§7　Lagrange の未定乗数法

条件付き極値問題の解法として，Lagrange の未定乗数法(Lagrange's undetermined multiplier or Lagrange multiplier)は良く使われるので重要である．未定係数法とも呼ばれる．

１）拘束条件が一つである場合の極値問題

Lagrangian，$L(q_1,..q_f,\dot{q}_1,...\dot{q}_f)$，の座標変数が全て独立ではない場合がある. 例えば，剛体的な２原子分子では，二原子間の距離(d_0)が一定であると考える場合，これは座標変数に対する拘束条件である．

$$(x_1-x_2)^2+(y_1-y_2)^2+(z_1-z_2)^2=(d_0)^2 \tag{1}$$

変数を$(q_1, q_2, ..., q_f)$として，一般の拘束条件は，変数の陰関数として以下の様に表現される．

$$g(q_1, q_2, ..., q_f)=0 \tag{2}$$

拘束条件を用いて，独立変数の数を自由度に一致するように変数を消去できる場合は簡単であるが, (1)の条件のように, これが簡単には出来ない場合が圧倒的に多い. しばらくは，一個の拘束条件がある場合について考える．

一方，変数を$(q_1, q_2, ..., q_f)$とするある関数$F(q_1, q_2, ..., q_f)$の極値（最大値，最小値）を求める場合にも，変数に(2)のような拘束条件が付随していることがある．
そのような場合，

$$F(q_1, q_2, ..., q_f) \tag{3}$$

F は極値を取るのだから，変分をとりこれを０と出来る．

$$\delta F(q_1, q_2, ..., q_f)=\sum_{i=1}^{f}\frac{\partial F}{\partial q_i}\delta q_i=0 \tag{4}$$

しかし，拘束条件(2)から，δq_iの全てが独立ではないことは，(2)の変分をと取れば判る．(2)の右辺は元々０であるから，その変分も０であり，

$$\delta g(q_1, q_2, ..., q_f) = \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial g}{\partial q_i} \delta q_i = 0 \tag{5}$$

である．δq_iの(5)の一次結合が常に０でなければばならない．全てのδq_iが独立ではないことの具体的表現である．

しかし，(4)と(5)は常に成立している．そこで， (5)両辺に任意の定数λをかけても０は変わらないから，これと(4)を一緒にしても，やはり，

$$\delta F = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_i}\right) \delta q_i = 0 \tag{6}$$

である．定数λが任意であるから，消去したい変数に関する部分を(6)から除くことが出来る．

例えば， q_fに関する部分を除く時には，

$$\frac{\partial F}{\partial q_f} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_f} = 0 \tag{7}$$

となるように定数λを選べば良い． (6)は，

$$\delta F = \sum_{i=1}^{f-1} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_i}\right) \delta q_i = 0 \tag{8}$$

となり，ここでの(f−1)個のδq_iは独立であるから，

$$\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_i} = 0 \qquad (i = 1,2,.....,f-1) \tag{9}$$

となる．この結果は，(7)と同じ形式になっているから，(9)は(7)も含めて，全ての変数$(q_1, q_2, ..., q_f)$に対して，

$$\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_i} = 0 \qquad (i = 1,2,.....,f) \tag{10}$$

となる．結局，**一旦，** $\lambda = -(\partial F/\partial q_f)/(\partial g/\partial q_f)$**と決めてしまうと，形式上，**$\delta q_i$**の全てが独立であると扱って良いとの結論になる．**

以上では，拘束条件の関数 g の偏微分係数に任意係数λを掛けて F の変分式(8)に加えた．しかし，元々拘束条件の関数は g=0 であるから，g 自体に任意係数λを

掛けて関数Fに加えても，実質はFに等しい．そこで，f=F+λgを作り，

$$f(q_1, q_2, ..., q_f, \lambda) \equiv F(q_1, q_2, ..., q_f) + \lambda \cdot g(q_1, q_2, ..., q_f) \tag{11}$$

この変分を取って0と置くこともできるはずである．ただし，この変分関数fの変数は，λが加わったことにより，（f+１）個の$(q_1, q_2, ..., q_f, \lambda)$に増加しており，

$$\delta f = \sum_{i=}^{f}(\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_i})\delta q_i + g(q_1, q_2, ..., q_f)\delta\lambda \tag{12}$$

である．ここで，**f個のδq_iと$\delta\lambda$が独立であると仮定すると，**

$$\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial q_i} = 0 \qquad (i = 1,2,.....,f) \tag{10}$$

$$g(q_1, q_2, ..., q_f) = 0 \tag{2}$$

となる．この逆も成り立つ．第一式は前段の結論であり，第二式は，初めの拘束条件そのものであるから，(2)の拘束条件のもとでの極値条件は，f 個のδq_i が独立と考えた結果の(10)で良いことになる．(11)の考え方は，拘束条件が複数ある場合に簡単に拡張できる．

２）拘束条件が複数存在する場合の極値条件

拘束条件が複数あり，

$$g_\mu(q_1, q_2, ..., q_f) = 0 \qquad (\mu = 1,2,......,k < f) \tag{13}$$

のもとで，関数$F(q_1, q_2, ..., q_f)$が極値を取る条件は，以下の一次結合の変分を取り，これを0とすれば良い．

$$f(q_1, q_2, ..., q_f, \lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_k) \equiv F(q_1, q_2, ..., q_f) + \sum_{\mu=1}^{k}\lambda_\mu \cdot g_\mu(q_1, q_2, ..., q_f) \tag{14}$$

$$\delta f = \sum_{\mu=1}^{k}\sum_{i=1}^{f}\{(\frac{\partial F}{\partial q_i} + \lambda_\mu \frac{\partial g_\mu}{\partial q_i})\delta q_i + g_\mu(q_1, q_2, ..., q_f)\delta\lambda_{\mu_i}\} \tag{15}$$

ここで，(f+μ)個の全ての変数$(q_1, q_2, ..., q_f, \lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_k)$の微小変化は独立と考えれば良いから，

$$\frac{\partial F}{\partial q_i}+\sum_{\mu=1}^{k}\lambda_\mu\frac{\partial g_\mu}{\partial q_i}=0 \qquad (i=1,2.....,f) \tag{16}$$

$$g_\mu(q_1, q_2, ..., q_f)=0 \qquad (\mu=1,2,.....k) \tag{17}$$

(17)は与えられた拘束条件である．一方，(16)は，k 個の係数λ_μを含む一次方程式であり，これが f 個あることを意味する．f＞k であるから，この連立一次方程式を解いて，k 個の係数λ_μが決まる．

以上が Lagrange の未定乗数法である．