ニュートン法による最適化では、式(1.36)を満足するように最適ベクトル値 K を繰り返し法によって探索する。すなわち、$(m+1)$ステップにおける K の値を K^{m+1}、m ステップにおける値を K^m としたとき、次式(1.39)が成立するとして補正ベクトル ΔK をいかに客観的かつ迅速に算出するかが主要課題となる。

$$K^{m+1} = K^m + \Delta K \tag{1.39}$$

$$\Delta K = \left[\Delta c_{11} \quad \Delta c_{12} \quad \Delta c_{13}\right]^T \tag{1.40}$$

(4) 目的関数の評価基準と最小化条件

$(m+1)$ステップでの誤差項 $e_i\left(K^{m+1}\right)$を、K^m のまわりで 1 次の項まで Taylor 級数展開すると次のようになる。

$$\begin{aligned} e_i\left(K^{m+1}\right) = e_i\left(K^m\right) &+ \frac{\partial e_i\left(K^m\right)}{\partial c_{11}}\left(c_{11}^{m+1} - c_{11}^m\right) \\ &+ \frac{\partial e_i\left(K^m\right)}{\partial c_{12}}\left(c_{12}^{m+1} - c_{12}^m\right) \\ &+ \frac{\partial e_i\left(K^m\right)}{\partial c_{13}}\left(c_{13}^{m+1} - c_{13}^m\right) \end{aligned} \tag{1.41}$$

式(1.41)の誤差項に関する感度係数は、式(1.34)、(1.35)及び式(1.37)を用いて、次式で計算される。

$$\begin{cases} \dfrac{\partial e_i\left(K^m\right)}{\partial c_{11}} = -\dfrac{1}{\sqrt{q_i^*}}\dfrac{\partial q_i\left(K^m\right)}{\partial c_{11}} = -w_{i1} \\ \dfrac{\partial e_i\left(K^m\right)}{\partial c_{12}} = -\dfrac{1}{\sqrt{q_i^*}}\dfrac{\partial q_i\left(K^m\right)}{\partial c_{12}} = -w_{i2} \\ \dfrac{\partial e_i\left(K^m\right)}{\partial c_{13}} = -\dfrac{1}{\sqrt{q_i^*}}\dfrac{\partial q_i\left(K^m\right)}{\partial c_{13}} = -w_{i3} \end{cases} \tag{1.42}$$

式(1.42)の関係式を用いると、式(1.41)は以下のように書き換えることができる。

$$\begin{aligned} e_i\left(K^{m+1}\right) &= e_i\left(K^m\right) - w_{i1}\Delta c_{11} - w_{i2}\Delta c_{12} - w_{i3}\Delta c_{13} \\ &= E - W\Delta K \quad \left(i = 1,2,\cdots,N\right) \end{aligned} \tag{1.43}$$

ここに、

$$
\begin{cases}
E = \begin{bmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_i & \cdots & e_N \end{bmatrix}^T \\
W = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ w_{i1} & w_{i2} & w_{i3} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ w_{N1} & w_{N2} & w_{N3} \end{bmatrix} \\
\Delta K = \begin{bmatrix} \Delta c_{11} \\ \Delta c_{12} \\ \Delta c_{13} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11}^{m+1} - c_{11}^{m} \\ c_{12}^{m+1} - c_{12}^{m} \\ c_{13}^{m+1} - c_{13}^{m} \end{bmatrix}
\end{cases}
\tag{1.44}
$$

すなわち、 E は観測流量と計算流量の差からなる $(N \times 1)$ 行列、W は感度係数からなる $(N \times 3)$ 行列、ΔK はモデル定数の補正項からなる (3×1) 行列である。

式(1.36)の目的関数のもとに K^{m+1} の値を算出することになるが、K^{m} は既知であるので、目的関数の評価基準は次のように変換される。

$$
\begin{aligned}
&\underset{\Delta K}{Min}\, J(K) \\
&= \sum \left\{ e_i \left(K^m\right) - w_{i1}\,\Delta c_{11} - w_{i2}\,\Delta c_{12} - w_{i3}\,\Delta c_{13} \right\}^2 \\
&= \left(E - W\,\Delta K\right)^T \left(E - W\,\Delta K\right) \\
&= \left[E^T E\right] - 2(\Delta K)^T \left[W^T E\right] + (\Delta K)^T \left[W^T W\right](\Delta K)
\end{aligned}
\tag{1.45}
$$

式(1.45)の最小化条件は次式で与えられる。

$$
\frac{\partial J(K)}{\partial(\Delta K)} = -2\left[W^T E\right] + 2\left[W^T W\right] \Delta K = 0 \tag{1.46}
$$

式(1.46)から補正ベクトル ΔK は次式で計算される。

$$
\Delta K = \left[W^T W\right]^{-1} \left[W^T E\right] \tag{1.47}
$$

式(1.47)を解くにあたり、最適値すなわち $|\Delta K|$ の値が十分に小さい値に収束するか、

$\left|\Delta K / K^m\right|$が許容限界値(通常は 0.001～0.01 程度)におさまるまで繰り返される。このため、効率よくΔK を計算する必要がある。

本報告では、W の列ベクトルを互いに直交化させる Cholesky 法を用いて、ΔK を効率よく算定することができる成分回帰手法を併用した。