2.5 モデル定数の最適化手法

モデル定数の最適化には一次微係数を用いるニュートン法を採用する。

(1) 感度係数（一次微係数）の算定

今、モデル定数が時間的に変化しないと仮定し、式(2.25)における変数y_1とy_2に関する微分方程式をモデル定数k_{11}, k_{12}, c_{13}で微分すると式(2.58)が得られる。

$$\frac{dU}{dt} = A_1 U + D \tag{2.58}$$

ここに、

$$U = \left[\frac{\partial y_1}{\partial k_{11}} \frac{\partial y_1}{\partial k_{12}} \frac{\partial y_1}{\partial c_{13}} \frac{\partial y_2}{\partial k_{11}} \frac{\partial y_2}{\partial k_{12}} \frac{\partial y_2}{\partial c_{13}} \right]^T \tag{2.59}$$

$$A_1 = \frac{\partial F}{\partial Y}$$

$$= \left[\begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline a_1 & 0 & 0 & a_2 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & 0 & 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & a_1 & 0 & 0 & a_2 \end{array} \right] \tag{2.60}$$

$$D = \left[0\ 0\ 0\ d_1\ \ d_2\ \ d_3 \right]^T \tag{2.61}$$

$$\begin{cases} d_1 = \dfrac{\partial f_2}{\partial k_{11}} = -\dfrac{1}{k_{12}} \dfrac{p_1}{p_2} \left(y_1^* \right)^{p_1/p_2 - 1} \left(y_2^* \right) \\ d_2 = \dfrac{\partial f_2}{\partial k_{12}} = \dfrac{1}{k_{12}} \left\{ k_{11} \dfrac{p_1}{p_2} \left(y_1^* \right)^{p_1/p_2 - 1} \left(y_2^* \right) + c_{13} \left(y_1^* \right)^{1/p_2} - r \right\} \\ d_3 = \dfrac{\partial f_2}{\partial c_{13}} = -\dfrac{1}{k_{12}} \left(y_1^* \right)^{1/p_2} \end{cases} \tag{2.62}$$

式(2.59)のベクトルUは、モデル定数(k_{11}, k_{12}, c_{13})の変化が変数(y_1, y_2)の変化に及ぼす影響と解釈されるので、しばしば「感度係数」といわれ、感度係数に関する方程式(2.58)は「感度方程式」といわれる。

ここで感度方程式は、システム方程式と同一形式になることから、システム方程式(2.33)と同様に、式(2.58)は式(2.63)に変換される。

$$U_{k+1} = \Phi_1 U_k + \Gamma_1 D_k \tag{2.63}$$

ここに、

$$\Phi_1 = \left[\begin{array}{ccc|ccc} \phi_{11} & 0 & 0 & \phi_{12} & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{11} & 0 & 0 & \phi_{12} & 0 \\ 0 & 0 & \phi_{11} & 0 & 0 & \phi_{12} \\ \hline \phi_{21} & 0 & 0 & \phi_{22} & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{21} & 0 & 0 & \phi_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \phi_{21} & 0 & 0 & \phi_{22} \end{array}\right] \tag{2.64}$$

$$\Gamma_1 = \left[\begin{array}{ccc|ccc} \gamma_{11} & 0 & 0 & \gamma_{12} & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_{11} & 0 & 0 & \gamma_{12} & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_{11} & 0 & 0 & \gamma_{12} \\ \hline \gamma_{21} & 0 & 0 & \gamma_{22} & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_{21} & 0 & 0 & \gamma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_{21} & 0 & 0 & \gamma_{22} \end{array}\right] \tag{2.65}$$

係数行列Φ_1およびΓ_1は(6×6)の正方行列であり、式(2.39)と同じ要素で構成されることがわかる。Φ_1とΓ_1の小行列が対角行列になるのは、式(2.60)の行列A_1の小行列が対角行列になっていることによる。また、ϕ_{11}～ϕ_{22}及びγ_{11}～γ_{22}の要素は、式(2.43)と式(2.44)に示される係数と同一である。したがって、感度方程式(2.63)の解法は非常に容易となる。

(2) 表面･中間流出成分に関する感度係数

流出高q_1に関する感度係数は、式(2.46)を用いて次のように計算される。

$$\begin{cases} \dfrac{\partial q_1}{\partial k_{11}} = \dfrac{1}{p_2} y_1^{1/p_2-1} \dfrac{\partial y_1}{\partial k_{11}} \\ \dfrac{\partial q_1}{\partial k_{12}} = \dfrac{1}{p_2} y_1^{1/p_2-1} \dfrac{\partial y_1}{\partial k_{12}} \\ \dfrac{\partial q_1}{\partial c_{13}} = \dfrac{1}{p_2} y_1^{1/p_2-1} \dfrac{\partial y_1}{\partial c_{13}} \end{cases} \tag{2.66}$$