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。

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

式(2.66)の右辺に示される感度係数は、式(2.59)のベクトル U の３要素から求められる。

さらに、c_{11} と c_{12} の最適値を求めるためには、c_{11} と c_{12} に関する感度係数が必要となるが、これらは式(2.4)と(2.66)を用いて、次式で計算される。

$$\begin{cases} \dfrac{\partial q_1}{\partial c_{11}} = \dfrac{\partial q_1}{\partial k_{11}} \dfrac{\partial k_{11}}{\partial c_{11}} = \left(A^{0.24}\right) \dfrac{\partial q_1}{\partial k_{11}} \\ \dfrac{\partial q_1}{\partial c_{12}} = \dfrac{\partial q_1}{\partial k_{12}} \dfrac{\partial k_{12}}{\partial c_{12}} = \left(k_1^2\, \bar{r}^{\,-0.2648}\right) \dfrac{\partial q_1}{\partial k_{12}} \end{cases} \tag{2.67}$$

(3) ニュートン法による最適化手法の適用

モデル定数の最適化は、分離後の表面・中間流量 q_{1i}^* と１段目タンク計算流 $q_{1i}\left(c_{11}, c_{12}, c_{13}\right)$ の誤差の２乗和、$e_i^2\left(c_{11}, c_{12}, c_{13}\right)$ができるだけ小さくなるように定数を同定することを目的としている。

よって本報告では、誤差の２乗和を最小とする目的関数（評価関数）$J\left(c_{11}, c_{12}, c_{13}\right)$を、次式のように表す。

$$\underset{c_{11}, c_{12}, c_{13}}{Min} \; J\left(c_{11}, c_{12}, c_{13}\right) = \sum_{i=1}^{N} e_i^2\left(c_{11}, c_{12}, c_{13}\right) \tag{2.68}$$

ここに、$J\left(c_{11}, c_{12}, c_{13}\right)$：目的関数、$e_i\left(c_{11}, c_{12}, c_{13}\right)$：誤差項、$N$ ：標本数

また、誤差項は次式で与えられる。

$$e_i\left(c_{11}, c_{12}, c_{13}\right) = q_{1i}^* - q_{1i}\left(c_{11}, c_{12}, c_{13}\right) \tag{2.69}$$

ここに、q_{1i}^* ：分離後表面・中間流出成分、$q_{1i}\left(c_{11}, c_{12}, c_{13}\right)$：１段目タンク計算流量

今、新たにモデル定数ベクトル K を定義する。

$$K = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \end{bmatrix}^T \tag{2.70}$$

ニュートン法による最適化では、式(2.68)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(2.71)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。