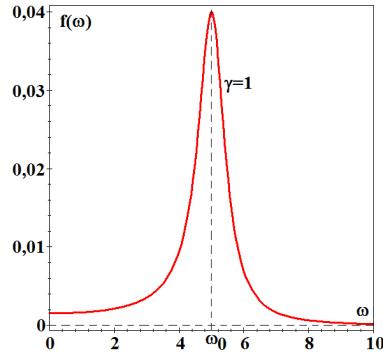


Die vollständige Regression der Lorentzfunktion



Dipl.- Ing. Björnstjerne Zindler, M.Sc.

www.Zenithpoint.de

Erstellt: 26. September 2021 – Letzte Revision: 6. Januar 2024

Inhaltsverzeichnis

1 Die Regression der Lorentzfunktion	3
1.1 Methode	3
1.2 Ermittlung der Koeffizienten	4
1.2.1 Koeffizient a_4	4
1.2.2 Koeffizient a_3	5
1.2.3 Koeffizient a_2	6
1.2.4 Koeffizient a_1	7
1.2.5 Koeffizient a_0	8
2 Zusammenfassung	9
3 Beispiel	10
3.1 Lorentzverteilt	10
3.2 Nicht lorentzverteilt	11

Literatur

[001] Keine für vorliegenden Text.

[Dipa] Dipl.- Ing. Björnstjerne Zindler, M.Sc. Die Regression der Pseudo-Voigt-Funktion.

[Dipb] Dipl.- Ing. Björnstjerne Zindler, M.Sc. (Polynom)Regression von Datenpunkten.

1 Die Regression der Lorentzfunktion

1.1 Methode

Gegeben ist die Lorentzfunktion:

[001]

$$f^*(\omega) = \frac{\gamma^2 \cdot \omega_0^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \cdot \omega_0^2}$$

\Rightarrow

$$\frac{f^*(\omega)}{\gamma^2 \cdot \omega_0^2} = f(\omega) = \frac{1}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \cdot \omega_0^2}$$

Dabei beschreibt ω_0 die Lage des Maximums (Resonanzpunkt) und γ die Breite der Funktion.

Die Aufgabe ist es, eine Regressionsvorschrift zu finden. Dafür wird umgestellt:

$$f(\omega)^{-1} = (\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \cdot \omega_0^2$$

\Rightarrow

$$f(\omega)^{-1} = \omega^4 - 2\omega_0^2 \cdot \omega^2 + (\omega_0^2 + \gamma^2) \cdot \omega_0^2$$

\Leftarrow

$$P(x) = a_4 \cdot x^4 + a_3 \cdot x^3 + a_2 \cdot x^2 + a_1 \cdot x^1 + a_0 \cdot x^0$$

Damit ist festgestellt, dass eine Biquadratische Polynomregression die Parameter der Lorentzfunktion vollständig¹ bestimmen kann. Für die Koeffizienten gilt:

$$a_4 = 1 \quad a_3 = 0 \quad a_2 = -2 \cdot \omega_0^2 \quad a_1 = 0 \quad a_0 = (\omega_0^2 + \gamma^2) \cdot \omega_0^2$$

\Rightarrow

$$\omega_0^2 = -\frac{a_2}{2} \quad \gamma^2 = \frac{a_0 - \omega_0^4}{\omega_0^2}$$

\Rightarrow

$$\gamma^2 = \frac{a_2^2 - 4 \cdot a_0}{2 \cdot a_2}$$

¹Vollständig, da Regression ohne Restterm.

1.2 Ermittlung der Koeffizienten

Die Ermittlung des Regressionspolynoms erfolgt über den Gaußalgorithmus. Für die Notation siehe [Dipb].

1.2.1 Koeffizient a_4

$$a_4 = 1 = \frac{\bar{B}}{\bar{A}}$$

\Rightarrow

$$\bar{A} - \bar{B} = 0$$

Mit:

$$\bar{A} = \frac{\hat{B}}{\hat{A}} - \frac{\hat{E}}{\hat{D}} \quad \bar{B} = \frac{\hat{C}}{\hat{A}} - \frac{\hat{F}}{\hat{D}}$$

Mit:

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \frac{\tilde{B}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{F}}{\tilde{E}} & \hat{B} &= \frac{\tilde{C}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{G}}{\tilde{E}} & \hat{C} &= \frac{\tilde{D}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{H}}{\tilde{E}} \\ \hat{D} &= \frac{\tilde{B}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{J}}{\tilde{I}} & \hat{E} &= \frac{\tilde{C}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{K}}{\tilde{I}} & \hat{F} &= \frac{\tilde{D}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{L}}{\tilde{I}} \end{aligned}$$

Mit:

$$\begin{aligned} \tilde{A} &= \frac{B}{A} - \frac{G}{F} & \tilde{B} &= \frac{C}{A} - \frac{H}{F} & \tilde{C} &= \frac{D}{A} - \frac{I}{F} & \tilde{D} &= \frac{E}{A} - \frac{J}{F} \\ \tilde{E} &= \frac{B}{A} - \frac{L}{K} & \tilde{F} &= \frac{C}{A} - \frac{M}{K} & \tilde{G} &= \frac{D}{A} - \frac{N}{K} & \tilde{H} &= \frac{E}{A} - \frac{O}{K} \\ \tilde{I} &= \frac{B}{A} - \frac{Q}{P} & \tilde{J} &= \frac{C}{A} - \frac{R}{P} & \tilde{K} &= \frac{D}{A} - \frac{S}{P} & \tilde{L} &= \frac{E}{A} - \frac{T}{P} \end{aligned}$$

Mit:

$$\begin{aligned} A &= U - \frac{\{x^2\}}{\{x\}} & B &= V - \frac{\{x^3\}}{\{x\}} & C &= W - \frac{\{x^4\}}{\{x\}} & D &= X - \frac{\{x^5\}}{\{x\}} \\ E &= Y - \frac{\{x \cdot y\}}{\{x\}} & F &= U - \frac{\{x^3\}}{\{x^2\}} & G &= V - \frac{\{x^4\}}{\{x^2\}} & H &= W - \frac{\{x^5\}}{\{x^2\}} \\ I &= X - \frac{\{x^6\}}{\{x^2\}} & J &= Y - \frac{\{x^2 \cdot y\}}{\{x^2\}} & K &= U - \frac{\{x^4\}}{\{x^3\}} & L &= V - \frac{\{x^5\}}{\{x^3\}} \\ M &= W - \frac{\{x^6\}}{\{x^3\}} & N &= X - \frac{\{x^7\}}{\{x^3\}} & O &= Y - \frac{\{x^3 \cdot y\}}{\{x^3\}} & P &= U - \frac{\{x^5\}}{\{x^4\}} \\ Q &= V - \frac{\{x^6\}}{\{x^4\}} & R &= W - \frac{\{x^7\}}{\{x^4\}} & S &= X - \frac{\{x^8\}}{\{x^4\}} & T &= Y - \frac{\{x^4 \cdot y\}}{\{x^4\}} \end{aligned}$$

Mit:

$$U = \frac{\{x\}}{n} \quad V = \frac{\{x^2\}}{n} \quad W = \frac{\{x^3\}}{n} \quad X = \frac{\{x^4\}}{n} \quad Y = \frac{\{y\}}{n}$$

1.2.2 Koeffizient a_3

$$a_3 = 0 = \frac{\hat{C}}{\hat{A}} - \frac{\hat{B}}{\hat{A}} \cdot a_4$$

$$\Rightarrow a_4 = \frac{\hat{C}}{\hat{B}}$$

Da $a_4 = 1$ gelten muss, folgt daraus:

$$\hat{B} - \hat{C} = 0$$

Mit:

$$\hat{B} = \frac{\tilde{C}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{G}}{\tilde{E}} \quad \hat{C} = \frac{\tilde{D}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{H}}{\tilde{E}}$$

$$\Rightarrow \tilde{E} \cdot (\tilde{C} - \tilde{D}) + \tilde{A} \cdot (\tilde{H} - \tilde{G}) = 0$$

Mit:

$$\begin{aligned} \tilde{A} &= \frac{B}{A} - \frac{G}{F} & \tilde{C} &= \frac{D}{A} - \frac{I}{F} & \tilde{D} &= \frac{E}{A} - \frac{J}{F} \\ \tilde{E} &= \frac{B}{A} - \frac{L}{K} & \tilde{G} &= \frac{D}{A} - \frac{N}{K} & \tilde{H} &= \frac{E}{A} - \frac{O}{K} \end{aligned}$$

Mit:

$$\begin{aligned} A &= U - \frac{\{x^2\}}{\{x\}} & B &= V - \frac{\{x^3\}}{\{x\}} & D &= X - \frac{\{x^5\}}{\{x\}} \\ E &= Y - \frac{\{x \cdot y\}}{\{x\}} & F &= U - \frac{\{x^3\}}{\{x^2\}} & G &= V - \frac{\{x^4\}}{\{x^2\}} \\ I &= X - \frac{\{x^6\}}{\{x^2\}} & J &= Y - \frac{\{x^2 \cdot y\}}{\{x^2\}} & K &= U - \frac{\{x^4\}}{\{x^3\}} \\ L &= V - \frac{\{x^5\}}{\{x^3\}} & N &= X - \frac{\{x^7\}}{\{x^3\}} & O &= Y - \frac{\{x^3 \cdot y\}}{\{x^3\}} \end{aligned}$$

Mit:

$$U = \frac{\{x\}}{n} \quad V = \frac{\{x^2\}}{n} \quad W = \frac{\{x^3\}}{n} \quad X = \frac{\{x^4\}}{n} \quad Y = \frac{\{y\}}{n}$$

1.2.3 Koeffizient a_2

$$a_2 = -2 \cdot \omega_0^2$$

\Rightarrow

$$\frac{\tilde{D}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{C}}{\tilde{A}} \cdot a_4 - \frac{\tilde{B}}{\tilde{A}} \cdot a_3 = -2 \cdot \omega_0^2$$

\Rightarrow

$$\omega_0^2 = \frac{\tilde{C} - \tilde{D}}{2 \cdot \tilde{A}}$$

Mit:

$$\tilde{A} = \frac{B}{A} - \frac{G}{F} \quad \tilde{C} = \frac{D}{A} - \frac{I}{F} \quad \tilde{D} = \frac{E}{A} - \frac{J}{F}$$

\Rightarrow

$$\omega_0^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{F \cdot (D - E) + A \cdot (J - I)}{B \cdot F - A \cdot G}$$

Mit:

$$A = U - \frac{\{x^2\}}{\{x\}} \quad B = V - \frac{\{x^3\}}{\{x\}} \quad D = X - \frac{\{x^5\}}{\{x\}}$$

$$E = Y - \frac{\{x \cdot y\}}{\{x\}} \quad F = U - \frac{\{x^3\}}{\{x^2\}} \quad I = X - \frac{\{x^6\}}{\{x^2\}} \quad J = Y - \frac{\{x^2 \cdot y\}}{\{x^2\}}$$

Mit:

$$U = \frac{\{x\}}{n} \quad V = \frac{\{x^2\}}{n} \quad X = \frac{\{x^4\}}{n} \quad Y = \frac{\{y\}}{n}$$

1.2.4 Koeffizient a_1

$$a_1 = 0 = \frac{E}{A} - \frac{D}{A} \cdot a_4 - \frac{C}{A} \cdot a_3 - \frac{B}{A} \cdot a_2$$

\Rightarrow

$$0 = E - D + 2 \cdot B \cdot \omega_0^2$$

\Rightarrow

$$\omega_0^2 = \frac{D - E}{2 \cdot B}$$

Mit:

$$B = V - \frac{\{x^3\}}{\{x\}} \quad D = X - \frac{\{x^5\}}{\{x\}} \quad E = Y - \frac{\{x \cdot y\}}{\{x\}}$$

Mit:

$$V = \frac{\{x^2\}}{n} \quad X = \frac{\{x^4\}}{n} \quad Y = \frac{\{y\}}{n}$$

\Rightarrow

$$B = \frac{\{x^2\}}{n} - \frac{\{x^3\}}{\{x\}} \quad D = \frac{\{x^4\}}{n} - \frac{\{x^5\}}{\{x\}} \quad E = \frac{\{y\}}{n} - \frac{\{x \cdot y\}}{\{x\}}$$

1.2.5 Koeffizient a_0

$$a_0 = (\omega_0^2 + \gamma^2) \cdot \omega_0^2 = Y - X \cdot a_4 - W \cdot a_3 - V \cdot a_2 - U \cdot a_1$$
$$\Rightarrow \gamma^2 = \frac{Y - X}{\omega_0^2} + 2 \cdot V - \omega_0^2$$

Mit:

$$V = \frac{\{x^2\}}{n} \quad X = \frac{\{x^4\}}{n} \quad Y = \frac{\{y\}}{n}$$

2 Zusammenfassung

Die Regression der Lorentzfunktion² erfolgt durch:

- **Nachweis der Gültigkeit**

Mit geeigneten oder den oben gezeigten Mitteln ist nachzuweisen, dass die vorliegenden Datenpaare lorentzverteilt sind, z.B. über:

$$\hat{B} - \hat{C} = 0 \quad \text{oder} \quad \bar{A} - \bar{B} = 0$$

- **Ermitteln von ω_0^2 für sicher lorentzverteilte Daten**

$$\omega_0^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{D - E}{B}$$

⇒

$$\omega_0^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{\{x^4\} \cdot \{x\} - \{x\} \cdot \{y\} + \{x \cdot y\} \cdot n - \{x^5\} \cdot n}{\{x^2\} \cdot \{x\} - \{x^3\} \cdot n}$$

- **Ermitteln von ω_0^2 ersatzweise als $\hat{\omega}_0^2$**

$$\hat{\omega}_0^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{\{x^4\} \cdot \{x\} - \{x\} \cdot \{y\} + \{x \cdot y\} \cdot n - \{x^5\} \cdot n}{\{x^2\} \cdot \{x\} - \{x^3\} \cdot n}$$

- **Ermitteln von γ^2 für sicher lorentzverteilte Daten**

$$\gamma^2 = \frac{Y - X}{\omega_0^2} + 2 \cdot V - \omega_0^2$$

⇒

$$\gamma^2 = \frac{\{y\} - \{x^4\}}{\omega_0^2 \cdot n} + \frac{2}{n} \cdot \{x^2\} - \omega_0^2$$

- **Ermitteln von γ^2 ersatzweise als $\hat{\gamma}^2$**

$$\hat{\gamma}^2 = \frac{1}{f(\omega)_{max} \cdot \omega_0^2}$$

- **Für die Lorentzkoeffizienten gilt**

$$\text{Ideal : } a_4 = 1$$

$$\text{Ideal : } a_3 = 0$$

$$\text{Ideal : } a_2 < 0$$

$$\text{Ideal : } a_1 = 0$$

$$\text{Muss : } a_0 > 0$$

- **Die reduzierten Lorentzkoeffizienten**

Für bestimmte Anwendungen ist es vorteilhaft, mit den reduzierten Lorentzkoeffizienten weiter zu rechnen.

$$\hat{a}_4 = 1$$

$$\hat{a}_3 = a_3/a_4$$

$$\hat{a}_2 = a_2/a_4$$

$$\hat{a}_1 = a_1/a_4$$

$$\hat{a}_0 = a_0/a_4$$

- **Das Kontrollprodukt**

$$\hat{\gamma}^2 \cdot \hat{\omega}_0^2 = \gamma^2 \cdot \omega_0^2$$

²eine weitere Möglichkeit ist in [Dipa] beschrieben

3 Beispiel

3.1 Lorentzverteilt

Die Datenpaare folgen einer Lorentzfunktion, da gilt $\hat{B} - \hat{C} = 0$ und $\bar{A} - \bar{B} = 0$ ³.

n	ω^1	ω^2	ω^3	ω^4	ω^5
1	0	0	0	0	0
2	1	1	1	1	1
3	2	4	8	16	32
4	3	9	27	81	243
5	4	16	64	256	1 024
6	5	25	125	625	3 125
7	6	36	216	1 296	7 776
8	7	49	343	2 401	16 807
9	8	64	512	4 096	32 768
10	9	81	729	6 561	59 049
11	10	100	1 000	10 000	100 000
11	55	385	3 025	25 333	220 825

n	$f(\omega)^{+1}$	$\omega^0 \cdot f(\omega)^{-1}$	$\omega^1 \cdot f(w)^{-1}$	$\omega^2 \cdot f(w)^{-1}$	$\omega^3 \cdot f(w)^{-1}$
1	0,001 538 461 538	650	0	-	-
2	0,001 663 893 511	601	601	-	-
3	0,002 145 922 747	466	932	-	-
4	0,003 558 718 861	281	843	-	-
5	0,009 433 962 264	106	424	-	-
6	0,040 000 000 000	25	125	-	-
7	0,006 849 315 068	146	876	-	-
8	0,001 663 893 511	601	4 207	-	-
9	0,000 646 830 530	1 546	12 368	-	-
10	0,000 316 355 584	3 161	28 449	-	-
11	0,000 176 991 150	5 650	56 500	-	-
11	0,067 994 344 764	13 233	105 325	-	-

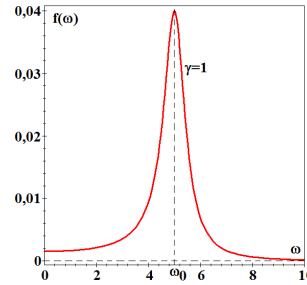
⇒

$$\omega_0^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{25333 \cdot 55 - 55 \cdot 13233 + 105325 \cdot 11 - 220825 \cdot 11}{385 \cdot 55 - 3025 \cdot 11} = 25$$

⇒

$$\gamma^2 = \frac{13233 - 25333}{25 \cdot 11} + \frac{2}{11} \cdot 385 - 25 = 1$$

⇒



³Berechnung dazu siehe Maple[©]-Classic-Worksheet auf www.ZenithPoint.de

3.2 Nicht lorentzverteilt

Die Datenpaare folgen keiner Lorentzfunktion, da gilt $\hat{B} - \hat{C} = 1,579$ und $\bar{A} - \bar{B} = 2,985$ ⁴.

n	ω^1	ω^2	ω^3	ω^4	ω^5
1	0	0	0	0	0
2	1	1	1	1	1
3	2	4	8	16	32
4	3	9	27	81	243
5	4	16	64	256	1 024
6	5	25	125	625	3 125
7	6	36	216	1 296	7 776
8	7	49	343	2 401	16 807
9	8	64	512	4 096	32 768
10	9	81	729	6 561	59 049
11	10	100	1 000	10 000	100 000
11	55	385	3 025	25 333	220 825

n	$f(\omega)^{+1}$	$\omega^0 \cdot f(\omega)^{-1}$	$\omega^1 \cdot f(w)^{-1}$	$\omega^2 \cdot f(w)^{-1}$	$\omega^3 \cdot f(w)^{-1}$
1	0,001 000	1 000, 000	0,000	-	-
2	0,008 800	113, 636	113, 640	-	-
3	0,016 600	60, 241	120, 480	-	-
4	0,024 400	40, 984	122, 950	-	-
5	0,032 200	31, 056	124, 220	-	-
6	0,040 000	25, 000	125, 000	-	-
7	0,032 040	31, 211	187, 000	-	-
8	0,024 080	41, 528	290, 700	-	-
9	0,016 120	62, 035	496, 280	-	-
10	0,008 160	122, 550	1 102, 950	-	-
11	0,000 200	5 000, 000	50 000, 000	-	-
11	0,203 600	6 528, 200	52 683, 490	-	-

⇒

$$\hat{\omega}_0^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{25333 \cdot 55 - 55 \cdot 6528,2 + 52683,49 \cdot 11 - 220825 \cdot 11}{385 \cdot 55 - 3025 \cdot 11} = 33,690$$

⇒

$$\gamma^2 = \frac{6528,2 - 25333}{33,690 \cdot 11} + \frac{2}{11} \cdot 385 - 33,690 = -14,433$$

bzw.

$$\hat{\gamma}^2 = \frac{1}{0,04 \cdot 33,690} = 0,742$$

Da für beide Beispiele gilt

$$f(\omega)_{max} = 0,04$$

ist:

$$0,742 \cdot 33,690 = 1 \cdot 25$$

⁴Berechnung dazu siehe Maple[©]-Classic-Worksheet auf www.ZenithPoint.de

LATEX 2_ε