未定乗数法

かめさん (@cogitoergosumkm)

1　条件式が一つのとき

$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$ とし, $g(\boldsymbol{x}) = 0$ の条件のもと $f(\boldsymbol{x})$ の極値を求めたい.

$$\nabla g(\boldsymbol{x}') = \left(\frac{\partial g}{\partial x_1}, \frac{\partial g}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial g}{\partial x_N}\right) \neq 0 \tag{1}$$

である点 $\boldsymbol{x}'$ では, $g(\boldsymbol{x}) = 0$ の接ベクトルを考えることができる. 接線方向への変化で g は変化しないから, g の接線方向への微分は 0 となる. 逆に, g のあるベクトルに沿った微分が 0 ならば, そのベクトルは接ベクトルである. したがって, 接ベクトル $\boldsymbol{v}$ は以下を満たし, また以下を満たすものに限られる.

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{g(\boldsymbol{x} + \epsilon \boldsymbol{v}) - g(\boldsymbol{x})}{\epsilon} = (\nabla g) \cdot \boldsymbol{v} = 0 \tag{2}$$

接ベクトル空間 V は,

$$V = \left\{ v \in \mathbb{R}^N \middle| (\nabla g) \cdot \boldsymbol{v} = 0 \right\} \tag{3}$$

$g(\boldsymbol{x}) = 0$ の条件のもとで $f(\boldsymbol{x})$ の極値をとるならば, f の $g(\boldsymbol{x}) = 0$ の任意の接線方向への微分が 0 となる.
つまり,

$$\forall v \in V,\ \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(\boldsymbol{x} + \epsilon \boldsymbol{v}) - f(\boldsymbol{x})}{\epsilon} = (\nabla f) \cdot \boldsymbol{v} = 0 \tag{4}$$

$g(\boldsymbol{x}) = 0$ の法ベクトル空間 $V^\perp$ を考えると,

$$\nabla f \in V^\perp = \left\{ n \in \mathbb{R}^N \middle| n = \lambda (\nabla g)\ (\lambda \in \mathbb{R}) \right\} \tag{5}$$

したがって, ある $\lambda \in \mathbb{R}$ が存在して,

$$\nabla f = \lambda (\nabla g) \tag{6}$$
$$\nabla (f - \lambda g) = \boldsymbol{0} \tag{7}$$

また, $g(\boldsymbol{x}) = 0$ から,

$$\frac{\partial}{\partial \lambda}(f - \lambda g) = 0 \tag{8}$$

2　条件式が複数あるとき

$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$ とし, $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = (g_1(\boldsymbol{x}), g_2(\boldsymbol{x}), \ldots, g_M(\boldsymbol{x})) = \boldsymbol{0}$ の条件のもと $f(\boldsymbol{x})$ の極値を求めたい. ただし, $\nabla g_1, \nabla g_2, \ldots, \nabla g_M$ は線形独立であるとする.
すると, $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ の M 個の方程式は独立であるので, パラメータ $\boldsymbol{s} = (s_1, s_2, \ldots, s_{N-M})$ を用いて媒介変数表示をすると $\boldsymbol{x}(\boldsymbol{s})$ とかける.
$\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_M)$ として,

$$F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\boldsymbol{x}) - \sum_{j=1}^{M} \lambda_j g_j(\boldsymbol{x}) \tag{9}$$

とおく. $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ の上で $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) \to (\boldsymbol{s}, \boldsymbol{g}, \boldsymbol{\lambda})$ の変数変換をすると,

$$\begin{align} dF &= \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{\partial f}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^{M} \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_i} \right] dx_i - \sum_{j=1}^{M} g_j d\lambda_j \tag{10} \\ &= \sum_{i=1}^{N-M} \frac{\partial f}{\partial s_i} ds_i - \sum_{j=1}^{M} g_j d\lambda_j + \sum_{k=1}^{M} \left[\frac{\partial f}{\partial g_k} - \lambda_k \right] dg_k \tag{11} \end{align}$$

$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ の条件のもと $f(\boldsymbol{x})$ が極値をとるということは,

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{s}} = \left(\frac{\partial f}{\partial s_1}, \frac{\partial f}{\partial s_2}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial s_{N-M}} \right) = \boldsymbol{0} \tag{12}$$

また, $dF = 0$ の場合を考えると,

$$\begin{align} & \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{0} \text{ かつ } \boldsymbol{g} = \boldsymbol{0} \\ \Leftrightarrow \quad & \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{s}} = \boldsymbol{0} \text{ かつ } \boldsymbol{g} = \boldsymbol{0} \text{ かつ} \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{g}} = \boldsymbol{\lambda} \tag{13} \end{align}$$