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。

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

(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。

$$K^{m+1} = K^m + \Delta K \tag{2.71}$$

$$\Delta K = \left[\Delta c_{11} \quad \Delta c_{12} \quad \Delta c_{13}\right]^T \tag{2.72}$$

(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。

$$\begin{aligned} e_i\left(K^{m+1}\right) = e_i\left(K^m\right) &+ \frac{\partial e_i\left(K^m\right)}{\partial c_{11}}\left(c_{11}^{m+1} - c_{11}^m\right) \\ &+ \frac{\partial e_i\left(K^m\right)}{\partial c_{12}}\left(c_{12}^{m+1} - c_{12}^m\right) \\ &+ \frac{\partial e_i\left(K^m\right)}{\partial c_{13}}\left(c_{13}^{m+1} - c_{13}^m\right) \end{aligned} \tag{2.73}$$

式(2.73)の誤差項に関する感度係数は、式(2.66)、(2.67)及び式(2.69)を用いて、次式で計算される。

$$\begin{cases} \dfrac{\partial e_{1i}\left(K^m\right)}{\partial c_{11}} = -\dfrac{\partial q_{1i}\left(K^m\right)}{\partial c_{11}} = -w_{i1} \\ \dfrac{\partial e_{1i}\left(K^m\right)}{\partial c_{12}} = -\dfrac{\partial q_{1i}\left(K^m\right)}{\partial c_{12}} = -w_{i2} \\ \dfrac{\partial e_{1i}\left(K^m\right)}{\partial c_{13}} = -\dfrac{\partial q_{1i}\left(K^m\right)}{\partial c_{13}} = -w_{i3} \end{cases} \tag{2.74}$$

式(2.74)の関係式を用いると、式(2.73)は以下のように書き換えることができる。

$$\begin{aligned} e_i\left(K^{m+1}\right) &= e_i\left(K^m\right) - w_{i1}\,\Delta c_{11} - w_{i2}\,\Delta c_{12} - w_{i3}\,\Delta c_{13} \\ &= E - W\,\Delta K \quad (i = 1,2,\cdots,N) \end{aligned} \tag{2.75}$$

ここに、

$$\begin{cases} E = \left[\, e_1 \;\; e_2 \;\; \cdots \;\; e_i \;\; \cdots \;\; e_N \,\right]^T \\ W = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ w_{i1} & w_{i2} & w_{i3} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ w_{N1} & w_{N2} & w_{N3} \end{bmatrix} \end{cases} \tag{2.76}$$