「核データニュース」、No.42 (1992)
解　説（I）

ピールのパズルについて（2）

（日本原子力研究所）千葉　敏

4. Zhao-Perey の方法

この問題に対して別の解釈を与えたのは中国原子能科学研究院・中国核データセンターの Z. Zhao であった。当時彼は ORNL の Perey の研究室に滞在中で、 ENDF/B-VI のために ^{19}F の評価をしていた。彼は PPP を少し変形して次のように置き換えた。

今、生の実験データに相当する量 B と C があったとして、PPP で出てくる物理量 D と、

$$D = \frac{B}{C} \tag{16}$$

という関係にあるとしよう。そして、B に対するふたつの実験値 $b_1 = 1.5$ と $b_2 = 1.0$、C の測定値 $c = 1.0$ が分かっているとする。ただし、これらの測定値はいずれも独立として、それぞれ 10%、10%、20% という誤差を持っているとする。これより、$d_1 = b_1/c$、$d_2 = b_2/c$ とすると、それらは

$$d_1 = \frac{b_1}{c} = \frac{1.5}{1.0} = 1.5、\qquad d_2 = \frac{b_2}{c} = \frac{1.0}{1.0} = 1.0 \tag{17}$$

$$\begin{aligned}(\Delta d_1)^2 &= \left(\frac{\partial d_1}{\partial b_1}\cdot\Delta b_1\right)^2 + \left(\frac{\partial d_1}{\partial c}\cdot\Delta c\right)^2 \\ &= \left(\frac{1}{c}\right)^2\cdot(\Delta b_1)^2 + \left(\frac{b_1}{c^2}\right)^2\cdot(\Delta c)^2 \\ &= 1.0^2\cdot 0.15^2 + 1.5^2\cdot 0.2^2 = 0.1125\end{aligned} \tag{18}$$

$$\begin{aligned}(\Delta d_2)^2 &= \left(\frac{1}{c}\right)^2\cdot(\Delta b_2)^2 + \left(\frac{b_2}{c^2}\right)^2\cdot(\Delta c)^2 \\ &= 1.0^2\cdot 0.10^2 + 1.0^2\cdot 0.2^2 = 0.05\end{aligned} \tag{19}$$

$$\begin{aligned}\Delta d_1\cdot\Delta d_2 &= \left(\frac{\partial d_1}{\partial c}\cdot\Delta c\right)\cdot\left(\frac{\partial d_2}{\partial c}\cdot\Delta c\right) \\ &= \left(\frac{b_1}{c^2}\right)\cdot\left(\frac{b_2}{c^2}\right)\cdot(\Delta c)^2\end{aligned}$$

$$= 1.5 \cdot 1.0 \cdot 0.2^2 = 0.06 \tag{20}$$

となる。(17) ～ (20) 式より、D の実験値ベクトル (d) 、および共分散行列 (V) は、

$$d = \begin{pmatrix} 1.5 \\ 1.0 \end{pmatrix}、\qquad V = \begin{pmatrix} 0.1125 & 0.06 \\ 0.06 & 0.05 \end{pmatrix} \tag{21}$$

これらを (7)、(8) 式に代入すると、再び $x = 0.882$、$\Delta x = 0.218$ という答が得られる。つまり、ここで考えた問題は PPP と全く等価であることが分かる。

さて、今の場合生データ b_1、b_2、c の誤差から、変換されたデータ d_1、d_2 の誤差を求めるときに、テーラー展開、(18)、(19)、(20) 式を用いているが、Zhao が言い出したことは、テーラー展開の係数は、データそのものではなく、真値、あるいは平均値の回りで展開すべきであるということである。この問題では、物理量 B についてはふたつの実験データ b_1 と b_2 があるので、B に関してはこれらのデータそのものよりも正しいと考えられる値を推定してそれを代入すべきである。b_1 と b_2 は独立なので、その平均値 (b) は通常の最小自乗法で求めることが出来て、それは

$$b = \frac{b_1 \cdot (1/\Delta b_1)^2 + b_2 \cdot (1/\Delta b_2)^2}{(1/\Delta b_1)^2 + (1/\Delta b_2)^2} = \frac{1.5 \cdot (1/0.15)^2 + 1.0 \cdot (1.0/0.1)^2}{(1/0.15)^2 + (1/0.1)^2} = 1.15 \tag{22}$$

となる($\Delta b = 0.083$)。この値を (18) ～ (20) 式の b_1、b_2 のかわりに代入すると、 d の共分散行列 V は

$$V = \begin{pmatrix} 0.0754 & 0.0529 \\ 0.0529 & 0.0629 \end{pmatrix} \tag{23}$$

これを用いて再び x を計算すると、$x = 1.154$、$\Delta x = 0.245$、カイ 2 乗は 7.69 となる。

このやり方では、変換されたデータの誤差を誤差伝搬の法則に従って計算する時に、テーラー展開の係数をデータそのものでなく平均値を使って計算している。我々としても、これは原理的には正しいやり方だと思うが、最初に B の平均値を求めるならば、何もわざわざデータ d に変換しなくとも、$D = B/C$ という関係式から直接

$$x = \langle D \rangle = b/c = 1.15/1.0 = 1.15 \tag{24}$$

とやった方が分かりやすい気がする。逆に、このやり方でやれば、誤差に相関のない通常の最小自乗法を使えばことが足りるので、この答、1.15 が正しい答であると言ってもいいのであろう。

ところで、この Zhao-Perey の方法は我々のやり方と共存できる。Zhao-Perey のやり方

では、データ b の平均値を求めるときに、データの誤差 = %-誤差・データとしているが、我々のやり方では、データの誤差 = %-誤差・平均値　となる。このやり方に従うと、b の平均値は、b_1 と b_2 の %-誤差が等しいので重みも等しくなって、$b = (b_1+b_2)/2 = 1.25$ となる。d の共分散行列をこの値を使って計算すると（後述 5-6 に示すように）、それは（9）式で未知の x を使ってやったのと全く同じ結果（11）となるので、(7) 式に従って x を計算しても、単純に $d = b/c$ と計算しても答はいずれも $x = 1.25$ となる。これは我々が最初に出した答 （(10) 式）そのものである。従って、この問題のように誤差の相対値が与えられている問題では、正解は 1.25 である。我々の考え方は、Zhao-Perey の方法を自然に取り込んでいたことになる。このような議論を通して、PPP で最初に出てきた答 0.882 が正しい答ではないことが次第に明らかになっていった。これが、主張 ① に対する回答である。Fröhner もこのあたりからだんだん意見が変わっていった。

以前、データ d_1 の重みが $(V_{22} - V_{12})$ にしていることを示したが、(7) 式の場合にはこれが負の値になっていた。新しい共分散行列（(18) ～ (20) 式で $b_1 = b_2 = b$ と置いたもの）を使うとどういうことになるのだろうか。

$$V_{22} - V_{12} = \left(\frac{1}{c}\right)^2 \cdot (\Delta b_2)^2 + \left(\frac{b}{c^2}\right)^2 \cdot (\Delta c)^2 - \left(\frac{b}{c^2}\right)^2 \cdot (\Delta c)^2$$
$$= \left(\frac{1}{c}\right)^2 \cdot (\Delta b_2)^2$$

同様に d_2 の重みは

$$V_{11} - V_{12} = \left(\frac{1}{c}\right)^2 \cdot (\Delta b_1)^2 + \left(\frac{b}{c^2}\right)^2 \cdot (\Delta c)^2 - \left(\frac{b}{c^2}\right)^2 \cdot (\Delta c)^2$$
$$= \left(\frac{1}{c}\right)^2 \cdot (\Delta b_1)^2$$

これらはそれぞれ d_2 と d_1 の、共通な因子 c に起因する相関成分を除いたランダムエラーに起因する誤差の成分である。つまり、$(V_{22} - V_{12})$ という式は、データの持つ全誤差の内、相関成分を取り除いてランダム成分（今の場合は b の誤差）だけで重みを付けなさいよと言うことを意味していた訳である。これは、b の平均値を推定するときに現れる重みと同じことである。従って、このやり方は、結局は（24）式と同じことをやっていたわけで、やはり最小自乗法自体は相関のある時でも正しかったのである。この解釈が正しいとすると、PPP で現れたように $(V_{22} - V_{12})$ が負になるということはおかしいので、これは要するに共分散行列が間違っていたということになる。さらにつけ加えるならば、このように単純な問題では、最小自乗法で得られる結果は、誤差に相関がある場合でも、相関を無視し、個々のデータのランダム誤差だけで重み付けをした結果と等しくならなければ、

何かまちがったことをやっていると思うべきである。ただし、得られた結果の誤差を計算するときは、データの誤差相関まで正しく考慮して誤差伝搬の法則を使わないといけない。

さて、Zhao-Perey の考え方は基本的には正しいと言って良いのであろうが、これは誤差伝搬の法則に関するやり方であるため、それが適用できるのは、生データに相当する量（PPP の問題ではデータ b_1、b_2、c ）が分かっており、さらにそれらのうちテーラー展開の係数を計算するのに必要ないくつかのものに対しては一つ以上のデータが測定されていてその平均値が求められる時である。彼らがそもそも問題の置き換えを行ったのも、オリジナルの PPP のように、 最終データ（d_1、d_2 とその共分散行列）が与えられているだけではどうしようもないからである。ところで、現実問題、例えば核データの評価において、評価者が実験の生データの情報を持っていることは皆無であって、彼に分かるのは最終データとその共分散行列のみである。ということは、現実問題は、よりオリジナルの PPP の状況に近く、Zhao-Perey の方法は実際には無力であることが分かる。ただし、実験者がデータ整理を行う段階においては、彼は十分な情報を持っている可能性があるので適用可能かも知れない。要は、最小自乗法を適用するのはなるべくデータに相関が無い段階で行って、後はそうして求まった平均値をたすなりかけるなりして最終データを出すのが賢明なやり方であるということである。最終データにしてしまってから平均値を出そうとすると PPP と同じことが起こる可能性がある。

5. いろいろな解法

Zhao が 4. で説明した問題の置き換えを行ってから、それに対するいろいろな解法が提案されたのでここにその一部を示す。

5-1. 通常の最小自乗法

(21) を (7)、(8) に代入して $x = 0.882$、$\Delta x = 0.218$ となる。

5-2. 相関を考慮しない最小自乗法

(21)式 の V の非対角成分を 0 とおいて、$x = 1.154$、$\Delta x = 0.186$ となる。%-誤差を信じるならば、 $x = 1.250 \pm 0.198$ となる。

5-3. Zhao-Perey の方法

(23) 式の下に書いたように $x = 1.154$、$\Delta x = 0.245$。

5-4. 先に b と c の平均値を求めて x = b/c とする方法。

前に書いたように $x = 1.154$、$\Delta x = 0.245$。これは Zhao-Perey の方法と等価。ただし、誤差を我々のやり方で評価すると $x = 1.25$ となる。

5-5. 我々の方法

%-誤差を伝搬させていく。

$$(\Delta d_1)^2 = [(\Delta b_1/b_1)^2 + (\Delta c/c)^2\ ]\cdot x^2 = (0.1^2 + 0.2^2)\cdot x^2$$

$$(\Delta d_2)^2 = (0.1^2 + 0.2^2)\cdot x^2$$

$$(\Delta d_1 \cdot \Delta d_2) = 0.2^2 \cdot x^2$$

これは (9) 式の V そのものである。従って答は (10)、(12) より $x = 1.250$、$\Delta x = 0.265$ となる。

5-6. 我々の方法 + Zhao-Perey の方法

誤差伝搬に Zhao-Perey の方法と我々の考え方を取り入れると、b_1、b_2 と b を同一視して、

$$\begin{aligned}(\Delta d_1)^2 &= \left(\frac{\partial d_1}{\partial b_1}\cdot\Delta b_1\right)^2 + \left(\frac{\partial d_1}{\partial c}\cdot\Delta c\right)^2\\ &= \left(\frac{1}{c}\right)^2\cdot(\Delta b_1)^2 + \left(\frac{b}{c^2}\right)^2\cdot(\Delta c)^2\\ &= \left(\frac{b}{c}\right)^2\cdot\left(\frac{\Delta b_1}{b}\right)^2 + \left(\frac{b}{c}\right)^2\cdot\left(\frac{\Delta c}{c}\right)^2\\ &= x^2\cdot\left(\frac{\Delta b_1}{b}\right)^2 + x^2\cdot\left(\frac{\Delta c}{c}\right)^2\\ &= (\ 0.1^2 + 0.2^2\ )\cdot x^2 = 0.05\cdot x^2 \end{aligned} \tag{25}$$

これは (9) 式の V_{11} そのものである。V の他の要素も (9) 式と等しくなるので、答は (10)、(12) より $x = 1.250$、$\Delta x = 0.265$ となる。基本的には 5-5 と同じことをやっている。

5-7. 対数変換する方法

$y_1 = \ln(d_1) = \ln(b_1) - \ln(c)$ 等と対数変換して最小自乗法を適用すると

$$x = \exp(\langle y\rangle) = 1.225、\Delta x = 0.260$$

となる。データ d_1、d_2 とオリジナルの共分散行列 (1) より出発し対数変換を行っても同じ結果となる。対数変換すればオリジナルの PPP からもまともな答が出せるのである！！

5-8. 対数変換 + Zhao-Perey の方法

5-7 の最後に述べたように、対数変換を行えばオリジナルの PPP でもまともな答が出てくる。しかし、これはぬか喜びで、データ d_1、d_2 から $y_1 = \ln(d_1)$、$y_2 = \ln(d_2)$ の共分散行列 (V_y)を計算する際、$\Delta y_1 = \Delta d_1/d_1$ とやってしまっては Zhao-Perey の法則に反する(5-7 ではこうしている)。正しくは $\Delta y_1 = \Delta d_1/x$、$\Delta y_2 = \Delta d_2/x$ とするべきである。これより V_yは、(1) の V を使って、$V_y = 1/x^2 \cdot V$ となる。これを (7)、(8) 式に代入し、最終的に $x = \exp(\langle y \rangle) = 0.909$、$\Delta x = 0.198$ となる。これがオリジナルの PPP を対数変換により正しく解いた答である。

5-9. データ b_1、b_2、c から直接に x を求める方法

この方法では、データセット (b_1、b_2、c) から変換されたデータ (d_1、d_2) を経由しないで直接 x を求めることが出来る。c の平均値を $\langle c \rangle$ とすると、$b = x \cdot \langle c \rangle$ なので、

$$Q^2 = (b_1 - x \cdot \langle c \rangle)^2 / (\Delta b_1)^2 + (b_2 - x \cdot \langle c \rangle)^2/(\Delta b_2)^2 + (c - \langle c \rangle)^2/(\Delta c)^2$$

と書ける。Q^2 を x と $\langle c \rangle$ で偏微分してそれぞれを0とおくと、$x = b/\langle c \rangle$、$\langle c \rangle = c$ という式が得られる。これは 5-4 と等価で、b = 1.154 なら x = 1.154、我々のやり方に従って b = 1.250 なら x = 1.250 となる。

この他にもいろいろ考えられるがそれは省略することにして、以上で得られた結果を次表にまとめる。

ケース	解法	答	誤差
5-1	通常	0.882	0.218
5-2	相関を無視（絶対誤差）	1.154	0.186
	（相対誤差）	1.250	0.198
5-3	Zhao-Perey	1.154	0.245
5-4	x = b/c （絶対誤差）	1.154	0.245
	（相対誤差）	1.250	0.265
5-5	我々	1.250	0.265
5-6	我々+Zhao-Perey	1.250	0.265
5-7	対数変換	1.225	0.260
5-8	対数変換+Zhao-Perey	0.909	0.198
5-9	直接法（5-4 と等価）	1.154 または 1.250	

この表を見ると、通常の誤差伝搬の法則と最小自乗法で得られた答 0.882 が的外れなこと

が明かであろう。一方、相関を無視した場合、答は 1.154 とそれほど悪い値とはならない。ただし、誤差が過小評価されているので、誤差が問題とならないような場合でなければ危険である。方法 5-3 と 5-4 は等価である。5-4 にも我々の考えを取り込むと答は 5-5、5-6 と等しくなる。一方、対数変換をする方法（5-7）は、少し考えると分かるように基本的には相対誤差を信用するやり方であるので、我々の方法と同じことをしていることになる。ただし、厳密なことを言うとこれは x の不偏推定値とはなっていない。対数変換の方法はオリジナルの PPP のように最終結果しか与えられていない場合でも適用可能で、しかも通常の誤差伝搬の法則に従えばまともな値を与えるので実用的な方法ではある。今の場合、対数変換の結果、1.225 と我々の結果 1.250 の差は 2% 程度であるので誤差の大きさを考えると問題ではないが、1% 程度の誤差を問題にしているときには十分注意すべきである。逆に、データのばらつきが大きいときもバイアスが大きくなるので注意が必要である。対数を取ることによって大きなメリットがあるような問題を除いては、できればこのような biased estimator は避けた方が良い。また、5-8 で示されたように、最終データを対数変換をして解く場合でも、誤差伝搬の Zhao-Perey の方法（原理的にはこれが正しいはずであるが）を使うと結局 5-1 と同じパズルとなってしまう。5-1 と 5-8 の答の違いはやはり対数変換をしたことによるバイアスである。尚、この問題で答が 1.154 か 1.250 かは誤差の解釈の違いだけなので、絶対誤差が信用できるなら1.154 が正解、相対誤差が信用できるなら 1.250 が正解となる。 PPP では後者が正解である。

6. 実例

我々が ENDF/B-VI のために ^{115}In(n,n')^{115m}In 反応断面積の評価をしたときにも PPP と同じことが起こった。文献を調べ、誤差情報を最大限読み取り、誤差が過小評価されていると思われるものや古い崩壊定数を使用しているものは補正してデータベクトルと共分散行列を作り、最小自乗法を適用したところ、明らかにデータより小さ目の結果となってしまった。図１のカーブＡがその結果である。どう見てもデータの重心を通っているとは言えない。積分テストの結果と比較しても過小評価になっていることが分かった。実の所を言うと、こちらの問題を解決するために、まず、より簡単と思われる PPP を解決しようとしようということからそもそも頭をつっこむことになった訳である。一方、我々の方法を適用したのがカーブＢである。この問題では、最初に ENDF/B-V を初期値として、それとデータの相対誤差から共分散行列を計算し解を求める。次にその解を初期値として共分散行列を計算し直してもう一度解を求める、という方法で逐次改良を行っていった。集束は非常に早く、その様子を図２に示してある。横軸に繰り返しの回数、縦軸にカイ２乗をプロットしてある。今述べたのが Good a priori と書いてある方である。実際には一度繰

り返すだけで解は集束した。一方、 Bad a priori と書いてあるのは、初期値として断面積がエネルギーによらず 1mb としたときのもので、2 回の繰り返しで主な改良が行われ、全体でも数回で先ほどの良い初期値を取った時と同じ値に集束した。このあたりの細かいことは既に ANL/NDM-121 として出版された。

もうひとつの例は、D.L. Smith が行った 14 MeV での放射化断面積の評価 [B.P. Evain, D.L. Smith and P. Lucchese, ANL/NDM-89 (1985)] である。彼は、かねてからこのレポートに書いてある結果が小さすぎるのではないかと気にしていたようである。例えば、^{59}Co(n,p) 反応断面積は、従来の方法でやると 56.6±3.1mb、一方、我々のやり方でやると 70.2±3.7mb となった。

7. 教訓

最小自乗法は、データベクトルの一次結合を取ってパラメータベクトルに写象する一次変換である。データベクトルが誤差を持っている (error affected) ことは当たり前のこととして、現実の測定ではデータの誤差自体が不確定さを持っている。そして、変換の行列がこの誤差共分散行列に依存しているので、それすらも誤差を持っているのである。アンフォールディングの問題では、変換行列自身が測定、あるいは計算の結果求められるものなので、単純なアンフォールディングが物理的に不合理な負の解や振動を生じることは良く知られている。PPP はそれと同じことが最小自乗法で起こっていることを示している。アンフォールディング問題で対数変換の方法が有効であったように、最小自乗法でもそれは有効である。ただしそれは不偏推定値ではない。最良の方法は %-誤差を信じて線形のままでやることである。逆に、実験者が絶対誤差に自信を持っているなら、それをデータで割って「このデータの信頼度は 10% である」、と言うのは大きな誤りの元となるのですぐにやめるべきである（データ自体が不確定な時に誤差の絶対値に自信があるというのも考えにくいが）。なお、絶対誤差に信用のおけるデータと、相対誤差に信用のおけるデータが混在している場合でも、我々の方法は適用可能である。

かつて Perey は、Harwell 会議の Proceedings で、二つのデータから共鳴エネルギーを推定するときに、どちらのデータよりも小さい値となることがあることを示した。これも PPP のひとつである。当時彼はこの結果は正しいと言っていたが、今や我々はそれが正しくないことを知っている。核データの分野において、どれほどの結果が PPP に毒されているかは、誰にもわからない。Peelle の言うように、『こんなパズルを見つけなければ良かった。』のか、まだ手遅れではないのか。

この問題で、最初に与えられた共分散行列 (1) 式が絶対値として正しいと言われたらどうなるのだろう。おそらく、我々の嫌いな 0.882 が答となるのだろう。ただし、(1) が正

しいと言えるのは、人間の知り得ない"偏差"を知っている神様だけなのではないだろうか。

8. 最後に

Gauss が最初に最小自乗法を考案した時は、誤差の相関などは考えていなかった。それを後に Aitken が相関を含めて一般化した訳である。これは形式論としてはより洗練され、正しい方向に向かっている事にまちがいはないが、誤差相関を考慮する場合、誤った共分散行列を使うと破滅的な結果となりうることが PPP によって示された。共分散は確かに重要であるが、誤ったものを使うよりは非対角要素を 0 とおいてしまった Gauss 流の古典的なやり方の方がずっとまともな結果となることも忘れてはいけない。

以上は、筆者が PPP に関して経験したことの一部である。この問題ではここで書いてきたことの他にも、誤差伝搬の法則（テーラー展開）における高次の項の影響、変換されたデータの非正規性の問題なども議論されたが、ここで紹介するにはいずれも少し込み入っているし、本質的な問題とは思われない。

前回の冒頭で、「この問題は多くの専門家の間で激しい議論を巻き起こした」と書いたが、筆者だけは専門家ではない。むしろこの問題を通して統計学を少しかじっただけの初心者である。このシリーズで書いたことにも力量不足のため偏見や主観、誤りなどが多々あるのではないかと思う。読者の皆さんでそのようなことに気づかれたかたは、どうか後学のために筆者までご指摘をお願いします。

謝辞

この問題について議論していただいた A.B.Smith 博士、D.L.Smith 博士、J.W.Meadows 博士、R.W.Peelle 博士、F.G.Perey 博士、Z.Zhao 博士、H.K.Vonach 博士、F.H.Fröhner 博士、植之原雄二博士、核データセンターの諸氏に感謝します。

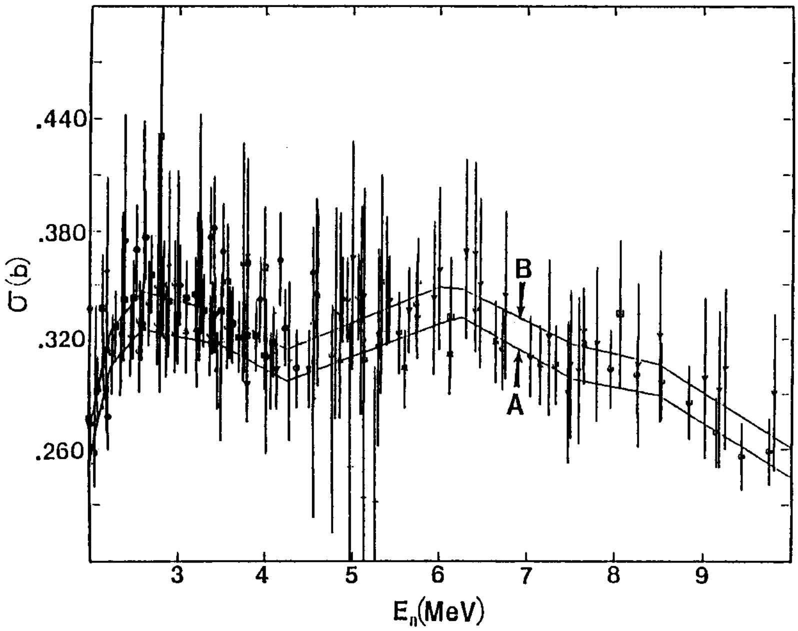

図1　^{115}In(n, n')^{115m}In　反応断面積

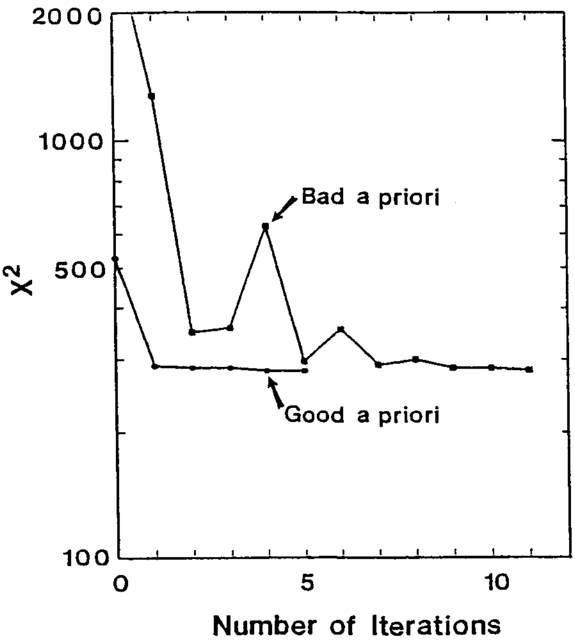

図2　繰り返しによるカイ2乗の変化