

$$a_3 = a_1 + a_2^2, \quad a_4 = a_1 + a_3 \quad (1.24)$$

所要流出高  $q$  は、漸化式(1.18)により任意のタイム・ステップ  $k$  における  $y_1 = q^{p_2}$  と  $y_2 = \frac{d}{dt}(q^{p_2})$  の値が逐次計算されるので、式(1.3)を用いて次のように求められる。

$$q = y_1^{1/p_2} \quad (1.25)$$

## 1.2 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(1.4)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(1.26)が得られる。

$$\frac{dU}{dt} = A_1 U + D \quad (1.26)$$

ここに、

$$U = \left[ \frac{\partial y_1}{\partial k_{11}} \quad \frac{\partial y_1}{\partial k_{12}} \quad \frac{\partial y_1}{\partial c_{13}} \quad \frac{\partial y_2}{\partial k_{11}} \quad \frac{\partial y_2}{\partial k_{12}} \quad \frac{\partial y_2}{\partial c_{13}} \right]^T \quad (1.27)$$

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

$$= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline a_1 & 0 & 0 & a_2 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & 0 & 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & a_1 & 0 & 0 & a_2 \end{bmatrix} \quad (1.28)$$

$$D = [0 \ 0 \ 0 \ d_1 \ d_2 \ d_3]^T \quad (1.29)$$

$$\begin{cases} d_1 = \frac{\partial f_2}{\partial k_{11}} = -\frac{1}{k_{12}} \frac{p_1}{p_2} (y_1^*)^{p_1/p_2-1} (y_2^*) \\ d_2 = \frac{\partial f_2}{\partial k_{12}} = \frac{1}{k_{12}} \left\{ k_{11} \frac{p_1}{p_2} (y_1^*)^{p_1/p_2-1} (y_2^*) + c_{13} (y_1^*)^{1/p_2} - (r + q_0) \right\} \\ d_3 = \frac{\partial f_2}{\partial c_{13}} = -\frac{1}{k_{12}} (y_1^*)^{1/p_2} \end{cases} \quad (1.30)$$

式(1.27)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(1.26)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(1.12)と同様に、式(1.26)は式(1.31)に変換される。

$$U_{k+1} = \Phi_1 U_k + \Gamma_1 D_k \quad (1.31)$$

ここに、

$$\Phi_1 = \begin{bmatrix} \phi_{11} & 0 & 0 & \phi_{12} & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{11} & 0 & 0 & \phi_{12} & 0 \\ 0 & 0 & \phi_{11} & 0 & 0 & \phi_{12} \\ \hline \phi_{21} & 0 & 0 & \phi_{22} & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{21} & 0 & 0 & \phi_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \phi_{21} & 0 & 0 & \phi_{22} \end{bmatrix} \quad (1.32)$$

$$\Gamma_1 = \begin{bmatrix} \gamma_{11} & 0 & 0 & \gamma_{12} & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_{11} & 0 & 0 & \gamma_{12} & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_{11} & 0 & 0 & \gamma_{12} \\ \hline \gamma_{21} & 0 & 0 & \gamma_{22} & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_{21} & 0 & 0 & \gamma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_{21} & 0 & 0 & \gamma_{22} \end{bmatrix} \quad (1.33)$$

係数行列 $\Phi_1$ および $\Gamma_1$ は $(6 \times 6)$ の正方行列であり、式(1.18)と同じ要素で構成されることとわかる。 $\Phi_1$ と $\Gamma_1$ の小行列が対角行列になるのは、式(1.28)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、 $\phi_{11} \sim \phi_{22}$ 及び $\gamma_{11} \sim \gamma_{22}$ の要素は、式(1.22)と(1.23)に示される係数と同一である。したがって、感度方程式(1.31)の解法は非常に容易となる。