

No.5 極値問題

この回のゴール

- 極値をとる点では $\nabla f = \mathbf{0}$ となることを示し、停留点を求められる.
- ヘッセ行列の行列式 $D = f_{xx}f_{yy} - f_{xy}^2$ を使って、極大・極小・鞍点を判定できる.
- ラグランジュの未定乗数法で、条件付きの極値の候補を求められる.
- 有界閉集合での最大値・最小値を、内部と境界に分けて求められる.

■ 1. 極値と停留点

定義 1 極大・極小

$f(x, y)$ が点 (a, b) で**極大**であるとは、 (a, b) を中心とする十分小さな円板をとると、その中のすべての点 (x, y) で $f(x, y) \leq f(a, b)$ となることをいう. 極小も同様で、あわせて**極値**という. $(x, y) \neq (a, b)$ で等号が成り立たないときは**狭義の極大・極小**という.

(1 変数の第1章 No.4 定義1と同じく、等号を許して定義している.)

定理 1

f が (a, b) で**極値**をとり、 (a, b) で**偏微分可能**ならば、 $f_x(a, b) = f_y(a, b) = 0$, すなわち $\nabla f(a, b) = \mathbf{0}$.

【証明】 (a, b) で極大なら、1 変数関数 $x \mapsto f(x, b)$ も $x = a$ で極大である. 第1章 No.4 定理1より $f_x(a, b) = 0$. f_y も同様. $\square$

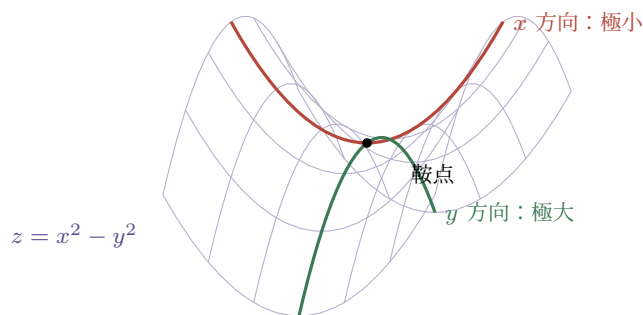
定義 2 停留点

$\nabla f(a, b) = \mathbf{0}$ となる点 (a, b) を、 f の**停留点** (臨界点) という.

定理1により、偏微分可能な関数の極値は停留点の中から探せばよい. ただし、停留点が極値とは限らない.

例 1

- (1) $f = x^2 + y^2$ は原点が停留点で、そこで (狭義の) 極小値 0 をとる.
- (2) $f = x^2 - y^2$ も原点が停留点だが、 x 軸方向に見ると極小、 y 軸方向に見ると極大で、極値ではない. このような点を**鞍点** (あんてん) という. 馬の鞍 (くら) の形に似ているからである.



■ 2. 2次導関数による判定

停留点 (a, b) では $\nabla f = \mathbf{0}$ なので, No.4 定理 2 (2 次までのテイラー展開) は

$$f(a+h, b+k) - f(a, b) = \frac{1}{2} (Ah^2 + 2Bhk + Ck^2) \quad (A, B, C \text{ は } (a+\theta h, b+\theta k) \text{ での } f_{xx}, f_{xy}, f_{yy})$$

となる. したがって, 2 次形式 $Ah^2 + 2Bhk + Ck^2$ の符号を調べればよい. $A \neq 0$ なら平方完成して

$$Ah^2 + 2Bhk + Ck^2 = A \left(h + \frac{B}{A}k \right)^2 + \frac{AC - B^2}{A}k^2.$$

この式から次の判定法が得られる.

定理 2 極値の判定

f は (a, b) の近くで C^2 級で, (a, b) は停留点とする.

$$D = f_{xx}(a, b)f_{yy}(a, b) - f_{xy}(a, b)^2 \quad (\text{ヘッセ行列の行列式 } \det H_f(a, b))$$

とおく.

- (1) $D > 0$ かつ $f_{xx}(a, b) > 0$ ならば, (a, b) で (狭義の) 極小.
- (2) $D > 0$ かつ $f_{xx}(a, b) < 0$ ならば, (a, b) で (狭義の) 極大.
- (3) $D < 0$ ならば, (a, b) は鞍点で, 極値ではない.
- (4) $D = 0$ のときは, この方法では判定できない.

【証明】(1) $f_{xx}, f_{xx}f_{yy} - f_{xy}^2$ は連続なので, (a, b) で正なら, その十分近くの点でも正である. よって (h, k) が十分小さければ, 上の平方完成で $A > 0, AC - B^2 > 0$ となり, $(h, k) \neq (0, 0)$ なら $Ah^2 + 2Bhk + Ck^2 > 0$. すなわち $f(a+h, b+k) > f(a, b)$. (2) は $-f$ に (1) を使えばよい. (3) $D < 0$ なら, (a, b) での 2 次形式は, ある方向 $\mathbf{v}_1$ では正, 別の方向 $\mathbf{v}_2$ では負の値をとる (平方完成の式から分かる). $\mathbf{v}_1$ 方向の直線上では極小, $\mathbf{v}_2$ 方向の直線上では極大のようにふるまうので, 極値ではない (詳しくは教科書に任せる). $\square$

線形代数とのつながり

ヘッセ行列 H_f は対称行列なので, 直交行列で対角化でき, 固有値 λ_1, λ_2 は実数である (分野「線形代数」第7章 No.5). $D = \det H_f = \lambda_1 \lambda_2$ なので, (1) は「固有値がともに正」, (2) は「ともに負」, (3) は「符号が異なる」ことにあたる. この言い換えは3変数以上でも通用し, 「ヘッセ行列の固有値がすべて正なら極小」となる.

例題 1

$f(x, y) = x^3 - 3xy + y^3$ の極値を求めよ.

【解答】 $f_x = 3x^2 - 3y = 0$, $f_y = 3y^2 - 3x = 0$ より $y = x^2$, $x = y^2$. 代入して $x = x^4$, $x(x^3 - 1) = 0$. 実数解は $x = 0, 1$. 停留点は $(0, 0)$, $(1, 1)$. $f_{xx} = 6x$, $f_{xy} = -3$, $f_{yy} = 6y$.

- $(0, 0)$: $D = 0 \cdot 0 - 9 = -9 < 0$ なので鞍点.
- $(1, 1)$: $D = 36 - 9 = 27 > 0$, $f_{xx} = 6 > 0$ なので極小. 極小値 $f(1, 1) = -1$.

(No.4 練習問題 4 で求めたヘッセ行列 $\begin{pmatrix} 6 & -3 \\ -3 & 6 \end{pmatrix}$ の固有値は 3, 9 で, ともに正である.)

 $D = 0$ の例

$x^4 + y^4$, $-(x^4 + y^4)$, $x^4 - y^4$ はどれも原点が停留点で $D = 0$ だが, それぞれ極小, 極大, 極値でない. $D = 0$ のときは, 関数の形を直接調べる必要がある.

■ 3. 条件つき極値：ラグランジュの未定乗数法

「円 $x^2 + y^2 = 1$ の上で $x + y$ を最大にせよ」のように, 変数に条件がついた極値問題を考える.

定理 3 ラグランジュの未定乗数法

$f(x, y), g(x, y)$ は C^1 級とする. 条件 $g(x, y) = 0$ のもとで, f が点 (a, b) で極値をとり, $\nabla g(a, b) \neq 0$ ならば, ある実数 λ があって

$$\nabla f(a, b) = \lambda \nabla g(a, b), \quad \text{すなわち} \quad f_x = \lambda g_x, \quad f_y = \lambda g_y, \quad g = 0$$

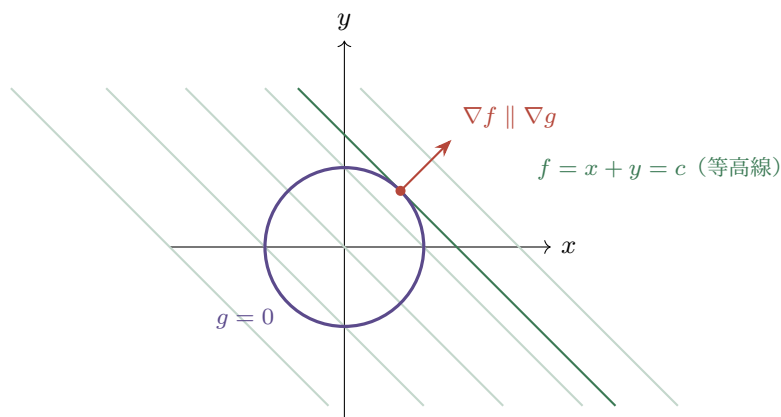
が (a, b) で成り立つ. λ をラグランジュ乗数という.

【証明】 $g_y(a, b) \neq 0$ の場合を示す ($g_x \neq 0$ なら x と y を入れかえる). 陰関数定理 (No.3 定理 3) より, (a, b) の近くで条件 $g = 0$ は $y = \varphi(x)$ と表せて, $\varphi' = -\frac{g_x}{g_y}$. $h(x) = f(x, \varphi(x))$ は $x = a$ で極値をとるので, No.3 定理 1 と第 1 章 No.4 定理 1 より

$$0 = h'(a) = f_x + f_y \varphi'(a) = f_x - f_y \frac{g_x}{g_y}.$$

$\lambda = \frac{f_y(a, b)}{g_y(a, b)}$ とおけば, $f_y = \lambda g_y$ であり, 上の式から $f_x = \lambda g_x$. □

図形的には, 「 f の等高線が, 条件の曲線 $g = 0$ に接するところで極値になる」ということである. 接していなければ, 曲線に沿って動くことで f の値をもっと大きくも小さくもできる. 接するとき, 2 つの曲線の法線ベクトル ∇f と ∇g は平行になる.



例題 2

条件 $x^2 + y^2 = 1$ のもとで, $f(x, y) = x + y$ の最大値と最小値を求めよ.

【解答】 $g = x^2 + y^2 - 1$ とすると $\nabla g = {}^t(2x, 2y) \neq \mathbf{0}$ (円周上). $\nabla f = \lambda \nabla g$ より $1 = 2\lambda x$, $1 = 2\lambda y$. よって $x = y$ で, $x^2 + y^2 = 1$ と合わせて $(x, y) = \pm \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$. 円周は有界閉集合で f は連続なので, 最大値・最小値が存在する (定理 4). それらは候補のどちらかでとるので, 最大値 $\sqrt{2}$ ($x = y = \frac{1}{\sqrt{2}}$), 最小値 $-\sqrt{2}$ ($x = y = -\frac{1}{\sqrt{2}}$).

注意

- 未定乗数法が与えるのは候補だけである. それが本当に最大・最小になることは, 例題 2 のように「最大値・最小値が存在する」ことと組み合わせて確かめる.
- $\nabla g = \mathbf{0}$ となる点は定理の対象外なので, そこが候補になりうるかは別に調べる.
- 本によっては $F = f - \lambda g$ (あるいは $f + \lambda g$) とおいて「 $F_x = F_y = F_\lambda = 0$ 」と書く. 中身は同じである.
- 3変数 $f(x, y, z)$ と条件 $g(x, y, z) = 0$ でも, $\nabla f = \lambda \nabla g$ という同じ形で使える.

■ 4. 有界閉集合での最大値・最小値

定理 4 最大値・最小値の定理 (2 変数)

$f(x, y)$ が有界閉集合 D (たとえば円板 $x^2 + y^2 \leq r^2$ や長方形 $[a, b] \times [c, d]$ のように, 境界も含み, どこまでも広がってはいない集合) で連続ならば, f は D で最大値と最小値をとる. (1 変数の第 1 章 No.1 定理 7 の一般化. 証明は分野「位相空間論」第 3 章で扱うコンパクト性による.)

最大値・最小値をとる点は, D の内部なら停留点 (定理 1), そうでなければ境界上にある. したがって次の手順で求められる.

手順

1. D の内部の停留点を求め, そこでの f の値を計算する (極値の判定はしなくてよい).
2. 境界上での f の最大値・最小値を求める (境界を媒介変数で表す, 未定乗数法を使う, など).
3. 1, 2 で出てきた値をすべて比べ, 最大のものと最小のものを選ぶ.

例題 3

$D: x^2 + y^2 \leq 4$ における $f(x, y) = x^2 + y^2 - 2x$ の最大値と最小値を求めよ.

【解答】 内部: $f_x = 2x - 2 = 0$, $f_y = 2y = 0$ より $(1, 0)$. $f(1, 0) = -1$.

境界: $x^2 + y^2 = 4$ では $f = 4 - 2x$ ($-2 \leq x \leq 2$). 最大 8 ($(-2, 0)$), 最小 0 ($(2, 0)$).

比べて, 最大値 8 ($(-2, 0)$), 最小値 -1 ($(1, 0)$).

コラム: 最小二乗法と最適化

データ (x_i, y_i) に直線 $y = ax + b$ を当てはめるとき, 「ずれの 2 乗の和 $S(a, b) = \sum (y_i - ax_i - b)^2$ を最小にする」のが**最小二乗法**である (練習問題 5). これは a, b についての 2 変数の極値問題で, 分野「確率・統計」第 6 章 No.1 の単回帰分析の基礎になっている. また, 不等式の条件がついた最適化問題では, ラグランジュの未定乗数法を拡張した KKT 条件が使われる (分野「最適化」第 2 章 No.2).

■ 練習問題

1. 次の関数の極値を求めよ.

$$(1) x^2 + xy + y^2 - 3x \quad (2) x^3 + y^3 - 3x - 12y \quad (3) xy(1 - x - y)$$

2. ラグランジュの未定乗数法を使って, 次の問いに答えよ.

(1) 条件 $x^2 + y^2 = 2$ のもとで, xy の最大値と最小値を求めよ.

(2) 条件 $x + 2y = 5$ のもとで, $x^2 + y^2$ の最小値を求めよ. (最大値は存在しないことにも注意せよ.)

3. $D: x^2 + y^2 \leq 1$ における $f(x, y) = x^2 - y^2$ の最大値と最小値を求めよ.

4. 3 辺の長さの和が 12 である直方体のうち, 体積が最大のものを求めよ. (3 変数の未定乗数法を使え. 辺の長さは正とする.)

5. 3 点 $(0, 1)$, $(1, 2)$, $(2, 4)$ に直線 $y = ax + b$ を当てはめる. $S(a, b) = \sum_{i=1}^3 (y_i - ax_i - b)^2$ を最小にする a, b を求めよ.

6. **発展** (考えてみよう) 条件 $x^2 + xy + y^2 = 3$ のもとで, 原点からの距離 $\sqrt{x^2 + y^2}$ の最大値と最小値を求めよ. また, 結果を 2 次形式 $x^2 + xy + y^2 = \mathbf{v}A\mathbf{v}$ の行列 $A = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}$ の固有値・固有ベクトルと比べてみよ.

■ 練習問題の解答

1. (1) $f_x = 2x + y - 3 = 0$, $f_y = x + 2y = 0$ より $(2, -1)$. $f_{xx} = 2$, $f_{xy} = 1$, $f_{yy} = 2$, $D = 3 > 0$, $f_{xx} > 0$ なので極小値 $f(2, -1) = -3$.
 (2) $f_x = 3x^2 - 3 = 0$, $f_y = 3y^2 - 12 = 0$ より $x = \pm 1$, $y = \pm 2$ の4点. $f_{xx} = 6x$, $f_{xy} = 0$, $f_{yy} = 6y$, $D = 36xy$. $(1, 2) : D > 0$, $f_{xx} > 0$ で極小値 -18 . $(-1, -2) : D > 0$, $f_{xx} < 0$ で極大値 18 . $(1, -2)$, $(-1, 2) : D < 0$ で鞍点.
 (3) $f_x = y(1 - 2x - y) = 0$, $f_y = x(1 - x - 2y) = 0$ より停留点は $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(0, 1)$, $(\frac{1}{3}, \frac{1}{3})$. $f_{xx} = -2y$, $f_{xy} = 1 - 2x - 2y$, $f_{yy} = -2x$. 最初の3点は $D = -1 < 0$ で鞍点. $(\frac{1}{3}, \frac{1}{3})$ は $D = \frac{4}{9} - \frac{1}{9} = \frac{1}{3} > 0$, $f_{xx} = -\frac{2}{3} < 0$ で極大値 $\frac{1}{27}$.
2. (1) $g = x^2 + y^2 - 2$. $y = 2\lambda x$, $x = 2\lambda y$ より $x = 4\lambda^2 x$. $x = 0$ なら $y = 0$ となり条件に反するので $\lambda = \pm \frac{1}{2}$, $y = \pm x$. $y = x$ なら $x^2 = 1$ で $xy = 1$; $y = -x$ なら $xy = -1$. 円周は有界閉集合なので, 最大値 1 , 最小値 -1 .
 (2) $2x = \lambda$, $2y = 2\lambda$ より $y = 2x$. 条件から $x = 1$, $y = 2$ で, 値は 5 . 直線は有界でなく, $x^2 + y^2$ は直線上でいくらでも大きくなるので最大値はない. 最小値が存在すること (原点から直線への距離の2乗) を認めれば, 候補は1つなので最小値は 5 .
3. 内部: 停留点 $(0, 0)$, $f = 0$. 境界: $y^2 = 1 - x^2$ より $f = 2x^2 - 1$ ($-1 \leq x \leq 1$) で, 最大 1 ($(\pm 1, 0)$), 最小 -1 ($(0, \pm 1)$). よって最大値 1 , 最小値 -1 . (原点は鞍点なので, 内部では最大にも最小にもならない.)
4. 体積 $f = xyz$, 条件 $x + y + z = 12$. $\nabla f = \lambda \nabla g$ より $yz = xz = xy = \lambda$. $x, y, z > 0$ なので $x = y = z = 4$. 最大体積は立方体の 64 . ($x, y, z \geq 0$ の範囲は有界閉集合で, 境界 (どれかが 0) では体積 0 なので, 最大は内部の候補でとる.)
5. $S_a = -2 \sum x_i(y_i - ax_i - b) = 0$, $S_b = -2 \sum (y_i - ax_i - b) = 0$ より $(\sum x_i^2) a + (\sum x_i) b = \sum x_i y_i$, $(\sum x_i) a + 3b = \sum y_i$. 数値を入れると $5a + 3b = 10$, $3a + 3b = 7$. よって $a = \frac{3}{2}$, $b = \frac{5}{6}$. ヘッセ行列は $\begin{pmatrix} 10 & 6 \\ 6 & 6 \end{pmatrix}$ で $D = 24 > 0$, $S_{aa} > 0$ なので極小 (S は2次式なので, これが最小).
6. $f = x^2 + y^2$, $g = x^2 + xy + y^2 - 3$ とする. $2x = \lambda(2x + y)$, $2y = \lambda(x + 2y)$. 2式を引くと $2(x - y) = \lambda(x - y)$, 足すと $2(x + y) = 3\lambda(x + y)$. $x = y$ のとき条件から $3x^2 = 3$, $f = 2$. $x = -y$ のとき $x^2 = 3$, $f = 6$. ($x \neq y$ かつ $x \neq -y$ なら $\lambda = 2$ かつ $\lambda = \frac{2}{3}$ で矛盾.) 曲線 (楕円) は有界閉集合なので, 距離の最小値は $\sqrt{2}$, 最大値は $\sqrt{6}$. A の固有値は $\frac{3}{2}$ (固有ベクトル ${}^t(1, 1)$), $\frac{1}{2}$ (固有ベクトル ${}^t(1, -1)$) で, 楕円の長軸・短軸は固有ベクトルの方向にあり, 半径は $\sqrt{3/\frac{3}{2}} = \sqrt{2}$, $\sqrt{3/\frac{1}{2}} = \sqrt{6}$ になっている. (未定乗数法の式 $\nabla f = \lambda \nabla g$ は, $2\mathbf{v} = 2\lambda A\mathbf{v}$, つまり $A\mathbf{v} = \frac{1}{\lambda}\mathbf{v}$ という固有値問題そのものである.)