の第2節に書いた証明はこの Dederick の方法を少し精密化して行ったものである．

di Bruno の公式を証明するには他の方法もある．Dresden という人は論文 [7] において，公式(1.1)を直接逐次微分していくという方法で di Bruno の公式を証明した．筆者が Goursat の本の演習問題のことを知ったのはこの Dresden の論文を通じてである．$f(g(x))$ の n 階導関数が

$$\sum_{i=1}^{n} f^{(i)}(g(x))P_i(g'(x),\ \cdots,\ g^{(n)}(x)), \tag{4.1}$$

ただし $P_i(z_1,\ \cdots,\ z_n)$ は $z_1,\ \cdots,\ z_n$ の或る多項式

の形をしていると仮定し，f として特別な関数をとることにより，多項式 P_i の形を決定しようという試み（一種の未定係数法）もいくつか行われた．しかし，この未定係数法による計算もそう簡単ではないようである．Bell という人は論文 [4] 等において，di Bruno の公式を証明する目的ではなく，Hermite 多項式とか Appell 多項式とかいったものを一般化する目的で，$f(x)=e^x$ のときの（4.1）に現れる多項式 P_i を計算して，それを指数多項式と名付けた．Riordan は [11] において Bell の指数多項式と di Bruno の公式との関連に注意したわけである．それで，一松教授の本では合成関数の高階微分の公式が Bell の多項式の応用として紹介されている．

（1.3）に近い形で合成関数の高階微分の公式が最初に発表されたのは Faa' di Bruno の論文 [6] においてであるようである．しかしこの論文はたった2ページのもので，そこには証明は述べられていない．余談ながら，[6] は1855年という大変古いものなので，それを入手するのに筆者は大部苦労した．いろいろ探した結果，[6] が置いてあるのは日本国内では京大と北大だけだとわかり，筆者は京大に頼んでコピーを送って貰った次第である．

5．補遺．Schwatt の公式

本稿の下書きが大体出来上ったあとで，筆者は電話で一松教授から合成関数の高階微分の公式が出ている日本語の本がもう一つあることを教えていただいた．それは藤原 松三郎の古い教科書 [3] である．[3] の第1巻，280ページに，やはり演習問題の形

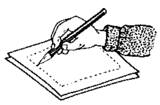
で，合成関数の高階微分の一つの公式がでている．しかし，これは di Bruno の公式とは異なるもので，

$$(f\circ g)^{(n)}(x) = \sum_{k=1}^{n}\frac{f^{(k)}(g)}{k!}\sum_{i=1}^{k}{}_k\mathrm{C}_i(-g)^{k-i}\frac{d^n}{dx^n}(g(x)^i)$$

という形をしている．藤原は出典として Perron [10] を挙げているが，Perron はその公式を Schwatt の公式と呼んでいる．Schwatt がその著書 [13] において与えたものらしい（[13] は筆者には入手不能）．Schwatt の公式も，di Bruno の公式と同様，Taylor の公式を使って証明することができる．Schwatt の公式は di Bruno の公式よりもむしろ簡潔な形をしており，よりよい公式とさえ言われるかも知れない．ただこの公式は g 自身ではなく，g を何乗かしたものの微分が現れる点で使いにくい所があり，また負の係数をもつ項が一時的に（というのは，他の正の係数をもつ項と打消し合うという意味）現れるという点で無駄があるとも言える．そういうわけで，「無駄のない」形をしている di Bruno の公式の価値は依然として失われないものと思われる．

6．謝辞

最後に，本稿を草するに当たり，直接・間接にいろいろお教え頂いた一松 信教授と，その前に一松教授の本の存在を筆者に教えて下さった「物知りの友人」こと上坂 洋司氏に心からの感謝の言葉を捧げたい．



参 考 文 献

[1] 一松 信：解析学序説，上，下．裳華房，昭和 37-38 年初版．

[2] 森口・宇田川・一松：岩波・数学公式，I-III，岩波書店，1956 年初版．

[3] 藤原 松三郎：微分積分学，1～2，内田老鶴圃；昭和 9 年初版．

[4] E. T. Bell：Exponential Polynomials. Annals of Math. v. 35 (1934), 258-277.

[5] L. S. Dederick：Successive derivatives of a function of several functions. Annales of Math. v. 27 (1926), 385-394.

[6] Faa' di Bruno：Sullo sviluppo delle funzioni. Annali di Scienze Matematiche e Fisiche di Tortolini, v. 6 (1855), 479-480.

[7] A. Dresden：The derivatives of composite functions. American Mathematical Monthly, v.50 (1943), 9-12.

[8] E. Goursat：Cours d'analyse mathematique, I-III. Gauthier-Villars, 1902 年初版．

[9] F. Meyer：Über algebraische Relationen zwischen den Entwickelungscoefficienten höherer Differential. Mathematische Ann., Bd. 36 (1890), 453-466.

[10] O. Perron：Über eine Formel des Herrn Schwatt. Mathematische Zeitschrift, Bd. 31 (1930), 159-160.

[11] J. Riordan：Derivatives of composite functions. Bulletin of American Mathematical Society, v. 52 (1946), 664-667.

[12] J. Riordan：Inversion formulas in normal variable mapping. Annales of Mathematical Statistics, v. 20 (1949), 417-425.

[13] I. J. Schwatt：An introduction to the Operations with series. University of Pensylvania.

（日本大学）