

条件付き極値 $\mathbf{x}$ が拘束条件 (制約条件) $F(\mathbf{x}) = 0$ を満たしながら動くとき、即ち、方程式 $F(\mathbf{x}) = 0$ の解 (全体の) 集合 $\{\mathbf{x} | F(\mathbf{x}) = 0\}$ 上で目的関数 $f(\mathbf{x})$ が (広義の) 極値を取るための条件を考える。

定理 (Lagrange(ラグランジュ) の (未定) 乗数法) $F(\mathbf{x}), f(\mathbf{x})$ を C^1 級関数とする。 $\mathbf{x}$ が条件 $F(\mathbf{x}) = 0$ を満たしながら動くとき、 $f(\mathbf{x})$ が点 $\mathbf{a}$ で (広義の) 極値をとるならば、 $JF(\mathbf{a}) = \mathbf{0}$ であるか、または

$$(*) \quad Jf(\mathbf{a}) = \lambda JF(\mathbf{a}) \quad (f_{x_i}(\mathbf{a}) = \lambda F_{x_i}(\mathbf{a}) \quad (i = 1, \dots, n))$$

をみたす定数 λ (ラグランジュ (の未定) 乗数という) が存在する。

定理 4.4.2 (上の定理の別形) $F(\mathbf{x}), f(\mathbf{x})$ が C^1 級、条件 $F(\mathbf{x}) = 0$ のもとで $f(\mathbf{x})$ が $\mathbf{a}$ で広義の極値を取るとき、 $G(\mathbf{x}, u) := f(\mathbf{x}) - uF(\mathbf{x})$ (u は変数) とおくと、 $JF(\mathbf{a}) \neq \mathbf{0}$ ならば $JG(\mathbf{a}, \lambda) = \mathbf{0}$ をみたす λ が存在する。

説明 一般に、命題「 P または Q が成立」と命題「 P でないならば Q が成立」は同値なので、上の定理は「 $JF(\mathbf{a}) \neq \mathbf{0} \Rightarrow Jf(\mathbf{a}) = \lambda JF(\mathbf{a})$ をみたす λ がある」と同値、従って $JF(\mathbf{a}) \neq \mathbf{0}$ を仮定して下の定理の「 $JG(\mathbf{a}, \lambda) = \mathbf{0}$ をみたす λ がある」と同値であることを示せばよい。 $JG(\mathbf{a}, \lambda) = \mathbf{0}$ は、 $JG = (Jf - uJF, -F)$ より $JG(\mathbf{a}, \lambda) = (Jf(\mathbf{a}) - \lambda JF(\mathbf{a}), -F(\mathbf{a})) = \mathbf{0}$ だが、 $F(\mathbf{a}) = 0$ なので $Jf(\mathbf{a}) - \lambda JF(\mathbf{a}) = \mathbf{0}$ を意味し、上 2 つの定理は同値になる。

証明 $JF(\mathbf{a}) \neq \mathbf{0}$ として、 $(*)$ をみたす λ が存在することを示す。 $JF \neq \mathbf{0}$ より、 $F_{x_i}(\mathbf{a}) \neq 0$ となる i がある。 $i = n$ ($F_{x_n}(\mathbf{a}) \neq 0$) のとき、 $F(\mathbf{x}) = 0$ の陰関数を $x_n = g(\mathbf{x}_n) = g(x_1, \dots, x_{n-1})$, $\mathbf{a}_n := (a_1, \dots, a_{n-1})$, $g(\mathbf{a}_n) = a_n$ とすると条件は「 $h(\mathbf{x}_n) := f(\mathbf{x}_n, g(\mathbf{x}_n))$ が $\mathbf{a}_n$ で広義の極値をとる」になる。 このとき $i = 1, \dots, n-1$ に対し、

$$0 = \frac{\partial h}{\partial x_i}(\mathbf{a}_n) = f_{x_i}(\mathbf{a}) + f_{x_n}(\mathbf{a})g_{x_i}(\mathbf{a}_n) = f_{x_i}(\mathbf{a}) - f_{x_n}(\mathbf{a}) \frac{F_{x_i}(\mathbf{a})}{F_{x_n}(\mathbf{a})} = f_{x_i}(\mathbf{a}) - F_{x_i}(\mathbf{a}) \frac{f_{x_n}(\mathbf{a})}{F_{x_n}(\mathbf{a})}$$

より $\lambda := f_{x_n}(\mathbf{a})/F_{x_n}(\mathbf{a})$ とおけば $i = n$ も含めて $f_{x_i}(\mathbf{a}) - \lambda F_{x_i}(\mathbf{a}) = 0$ ($i = 1, \dots, n$) をえる。 他の場合も同様。
(別証) $\mathbf{a}$ を通る $S: F(\mathbf{x}) = 0$ 上の曲線を $\mathbf{x}(t)$ ($\mathbf{x}(0) = \mathbf{a}$, $F(\mathbf{x}(t)) = 0$) とすると、 $f(\mathbf{x}(t))$ は $t=0$ で広義の極値を取るので $0 = \frac{d}{dt}f(\mathbf{x}(t))|_{t=0} = Jf(\mathbf{a})\mathbf{x}'(0)$ 。 即ち、 $\text{grad } f_{\mathbf{a}} := {}^tJf(\mathbf{a})$ は S の接空間に直交しているので法線上にある。 法線は 1 つしかないので、ある λ により ${}^tJf(\mathbf{a}) = \lambda {}^tJF(\mathbf{a})$, $\therefore Jf(\mathbf{a}) = \lambda JF(\mathbf{a})$ と表せる。

このことは、広義の極値を取る点 $\mathbf{a}$ では、一般には $F(\mathbf{x}) = 0$ の接空間と図形 $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{a})$ の接空間が一致、即ち $F(\mathbf{x}) = 0$ と $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{a})$ は $\mathbf{a}$ で接することを表している。(図)

例題 4.4.4 $F(x, y) = x^2 - \frac{1}{4}y^2 - 1 = 0$ のもとで $f(x, y) = x^3 + y$ の極値を調べる。

解答例 $S: F(x, y) = 0$ とする。 $dF = 2xdx - \frac{1}{2}ydy$. $JF = \mathbf{0}$ となる点は $(0, 0)$ のみで $F(0, 0) = -1 \neq 0$ より S 上の各点で $JF \neq \mathbf{0}$. $df = 3x^2dx + dy$, $df = \lambda dF$ より $3x^2 = 2\lambda x$, $1 = -\frac{1}{2}\lambda y$. $\therefore x = 0, 2\lambda/3$, $y = -2/\lambda$, $\lambda \neq 0$. $F(0, y) = -\frac{1}{4}y^2 - 1 \neq 0$ より $x = 0$ は S 上にない。 $(x, y) = (2\lambda/3, -2/\lambda)$ を $F(x, y) = 0$ に代入して $(4\lambda^2 + 3)(\lambda^2 - 3) = 0$. $\therefore \lambda = \pm\sqrt{3}$, $(x, y) = (\pm 2/\sqrt{3}, \mp 2/\sqrt{3})$ (複号同順)。これが極値の候補である。

$\mathbf{a} = (a, b) = (2/\sqrt{3}, -2/\sqrt{3})$ の近傍での $F(x, y) = 0$ の陰関数を $y = g(x)$ ($g(a) = b$) とし、 $F(x, g(x)) = 0$ の両辺を x で 2 回微分して $g'(a)$, $g''(a)$ を求めると：

$$0 = F_x + F_y g' = 2x - (g/2)g', \quad 0 = 2 - g'^2/2 - gg''/2. \quad \therefore g'(a) = 4a/b = -4, \quad g''(a) = (4 - g'(a)^2)/b = 6\sqrt{3}.$$

$$h(x) := f(x, g(x)) \text{ において } x \text{ で 2 回微分して } h''(a) \text{ を求めると：}$$

$$h' = f_x + f_y g' = 3x^2 + 1g', \quad h'' = 6x + g''. \quad \therefore h''(a) = 6a + g''(a) = 10\sqrt{3} > 0 \quad (h'(a) = 0)$$

よって $h(x)$ は $a = 2/\sqrt{3}$ で極小値 $f(a, b) = a^3 + b = 2/(3\sqrt{3}) = 2\sqrt{3}/9$ をとる。

$\mathbf{a} = (a, b) = (-2/\sqrt{3}, 2/\sqrt{3})$ でも同様にして、 $h''(a) = -10\sqrt{3} < 0$ より $x = -2/\sqrt{3}$ で極大値 $-2\sqrt{3}/9$ をとる。

上の例題で見た様に、 C^2 級関数 $f(\mathbf{x}), F(\mathbf{x})$ の条件付き極値問題は、ラグランジュの未定乗数法を用いて極値の候補を求め、 $JF(\mathbf{a}) \neq \mathbf{0}$ のとき、例えば $F_{x_n}(\mathbf{a}) \neq 0$ のときは、 $F(\mathbf{x}) = 0$ の陰関数 $x_n = g(\mathbf{x}_n)$ ($\mathbf{x}_n = (x_1, \dots, x_{n-1})$) を $f(\mathbf{x})$ に代入して $h(\mathbf{x}_n) := f(\mathbf{x}_n, g(\mathbf{x}_n))$ の極大極小を調べることになる。その際には陰関数の微分法を用いて、

$$g_{x_i} = -F_{x_i}/F_{x_n}, \quad h_{x_i} = f_{x_i} + f_{x_n}g_{x_i}, \quad h_{x_i x_j} = f_{x_i x_j} + f_{x_i x_n}g_{x_j} + f_{x_n x_j}g_{x_i} + f_{x_n x_n}g_{x_i}g_{x_j} + f_{x_n}g_{x_i x_j} \quad (i, j \leq n-1)$$

より、 h のヘッシアン $Hh(\mathbf{a}_n) = (h_{x_i x_j}(\mathbf{a}_n))$ を求めて極大極小を判定する。二変数関数 ($\mathbf{x} = (x, y)$) の場合は、

$$g' = -F_x/F_y, \quad h' = f_x + f_y g', \quad h'' = f_{xx} + 2f_{xy}g' + f_{yy}g'^2 + f_y g''$$

より $h''(a)$ ($\mathbf{a} = (a, b)$) を求めてその正負により極小極大を判定するが、他に次の方法がある：

定理 C^2 級二変数関数 $f(\mathbf{x}), F(\mathbf{x})$ ($\mathbf{x} = (x, y)$) が定理 4.4.2 の条件の下で、 $JF(\mathbf{a}) \neq \mathbf{0}$, $JG(\mathbf{a}, \lambda) = \mathbf{0}$ とするとき、 $\det HG(\mathbf{a}, \lambda)$ が正ならば、条件 $F(\mathbf{x}) = 0$ のもとに $f(\mathbf{x})$ は $\mathbf{a}$ で極大値、負ならば $\mathbf{a}$ で極小値をとる。

($\therefore$) $F_y(\mathbf{a}) \neq 0$ とする。 $F(x, g(x)) \equiv 0$ より $G(x, g(x), u) = h(x)$. $h'' = \frac{d^2 G}{dx^2} = G_{xx} + 2G_{xy}g' + G_{yy}g'^2 + G_y g''$. $(\mathbf{x}, u) = (\mathbf{a}, \lambda)$ のとき、 $G_y(\mathbf{a}, \lambda) := f_y(\mathbf{a}) - \lambda F_y(\mathbf{a}) = 0$ ($\Leftarrow JG(\mathbf{a}, \lambda) = \mathbf{0}$) と $g'(a) = -F_x(\mathbf{a})/F_y(\mathbf{a})$ より

$$h''(a) = (G_{xx}F_y^2 - 2G_{xy}F_xF_y + G_{yy}F_x^2)/F_y^2 \quad (\text{右辺 } (\mathbf{a}, \lambda) \text{ 等略})$$

$$\det HG(\mathbf{a}, \lambda) = \begin{vmatrix} G_{xx} & G_{xy} & -F_x \\ G_{yx} & G_{yy} & -F_y \\ -F_x & -F_y & 0 \end{vmatrix} = 2G_{xy}F_xF_y - G_{xx}F_y^2 - G_{yy}F_x^2 = -h''(a)F_y(\mathbf{a})^2$$

$F_y(\mathbf{a})^2 > 0$ より結論を得る. $F_x(\mathbf{a}) \neq 0$ の場合も同様. (計算量が減るかどうかは不明だが, 機械的に計算できる.)

- $\det Hf(\mathbf{a})$ や $\det HG(\mathbf{a}, \lambda)$ の計算は $f_{xx}(\mathbf{a})$ 等の値を求めてから行列式を計算する方が間違いが少ない.

拘束条件が複数ある場合 拘束条件が $F_1(\mathbf{x}) = 0, \dots, F_m(\mathbf{x}) = 0$ の m 個与えられたとき, 即ち, 写像 $\mathbf{F} = {}^t(F_1, \dots, F_m)$, $\mathbf{F}: D \rightarrow \mathbb{R}^m$, ($D \subset \mathbb{R}^{m+n}$) により, $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ で与えられたときは次のようになる:

定理 (未定乗数法) 写像 $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = {}^t(F_1(\mathbf{x}), \dots, F_m(\mathbf{x}))$ と関数 $f(\mathbf{x})$ が C^1 級とし, $\mathbf{x}$ が条件 $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ をみたしながら動くとき $f(\mathbf{x})$ が $\mathbf{a}$ で広義の極値をとるとする. このとき, $\text{rank } J\mathbf{F}(\mathbf{a}) = m$ ならば,

$$Jf(\mathbf{a}) = \lambda J\mathbf{F}(\mathbf{a}), \quad \lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_m), \quad \text{即ち, } f_{x_i}(\mathbf{a}) = \lambda_1 F_{1x_i}(\mathbf{a}) + \dots + \lambda_m F_{mx_i}(\mathbf{a}) \quad (i = 1, \dots, m+n)$$

をみたす λ が存在する.

(条件付き) 極値問題の例

幾何学的問題の例

三辺の長さの和が一定 ($= 2s > 0$) の三角形の内面積が最大になるのは正三角形である.

略証 三辺の長さを x, y, z ($\mathbf{x} = (x, y, z)$, $F(\mathbf{x}) := x + y + z - 2s = 0$, 面積の 2 乗を $f(\mathbf{x}) := s(s-x)(s-y)(s-z)$ (ヘロンの公式) とおいて条件付き極値を求める ($z = 2s - x - y$ を代入して無条件極値問題としても考えられる).

$J\mathbf{F} = (1, 1, 1)$ より $Jf = (s(s-y)(s-z), s(s-x)(s-z), s(s-x)(s-y)) = (\lambda, \lambda, \lambda)$ をみたす λ がある. これと $F(\mathbf{x}) = 0$ を連立させて解くと $x = y = z = 2s/3$ (正三角形) で極大値をとる事が分かる. 最大であることを示す為に, 三角形がつぶれる場合も許容して $0 \leq x, y, z \leq 2s$, $x + y \geq z$, $y + z \geq x$, $z + x \geq y$ とすると, 定義域が有界閉集合になる. このとき,

最大値最小値定理 $\mathbb{R}^n$ の有界閉集合 D 上の連続関数は最大値最小値を D 上でとる.

(ここで, 有界 = 半径が有限の球体に含まれる. 閉集合 = 開集合の補集合, 境界を含む.)

更に一般に, 写像 $\mathbf{F}: D \rightarrow \mathbb{R}^m$ が連続で, D が $\mathbb{R}^n$ の有界閉集合なら像 $f(D)$ や 図形: $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ (即ち, $\{\mathbf{x} \in D | \mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\}$) も有界閉集合になる.

略証の続き 定義域が有界閉集合なので $f(\mathbf{x})$ は最大値をもち, 境界では $f = 0$, 内部で $f > 0$ なので, 極大のとき, 即ち, 正三角形のときに最大になる.

このような幾何学的問題は多数ある. 以下にいくつか例を与えておく.

- 原点から平面 $ax + by + cz + d = 0$ ($(a, b, c) \neq \mathbf{0}$, $d \neq 0$) までの距離は $\frac{|d|}{\sqrt{a^2 + b^2 + c^2}}$ である.

[説明] ある点から平面への距離とは, その点と平面上の点の距離の最小値のことなので,

$$F(x, y, z) = ax + by + cz + d, \quad f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 \quad \text{として,}$$

$F(x, y, z) = 0$ のもとに, 距離の 2 乗 $f(x, y, z)$ の最小値を求めればよい.

- 辺の長さの和が一定の直方体の内体積が最大になるのは立方体のときである.

[説明] 辺の長さを x, y, z とし, $F(\mathbf{x}) = x + y + z - a$ ($a > 0$), $f(\mathbf{x}) = xyz$ とし, $0 \leq x, y, z \leq a$ の範囲で考える.

- 表面積が一定の直方体の内体積が最大になるのは立方体のときである.
- 3 辺が x, y, z の表面積が一定の直方体のます (上面がない, $F(x, y, z) = xy + 2(yz + zx) - a$ ($a > 0$)) の内体積が最大になるのは $x : y : z = 2 : 2 : 1$ のときである.

- n 個の点 $\mathbf{a}_i = (a_i, b_i, c_i)$ ($i = 1, \dots, n$) からの距離の 2 乗の和 $|\mathbf{x} - \mathbf{a}_1|^2 + \dots + |\mathbf{x} - \mathbf{a}_n|^2$ が最小になる点 $\mathbf{x}$ は $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ の重心 $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i$ である.

- 定円に内接する三角形のうち, 面積が最大のものは正三角形である.

- 定三角形の内部の点で, 3 辺への垂線の長さの積が最大になるのは三角形の重心である.

その他, 円周 $F(x, y) = x^2 + y^2 - r^2 = 0$ ($r > 0$) や球面 $F(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 - r^2 = 0$ ($r > 0$) 上 (楕円や楕円面上でも同様) で関数の極大極小を考える問題も多い. 特に二次形式 $f(x, y, z) = ax^2 + by^2 + cz^2 + 2\ell xy + 2m yz + 2n zx$ の最大値最小値は線形代数第二で学ぶ次の対称行列の固有値と深く結びついている:

$$\begin{pmatrix} a & \ell & n \\ \ell & b & m \\ n & m & c \end{pmatrix}$$