HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	中性子準弾性散乱における数理統計データ解析
Author(s)	井上, 和彦
Citation	北海道大學工學部研究報告, 98, 77-86
Issue Date	1980-05-30
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/41611
Type	departmental bulletin paper
File Information	98_77-86.pdf

Hokkaido University Collection of Scholarly and Academic Papers : HUSCAP

北海道大学工学部研究報告
第98号（昭和55年）

Bulletin of the Faculty of Engineering,
Hokkaido University, No. 98 (1980)

中性子準弾性散乱における数理統計データ解析

井　上　和　彦*

（昭和54年12月27日受理）

Statistical and Computational Data Analysis in Quasielastic Neutron Scattering

Kazuhiko INOUE

(Received December 27, 1979)

Abstract

The spectra of the quasielastically scattered neutrons tend to take the shapes which resemble Lorentzian distribution and reveal the characteristics concerning the fluctuating motions of atoms and molecules. The shape of the peak of the spectra can serve to determine several unknown parameters included in the neutron cross section derived from a scattering model. In this case data analysis is reduced to the problems of curve fitting and hypothesis testing.

Frequently the relation between measurable quantities and unknown parameters is non-linear, and then we are compelled to solve the minimization problem by using iterative procedure. Applying appropriate strategy we can reach the minimum, even if the first approximation of a set of unknown parameters is too far removed from true solution. The χ^2-test is also useful in the case of quasielastic scattering spectral analysis. In this paper, we present a procedure for the data analysis in quasielastic neutron scattering, and results of numerical calculations for a typical minimization problem are described.

1. 序　　論

中性子準弾性散乱を利用したこれまでの多くの研究では，測定したスペクトルピークの半値幅と散乱モデルに基づく計算結果の半値幅を比較することによって，散乱モデルの許容あるいは棄却を決定してきた[1)-3)]。したがって，データ解析の手続きは直接的であり，また簡単であった。しかし，スペクトルピークのプロフィル（輪郭）から情報を引き出そうとすると，膨大なデータ処理計算を必要とすることになり，統計的手法を積極的に用いる必要がある。

実際に問題となる中性子準弾性散乱スペクトルのプロフィルは，ローレンツ函数に似た形状をしており，唯一のピークとその裾の部分の比較的単調な形であるが，中心部分との微妙な形と相対強度の兼ね合いの中に，散乱断面積の未知パラメータに関する情報が隠されている。さらに，測定データには，装置函数の畳込み積分による広がりと，統計誤差によるばらつきが付随している。これらの理由のために，準弾性散乱スペクトルプロフィルのデータを一見しただけでは，散乱モデルを仮定して，未知パラメータを調整してあてはめ曲線を求めても，パラメータの値の選

* 原子工学科　放射線源工学講座

択に大きな幅があって，明確にはパラメータを定めにくい，ひいては散乱モデルの適否を明確には決定し難いのではないかとの懸念が生じるのは当然のことである。

加速器冷中性子源を使った準弾性散乱分光器が完成し，さらにデータ集録システムが設置されて，ピコ秒台の特性時間の原子・分子の揺動に関連する現象を調べる装置として稼動を開始している[4)5)]。その開発と並んで統計データ解析システムの研究開発を行ない，上記の問題を調べた。本論文では，準弾性散乱スペクトル統計データ解析の一般的処法を述べ，遭遇する場合が多い典型的プロフィルの例について計算機実験を行ない，非線型問題の反復解法の収束性，仮説検定の有効性などを調べた結果を述べる。付録では，付随する二三の問題について述べ，さらに仮説検定に使用する χ^2 検定用の数表の代わりになる大きな自由度に対してほぼ4桁まで正確な値を与える簡単で便利な近似計算式を示す。

2. 準弾性散乱スペクトルの測定

中性子準弾性散乱はエネルギー変化が小さい非弾性散乱の一種であり，散乱試料に入射する中性子のエネルギー E_1 と散乱後の中性子のエネルギー E_2 を測定しなければならない。この測定を行なう装置が準弾性散乱分光器であり，測定方法の違いにより数種類の型式がある。分光器は二組の中性子エネルギー分析測定装置を備えており，時間あるいは散乱角を制御された変数とする一連の中性子計数が得られる。この分光器によって測られるスペクトルは中性子の入射および散乱エネルギーと散乱角を変数とする準弾性散乱断面積に必要な変数変換および積分変換を施した或る母集団からのサンプルである。変数変換あるいは積分変換の内容は分光器の型式に応じて定まっている。本論文では，加速器パルス中性子源を使ったいわゆる逆転配置の飛行時間型分光器について考えることにする。図1は，この方式の分光器の装置の組み合わせ配置と中性子の挙動を示す概念図である。

加速器のターゲットで発生した平均エネルギーが約 1 MeV の速中性子は，減速材に入射してから減速熱化によって熱中性子あるいは冷中性子となる。この低エネルギー中性子は時間的にパルス状になって発生し，数 10μ 秒から約 200μ 秒の放出時間を持ち，減速材表面から散乱試料へ向けてビーム状になって放出される。図1の内挿図 Ⓐ～Ⓓ は，分光器の各位置における中性子のエネルギー・時間特性の概要を示したものである。時間 t の原点は加速器のバースト時刻である。Ⓐ の t は中性子放出時間を表わし，Ⓑ～Ⓓ では中性子の飛行時間を表わすことになる。減速材中性子放出面上では，中性子は Ⓐ に示すように上記の放出時間を持つ短かいパルス状をしている。散乱試料位置では，Ⓑ に示すようにそのエネルギーに応じて散乱試料に達する時刻が異なっている。試料で散乱された中性子は，準弾性散乱あるいは非弾性散乱で，一般にエネルギーが変化してから，所定の散乱角 θ のものがアナライザーミラーに入射して，さらにその中からあらかじめ設定されているエネルギー E_2 のものだけが中性子カウンターの方向に反射されて検出される。この時，加速器のバースト時から検出されるまでの中性子の全飛行時間 t が計測・記録される。入射中性子のエネルギー E_1 は t と E_2 から計算して決定される。飛行時間 t は，時間分析器によって計測される。飛行時間の必要な領域を N 個の離散的な時間チャネルに分割してあり，データは各チャネル当たりの計数となる。測定された散乱スペクトルのデータは，データ集録システムに格納・整理・記録・作図される。

n 番目の代表時刻 t_n のチャネルの計数を y_n とすると，測定された準弾性散乱スペクトルであるサンプル $\boldsymbol{y}$ は，次式のように N 個の要素から成り立っていることになる。

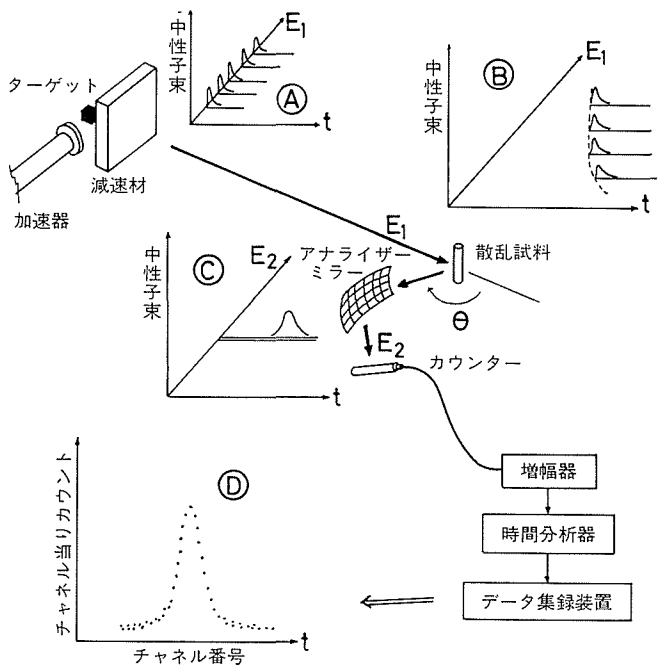


図1 実験装置配置と測定原理の概念図

$$\boldsymbol{y}=(y_1, y_2, \ldots, y_N) \tag{1}$$

上記のように，各 y_n には統計誤差が含まれている。$\boldsymbol{y}$ は整数値をとる離散型ランダム変数であるが，このことは重要ではなく充分 y_n が大きければ連続型と見なしてもかまわない。各チャネルの代表時刻 $(t_1, t_2 \ldots, t_N)$ が制御された独立変数である。各チャネルの測定は互いに独立である。

3. 散乱モデルの検定

前章で説明したように，実験結果を構成する量は，飛行時間分析器の離散的時間チャネルに計数される一連の中性子計数スペクトルである。この N 個の成分からなるランダム変数 $\boldsymbol{y}$ の成分計数 y_n にはすでに述べたように測定誤差が含まれている。誤差 ε_n は零のまわりに正規分布をしていると仮定することができる。

$$E(\varepsilon_n)=0, \qquad E(\varepsilon_n^2)=\sigma_n^2 \tag{2}$$

この分散 σ_n^2 をまとめて，$\boldsymbol{y}$ の対角的な共分散行列で表わす。

$$C_y=\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & & 0 \\ & \sigma_2^2 & \\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma_N \end{pmatrix} \tag{3}$$

中性子準弾性散乱の統計データ解析では，散乱モデルの仮説に基づく中性子散乱断面積 σ を用いて計算した n 番目チャネルに中性子が入射する確率 η_n とサンプルの y_n とを直接比較する手法をとる。一般に，σ には R 個の未知パラメータが含まれている。したがって，

$$\eta=\eta(\boldsymbol{x}) \tag{4}$$

である。ここで，$\boldsymbol{x}=(x_1, x_2, \ldots, x_R)$ である。η と $\boldsymbol{y}$ については，あてはめが良好であれば，

$$\boldsymbol{y}=\eta(\boldsymbol{x})+\varepsilon \tag{5}$$

の関係で結ばれる。

加速器中性子源を使った逆転配置の飛行時間型準弾性散乱分光器の場合には，η_n は具体的に次の表式で与えられる。

$$\eta_n=\text{const.}\iiint\phi(E_1,t_1)\sigma(E_1\to E_2,\theta)R(E_2)\delta(t_n-t_1-L_2/\sqrt{2E_2/m})dE_1dE_2dt_1 \tag{6}$$

ここで，$\phi(E_1,t_1)$ はエネルギーが E_1 で，時刻 t_1 に散乱試料に入射する中性子ビームのエネルギー・時間スペクトルであり，図1の Ⓐ に特徴が示されている。$\sigma(E_1\to E_2,\theta)$ は，散乱角が θ で，E_1 から E_2 へエネルギーが変化する散乱断面積であり，これが未知パラメータを含む。$R(E_2)$ はアナライザーミラーの分解能函数である。$\delta(t_n-t_1-L_2/\sqrt{2E_2/m})$ は各時間の整合を保証するための δ 函数である。m は中性子質量を，L_2 は試料から中性子カウンターまでの第2飛行路長を表わす。散乱モデルすなわち仮説を決めると，$\sigma(E_1\to E_2,\theta)$ の函数型が決定される。その中の未知パラメータを (5) 式の最良のあてはめが得られるように調整する。このために，通常の統計データ解析の手法に従って[6]，次の目的函数を採用する。

$$M=\sum_{n=1}^{N}\frac{\varepsilon_n^2}{\sigma_n^2}=\varepsilon^{+}C_y^{-1}\varepsilon \tag{7}$$

ここで，＋記号は転置を表わす。この M を最小化するように $\boldsymbol{x}$ を決定すれば良いわけである。

あてはめの良さを検定することにより，散乱モデルの仮説を許容するか棄却するかを決定する。この種の検定では χ^2 検定を用いる[6]。自由度が N–R 個である場合に，有意水準 α に対する χ^2 の分位数に関して，

$$M<\chi^2_{1-\alpha}(N-R) \tag{8}$$

が成り立つなら，あてはめの結果を許容することができる。すなわち，散乱モデルを受け入れても良いことになる。(χ^2 の分位数は数表で与えられているが，我々が遭遇する自由度は 100 ないし 200 程度の大きな値であり，この範囲の数表は入手し難いことが多い。そこで，大きな自由度に対して便利な精度の良い近似計算式を作ったので，付録に示しておいた。)

4. 最小化の方法

パラメータ空間内で，M を最小化する $\boldsymbol{x}$ の値を求めなければならない。

$$M(\boldsymbol{x})=\min. \tag{9}$$

を解く方法はいろいろ考えられるが，問題に応じてそれぞれ適した方法を見つけ出さねばならない。最小二乗法は最も良く用いられているが，常にこれが成功するわけではない。非線型パラメータの場合には，しばしばうまくいかないことが起こる。本章では，まず中性子準弾性散乱に適用する Taylor 展開最小二乗法について述べる。次に，パラメータ軸に沿ってステップ状に各パラメータを動かしながら M を計算して，M の最小点を見つける処法について述べる。

表記を簡単にするために，(6) 式を次のように演算記号を用いて書きかえる。

$$\eta_n=L_n\sigma(\boldsymbol{x}) \tag{10}$$

ここで，L_n は (6) 式の積分変換を表わし，$\sigma(\boldsymbol{x})$ は断面積を表わす略号である。ベクトル記法を用いると，(10) 式は次のようになる。

$$\eta=\boldsymbol{L}\sigma(\boldsymbol{x}) \tag{11}$$

一般に，$\sigma(\boldsymbol{x})$ と $\boldsymbol{x}$ の関係は非線型であり，$\boldsymbol{L}$ には $\boldsymbol{x}$ は含まれていない。

適当な方法で試行値 $\boldsymbol{x}_0$ を見出し，$\sigma(\boldsymbol{x})$ を $\boldsymbol{x}_0$ のまわりで Taylor 展開して，1次の項までと

れば,

$$\sigma(\boldsymbol{x})=\sigma(\boldsymbol{x}_0)+(x_1-x_{10})\left(\frac{\partial\sigma}{\partial x_1}\right)_{x=x_0}+\cdots\cdots+(x_r-x_{r0})\left(\frac{\partial\sigma}{\partial x_r}\right)_{x=x_0}+\cdots\cdots \tag{12}$$

となる。ここで，次の諸量を定義する。

$$\boldsymbol{z}=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0 \tag{13}$$

$$A=\begin{pmatrix} a_{11}\cdots\cdots a_{1R} \\ \vdots \qquad\quad \vdots \\ a_{N_1}\cdots a_{NR} \end{pmatrix} \tag{14}$$

$$a_{nr}=L_n\left(\frac{\partial\sigma}{\partial x_r}\right)_{x=x_0} \tag{15}$$

これを用いると η は次のようになる。

$$\eta(\boldsymbol{x})=\eta(\boldsymbol{x}_0)+A\boldsymbol{z} \tag{16}$$

これを (5) 式に代入して，ε を求めると，

$$\varepsilon=\boldsymbol{y}-\eta(\boldsymbol{x}_0)-A\boldsymbol{z} \tag{17}$$

となる。これを (7) 式に代入して，M に対する $\boldsymbol{z}$ の最小二乗解を求めると，

$$\boldsymbol{z}=(A^{+}C_y^{-1}A)^{-1}A^{+}C_y^{-1}[\boldsymbol{y}-\eta(\boldsymbol{x}_0)] \tag{18}$$

を得る[6]。$\boldsymbol{x}$ の共分散行列は

$$C_x=(A^{+}C_y^{-1}A)^{-1}$$

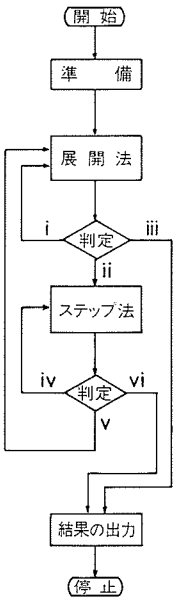
となる。この手続きを反復して，M または $\boldsymbol{x}$ が変化しなくなるまで繰り返す。(以下では Taylor 展開法と略称する。)

(12) 式の展開を1次までとったのでは，$\sigma(\boldsymbol{x})$ を充分正確には表わせない場合について考える。そのような場合には，試行パラメータ $\boldsymbol{x}_0$ を用いて M を計算する。次に，$\boldsymbol{x}$ 内のあるパラメータ軸に沿って $\boldsymbol{x}_0$ から若干そのパラメータをあるステップだけ変化させてさらに M を計算して，前の M の値と比較して，次の M の方が小さくなる $\boldsymbol{x}$ を捜して，極小点を与えるパラメータの値を決定する。この操作をすべてのパラメータについて行なう。このようにして，常に i 番目の M_i よりも $i+1$ 番目の M_{i+1} の方が小さくなる $\boldsymbol{x}$ を捜して，M が小さくなる方向が見出されなくなった時に止める。(以下ではステップ法と略称する。)

5. 最小化プログラム

(9) 式を解く場合に，どうすれば遭遇するかもしれない見かけの解の発散を回避して最も早く充分正確な答えに達することができるかということには，一般論は存在しないというのが通念になっている[6]。中性子準弾性散乱スペクトルの場合には，初期値が正確な答えから離れ過ぎている場合に，Taylor 展開法で反復計算すると M が増加することがある。また，収束条件が厳し過ぎる場合にも，解が振動して収束しないことがある。少なくとも，第1近似で試行パラメータが良いという保証は全くわからないわけである。そのような場合にもステップ法では M が増加発散するようなことはない。しかし，ステップ法の計算の手間は一般に Taylor 展開法よりも多い。そこで解の見かけの発散を避けながら，最小の労力で M の最小点に達するために，Taylor 展開法とステップ法を組み合わせた適切な戦術を用いる必要がある。

Taylor 展開法において，引き続く M_i の値を比較することによって，発散が起こる兆候を検出することができる。しかし，$M_{i+1}>M_i$ でありながら，かつ $M_{i+2}<M_{i+1}$ であるような場合もしばしば起こる。これを予め検出する手段は見つかっていない。また，Taylor 展開法が使え



	判 定 内 容
i	$M_{i+1}<M_i$ なら反復する。又は $M_{i-1}<M_i$ でも i がその組の初回なら反復する。
ii	$M_{i-2}>M_{i-1}>M_i$ （×(i)を持って行く）
iii	$\left\|\frac{M_{i-1}-M_i}{M_i}\right\|\leq\delta$
iv	$M_{i+1}<M_i$
v	$M_i<\beta N$
vi	$\left\|\frac{M_{i+1}-M_i}{M_i}\right\|\leq\delta$

註1） δ は収束条件である。
註2） 各判定において、共に、yes のものがあれば、時計廻りの早い時刻の方が優先する。

図2 最小化プログラムの流れ図

る際には，後者を使った方が早く M が収束するのであるから，見かけの発散が起こったので已むを得ずステップ法を採用した際にも，$\boldsymbol{x}$ が正確な答えに接近して，Taylor 展開法を適用しても発散が無くなる状況になったならば，Taylor 展開法に速やかに復帰するべきである。この場合にも，その状況を先験的に判断する手段は見つかっていない。

図2に，最小化戦術のプログラムの1例の流れ図を示す。この戦術では，とにかく M の最小値にたどり着くことが可能である。ステップ法から Taylor 展開法へ移行するかどうかの判断は，M の値が予期される χ^2 分位数の p 倍以下になったら移行するということにしている。p をいくらに選べばよいかについては一般論はなく，経験的に見出さねばならないが，おそらく倍率 p は数倍ないし十数倍の程度を選べば良いであろう。

6. 計 算 例

準弾性散乱スペクトルは，散乱試料の原子・分子の固有の揺動運動モードを反映して，微妙なスペクトルプロフィルを示すが，2つのモードの影響が強く現われる例が多い。各モードはさらに1個ないし複数個のパラメータによって特徴づけられる。本章では，次式のような2つのモードを有する典型的な散乱函数について，最小化の過程がどのように収束するか，統計誤差の大きさがパラメータの誤差にどのように反映するのか，未知パラメータの初期推定値の正確な答えからのずれがどのように収束性に影響するのかなどについて，電算機による統計データ解析プログラムで調べた結果を示す。

$$S_{\mathrm{inc}}(Q,\omega)=\mathrm{const.}\,e^{-2W}\{1+(n-1)j_0^2(Qd)\}\frac{f(Q)}{\omega^2+f^2(Q)}$$
$$+(n-1)\{1-j_0^2(Qd)\}\frac{f(Q)+\mu}{\omega^2+\{f(Q)+\mu\}^2} \tag{20}$$

ここで，$f(Q)=D_tQ^2/(1+D_t\tau_tQ^2)$，$\mu=n(n-1)^{-1}\tau_f^{-1}$ である。

統計データ解析プログラムの本来の目的は実際の実験データを解析することであるが，プログラムの性質を調べるためには予め正しい答えを知っておく必要がある。そこで，予め設定したパラメータの値と (20) 式および (6) 式を使って散乱スペクトルを計算し，乱数を使って正規分布に従う誤差を付け加えて，模擬実験データを作成し，これについてデータ解析を行なった。したがって，実験データの誤差が正規分布をしていることが保証されており，未知パラメータの最尤推定値が正しい答えからどれ位ずれているか，誤差の範囲内にあるかなどを知ることができる。

計算には QUESSA-NLG および-NLD コードを使用した。前者では分光器の分解能に関与する装置函数をまとめてガウス函数で近似しており，後者では分解能を δ 函数として計算に取り入れている。この計算機実験では，(20) 式のパラメータの中で，D_t と τ_t は既知であり，const. e^{-2W}，n, τ_f および d を未知パラメータとした。既知パラメータの値は次の通りである。

$$D_t=0.19 \qquad (\text{Å}^2\cdot ps^{-1})$$

$$\tau_t=1.2 \qquad (ps)$$

未知パラメータ $\boldsymbol{x}$ の成分数は $R=4$ であり，x_1～x_4 を次のように対応させた。

$x_1=$const. e^{-2W} (チャネル当たり計数が所定の統計になるように選ぶ)

$x_2=n$ (個数)

$x_3=\tau_f$ (ps)

$x_4=d$ (Å)

図3に，模擬実験データと後述する解析計算の結果を示す。図の縦軸はチャネル当たりの計数であり，誤差は統計誤差で正規分布をしている。横軸は時間分析器のチャネル数であり，110 チャネルから 230 チャネルまでの 121 個のデータについて解析した。散乱函数の未知パラメータ x_1～x_4 の初期試行値，最尤推定値および真値は表1のケース 1 (D) のものである。図の内挿表に示すように4回の反復計算で M の値は収束している。破線が初期試行パラメータを用いた η の値であり，実線が4回の反復計算を経て収束した最尤あてはめ曲線である。

表1は，図3のケースと同様にして計算した5組のケースについての統計データ解析計算例および χ^2 の分位数を示す。全ての結果について，$\alpha=5\%$ で χ^2 検定を行なっても，あてはめ曲線は棄却されることはないであろう。かなり異なる試行値から出発しても，同一の実験データに対しては，当然ではあるが，全く同じように収束した結果に達している。統計の良否は，これも当然であるが，M の収束結果の値の大きさにはあまり影響しない。このことは重要な点であって，M の値のずれが仮説モデルの不適切さを反映するわけである。この点については，今後さらに詳細に調べる必要がある。

(D) と記入してある結果は分解能が δ 函数であり，(G) ではガウス函数で半値幅を 250 μeV に選んである。表1からわかるように，装置の分解能はあまり結果には大きく影響しないことがわかる。

統計の良否は，ケース 1, 2, 5 およびケース 3, 4 の組の比較からわかるように，未知パラメータの最尤値の誤差の大きさに影響する。統計の良否にかかわらず，パラメータの最尤値は共分散行列の対角要素から求めた誤差の範囲で真値に良く合っている。

7. 結　　言

以上に示した結果は，統計データ解析手法が中性子準弾性散乱の場合においても，いかに有用

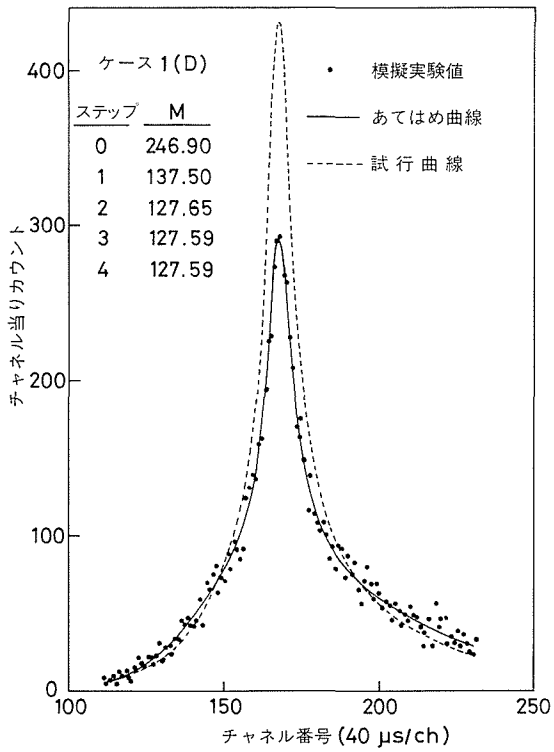


図3 計算実験の結果

表1 模擬実験の統計データ解析と χ^2 分位数

ケース 1 (D)			
	試行値	最尤値	真値
x_1	10.0	8.69±3.21	11.0
x_2	5.5	6.34±2.30	5.0
x_3	0.5	0.39±0.02	0.4
x_4	1.1	1.14±0.13	1.2
初回 M=246.90		収束 M=127.59	
反復回数	展開法	ステップ法	
4	4	0	

ケース 2 (D)			
	試行値	最尤値	真値
x_1	9.0	8.69±3.21	11.0
x_2	6.0	6.34±2.30	5.0
x_3	0.6	0.39±0.02	0.4
x_4	0.9	1.14±0.13	1.2
初回 M=893.40		収束 M=127.59	
反復回数	展開法	ステップ法	
6	6	0	

ケース 3 (D)			
	試行値	最尤値	真値
x_1	110.0	93.49±8.18	100.0
x_2	6.0	5.35±0.46	5.0
x_3	0.55	0.40±0.01	0.4
x_4	0.9	1.18±0.04	1.2
初回 M=31066.0		収束 M=127.60	
反復回数	展開法	ステップ法	
7	0	0	

ケース 4 (G)			
	試行値	最尤値	真値
x_1	80.0	93.44±8.91	100.0
x_2	4.0	5.34±0.47	5.0
x_3	0.3	0.40±0.01	0.4
x_4	1.5	1.17±0.05	1.2
初回 M=25519.4		収束 M=128.71	
反復回数	展開法	ステップ法	
10	2+5	3	

ケース 5 (G)			
	試行値	最尤値	真値
x_1	10.0	8.57±3.65	11.0
x_2	5.5	6.39±2.59	5.0
x_3	0.5	0.40±0.03	0.4
x_4	1.1	1.12±0.14	1.2
初回 M=284.72		収束 M=128.69	
反復回数	展開法	ステップ法	
5	5	0	

$\chi^2_{1-\alpha}(N\text{-}R)$ の分位数

自由度	α	χ^2
117	5%	143.25
117	1%	155.50
117	0.1%	170.02

であるかを示している。そして，中性子スペクトルの形が単調であるために，未知パラメータを明確には定め難いのではないかという懸念は払拭された。パラメータの最尤値の誤差は統計の良否に影響されるが，それがどのように振舞うかについては，前記の手法で適確に調べることができるから，予め実験条件を適切に設定することができる。

付　　録　A-1

断面積に含まれる未知パラメータの最尤値を決める前に，測定データのピークのチャネル位置の決定を行なっておくことが望ましい。この際に，ピーク付近のどのチャネルのデータを使用すれば，ピーク位置の誤差が最も小さくなるかを考える。この場合，η_n とピークチャネル位置の関係は非線型である。逐次反復計算により，ほぼ正確を得た場合を考える。チャネルピーク位置について η_n を Taylor 展開して1次の項までとり，測定データに最小二乗あてはめを行なって，ピーク位置時刻の誤差 Δt_p を求めると次のようになる。

$$(\Delta t_p)^2 \approx \left(\frac{1}{\sum_{n=1}^{N} (d\eta_n/dt)^2/\eta_n} \right)_{t=t_{p_0}} \tag{A1}$$

ここで，t_{p_0} は最終のピーク位置の推定値である。(A1) 式の分母の和の各項は，測定データのピークの両側のカーブの変曲点付近において大きな値を持ち，ピークの中心付近およびピークの裾では小さな値しか持たない。したがって，この項が大きな値を持つようなチャネルを含めてピーク位置の推定を行なうべきである。

付　　録　A-2

スペクトルピークの半値幅を，直接に測定データから概算する必要が起こることがある。最も簡単な方法では，ピークの両側において，半値高 $y_{1/2}$ の付近の数点のチャネルの計数に対して，1次式をあてはめ，$y=y_{1/2}$ との二つの交点の間のチャネル数から半値幅を決定する。この際には，当然誤差の評価を行なわねばならない。この評価では，あてはめ直線群の $y=y_{1/2}$ における t 方向の広がりから目安をつける。あてはめ直線群の共分散円の性質の考察から，所要の半値幅の誤差 Δw は評価されて，次式のようになる。

$$(\Delta w)^2 \approx y_{1/2}^2[(1/\tilde{a}_R)^2 + (1/\tilde{a}_L)^2] \tag{A2}$$

ここで，$\tilde{a}_R$ と $\tilde{a}_L$ はピークの右側および左側のあてはめ直線の勾配である。

付　　録　A-3

中性子準弾性散乱の統計データ解析では，しばしば大きな自由度の χ^2 分位数が必要になるが，100 以上の自由度に対しては数表を入手し難い場合が多い。また，統計データ解析計算のための電算機プログラムにおいても，任意の自由度に対して計算できる簡単な式があることが望ましい。χ^2 分位数の性質を考慮して，次の近似式を作った。

$$\chi^2_{1-\alpha}(f) \approx f(1 + a_1/\sqrt{f} + a_2/f) \tag{A3}$$

表 A-1 に与えてある a_1 と a_2 を用いると，$50 \leq f \leq 200$ の範囲において，相対誤差が 1/1000 以内の精度で，χ^2 分位数を計算することができる。

表 A1 χ^2 分位数の近似式の係数

α	a_1	a_2
5%	2.3347	0.9961
1%	3.2961	2.8467
0.1%	4.3691	5.7617

参 考 文 献

1) T. Springer: "Springer Tracts in Modern Physics", Vol. 64, (1972), Springer-Verlag.
2) S. W. Lovesey; "Topics in Current Physics", Vol. 3, (1977), Springer-Verlag.
3) 井上和彦: 日本原子力学会誌, Vol. 21 〔10〕, 762 (1979).
4) 井上和彦: 北大工学部研究報告, 90 号, 69 (1978).
5) 井上和彦, 他: 日本原子力学会誌, Vol. 21 〔11〕, 865 (1979).
6) S. Brandt: "Statistical and Computational Methods in Data Analysis", (1970), North-Holland.