

2016年4月14日(木) 作成

2016年5月1日(日) 修正

RIETVELD の非対称ガウシアン

名古屋工業大学先進セラミックス研究センター

井田隆

[H. M. Rietveld, “A Profile Refinement Method for Nuclear and Magnetic Structures”, J. Appl. Crystallogr. 2, 65–71 (1969)]

上記文献で提案されている非対称化 Gaussian 関数の反射ピーク形状モデルについて考える。このモデルでは

$$f_R(x; x_R, b_R, p_R) = N_R \exp\left[-b_R(x - x_R)^2\right] \begin{cases} 1 - p_R(x - x_R)^2 & [x \leq x_R] \\ 1 + p_R(x - x_R)^2 & [x_R < x] \end{cases}$$

と表現されている。 p_R は非対称パラメータである。この形式では低角度ピークの高角側の裾が負の値をとってしまうことになるが、このことを気にしなければ

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f_R(x; x_R, b_R, p_R)}{N_R} dx &= \int_{-\infty}^{x_R} \left[e^{-b_R(x-x_R)^2} - p_R(x-x_R)^2 e^{-b_R(x-x_R)^2} \right] dx \\ &\quad + \int_{x_R}^{\infty} \left[e^{-b_R(x-x_R)^2} + p_R(x-x_R)^2 e^{-b_R(x-x_R)^2} \right] dx \\ &= \int_{-\infty}^0 \left(e^{-b_R y^2} - p_R y^2 e^{-b_R y^2} \right) dy + \int_0^{\infty} \left(e^{-b_R y^2} + p_R y^2 e^{-b_R y^2} \right) dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-b_R y^2} dy - p_R \int_{-\infty}^0 y^2 e^{-b_R y^2} dy + p_R \int_0^{\infty} y^2 e^{-b_R y^2} dy \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{b_R}} \end{aligned}$$

となる。したがって、 $N_R = \sqrt{\frac{b_R}{\pi}}$ とすれば規格化される。少し形式を変えた等価な形式として、

$$f_R(x; x'_R, \sigma'_R, p_R) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma'_R} \exp\left[-\frac{(x-x'_R)^2}{2\sigma'^2_R}\right] \begin{cases} 1 - p_R(x-x'_R)^2/2\sigma'^2_R & [x \leq x'_R] \\ 1 + p_R(x-x'_R)^2/2\sigma'^2_R & [x'_R < x] \end{cases}$$

とすれば、平均は x'_R に近い値になり、標準偏差は σ'_R に近い値になるはずである。

まず、このモデルの平均位置について考える。

$$\int_{-\infty}^{\infty} x f_R(x; x'_R, \sigma'_R, p_R) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma'_R} \int_{-\infty}^{x'_R} x \left[e^{-(x-x'_R)^2/2\sigma'^2_R} - \frac{p_R(x-x'_R)^2}{2\sigma'^2_R} e^{-(x-x'_R)^2/2\sigma'^2_R} \right] dx$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma'_R}} \int_{x'_R}^{\infty} x \left[e^{-(x-x'_R)^2/2\sigma'^2_R} + \frac{p_R (x-x'_R)^2}{2\sigma'^2_R} e^{-(x-x'_R)^2/2\sigma'^2_R} \right] dx \\
& \stackrel{\substack{= \\ \uparrow \\ x-x'_R=y \\ dx=dy}}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma'_R}} \int_{-\infty}^0 (y+x'_R) \left(e^{-y^2/2\sigma'^2_R} - \frac{p_R y^2}{2\sigma'^2_R} e^{-y^2/2\sigma'^2_R} \right) dy \\
& \quad \begin{array}{l} x : -\infty \rightarrow x_R \rightarrow \infty \\ y : -\infty \rightarrow 0 \rightarrow \infty \end{array} \\
& + \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma'_R}} \int_0^{\infty} (y+x'_R) \left(e^{-y^2/2\sigma'^2_R} + \frac{p_R y^2}{2\sigma'^2_R} e^{-y^2/2\sigma'^2_R} \right) dy \\
& \stackrel{\substack{= \\ \uparrow}}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma'_R}} \int_{-\infty}^{\infty} (y+x'_R) e^{-y^2/2\sigma'^2_R} dy - \frac{p_R}{2\sqrt{2\pi\sigma'^3_R}} \int_{-\infty}^0 (y+x'_R) y^2 e^{-y^2/2\sigma'^2_R} dy \\
& \quad \int_0^{\infty} \dots dy + \int_{-\infty}^0 \dots dy = \int_{-\infty}^{\infty} \dots dy \\
& \quad \int_0^{\infty} f(|y|) dy - \int_{-\infty}^0 [-f(|y|)] dy = 2 \int_0^{\infty} f(|y|) dy \\
& + \frac{p_R}{2\sqrt{2\pi\sigma'^3_R}} \int_0^{\infty} (y+x'_R) y^2 e^{-y^2/2\sigma'^2_R} dy \\
& \stackrel{\substack{= \\ \uparrow}}{=} \frac{x'_R}{\sqrt{2\pi\sigma'_R}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2\sigma'^2_R} dy + \frac{p_R}{\sqrt{2\pi\sigma'^3_R}} \int_0^{\infty} y^3 e^{-y^2/2\sigma'^2_R} dy \\
& \quad \int_{-\infty}^{\infty} y e^{-y^2/2\sigma'^2_R} dy = 0 \\
& \stackrel{\substack{= \\ \uparrow}}{=} x'_R + \frac{p_R}{\sqrt{2\pi\sigma'^3_R}} \left\{ \left[-\sigma'^2_R y^2 e^{-y^2/2\sigma'^2_R} \right]_0^{\infty} + 2\sigma'^2_R \int_0^{\infty} y e^{-y^2/2\sigma'^2_R} dy \right\} \\
& \quad \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma'^3_R}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2\sigma'^2_R} dy = 1 \\
& \quad \int_0^{\infty} y^3 e^{-y^2/2\sigma'^2_R} dy = \left[-\sigma'^2_R y^2 e^{-y^2/2\sigma'^2_R} \right]_0^{\infty} + 2\sigma'^2_R \int_0^{\infty} y e^{-y^2/2\sigma'^2_R} dy \\
& \stackrel{\substack{= \\ \uparrow}}{=} x'_R + \frac{2p_R}{\sqrt{2\pi\sigma'_R}} \int_0^{\infty} y e^{-y^2/2\sigma'^2_R} dy \\
& \quad \left[-\sigma'^2_R y^2 e^{-y^2/2\sigma'^2_R} \right]_0^{\infty} = 0 \\
& = x'_R + \frac{2p_R}{\sqrt{2\pi\sigma'_R}} \left[-\sigma'^2_R e^{-y^2/2\sigma'^2_R} \right]_0^{\infty} = x'_R + \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R
\end{aligned}$$

平均位置は非対称パラメータがゼロ ($p_R=0$) のときに x'_R と一致し、 p_R に比例してシフトするという挙動は、定性的にこのプロファイルの性格を再現できている。

かりに $x'_R=0$, $\sigma'_R=0.5$, $p_R=-0.1$ とすると、

$$x'_R + \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R = -0.0398942$$

$$\sum_{j=-3000}^{3000} \frac{j}{1000} f_R \left(x = \frac{j}{1000}; x'_R=0, \sigma'_R=0.5, p_R=-0.1 \right) = -0.0398942$$

かりに $x'_R=0$, $\sigma'_R=0.5$, $p_R=-0.2$ とすると、

$$x'_R + \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R = -0.0797885$$

$$\sum_{j=-3000}^{3000} \frac{j}{1000} f_R \left(x = \frac{j}{1000}; x'_R = 0, \sigma'_R = 0.5, p_R = -0.2 \right) = -0.0797885$$

かりに $x'_R = 0$, $\sigma'_R = 0.25$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$x'_R + \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R = -0.0398942$$

$$\sum_{j=-6000}^{6000} \frac{j}{1000} f_R \left(x = \frac{j}{1000}; x'_R = 0, \sigma'_R = 0.25, p_R = -0.2 \right) = -0.0398942$$

となる。OK! (平均ピーク位置を表す数式は、数値計算の結果と一致している)

二乗平均は

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 f_R(x; x'_R, \sigma'_R, p_R) dx &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma'_R} \int_{-\infty}^{x'_R} x^2 \left[e^{-(x-x'_R)^2/2\sigma'^2_R} - \frac{p_R(x-x'_R)^2}{2\sigma'^2_R} e^{-(x-x'_R)^2/2\sigma'^2_R} \right] dx \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma'_R} \int_{x'_R}^{\infty} x^2 \left[e^{-(x-x'_R)^2/2\sigma'^2_R} + \frac{p_R(x-x'_R)^2}{2\sigma'^2_R} e^{-(x-x'_R)^2/2\sigma'^2_R} \right] dx \\ &\stackrel{\substack{\uparrow \\ (x-x'_R)/\sqrt{2}\sigma'_R \equiv y \\ dx = \sqrt{2}\sigma'_R dy}}{=} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 (\sqrt{2}\sigma'_R y + x'_R)^2 (e^{-y^2} - p_R y^2 e^{-y^2}) dy \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (\sqrt{2}\sigma'_R y + x'_R)^2 (e^{-y^2} + p_R y^2 e^{-y^2}) dy \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 (2\sigma'^2_R y^2 + 2\sqrt{2}\sigma'_R y x'_R + x'^2_R) (e^{-y^2} - p_R y^2 e^{-y^2}) dy \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (2\sigma'^2_R y^2 + 2\sqrt{2}\sigma'_R y x'_R + x'^2_R) (e^{-y^2} + p_R y^2 e^{-y^2}) dy \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 (2\sigma'^2_R y^2 + 2\sqrt{2}\sigma'_R y x'_R + x'^2_R) e^{-y^2} dy - \frac{p_R}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 (2\sigma'^2_R y^2 + 2\sqrt{2}\sigma'_R y x'_R + x'^2_R) y^2 e^{-y^2} dy \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (2\sigma'^2_R y^2 + 2\sqrt{2}\sigma'_R y x'_R + x'^2_R) e^{-y^2} dy + \frac{p_R}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (2\sigma'^2_R y^2 + 2\sqrt{2}\sigma'_R y x'_R + x'^2_R) y^2 e^{-y^2} dy \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (2\sigma'^2_R y^2 + x'^2_R) e^{-y^2} dy + \frac{4\sqrt{2}p_R x'_R \sigma'_R}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^3 e^{-y^2} dy \\ &= \frac{2\sigma'^2_R}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy + x'^2_R + \frac{4\sqrt{2}p_R x'_R \sigma'_R}{\sqrt{\pi}} \left\{ \left[-\frac{y^2}{2} e^{-y^2} \right]_0^{\infty} + \int_0^{\infty} y e^{-y^2} dy \right\} \\ &= \frac{2\sigma'^2_R}{\sqrt{\pi}} \left\{ \left[-\frac{y}{2} e^{-y^2} \right]_{-\infty}^{\infty} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy \right\} + x'^2_R + \frac{4\sqrt{2}p_R x'_R \sigma'_R}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y e^{-y^2} dy \\ &= \frac{2\sigma'^2_R}{\sqrt{\pi}} \left(0 + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) + x'^2_R + \frac{4\sqrt{2}p_R x'_R \sigma'_R}{\sqrt{\pi}} \left[-\frac{1}{2} e^{-y^2} \right]_0^{\infty} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sigma_R'^2 + x_R^2 + \frac{4\sqrt{2}p_R x_R' \sigma_R'}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2} \right) \\
&= \sigma_R'^2 + x_R^2 + \frac{2\sqrt{2}p_R x_R' \sigma_R'}{\sqrt{\pi}}
\end{aligned}$$

かりに $x_R' = 0$, $\sigma_R' = 0.5$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$\sigma_R'^2 + x_R^2 + \frac{2\sqrt{2}p_R x_R' \sigma_R'}{\sqrt{\pi}} = 0.25$$

$$\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} \right)^2 f_R \left(x = \frac{j}{1000}; x_R' = 0, \sigma_R' = 0.5, p_R = -0.1 \right) = 0.25$$

かりに $x_R' = 0.1$, $\sigma_R' = 0.5$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$\sigma_R'^2 + x_R^2 + \frac{2\sqrt{2}p_R x_R' \sigma_R'}{\sqrt{\pi}} = 0.252021$$

$$\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} \right)^2 f_R \left(x = \frac{j}{1000}; x_R' = 1, \sigma_R' = 0.5, p_R = -0.1 \right) = 0.252021$$

かりに $x_R' = 0.1$, $\sigma_R' = 0.25$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$\sigma_R'^2 + x_R^2 + \frac{2\sqrt{2}p_R x_R' \sigma_R'}{\sqrt{\pi}} = 0.0685106$$

$$\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} \right)^2 f_R \left(x = \frac{j}{1000}; x_R' = 0.1, \sigma_R' = 0.25, p_R = -0.1 \right) = 0.0685106$$

となる。OK! (二乗平均を表す式に数値をあてはめると, 数値計算の結果と一致する)

したがって分散は

$$\begin{aligned}
\sigma_R^2 &= \left(\sigma_R'^2 + x_R^2 + \frac{2\sqrt{2}p_R x_R' \sigma_R'}{\sqrt{\pi}} \right) - \left(x_R' + \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma_R' \right)^2 \\
&= \left(\sigma_R'^2 + x_R^2 + \frac{2\sqrt{2}p_R x_R' \sigma_R'}{\sqrt{\pi}} \right) - \left(x_R^2 + 2x_R \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma_R' + \frac{2}{\pi} p_R^2 \sigma_R'^2 \right) \\
&= \sigma_R'^2 - \frac{2}{\pi} p_R^2 \sigma_R'^2 \\
&= \left(1 - \frac{2}{\pi} p_R^2 \right) \sigma_R'^2
\end{aligned}$$

となる。分散を表す式はピーク位置の影響を受けないはずだから, x_R' が消えて σ_R' と p_R だけの式になっていることはつじつまがっている。

また, 標準偏差は

$$\sigma_R = \sqrt{1 - \frac{2}{\pi} p_R^2} \sigma_R'$$

となる。

3乗平均は

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} x^3 f_{\text{R}}(x; x'_{\text{R}}, \sigma'_{\text{R}}, p_{\text{R}}) dx &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma'_{\text{R}}} \int_{-\infty}^{x'_{\text{R}}} x^3 \left[e^{-(x-x'_{\text{R}})^2/2\sigma'^2_{\text{R}}} - \frac{p_{\text{R}}(x-x'_{\text{R}})^2}{2\sigma'^2_{\text{R}}} e^{-(x-x'_{\text{R}})^2/2\sigma'^2_{\text{R}}} \right] dx \\
&+ \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma'_{\text{R}}} \int_{x'_{\text{R}}}^{\infty} x^3 \left[e^{-(x-x'_{\text{R}})^2/2\sigma'^2_{\text{R}}} + \frac{p_{\text{R}}(x-x'_{\text{R}})^2}{2\sigma'^2_{\text{R}}} e^{-(x-x'_{\text{R}})^2/2\sigma'^2_{\text{R}}} \right] dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 (\sqrt{2}\sigma'_{\text{R}}y + x'_{\text{R}})^3 (e^{-y^2} - p_{\text{R}}y^2 e^{-y^2}) dy \\
&\quad \begin{array}{l} \uparrow \\ (x-x'_{\text{R}})/\sqrt{2}\sigma'_{\text{R}} \equiv y \\ dx = \sqrt{2}\sigma'_{\text{R}} dy \\ x : -\infty \rightarrow x'_{\text{R}} \rightarrow \infty \\ y : -\infty \rightarrow 0 \rightarrow \infty \end{array} \\
&+ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (\sqrt{2}\sigma'_{\text{R}}y + x'_{\text{R}})^3 (e^{-y^2} + p_{\text{R}}y^2 e^{-y^2}) dy \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 (2\sqrt{2}\sigma'^3_{\text{R}}y^3 + 6\sigma'^2_{\text{R}}y^2x'_{\text{R}} + 3\sqrt{2}\sigma'_{\text{R}}yx'^2_{\text{R}} + x'^3_{\text{R}}) (e^{-y^2} - p_{\text{R}}y^2 e^{-y^2}) dy \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (2\sqrt{2}\sigma'^3_{\text{R}}y^3 + 6\sigma'^2_{\text{R}}y^2x'_{\text{R}} + 3\sqrt{2}\sigma'_{\text{R}}yx'^2_{\text{R}} + x'^3_{\text{R}}) (e^{-y^2} + p_{\text{R}}y^2 e^{-y^2}) dy \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 (6\sigma'^2_{\text{R}}y^2x'_{\text{R}} + x'^3_{\text{R}}) e^{-y^2} dy - \frac{p_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 (2\sqrt{2}\sigma'^3_{\text{R}}y^3 + 3\sqrt{2}\sigma'_{\text{R}}yx'^2_{\text{R}}) y^2 e^{-y^2} dy \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (6\sigma'^2_{\text{R}}y^2x'_{\text{R}} + x'^3_{\text{R}}) e^{-y^2} dy + \frac{p_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (2\sqrt{2}\sigma'^3_{\text{R}}y^3 + 3\sqrt{2}\sigma'_{\text{R}}yx'^2_{\text{R}}) y^2 e^{-y^2} dy \\
&= \frac{x'_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (6\sigma'^2_{\text{R}}y^2 + x'^2_{\text{R}}) e^{-y^2} dy + \frac{2\sqrt{2}p_{\text{R}}\sigma'_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (2\sigma'^2_{\text{R}}y^2 + 3x'^2_{\text{R}}) y^3 e^{-y^2} dy \\
&= \frac{6\sigma'^2_{\text{R}}x'_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy + \frac{x'^3_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy + \frac{4\sqrt{2}p_{\text{R}}\sigma'^3_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^5 e^{-y^2} dy + \frac{6\sqrt{2}p_{\text{R}}\sigma'_{\text{R}}x'^2_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^3 e^{-y^2} dy \\
&= \frac{6\sigma'^2_{\text{R}}x'_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) + x'^3_{\text{R}} + \frac{4\sqrt{2}p_{\text{R}}\sigma'^3_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} (2) \int_0^{\infty} y^3 e^{-y^2} dy + \frac{6\sqrt{2}p_{\text{R}}\sigma'_{\text{R}}x'^2_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^3 e^{-y^2} dy \\
&= 3\sigma'^2_{\text{R}}x'_{\text{R}} + x'^3_{\text{R}} + \frac{2\sqrt{2}p_{\text{R}}\sigma'_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} (4\sigma'^2_{\text{R}} + 3x'^2_{\text{R}}) \int_0^{\infty} y^3 e^{-y^2} dy \\
&= 3\sigma'^2_{\text{R}}x'_{\text{R}} + x'^3_{\text{R}} + \frac{2\sqrt{2}p_{\text{R}}\sigma'_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} (4\sigma'^2_{\text{R}} + 3x'^2_{\text{R}}) \left(\frac{1}{2} \right) \\
&= x'_{\text{R}} (3\sigma'^2_{\text{R}} + x'^2_{\text{R}}) + \frac{\sqrt{2}p_{\text{R}}\sigma'_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} (4\sigma'^2_{\text{R}} + 3x'^2_{\text{R}})
\end{aligned}$$

かりに $x'_{\text{R}} = 0$, $\sigma'_{\text{R}} = 0.5$, $p_{\text{R}} = -0.1$ とすると,

$$\begin{aligned}
x'_{\text{R}} (3\sigma'^2_{\text{R}} + x'^2_{\text{R}}) + \frac{\sqrt{2}p_{\text{R}}\sigma'_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} (4\sigma'^2_{\text{R}} + 3x'^2_{\text{R}}) &= -0.0398942 \\
\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} \right)^3 f_{\text{R}} \left(x = \frac{j}{1000}; x'_{\text{R}} = 0, \sigma'_{\text{R}} = 0.5, p_{\text{R}} = -0.1 \right) &= -0.039842
\end{aligned}$$

かりに $x'_{\text{R}} = 0.1$, $\sigma'_{\text{R}} = 0.5$, $p_{\text{R}} = -0.1$ とすると,

$$x'_{\text{R}} (3\sigma'^2_{\text{R}} + x'^2_{\text{R}}) + \frac{\sqrt{2}p_{\text{R}}\sigma'_{\text{R}}}{\sqrt{\pi}} (4\sigma'^2_{\text{R}} + 3x'^2_{\text{R}}) = 0.0349089$$

$$\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} \right)^3 f_R \left(x = \frac{j}{1000}; x'_R = 1, \sigma'_R = 0.5, p_R = -0.1 \right) = 0.0349089$$

かりに $x'_R = 0.1$, $\sigma'_R = 0.25$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$x'_R (3\sigma'^2_R + x'^2_R) + \frac{\sqrt{2} p_R \sigma'_R}{\sqrt{\pi}} (4\sigma'^2_R + 3x'^2_R) = 0.0141648$$

$$\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} \right)^3 f_R \left(x = \frac{j}{1000}; x'_R = 0.1, \sigma'_R = 0.25, p_R = -0.1 \right) = 0.0141648$$

となる。OK!

3次モーメントは

$$\begin{aligned} & x'_R (3\sigma'^2_R + x'^2_R) + \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R (4\sigma'^2_R + 3x'^2_R) \\ & - 3 \left(\sigma'^2_R + x^2_R + 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R x'_R \sigma'_R \right) \left(x'_R + \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R \right) + 2 \left(x'_R + \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R \right)^3 \\ & = 3x'_R \sigma'^2_R + x'^3_R + 4\sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'^3_R + 3\sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R x'^2_R \\ & - \left(3x'_R \sigma'^2_R + 3x^3_R + 6\sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R x^2_R \sigma'_R \right) - \left(3\sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'^3_R + 3\sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R x^2_R + \frac{12}{\pi} p^2_R x'_R \sigma'^2_R \right) \\ & + \left(2x^3_R + 6x^2_R \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R + \frac{12}{\pi} x'_R p^2_R \sigma'^2_R + \frac{4}{\pi} \sqrt{\frac{2}{\pi}} p^3_R \sigma'^3_R \right) \\ & = 4\sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'^3_R + 3\sigma'^2_R x'_R + 3\sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R x'^2_R + x'^3_R \\ & - 3\sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'^3_R - 3\sigma'^2_R x'_R - \frac{12}{\pi} p^2_R \sigma'^2_R x'_R - 6\sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R x^2_R - 3\sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R x^2_R - 3x^3_R \\ & + \frac{4}{\pi} \sqrt{\frac{2}{\pi}} p^3_R \sigma'^3_R + \frac{12}{\pi} p^2_R \sigma'^2_R x'_R + 6\sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'_R x^2_R + 2x^3_R \\ & = \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'^3_R + \frac{4}{\pi} \sqrt{\frac{2}{\pi}} p^3_R \sigma'^3_R \\ & = \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'^3_R \left(1 + \frac{4}{\pi} p^2_R \right) \end{aligned}$$

したがって歪度は

$$\chi_R = \frac{\sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \sigma'^3_R \left(1 + \frac{4}{\pi} p^2_R \right)}{\left(\sqrt{1 - \frac{2}{\pi} p^2_R \sigma'^2_R} \right)^3} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} p_R \left(1 + \frac{4}{\pi} p^2_R \right) \left(1 - \frac{2}{\pi} p^2_R \right)^{-3/2}$$

となる。

4 乗平均は

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} x^4 f_{\mathbf{R}}(x; x'_{\mathbf{R}}, \sigma'_{\mathbf{R}}, p_{\mathbf{R}}) dx &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma'_{\mathbf{R}}} \int_{-\infty}^{x'_{\mathbf{R}}} x^4 \left[e^{-(x-x'_{\mathbf{R}})^2/2\sigma'^2_{\mathbf{R}}} - \frac{p_{\mathbf{R}}(x-x'_{\mathbf{R}})^2}{2\sigma'^2_{\mathbf{R}}} e^{-(x-x'_{\mathbf{R}})^2/2\sigma'^2_{\mathbf{R}}} \right] dx \\
&+ \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma'_{\mathbf{R}}} \int_{x'_{\mathbf{R}}}^{\infty} x^4 \left[e^{-(x-x'_{\mathbf{R}})^2/2\sigma'^2_{\mathbf{R}}} + \frac{p_{\mathbf{R}}(x-x'_{\mathbf{R}})^2}{2\sigma'^2_{\mathbf{R}}} e^{-(x-x'_{\mathbf{R}})^2/2\sigma'^2_{\mathbf{R}}} \right] dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 (\sqrt{2}\sigma'_{\mathbf{R}}y + x'_{\mathbf{R}})^4 (e^{-y^2} - p_{\mathbf{R}}y^2 e^{-y^2}) dy \\
&\quad \begin{array}{c} \uparrow \\ (x-x'_{\mathbf{R}})/\sqrt{2}\sigma'_{\mathbf{R}} \equiv y \\ dx = \sqrt{2}\sigma'_{\mathbf{R}} dy \\ \begin{array}{l} x : -\infty \rightarrow x'_{\mathbf{R}} \rightarrow \infty \\ y : -\infty \rightarrow 0 \rightarrow \infty \end{array} \end{array} \\
&+ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (\sqrt{2}\sigma'_{\mathbf{R}}y + x'_{\mathbf{R}})^4 (e^{-y^2} + p_{\mathbf{R}}y^2 e^{-y^2}) dy \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 (4\sigma'^4_{\mathbf{R}}y^4 + 8\sqrt{2}\sigma'^3_{\mathbf{R}}y^3x'_{\mathbf{R}} + 12\sigma'^2_{\mathbf{R}}y^2x'^2_{\mathbf{R}} + 4\sqrt{2}\sigma'_{\mathbf{R}}yx'^3_{\mathbf{R}} + x'^4_{\mathbf{R}})(e^{-y^2} - p_{\mathbf{R}}y^2 e^{-y^2}) dy \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (4\sigma'^4_{\mathbf{R}}y^4 + 8\sqrt{2}\sigma'^3_{\mathbf{R}}y^3x'_{\mathbf{R}} + 12\sigma'^2_{\mathbf{R}}y^2x'^2_{\mathbf{R}} + 4\sqrt{2}\sigma'_{\mathbf{R}}yx'^3_{\mathbf{R}} + x'^4_{\mathbf{R}})(e^{-y^2} + p_{\mathbf{R}}y^2 e^{-y^2}) dy \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 (4\sigma'^4_{\mathbf{R}}y^4 + 12\sigma'^2_{\mathbf{R}}y^2x'^2_{\mathbf{R}} + x'^4_{\mathbf{R}})e^{-y^2} dy - \frac{p_{\mathbf{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 (8\sqrt{2}\sigma'^3_{\mathbf{R}}y^3x'_{\mathbf{R}} + 4\sqrt{2}\sigma'_{\mathbf{R}}yx'^3_{\mathbf{R}})y^2 e^{-y^2} dy \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (4\sigma'^4_{\mathbf{R}}y^4 + 12\sigma'^2_{\mathbf{R}}y^2x'^2_{\mathbf{R}} + x'^4_{\mathbf{R}})e^{-y^2} dy \\
&\quad + \frac{p_{\mathbf{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (8\sqrt{2}\sigma'^3_{\mathbf{R}}y^3x'_{\mathbf{R}} + 4\sqrt{2}\sigma'_{\mathbf{R}}yx'^3_{\mathbf{R}})y^2 e^{-y^2} dy \\
&= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (4\sigma'^4_{\mathbf{R}}y^4 + 12\sigma'^2_{\mathbf{R}}y^2x'^2_{\mathbf{R}} + x'^4_{\mathbf{R}})e^{-y^2} dy + \frac{2p_{\mathbf{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (8\sqrt{2}\sigma'^3_{\mathbf{R}}y^3x'_{\mathbf{R}} + 4\sqrt{2}\sigma'_{\mathbf{R}}yx'^3_{\mathbf{R}})y^2 e^{-y^2} dy \\
&= \frac{8\sigma'^4_{\mathbf{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^4 e^{-y^2} dy + \frac{24\sigma'^2_{\mathbf{R}}x'^2_{\mathbf{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy + \frac{2x'^4_{\mathbf{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-y^2} dy \\
&\quad + \frac{16\sqrt{2}p_{\mathbf{R}}\sigma'^3_{\mathbf{R}}x'_{\mathbf{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^5 e^{-y^2} dy + \frac{8\sqrt{2}p_{\mathbf{R}}\sigma'_{\mathbf{R}}x'^3_{\mathbf{R}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^3 e^{-y^2} dy
\end{aligned}$$

ここで,

$$\begin{aligned}
\int_0^{\infty} e^{-y^2} dy &= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \\
\int_0^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy &= \left[-\frac{y}{2} e^{-y^2} \right]_0^{\infty} + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} e^{-y^2} dy = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \\
\int_0^{\infty} y^4 e^{-y^2} dy &= \left[-\frac{y^3}{2} e^{-y^2} \right]_0^{\infty} + \frac{3}{2} \int_0^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \\
\int_0^{\infty} y e^{-y^2} dy &= \left[-\frac{1}{2} e^{-y^2} \right]_0^{\infty} = \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

$$\int_0^{\infty} y^3 e^{-y^2} dy = \left[-\frac{y^2}{2} e^{-y^2} \right]_0^{\infty} + \int_0^{\infty} y e^{-y^2} dy = \frac{1}{2}$$

$$\int_0^{\infty} y^5 e^{-y^2} dy = \left[-\frac{y^4}{2} e^{-y^2} \right]_0^{\infty} + 2 \int_0^{\infty} y^3 e^{-y^2} dy = 1$$

から, 4 乗平均は

$$\begin{aligned} & \frac{8\sigma_R'^4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^4 e^{-y^2} dy + \frac{24\sigma_R'^2 x_R'^2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy + \frac{2x_R'^4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-y^2} dy \\ & + \frac{16\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3 x_R'}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^5 e^{-y^2} dy + \frac{8\sqrt{2}p_R\sigma_R' x_R'^3}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^3 e^{-y^2} dy \\ & = \frac{8\sigma_R'^4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{8} \right) + \frac{24\sigma_R'^2 x_R'^2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{4} \right) + \frac{2x_R'^4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) + \frac{16\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3 x_R'}{\sqrt{\pi}} + \frac{8\sqrt{2}p_R\sigma_R' x_R'^3}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2} \right) \\ & = 3\sigma_R'^4 + 6\sigma_R'^2 x_R'^2 + x_R'^4 + \frac{16\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3 x_R'}{\sqrt{\pi}} + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R' x_R'^3}{\sqrt{\pi}} \\ & = 3\sigma_R'^4 + 6\sigma_R'^2 x_R'^2 + x_R'^4 + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R' x_R'}{\sqrt{\pi}} (4\sigma_R'^2 + x_R'^2) \end{aligned}$$

かりに $x_R' = 0$, $\sigma_R' = 0.5$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$\begin{aligned} & 3\sigma_R'^4 + 6\sigma_R'^2 x_R'^2 + x_R'^4 + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R' x_R'}{\sqrt{\pi}} (4\sigma_R'^2 + x_R'^2) = 0.1875 \\ & \sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} \right)^4 f_R \left(x = \frac{j}{1000}; x_R' = 0, \sigma_R' = 0.5, p_R = -0.1 \right) = 0.1875 \end{aligned}$$

かりに $x_R' = 0.1$, $\sigma_R' = 0.5$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$\begin{aligned} & 3\sigma_R'^4 + 6\sigma_R'^2 x_R'^2 + x_R'^4 + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R' x_R'}{\sqrt{\pi}} (4\sigma_R'^2 + x_R'^2) = 0.186483 \\ & \sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} \right)^4 f_R \left(x = \frac{j}{1000}; x_R' = 0.1, \sigma_R' = 0.5, p_R = -0.1 \right) = 0.186483 \end{aligned}$$

かりに $x_R' = 0.1$, $\sigma_R' = 0.25$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$\begin{aligned} & 3\sigma_R'^4 + 6\sigma_R'^2 x_R'^2 + x_R'^4 + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R' x_R'}{\sqrt{\pi}} (4\sigma_R'^2 + x_R'^2) = 0.0134943 \\ & \sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} \right)^4 f_R \left(x = \frac{j}{1000}; x_R' = 0.1, \sigma_R' = 0.25, p_R = -0.1 \right) = 0.0134943 \end{aligned}$$

となる。4 乗平均はOK!

ここまでをまとめると, 平均, 2 乗平均, 3 乗平均, 4 乗平均は

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= x_R' + \frac{\sqrt{2}p_R\sigma_R'}{\sqrt{\pi}} \\ \langle x^2 \rangle &= \sigma_R'^2 + x_R'^2 + \frac{2\sqrt{2}p_R x_R' \sigma_R'}{\sqrt{\pi}} \\ \langle x^3 \rangle &= x_R' (3\sigma_R'^2 + x_R'^2) + \frac{\sqrt{2}p_R\sigma_R'}{\sqrt{\pi}} (4\sigma_R'^2 + 3x_R'^2) \end{aligned}$$

$$\langle x^4 \rangle = 3\sigma_R'^4 + 6\sigma_R'^2 x_R'^2 + x_R'^4 + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'}{\sqrt{\pi}}(4\sigma_R'^2 + x_R'^2)$$

4次モーメントは

$$\begin{aligned} & \langle x^4 \rangle - 4\langle x^3 \rangle \langle x \rangle + 6\langle x^2 \rangle \langle x \rangle^2 - 3\langle x \rangle^4 \langle x^3 \rangle \\ & \left[3\sigma_R'^4 + 6\sigma_R'^2 x_R'^2 + x_R'^4 + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'}{\sqrt{\pi}}(4\sigma_R'^2 + x_R'^2) \right] \\ & - 4 \left[x_R' (3\sigma_R'^2 + x_R'^2) + \frac{\sqrt{2}p_R\sigma_R'}{\sqrt{\pi}}(4\sigma_R'^2 + 3x_R'^2) \right] \left(x_R' + \frac{\sqrt{2}p_R\sigma_R'}{\sqrt{\pi}} \right) \\ & + 6 \left(\sigma_R'^2 + x_R'^2 + \frac{2\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'}{\sqrt{\pi}} \right) \left(x_R' + \frac{\sqrt{2}p_R\sigma_R'}{\sqrt{\pi}} \right)^2 \\ & - 3 \left(x_R' + \frac{\sqrt{2}p_R\sigma_R'}{\sqrt{\pi}} \right)^4 \\ & = \left(3\sigma_R'^4 + 6\sigma_R'^2 x_R'^2 + x_R'^4 + \frac{16\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3 x_R'}{\sqrt{\pi}} + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'^3}{\sqrt{\pi}} \right) \\ & - 4 \left(3\sigma_R'^2 x_R' + x_R'^3 + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3}{\sqrt{\pi}} + \frac{3\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'^2}{\sqrt{\pi}} \right) x_R' \\ & - 4 \left(3\sigma_R'^2 x_R' + x_R'^3 + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3}{\sqrt{\pi}} + \frac{3\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'^2}{\sqrt{\pi}} \right) \frac{\sqrt{2}p_R\sigma_R'}{\sqrt{\pi}} \\ & + 6 \left(\sigma_R'^2 + x_R'^2 + \frac{2\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'}{\sqrt{\pi}} \right) \left(x_R'^2 + \frac{2\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'}{\sqrt{\pi}} + \frac{2p_R^2\sigma_R'^2}{\pi} \right) \\ & - 3 \left(x_R'^4 + 4x_R'^3 \frac{\sqrt{2}p_R\sigma_R'}{\sqrt{\pi}} + 6x_R'^2 \frac{2p_R^2\sigma_R'^2}{\pi} + 4x_R' \frac{2\sqrt{2}p_R^3\sigma_R'^3}{\pi\sqrt{\pi}} + \frac{4p_R^4\sigma_R'^4}{\pi^2} \right) \\ & = \left(3\sigma_R'^4 + 6\sigma_R'^2 x_R'^2 + x_R'^4 + \frac{16\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3 x_R'}{\sqrt{\pi}} + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'^3}{\sqrt{\pi}} \right) \\ & - \left(12\sigma_R'^2 x_R'^2 + 4x_R'^4 + \frac{16\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3 x_R'}{\sqrt{\pi}} + \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'^3}{\sqrt{\pi}} \right) \\ & - \left(\frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3 x_R'}{\sqrt{\pi}} + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'^3}{\sqrt{\pi}} + \frac{32p_R^2\sigma_R'^4}{\pi} + \frac{24p_R^2\sigma_R'^2 x_R'^2}{\pi} \right) \\ & + \left(6\sigma_R'^2 + 6x_R'^2 + \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'}{\sqrt{\pi}} \right) x_R'^2 \\ & + \left(6\sigma_R'^2 + 6x_R'^2 + \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'}{\sqrt{\pi}} \right) \frac{2\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'}{\sqrt{\pi}} \\ & + \left(6\sigma_R'^2 + 6x_R'^2 + \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'}{\sqrt{\pi}} \right) \frac{2p_R^2\sigma_R'^2}{\pi} \\ & - \left(3x_R'^4 + \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'^3}{\sqrt{\pi}} + \frac{36p_R^2\sigma_R'^2 x_R'^2}{\pi} + \frac{24\sqrt{2}p_R^3\sigma_R'^3 x_R'}{\pi\sqrt{\pi}} + \frac{12p_R^4\sigma_R'^4}{\pi^2} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(3\sigma_R'^4 + 6\sigma_R'^2 x_R'^2 + x_R'^4 + \frac{16\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3 x_R'}{\sqrt{\pi}} + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R' x_R'^3}{\sqrt{\pi}} \right) \\
&- \left(12\sigma_R'^2 x_R'^2 + 4x_R'^4 + \frac{16\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3 x_R'}{\sqrt{\pi}} + \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R' x_R'^3}{\sqrt{\pi}} \right) \\
&- \left(\frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3 x_R'}{\sqrt{\pi}} + \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R' x_R'^3}{\sqrt{\pi}} + \frac{32p_R^2\sigma_R'^4}{\pi} + \frac{24p_R^2\sigma_R'^2 x_R'^2}{\pi} \right) \\
&+ \left(6\sigma_R'^2 x_R'^2 + 6x_R'^4 + \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R' x_R'^3}{\sqrt{\pi}} \right) \\
&+ \left(\frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3 x_R'}{\sqrt{\pi}} + \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R' x_R'^3}{\sqrt{\pi}} + \frac{48p_R^2\sigma_R'^2 x_R'^2}{\pi} \right) \\
&+ \left(\frac{12p_R^2\sigma_R'^4}{\pi} + \frac{12p_R^2\sigma_R'^2 x_R'^2}{\pi} + \frac{24\sqrt{2}p_R^3\sigma_R'^3 x_R'}{\pi\sqrt{\pi}} \right) \\
&- \left(3x_R'^4 + \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R' x_R'^3}{\sqrt{\pi}} + \frac{36p_R^2\sigma_R'^2 x_R'^2}{\pi} + \frac{24\sqrt{2}p_R^3\sigma_R'^3 x_R'}{\pi\sqrt{\pi}} + \frac{12p_R^4\sigma_R'^4}{\pi^2} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 3\sigma_R'^4 + \frac{12p_R^2\sigma_R'^4}{\pi} - \frac{32p_R^2\sigma_R'^4}{\pi} - \frac{12p_R^4\sigma_R'^4}{\pi^2} \\
&+ \frac{16\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3x_R'}{\sqrt{\pi}} - \frac{16\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3x_R'}{\sqrt{\pi}} - \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3x_R'}{\sqrt{\pi}} + \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'^3x_R'}{\sqrt{\pi}} + \frac{24\sqrt{2}p_R^3\sigma_R'^3x_R'}{\pi\sqrt{\pi}} - \frac{24\sqrt{2}p_R^3\sigma_R'^3x_R'}{\pi\sqrt{\pi}} \\
&+ 6\sigma_R'^2x_R'^2 - 12\sigma_R'^2x_R'^2 - \frac{24p_R^2\sigma_R'^2x_R'^2}{\pi} + 6\sigma_R'^2x_R'^2 + \frac{48p_R^2\sigma_R'^2x_R'^2}{\pi} + \frac{12p_R^2\sigma_R'^2x_R'^2}{\pi} - \frac{36p_R^2\sigma_R'^2x_R'^2}{\pi} \\
&+ \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'^3}{\sqrt{\pi}} - \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'^3}{\sqrt{\pi}} - \frac{4\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'^3}{\sqrt{\pi}} + \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'^3}{\sqrt{\pi}} + \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'^3}{\sqrt{\pi}} - \frac{12\sqrt{2}p_R\sigma_R'x_R'^3}{\sqrt{\pi}} \\
&+ x_R'^4 - 4x_R'^4 + 6x_R'^4 - 3x_R'^4 \\
&= 3\sigma_R'^4 - \frac{20p_R^2\sigma_R'^4}{\pi} - \frac{12p_R^4\sigma_R'^4}{\pi^2} \\
&= \left(3 - \frac{20p_R^2}{\pi} - \frac{12p_R^4}{\pi^2}\right)\sigma_R'^4
\end{aligned}$$

かりに $x_R' = 0$, $\sigma_R' = 0.5$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$\begin{aligned}
&\left(3 - \frac{20p_R^2}{\pi} - \frac{12p_R^4}{\pi^2}\right)\sigma_R'^4 = 0.183514 \\
&\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} - \bar{x}\right)^4 f_R\left(x = \frac{j}{1000}; x_R' = 0, \sigma_R' = 0.5, p_R = -0.1\right) = 0.183514
\end{aligned}$$

かりに $x_R' = 0.1$, $\sigma_R' = 0.5$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$\begin{aligned}
&\left(3 - \frac{20p_R^2}{\pi} - \frac{12p_R^4}{\pi^2}\right)\sigma_R'^4 = 0.183514 \\
&\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} - \bar{x}\right)^4 f_R\left(x = \frac{j}{1000}; x_R' = 0.1, \sigma_R' = 0.5, p_R = -0.1\right) = 0.183514
\end{aligned}$$

かりに $x_R' = 0.1$, $\sigma_R' = 0.25$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$\begin{aligned}
&\left(3 - \frac{20p_R^2}{\pi} - \frac{12p_R^4}{\pi^2}\right)\sigma_R'^4 = 0.0114696 \\
&\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} - \bar{x}\right)^4 f_R\left(x = \frac{j}{1000}; x_R' = 0.1, \sigma_R' = 0.25, p_R = -0.1\right) = 0.0114696
\end{aligned}$$

となる。OK!

したがって尖度 kurtosis は

$$\mathcal{E}_R = \frac{\left(3 - \frac{20p_R^2}{\pi} - \frac{12p_R^4}{\pi^2}\right)\sigma_R'^4}{\left[\left(1 - \frac{2}{\pi}p_R^2\right)\sigma_R'^2\right]^2} - 3 = \frac{3 - \frac{20p_R^2}{\pi} - \frac{12p_R^4}{\pi^2}}{1 - \frac{4}{\pi}p_R^2 + \frac{4}{\pi^2}p_R^4} - 3$$

$$= \frac{3 - \frac{20p_R^2}{\pi} - \frac{12p_R^4}{\pi^2} - 3 + \frac{12}{\pi}p_R^2 - \frac{12}{\pi^2}p_R^4}{1 - \frac{4}{\pi}p_R^2 + \frac{4}{\pi^2}p_R^4} = \frac{-\frac{8p_R^2}{\pi} - \frac{24p_R^4}{\pi^2}}{1 - \frac{4}{\pi}p_R^2 + \frac{4}{\pi^2}p_R^4} = -\frac{8p_R^2}{\pi} \left(1 + \frac{3p_R^2}{\pi}\right) \left(1 - \frac{2p_R^2}{\pi}\right)^{-2}$$

となる。

かりに $x'_R = 0$, $\sigma'_R = 0.5$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$-\frac{8p_R^2}{\pi} \left(1 + \frac{3p_R^2}{\pi}\right) \left(1 - \frac{2p_R^2}{\pi}\right)^{-2} = -0.0260384$$

$$\frac{\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} - \bar{x}\right)^4 f_R\left(x = \frac{j}{1000}; x'_R = 0, \sigma'_R = 0.5, p_R = -0.1\right)}{\left[\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} - \bar{x}\right)^2 f_R\left(x = \frac{j}{1000}; x'_R = 0, \sigma'_R = 0.5, p_R = -0.1\right)\right]^2} - 3 = -0.0260384$$

かりに $x'_R = 0.1$, $\sigma'_R = 0.5$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$-\frac{8p_R^2}{\pi} \left(1 + \frac{3p_R^2}{\pi}\right) \left(1 - \frac{2p_R^2}{\pi}\right)^{-2} = -0.0260384$$

$$\frac{\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} - \bar{x}\right)^4 f_R\left(x = \frac{j}{1000}; x'_R = 0.1, \sigma'_R = 0.5, p_R = -0.1\right)}{\left[\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} - \bar{x}\right)^2 f_R\left(x = \frac{j}{1000}; x'_R = 0.1, \sigma'_R = 0.5, p_R = -0.1\right)\right]^2} - 3 = -0.0260384$$

かりに $x'_R = 0.1$, $\sigma'_R = 0.25$, $p_R = -0.1$ とすると,

$$-\frac{8p_R^2}{\pi} \left(1 + \frac{3p_R^2}{\pi}\right) \left(1 - \frac{2p_R^2}{\pi}\right)^{-2} = -0.0260384$$

$$\frac{\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} - \bar{x}\right)^4 f_R\left(x = \frac{j}{1000}; x'_R = 0.1, \sigma'_R = 0.5, p_R = -0.1\right)}{\left[\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} - \bar{x}\right)^2 f_R\left(x = \frac{j}{1000}; x'_R = 0.1, \sigma'_R = 0.5, p_R = -0.1\right)\right]^2} - 3 = -0.0260384$$

かりに $x'_R = 0.1$, $\sigma'_R = 0.25$, $p_R = -0.2$ とすると,

$$-\frac{8p_R^2}{\pi} \left(1 + \frac{3p_R^2}{\pi}\right) \left(1 - \frac{2p_R^2}{\pi}\right)^{-2} = -0.11349$$

$$\frac{\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} - \bar{x}\right)^4 f_R\left(x = \frac{j}{1000}; x'_R = 0.1, \sigma'_R = 0.5, p_R = -0.2\right)}{\left[\sum_{j=-6000}^{6000} \left(\frac{j}{1000} - \bar{x}\right)^2 f_R\left(x = \frac{j}{1000}; x'_R = 0.1, \sigma'_R = 0.5, p_R = -0.2\right)\right]^2} - 3 = -0.111349$$

となる。

OK !

RIETVELD モデルを修正して強度値が負にならないようにする選択もありうる。そのためには

$$f_R(x; x_R, b_R, p_R) = N_R \exp \left[-b_R (x - x_R)^2 \right] \left\{ \begin{array}{ll} 1 - p_R (x - x_R)^2 & [x \leq x_R] \\ \max \left[0, 1 + p_R (x - x_R)^2 \right] & [x_R < x] \end{array} \right\}$$

ここで

$$\max[x, y] = \begin{cases} y & [x < y] \\ x & [y \leq x] \end{cases}$$

とすれば良い。このピーク形状モデルの低次キュムラントの形式を導くのは格段に難しいわけではないだろうが、あまり意味がないことには変わりないので、これ以上のことはしなくとも良からうと思われる。