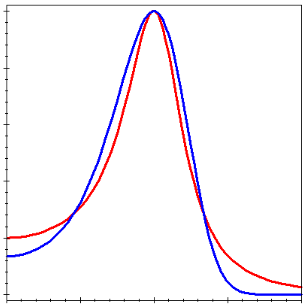
Die vollständige Regression der Pseudo-Voigt-Funktion



The complete regression of the pseudo-Voigt function

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

www.Zenithpoint.de

Erstellt: 1. April 2023 – Letzte Revision: 8. November 2025

Inhaltsverzeichnis

1 Die Regression der Pseudo-Voigt-Funktion **3**
- 1.1 Methode I - $\omega_0 \in R^+; 0 \leq \eta \leq 1 \leftarrow$ Pseudo-Voigt I . . . 3
- 1.2 Methode II - $\omega_0 = 1; 0 \leq \eta \leq 1 \leftarrow$ Pseudo-Voigt II . . . 4
- 1.3 Methode III - $\omega_0 = 1; \eta = 0 \leftarrow$ Gauß . . . 5
- 1.4 Methode IV - $\omega_0 = 1; \eta = 1 \leftarrow$ Lorentz . . . 6

2 Beispiele **7**
- 2.1 Beispiel I . . . 7
  - 2.1.1 Lorentzverteilt . . . 7
  - 2.1.2 Gaußverteilt . . . 9
  - 2.1.3 Pseudo-Voigt-verteilt . . . 11
- 2.2 Beispiel II . . . 13
  - 2.2.1 Lorentzverteilt . . . 13
  - 2.2.2 Gaußverteilt . . . 14
  - 2.2.3 Pseudo-Voigt-verteilt . . . 15

3 Anhang **17**
- 3.1 Koeffizienten a_0 bis a_8 des Polynoms $L(\gamma)$ . . . 17
- 3.2 Koeffizienten a_0 bis a_8 des Polynoms $G(\gamma)$ . . . 18
- 3.3 Koeffizienten a_0 bis a_8 des Polynoms $V(\gamma; \eta)$ . . . 19
- 3.4 Regression nach [Dip] . . . 20

Literatur

[001] Keine für vorliegenden Text.

[Dip] Dipl.-Ing. Björnstjerne Zindler, M.Sc. Regression von Datenpunkten. www.Zenithpoint.de.

1 Die Regression der Pseudo-Voigt-Funktion

1.1 Methode I - $\omega_0 \in R^+; 0 \leq \eta \leq 1$

Gegeben ist die Gaußfunktion: [001] ff.

$$G(x,\gamma,\omega_0) = e^{-\frac{1}{2}\cdot\frac{\left(x^2-\omega_0^2\right)^2}{\gamma^2\cdot\omega_0^2}}$$

Gegeben ist die Lorentzfunktion: Methode I

$$L(x,\gamma,\omega_0) = \frac{\gamma^2\cdot\omega_0^2}{\gamma^2\cdot\omega_0^2 + \left(x^2-\omega_0^2\right)^2}$$

Damit ist die Pseudo-Voigt-Funktion definiert:

$$V_P(x,\gamma,\omega_0,\eta) = \eta\cdot L(x,\gamma,\omega_0) + (1-\eta)\cdot G(x,\gamma,\omega_0)$$

Mit:

$$0 < \eta < 1$$

$\Leftarrow$

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

Es ist festgestellt, dass eine Biquadratische Polynomregression die Parameter der Pseudo-Voigt-Funktion in Polynomschreibweise bestimmen kann. Für die ersten fünf Koeffizienten gilt:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{4\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\omega_0^4 - (1+\eta)\cdot\gamma^2\cdot\omega_0^2 + 2\cdot\gamma^4}{2\cdot\gamma^4} \\ &= 2\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4}\cdot\omega_0^4 - \frac{1}{2}\cdot(1+\eta)\cdot\gamma^{-2}\cdot\omega_0^2 + 1 \end{aligned}$$

$$a_1 = -8\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4}\cdot\omega_0^3$$

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{12\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\omega_0^2 + (1+\eta)\cdot\gamma^2}{\gamma^4} \\ &= 12\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4}\cdot\omega_0^2 + (1+\eta)\cdot\gamma^{-2} \end{aligned}$$

$$a_3 = -8\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4}\cdot\omega_0$$

$$\begin{aligned} a_4 &= \frac{4\cdot\left(\omega_0^2+7\cdot\eta\right)\cdot\omega_0^2 - (1+\eta)\cdot\gamma^2}{2\cdot\gamma^4\cdot\omega_0^2} \\ &= 2\cdot\left(\omega_0^2+7\cdot\eta\right)\cdot\gamma^{-4} - \frac{1}{2}\cdot(1+\eta)\cdot\gamma^{-2}\cdot\omega_0^{-2} \end{aligned}$$

Es gilt:

$$\sum_{i=0}^{4} a_i = 1$$

1.2 Methode II - $\omega_0 = 1; 0 \leq \eta \leq 1$

Methode II

Gegeben ist die Gaußfunktion:

$$G(x,\gamma,\omega_0) = e^{-\frac{1}{2}\cdot\frac{\left(x^2-1\right)^2}{\gamma^2}}$$

Gegeben ist die Lorentzfunktion:

$$L(x,\gamma,\omega_0) = \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + \left(x^2-1\right)^2}$$

Damit ist die Pseudo-Voigt-Funktion definiert:

$$V_P(x,\gamma,\eta) = \eta \cdot L(x,\gamma) + (1-\eta)\cdot G(x,\gamma)$$

Mit:

$$0 < \eta < 1$$

$\Leftarrow$

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

Es ist festgestellt, dass eine Biquadratische Polynomregression die Parameter der Pseudo-Voigt-Funktion in Polynomschreibweise bestimmen kann. Für die ersten fünf Koeffizienten gilt:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{4\cdot(1+7\cdot\eta) - (1+\eta)\cdot\gamma^2 + 2\cdot\gamma^4}{2\cdot\gamma^4} \\ &= 2\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4} - \frac{1}{2}\cdot(1+\eta)\cdot\gamma^{-2} + 1 \end{aligned}$$

$$a_1 = -8\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4}$$

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{12\cdot(1+7\cdot\eta) + (1+\eta)\cdot\gamma^2}{\gamma^4} \\ &= 12\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4} + (1+\eta)\cdot\gamma^{-2} \end{aligned}$$

$$a_3 = -8\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4}$$

$$\begin{aligned} a_4 &= \frac{4\cdot(1+7\cdot\eta) - (1+\eta)\cdot\gamma^2}{2\cdot\gamma^4} \\ &= (1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4} - \frac{1}{2}\cdot(1+\eta)\cdot\gamma^{-2} \end{aligned}$$

Es gilt:

$$\sum_{i=0}^{4} a_i = 1$$

Zusätzlich:

$$a_1 = a_3 \qquad a_0 = a_4 + 1$$

1.3 Methode III - $\omega_0 = 1; \eta = 0$

Gegeben ist die Gaußfunktion: Methode III

$$G(x,\gamma,\omega_0) = e^{-\frac{1}{2}\cdot\frac{\left(x^2-1\right)^2}{\gamma^2}}$$

Gegeben ist die Lorentzfunktion:

$$L(x,\gamma,\omega_0) = \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + \left(x^2-1\right)^2}$$

Damit ist die Pseudo-Voigt-Funktion definiert:

$$V_P(x,\gamma,\eta) = \eta\cdot L(x,\gamma) + (1-\eta)\cdot G(x,\gamma)$$

Mit hier:

$$\eta = 0$$

$\Leftarrow$

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

Es ist festgestellt, dass eine Biquadratische Polynomregression die Parameter der Pseudo-Voigt-Funktion in Polynomschreibweise bestimmen kann. Für die ersten fünf Koeffizienten gilt:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{4-\gamma^2+2\cdot\gamma^4}{2\cdot\gamma^4} \\ &= 2\cdot\gamma^{-4} - \frac{1}{2}\cdot\gamma^{-2} + 1 \end{aligned}$$

$$a_1 = -8\cdot\gamma^{-4}$$

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{12+\gamma^2}{\gamma^4} \\ &= 12\cdot\gamma^{-4} + \gamma^{-2} \end{aligned}$$

$$a_3 = -8\cdot\gamma^{-4}$$

$$\begin{aligned} a_4 &= \frac{4-\gamma^2}{2\cdot\gamma^4} \\ &= 2\cdot\gamma^{-4} - \frac{1}{2}\cdot\gamma^{-2} \end{aligned}$$

Was einer Berechnung der Gaußfunktion $G(x,\gamma)$ entspricht.

Es gilt:

$$\sum_{i=0}^{4} a_i = 1$$

Zusätzlich:

$$a_1 = a_3 \qquad a_0 = a_4 + 1$$

1.4 Methode IV - $\omega_0 = 1; \eta = 1$

Methode IV

Gegeben ist die Gaußfunktion:

$$G(x,\gamma) = e^{-\frac{1}{2}\cdot\frac{\left(x^2-1\right)^2}{\gamma^2}}$$

Gegeben ist die Lorentzfunktion:

$$L(x,\gamma) = \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + \left(x^2-1\right)^2}$$

Damit ist die Pseudo-Voigt-Funktion definiert:

$$V(x,\gamma,\eta) = \eta \cdot L(x,\gamma) + (1-\eta)\cdot G(x,\gamma)$$

Mit hier:

$$\eta = 1$$

$\Leftarrow$

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

Es ist festgestellt, dass eine Biquadratische Polynomregression die Parameter der Pseudo-Voigt-Funktion in Polynomschreibweise bestimmen kann. Für die ersten fünf Koeffizienten gilt:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{16-\gamma^2+\gamma^4}{\gamma^4} \\ &= 16\cdot\gamma^{-4} - \gamma^{-2} + 1 \\ \\ a_1 &= -64\cdot\gamma^{-4} \\ \\ a_2 &= \frac{96+2\cdot\gamma^2}{\gamma^4} \\ &= 96\cdot\gamma^{-4} + 2\cdot\gamma^{-2} \\ \\ a_3 &= -64\cdot\gamma^{-4} \\ \\ a_4 &= \frac{16-\gamma^2}{\gamma^4} \\ &= 16\cdot\gamma^{-4} - \gamma^{-2} \end{aligned}$$

Was einer Berechnung der Lorentzfunktion $L(x,\gamma)$ entspricht.

Es gilt:

$$\sum_{i=0}^{4} a_i = 1$$

Zusätzlich:

$$a_1 = a_3 \qquad\qquad a_0 = a_4 + 1$$

2 Beispiele

2.1 Beispiel I

2.1.1 Lorentzverteilt

Gegeben ist die Lorentzfunktion $L\left(x;\gamma=0,5;\omega_0=1\right)$: Beispiel $L1$

$$L\left(x\right)=\frac{0,25}{0,25+\left(x^2-1\right)^2}$$

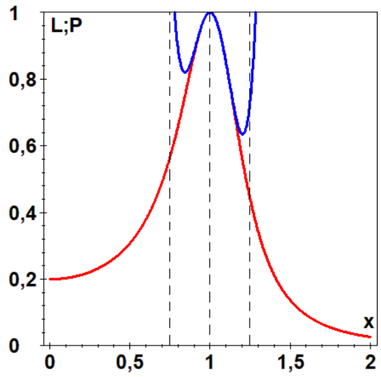
Das L regressierende Polynom $P\left(x\right)$ vierten Grades ist über die **Methode IV** beschreibbar.

$$\begin{aligned} a_0 &= +253 \\ a_1 &= -1024 \\ a_2 &= +1544 \\ a_3 &= -1024 \\ a_4 &= +252 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$a_1=a_3 \qquad a_0=a_4+1$$

Grafisch dargestellt:



Blau das Polynom P und rot die Lorentzfunktion L.

Eine biquadratische **Regression der Lorentzfunktion durch eine kommerzielle Software** im Intervall $0,75\leq x\leq 1,25$ berechnet folgendes Polynom $\tilde{P}\left(x\right)$.

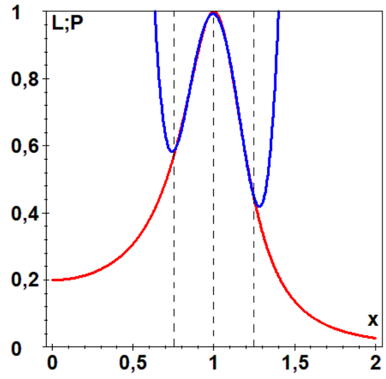
$$\begin{aligned} \tilde{a}_0 &= +81,9361173 \\ \tilde{a}_1 &= -347,761240 \\ \tilde{a}_2 &= +544,602378 \\ \tilde{a}_3 &= -369,570550 \\ \tilde{a}_4 &= +91,7863157 \end{aligned}$$

Die sich daraus ergebende Werte für $\tilde{\gamma}$.

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}_0 &= 0,66218201 \\ \tilde{\gamma}_1 &= 0,65497496 \\ \tilde{\gamma}_2 &= 0,64937805 \\ \tilde{\gamma}_3 &= 0,64509051 \\ \tilde{\gamma}_4 &= 0,64195177 \end{aligned}$$

Das Regressionsverfahren ist entscheidend für die Reproduzierbarkeit des gesuchten Wertes γ.

Grafisch dargestellt:



Blau das Polynom P und rot die Lorentzfunktion L.

Wobei:

$$\sum_{i=0}^{4} a_i = 0,993021$$

2.1.2 Gaußverteilt

Gegeben ist die Gaußfunktion $G\left(x;\gamma=0,5;\omega_0=1\right)$: Beispiel $G1$

$$G\left(x\right)=e^{-\frac{1}{2}\cdot\frac{\left(x^2-1\right)^2}{0,25}}$$

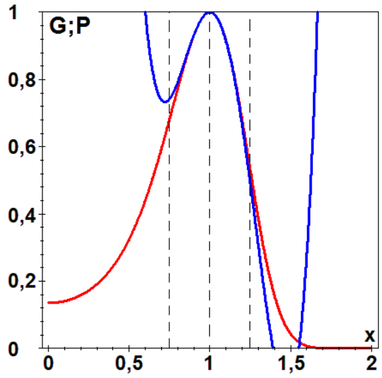
Das G regressierende Polynom $P\left(x\right)$ vierten Grades ist über die **Methode III** beschreibbar.

$$\begin{aligned}a_0&=+31\\a_1&=-128\\a_2&=+196\\a_3&=-128\\a_4&=+30\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$a_1=a_3 \qquad\qquad a_0=a_4+1$$

Grafisch dargestellt:



Blau das Polynom P und rot die Gaußfunktion G.

Eine biquadratische **Regression der Gaußfunkion durch eine kommerzielle Software** im Intervall $0,75\leq x\leq 1,25$ berechnet folgendes Polynom $\tilde{P}\left(x\right)$.

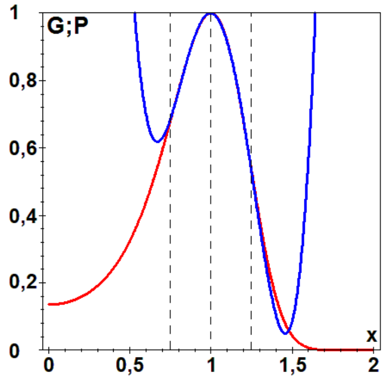
$$\begin{aligned}\tilde{a}_0&=+23,5570849\\\tilde{a}_1&=-101,575760\\\tilde{a}_2&=+161,611353\\\tilde{a}_3&=-108,678110\\\tilde{a}_4&=+26,0851560\end{aligned}$$

Die sich daraus ergebende Werte für $\tilde{\gamma}$.

$$\begin{aligned}\tilde{\gamma}_0&=0,53561936\\\tilde{\gamma}_1&=0,52975489\\\tilde{\gamma}_2&=0,52497999\\\tilde{\gamma}_3&=0,52087915\\\tilde{\gamma}_4&=0,51718356\end{aligned}$$

Das Regressionsverfahren ist entscheidend für die Reproduzierbarkeit des gesuchten Wertes γ.

Grafisch dargestellt:



Blau das Polynom P und rot die Gaußfunktion G.

Wobei:

$$\sum_{i=0}^{4} a_i = 0,9997239$$

2.1.3 Pseudo-Voigt-verteilt

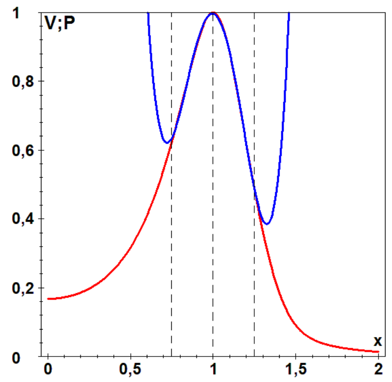
Gegeben ist die Pseudo-Voigt-Funktion $V\left(x; \gamma = 0,5; \omega_0 = 1; \eta = 0,5\right)$: Beispiel $V1$

$$V\left(x\right) = 0,5 \cdot \frac{0,25}{0,25 + \left(x^2 - 1\right)^2} + 0,5 \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \frac{\left(x^2-1\right)^2}{0,25}}$$

Eine biquadratische **Regression der Pseudo-Voigt-Funkion durch eine kommerzielle Software** im Intervall $0,75 \leq x \leq 1,25$ berechnet folgendes Polynom $\tilde{P}\left(x\right)$.

$$\begin{aligned}
a_0 &= +52,7466010 \\
a_1 &= -224,668500 \\
a_2 &= +353,106865 \\
a_3 &= -239,124330 \\
a_4 &= +58,9357357
\end{aligned}$$

Grafisch dargestellt:



Blau das Polynom P und rot die Pseudo-Voigt-Funktion V.

Wobei:

$$\sum_{i=0}^{4} a_i = 0,9997239$$

Der Wert γ ist über die **Methode III** berechenbar.

$$\begin{aligned}
{}_{III}\gamma_0 &= 0,4379769967 \\
{}_{III}\gamma_1 &= 0,4343971330 \\
{}_{III}\gamma_2 &= 0,4310093540 \\
{}_{III}\gamma_3 &= 0,4276776501 \\
{}_{III}\gamma_4 &= 0,4242902319
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$[1]

$${}_{III}\gamma = \frac{1}{5} \cdot \sum_{i=0}^{4} {}_{III}\gamma_i = 0,4310702732$$

Der Wert γ ist über die **Methode IV** berechenbar.

$$\begin{aligned}
{}_{IV}\gamma_0 &= 0,7392416206 \\
{}_{IV}\gamma_1 &= 0,7305659839 \\
{}_{IV}\gamma_2 &= 0,7240535287 \\
{}_{IV}\gamma_3 &= 0,7192652058 \\
{}_{IV}\gamma_4 &= 0,7159781653
\end{aligned}$$

[1] Für die Ermittlung des endgültigen Wertes von γ besteht weiterer Optimierungsbedarf. Hier wird der Einfachheit halber der Durchschnitt genommen.

$\Rightarrow$

$$_{IV}\gamma = \frac{1}{5} \cdot \sum_{i=0}^{4} {}_{IV}\gamma_i = 0,7258209010$$

$\Rightarrow$

$$\gamma = \frac{_{III}\gamma + _{IV}\gamma}{2} = 0,5784455870$$

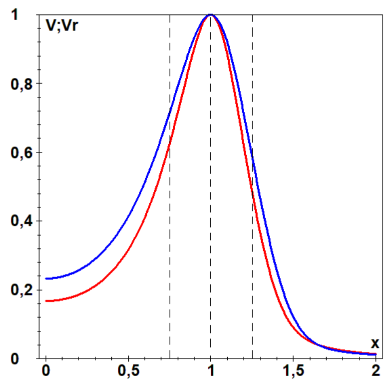
Der Wert η ist über die **Methode II** berechenbar.

$$\eta_0 = 0,2863271594$$
$$\eta_1 = 0,3063060989$$
$$\eta_2 = 0,3225019937$$
$$\eta_3 = 0,3352065788$$
$$\eta_4 = 0,3445133199$$

$\Rightarrow$[2]

$$\eta = \frac{1}{5} \cdot \sum_{i=0}^{4} \eta_i = 0,3189710302$$

Damit kann die regressierte Pseudo-Voigt-Funktion grafisch dargestellt werden.



Rot die Pseudo-Voigt-Funktion V und blau das Ergebnis der Regression.

[2] Für die Ermittlung des endgültigen Wertes von η besteht weiterer Optimierungsbedarf. Hier wird der Einfachheit halber der Durchschnitt genommen.

2.2 Beispiel II

2.2.1 Lorentzverteilt

Gegeben ist die Lorentzfunktion $L\,(x;\gamma = 0,5;\omega_0 = 1)$: Beispiel $L2$

$$L\,(x) = \frac{0,25}{0,25 + \left(x^2 - 1\right)^2}$$

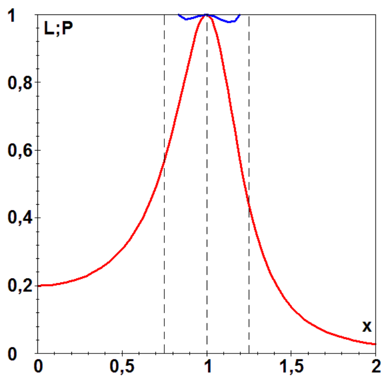
Eine biquadratische **Regression der Lorentzfunktion über [Dip]**[3] im Intervall $0,75 \leq x \leq 1,25$ berechnet folgendes Polynom $\tilde{P}\,(x)$.

$$\begin{aligned}
\tilde{a}_0 &= +68,50096119 \\
\tilde{a}_1 &= -272,2450373 \\
\tilde{a}_2 &= +409,4881523 \\
\tilde{a}_3 &= -272,2450373 \\
\tilde{a}_4 &= +67,50096119
\end{aligned}$$

Die sich daraus ergebende Werte für $\tilde{\gamma}$.

$$\begin{aligned}
\tilde{\gamma}_0 &= 0,6924666583 \\
\tilde{\gamma}_1 &= 0,6963137970 \\
\tilde{\gamma}_2 &= 0,6975939091 \\
\tilde{\gamma}_3 &= 0,6963137970 \\
\tilde{\gamma}_4 &= 0,6924666583
\end{aligned}$$

Grafisch dargestellt:



Blau das Polynom P und rot die Lorentzfunktion L.

[3] Maple-Worksheet© unter www.Zenithpoint.de abrufbar.

2.2.2 Gaußverteilt

Beispiel $G2$

Gegeben ist die Gaußfunktion $G\left(x;\gamma=0,5;\omega_0=1\right)$:

$$G\left(x\right)=e^{-\frac{1}{2}\cdot\frac{\left(x^2-1\right)^2}{0,25}}$$

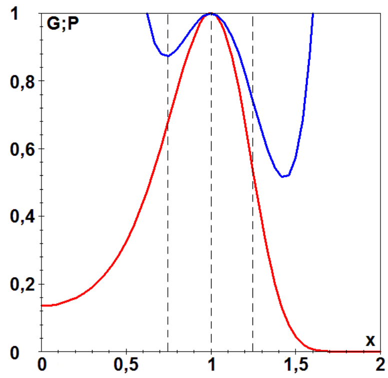
Eine biquadratische **Regression der Gaußfunkion über [Dip]**[4] im Intervall $0,75\leq x\leq 1,25$ berechnet folgendes Polynom $\tilde{P}\left(x\right)$.

$$\begin{aligned}\tilde{a}_0&=+19,88548647\\ \tilde{a}_1&=-79,82479486\\ \tilde{a}_2&=+121,8786168\\ \tilde{a}_3&=-79,82479486\\ \tilde{a}_4&=+18,88548647\end{aligned}$$

Die sich daraus ergebende Werte für $\tilde{\gamma}$.

$$\begin{aligned}\tilde{\gamma}_0&=0,5589780400\\ \tilde{\gamma}_1&=0,5626496382\\ \tilde{\gamma}_2&=0,5638354544\\ \tilde{\gamma}_3&=0,5626496382\\ \tilde{\gamma}_4&=0,5589780400\end{aligned}$$

Grafisch dargestellt:



Blau das Polynom P und rot die Gaußfunktion G.

[4] Maple-Worksheet© unter www.Zenithpoint.de abrufbar.

2.2.3 Pseudo-Voigt-verteilt

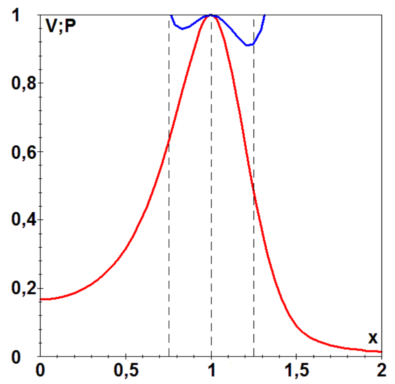
Gegeben ist die Pseudo-Voigt-Funktion $V\left(x;\gamma=0,5;\omega_0=1;\eta=0,5\right)$: Beispiel $V2$

$$V\left(x\right)=0,5\cdot\frac{0,25}{0,25+\left(x^2-1\right)^2}+0,5\cdot e^{-\frac{1}{2}\cdot\frac{\left(x^2-1\right)^2}{0,25}}$$

Eine biquadratische **Regression der Pseudo-Voigt-Funkion über [Dip]**[5] im Intervall $0,75\leq x\leq 1,25$ berechnet folgendes Polynom $\tilde{P}\left(x\right)$.

$$\begin{aligned}a_0&=+44,23912694\\a_1&=-176,2189973\\a_2&=+265,9597407\\a_3&=-176,2189973\\a_4&=+43,23912694\end{aligned}$$

Grafisch dargestellt:



Blau das Polynom P und rot die Pseudo-Voigt-Funktion V.

Der Wert γ ist über die **Methode III** berechenbar.

$$\begin{aligned}{}_{III}\gamma_0&=0,4575634069\\{}_{III}\gamma_1&=0,4615931075\\{}_{III}\gamma_2&=0,4629277220\\{}_{III}\gamma_3&=0,4615931075\\{}_{III}\gamma_4&=0,4575634069\end{aligned}$$

$\Rightarrow$[6]

$${}_{III}\gamma=\frac{1}{5}\cdot\sum_{i=0}^{4}{}_{III}\gamma_i=0,4602481502$$

Der Wert γ ist über die **Methode IV** berechenbar.

$$\begin{aligned}{}_{IV}\gamma_0&=0,7725616510\\{}_{IV}\gamma_1&=0,7763039788\\{}_{IV}\gamma_2&=0,7775401015\\{}_{IV}\gamma_3&=0,7763039788\\{}_{IV}\gamma_4&=0,7725616510\end{aligned}$$

[5] Maple-Worksheet© unter www.Zenithpoint.de abrufbar.

[6] Für die Ermittlung des endgültigen Wertes von γ besteht weiterer Optimierungsbedarf. Hier wird der Einfachheit halber der Durchschnitt genommen.

$\Rightarrow$

$$_{IV}\gamma = \frac{1}{5} \cdot \sum_{i=0}^{4} {}_{IV}\gamma_i = 0,7750542724$$

$\Rightarrow$

$$\gamma = \frac{_{III}\gamma + _{IV}\gamma}{2} = 0,6176512113$$

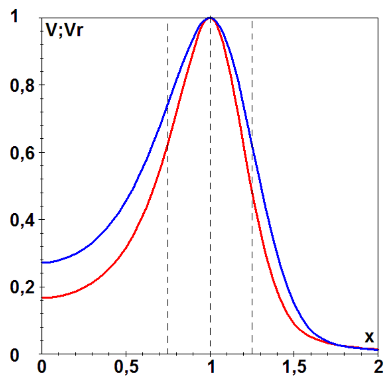
Der Wert η ist über die **Methode II** berechenbar.

$$\eta_0 = 0,3246834466$$
$$\eta_1 = 0,3151137629$$
$$\eta_2 = 0,3119815550$$
$$\eta_3 = 0,3151137629$$
$$\eta_4 = 0,3246834466$$

$\Rightarrow$[7]

$$\eta = \frac{1}{5} \cdot \sum_{i=0}^{4} \eta_i = 0,3183151948$$

Damit kann die regressierte Pseudo-Voigt-Funktion grafisch dargestellt werden.



Rot die Pseudo-Voigt-Funktion V und blau das Ergebnis der Regression.

[7] Für die Ermittlung des endgültigen Wertes von η besteht weiterer Optimierungsbedarf. Hier wird der Einfachheit halber der Durchschnitt genommen.

3 Anhang

Folgend die Koeffizienten für eine Regression bis a_8 für eine Lorentzfunktion $L(\gamma)$ bzw. einer Gaußfunktion $G(\gamma)$. Abschließend, für die Ermittlung von η die acht Koeffizienten der regressierten Pseudo-Voigt-Funktion $V(\gamma;\eta)$.

3.1 Koeffizienten a_0 bis a_8 des Polynoms $L(\gamma)$

Methode IV ← Lorentz Koeff L

$$a_0 = 1 - \gamma^{-2} + \gamma^{-4} - 112 \cdot \gamma^{-6} + 256 \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_1 = 960 \cdot \gamma^{-6} - 2048 \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_2 = 2 \cdot \gamma^{-2} - 4 \cdot \gamma^{-4} - 3648 \cdot \gamma^{-6} + 7168 \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_3 = 8000 \cdot \gamma^{-6} - 14336 \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_4 = -\gamma^{-2} + 6 \cdot \gamma^{-4} - 11040 \cdot \gamma^{-6} + 17920 \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_5 = 9792 \cdot \gamma^{-6} - 14336 \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_6 = -4 \cdot \gamma^{-4} - 5440 \cdot \gamma^{-6} + 7168 \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_7 = 1728 \cdot \gamma^{-6} - 2048 \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_8 = \gamma^{-4} - 240 \cdot \gamma^{-6} + 256 \cdot \gamma^{-8}$$

Auch hier gilt:

$$\sum_{i=0}^{8} a_i = 1$$

3.2 Koeffizienten a_0 bis a_8 des Polynoms $G(\gamma)$

Koeff G

Methode III ← Gauß

$$a_0 = 1 - \frac{1}{2} \cdot \gamma^{-2} + \frac{1}{8} \cdot \gamma^{-4} - \frac{7}{3} \cdot \gamma^{-6} + \frac{2}{3} \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_1 = 20 \cdot \gamma^{-6} - \frac{16}{3} \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_2 = \gamma^{-2} - \frac{1}{2} \cdot \gamma^{-4} - 76 \cdot \gamma^{-6} + \frac{56}{3} \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_3 = \frac{500}{3} \cdot \gamma^{-6} - \frac{112}{3} \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_4 = -\frac{1}{2} \cdot \gamma^{-2} + \frac{3}{4} \cdot \gamma^{-4} - 230 \cdot \gamma^{-6} + \frac{140}{3} \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_5 = 204 \cdot \gamma^{-6} - \frac{112}{3} \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_6 = -\frac{1}{2} \cdot \gamma^{-4} - \frac{340}{3} \cdot \gamma^{-6} + \frac{56}{3} \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_7 = 36 \cdot \gamma^{-6} - \frac{16}{3} \cdot \gamma^{-8}$$

$$a_8 = \frac{1}{8} \cdot \gamma^{-4} - 5 \cdot \gamma^{-6} + \frac{2}{3} \cdot \gamma^{-8}$$

Auch hier gilt:

$$\sum_{i=0}^{8} a_i = 1$$

3.3 Koeffizienten a_0 bis a_8 des Polynoms $V(\gamma;\eta)$

Methode II ← Pseudo-Voigt II Koeff $V\,II$

$$a_0 = 1 - \frac{1}{2}\cdot(1+\eta)\cdot\gamma^{-2} + \frac{1}{8}\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4} - \frac{7}{3}\cdot(1+47\cdot\eta)\cdot\gamma^{-6} + \frac{2}{3}\cdot(1+383\cdot\eta)\cdot\gamma^{-8}$$

$$a_1 = 20\cdot(1+47\cdot\eta)\cdot\gamma^{-6} - \frac{16}{3}\cdot(1+383\cdot\eta)\cdot\gamma^{-8}$$

$$a_2 = (1+\eta)\cdot\gamma^{-2} - \frac{1}{2}\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4} - 76\cdot(1+47\cdot\eta)\cdot\gamma^{-6} + \frac{56}{3}\cdot(1+383\cdot\eta)\cdot\gamma^{-8}$$

$$a_3 = \frac{500}{3}\cdot(1+47\cdot\eta)\cdot\gamma^{-6} - \frac{112}{3}\cdot(1+383\cdot\eta)\cdot\gamma^{-8}$$

$$a_4 = -\frac{1}{2}\cdot(1+\eta)\cdot\gamma^{-2} + \frac{3}{4}\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4} - 230\cdot(1+47\cdot\eta)\cdot\gamma^{-6} + \frac{140}{3}\cdot(1+383\cdot\eta)\cdot\gamma^{-8}$$

$$a_5 = 204\cdot(1+47\cdot\eta)\cdot\gamma^{-6} - \frac{112}{3}\cdot(1+383\cdot\eta)\cdot\gamma^{-8}$$

$$a_6 = -\frac{1}{2}\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4} - \frac{340}{3}\cdot(1+47\cdot\eta)\cdot\gamma^{-6} + \frac{56}{3}\cdot(1+383\cdot\eta)\cdot\gamma^{-8}$$

$$a_7 = 36\cdot(1+47\cdot\eta)\cdot\gamma^{-6} - \frac{16}{3}\cdot(1+383\cdot\eta)\cdot\gamma^{-8}$$

$$a_8 = \frac{1}{8}\cdot(1+7\cdot\eta)\cdot\gamma^{-4} - 5\cdot(1+47\cdot\eta)\cdot\gamma^{-6} + \frac{2}{3}\cdot(1+383\cdot\eta)\cdot\gamma^{-8}$$

Auch hier gilt:

$$\sum_{i=0}^{8} a_i = 1$$

3.4 Regression nach [Dip]

Regression

Der Regressionskern nach [Dip] berechnet die Koeffizienten a_0 bis a_4 durch:

$$\begin{aligned}
a_4 &= \frac{\bar{B}}{\bar{A}} \\
a_3 &= \frac{\hat{C}}{\hat{A}} - \frac{\hat{B}}{\hat{A}} \cdot a_4 \\
a_2 &= \frac{\tilde{D}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{C}}{\tilde{A}} \cdot a_4 - \frac{\tilde{B}}{\tilde{A}} \cdot a_3 \\
a_1 &= \frac{E}{A} - \frac{D}{A} \cdot a_4 - \frac{C}{A} \cdot a_3 - \frac{B}{A} \cdot a_2 \\
a_0 &= Y - X \cdot a_4 - W \cdot a_3 - V \cdot a_2 - U \cdot a_1
\end{aligned}$$

Die Berechnung der Koeffizienten a_0 und a_1 wird ersetzt mit den Randbedingungen:

$$a_0 = a_4 + 1 \qquad\qquad a_1 = a_3$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}
a_4 &= \frac{\bar{B}}{\bar{A}} \\
a_3 &= \frac{\hat{C}}{\hat{A}} - \frac{\hat{B}}{\hat{A}} \cdot a_4 \\
a_2 &= \frac{\tilde{D}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{C}}{\tilde{A}} \cdot a_4 - \frac{\tilde{B}}{\tilde{A}} \cdot a_3 \\
a_1 &= a_3 \\
a_0 &= a_4 + 1
\end{aligned}$$

Eine dritte Randbedingung berechnet a_2.

$$a_0 + a_1 + a_2 + a_3 + a_4 = 1$$

$\Rightarrow$

$$a_4 + 1 + a_3 + a_2 + a_3 + a_4 = 1$$

$\Rightarrow$

$$a_2 = -2 \cdot (a_3 + a_4)$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}
a_4 &= \frac{\bar{B}}{\bar{A}} \\
a_3 &= \frac{\hat{C}}{\hat{A}} - \frac{\hat{B}}{\hat{A}} \cdot a_4 \\
a_2 &= -2 \cdot (a_3 + a_4) \\
a_1 &= a_3 \\
a_0 &= a_4 + 1
\end{aligned}$$

Mit diesem Regressionskern ist dann das Beispiel II berechenbar[8].

$\LaTeX\,2_\varepsilon$

[8] Maple-Worksheet© unter www.Zenithpoint.de abrufbar.