2011年12月13日(火) 作成

2012年1月5日(木) 修正

畳み込みとしての粉末回折強度

観測される粉末回折強度は，個々の結晶粒からの回折強度の畳み込みとして表現されます。このことは，N 個の結晶粒からそれぞれの回折強度を $I_1, I_2, \ldots, I_N$ としたときに，観測される全回折強度 I が

$$I = I_1 + I_2 + \ldots + I_N \tag{1}$$

と表されるということとまったく同じことです。そのように単純なことを，わざわざ「畳み込み」という言葉で表現するのは不思議に見えるかもしれませんが，このことは意外に

複雑な問題を含んでおり，「畳み込み」と表現する事でその問題点と解決法を明確にすることを意図しています。

観測される粉末回折強度の統計的な分布がどのようになるかは以下のように導くことができます。

第 j 番目の結晶粒からの回折強度が I_j という値をとる確率密度関数を $p_j\left(I_j\right)$ と表します。別の言い方をすると，回折強度が I_j から $I_j + \mathrm{d}I_j$ までの値をとる確率が $p_j\left(I_j\right)\mathrm{d}I_j$ と表されるとします（$\mathrm{d}I_j$ は充分に小さい値だとします）。全回折強度が I

という強度をとることに対応する確率密度関数は

$$P(I)=\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}p_1(I_1)\cdots p_N(I_N)\times\delta\left(I-\sum_{j=1}^{N}I_j\right)\mathrm{d}I_1\cdots\mathrm{d}I_N \qquad (2)$$

と表現されます。ここで，$\delta(x)$ はディラックのデルタ関数 Dirac delta function です。

観測される粉末回折強度の統計分布は式 (2) によって厳密に表現されますが，この式をそのままの形式を使って解くことは現実的には不可能です。ところが「畳み込みのキュムラントはキュムラントの和に等しい」という加成性が成立する事を利用すれば実質的にこの問題を解くことができます。

　畳み込みの例として，「複数のサイコロの目の和」がどのような確率分布を持つかを考えれば理解しやすいでしょう。

名古屋工業大学
セラミックス基盤工学研究センター
井田 隆