

ラグランジュの未定乗数法

清家大嗣

平成 30 年 9 月 20 日

1 ラグランジュの未定乗数法

ラグランジュの未定乗数法は、入力変数に拘束条件が加えられた関数の極大・極小点を探す際に、その目安となる停留点¹がどのような条件を満たすべきかという問いに対する解を与える。以下、関数 f は n 次元のベクトル \mathbf{x} を引数に持つとする。また、ベクトル \mathbf{x} は、以下の m 個の拘束条件式 $g_i(\mathbf{x}) = 0$ ($i = 1, 2, \dots, m$) を満たすように変化するとする。ここで、これらの $m+1$ 個の関数と未知数 λ_i を用いて新たに関数 L を定義する。

$$L(\mathbf{x}) \equiv f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(\mathbf{x}) \quad (1)$$

ラグランジュの未定乗数法では、次式を満たす点 \mathbf{x} と各係数 λ_i が見つければ、拘束条件を満たした (引数ベクトル \mathbf{x} の自由度が制約されている) 上での停留点が得られるとしている。

$$\nabla L(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad (2)$$

$$\partial L(\mathbf{x}) / \partial \lambda_i = 0 \quad (i = 1, \dots, m) \quad (3)$$

3 式は単純に拘束条件を満たされていることを示している。また、2 式は 5 式を見ればわかるが、停留点において関数 f の勾配ベクトルが、各拘束条件の関数 g_i の一次結合 (線形結合) で表せるということを意味する。2, 3 式が、停留点であることの必要十分条件であることを示す。

1.1 2, 3 式を満たすことが停留点の十分条件であること

3 式より、拘束条件として与えられる全ての関数 g_i は n 個の変数が拘束条件に基づき変動可能な範囲で 0 (定数) となる。つまり、 \mathbf{x} が拘束条件を満たしながら $\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$ に移動する場合、常に次式が成立する必要がある。

$$\Delta g_i = \nabla g_i(\mathbf{x}) \Delta\mathbf{x} = 0 \quad (4)$$

また、2 式を変形すると次式が得られる。

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(\mathbf{x}) \quad (5)$$

¹ n 変数で拘束条件がないなら各変数に対して微分した値が 0 となること。鞍点もこれに含まれる。鞍点はある変数に関しては、最大値。他の変数に関しては最小値などで微分した値が 0 になるケースである。また、拘束条件がある場合、その拘束条件を満たした状態で変化可能な全ての微小量 $\Delta\mathbf{x}$ に対して、 $\nabla f(\mathbf{x}) \cdot \Delta\mathbf{x} = 0$ を満たす点が停留点となる

つまり、4 式の拘束条件から拘束条件を満たすように \boldsymbol{x} を微小変化させた場合を考えると、確かに拘束条件に従った上での変数 \boldsymbol{x} の微小変動に対して、関数 f の変動が 0 (停留点² の条件) となっていることがわかる。

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) \cdot \Delta \boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(\boldsymbol{x}) \cdot \Delta \boldsymbol{x} = 0 \quad (6)$$

つまり、2, 3 式が満たされれば停留点となることが理解される。

1.2 2, 3 式を満たすことが停留点である必要条件であること

停留点であるということは、拘束条件を満たしながら変化した場合の微小変位ベクトル $\Delta \boldsymbol{x}$ に対して、 ∇f が直交している必要がある。また、この変位ベクトル $\Delta \boldsymbol{x}$ が満たす条件は 4 式のように、任意の拘束条件に対して ∇g_i と $\Delta \boldsymbol{x}$ が直交することである。つまり、 ∇g_i の線形結合により張られる n 次元空間を V_{break} とすれば、 $\Delta \boldsymbol{x}$ は、その直交補空間 V_{meet} に含まれる³。当然、その直交補空間の任意のベクトルに対して、 ∇f は直交している必要がある。このことは、 ∇f が ∇g_i ($i = 1, \dots, m$) の線形結合で表されること (V_{break} 内の空間に存在する) に他ならない。

参考文献

- [1] 「ラグランジュの未定係数法」 <http://dora.bk.tsukuba.ac.jp/~takeuchi/?%E9%87%8F%E5%AD%90%E5%8A%9B%E5%AD%A6%E2%85%A0%2F%E3%83%A9%E3%82%B0%E3%83%A9%E3%83%B3%E3%82%B8%E3%83%A5%E3%81%AE%E6%9C%AA%E5%AE%9A%E4%BF%82%E6%95%B0%E6%B3%95>
- [2] 「勾配法は本当に鞍点近傍にはまるのか？モース理論で考えてみる」 <https://qiita.com/NaokiHamada/items/889c2e628505dc41e7a9>

²鞍点は極値を取らない停留点である。例えば変数 x_1 に対しては最大値、変数 x_2 に対しては最小値となるようなケースがそれにあたる

³数式で表すと点 \boldsymbol{x} における拘束条件 $g_i(\boldsymbol{x})$ ($i = 1, 2, \dots, m$) に関する直交補空間 V_{meet} は $\forall_{i \in \{1, 2, \dots, m\}} \forall_{\Delta \boldsymbol{x} \in V_{meet}} \nabla g_i(\boldsymbol{x}) \cdot \Delta \boldsymbol{x} = 0$ と表現できる