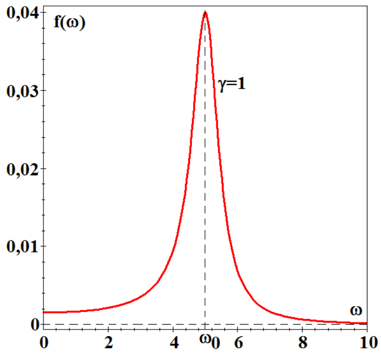
Die vollständige Regression der Lorentzfunktion



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

www.Zenithpoint.de

Erstellt: 26. September 2021 – Letzte Revision: 11. April 2024

Inhaltsverzeichnis

Literatur

[001] Keine für vorliegenden Text.

[Dipa] Dipl.- Ing. Björnstjerne Zindler, M.Sc. Analyse verschiedener Lorentzfunktionen.

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

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

---

1 Die Regression der Lorentzfunktion

1.1 Methode

Gegeben ist die Lorentzfunktion: [001]

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

⇒

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

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:

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

⇒

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

⇐

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

Damit ist festgestellt, dass eine Biquadratische Polynomregression die Parameter der Lorentzfunktion vollständig[1] bestimmen kann. Für die Koeffizienten gilt:

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

⇒

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

⇒

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

[1] Vollständig, da Regression ohne Restterm.

1.2 Ermittlung der Koeffizienten

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

1.2.1 Koeffizient a_4

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

$\Rightarrow$

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

Mit:

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

Mit:

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

$$\hat{D} = \frac{\tilde{B}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{J}}{\tilde{I}} \qquad \hat{E} = \frac{\tilde{C}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{K}}{\tilde{I}} \qquad \hat{F} = \frac{\tilde{D}}{\tilde{A}} - \frac{\tilde{L}}{\tilde{I}}$$

Mit:

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

$$\tilde{E} = \frac{B}{A} - \frac{L}{K} \qquad \tilde{F} = \frac{C}{A} - \frac{M}{K} \qquad \tilde{G} = \frac{D}{A} - \frac{N}{K} \qquad \tilde{H} = \frac{E}{A} - \frac{O}{K}$$

$$\tilde{I} = \frac{B}{A} - \frac{Q}{P} \qquad \tilde{J} = \frac{C}{A} - \frac{R}{P} \qquad \tilde{K} = \frac{D}{A} - \frac{S}{P} \qquad \tilde{L} = \frac{E}{A} - \frac{T}{P}$$

Mit:

$$A = U - \frac{\{x^2\}}{\{x\}} \qquad B = V - \frac{\{x^3\}}{\{x\}} \qquad C = W - \frac{\{x^4\}}{\{x\}} \qquad D = X - \frac{\{x^5\}}{\{x\}}$$

$$E = Y - \frac{\{x \cdot y\}}{\{x\}} \qquad F = U - \frac{\{x^3\}}{\{x^2\}} \qquad G = V - \frac{\{x^4\}}{\{x^2\}} \qquad H = W - \frac{\{x^5\}}{\{x^2\}}$$

$$I = X - \frac{\{x^6\}}{\{x^2\}} \qquad J = Y - \frac{\{x^2 \cdot y\}}{\{x^2\}} \qquad K = U - \frac{\{x^4\}}{\{x^3\}} \qquad L = V - \frac{\{x^5\}}{\{x^3\}}$$

$$M = W - \frac{\{x^6\}}{\{x^3\}} \qquad N = X - \frac{\{x^7\}}{\{x^3\}} \qquad O = Y - \frac{\{x^3 \cdot y\}}{\{x^3\}} \qquad P = U - \frac{\{x^5\}}{\{x^4\}}$$

$$Q = V - \frac{\{x^6\}}{\{x^4\}} \qquad R = W - \frac{\{x^7\}}{\{x^4\}} \qquad S = X - \frac{\{x^8\}}{\{x^4\}} \qquad T = Y - \frac{\{x^4 \cdot y\}}{\{x^4\}}$$

Mit:

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

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:

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

$\Rightarrow$

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

Mit:

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

$$\tilde{E} = \frac{B}{A} - \frac{L}{K} \qquad \tilde{G} = \frac{D}{A} - \frac{N}{K} \qquad \tilde{H} = \frac{E}{A} - \frac{O}{K}$$

Mit:

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

$$E = Y - \frac{\{x \cdot y\}}{\{x\}} \qquad F = U - \frac{\{x^3\}}{\{x^2\}} \qquad G = V - \frac{\{x^4\}}{\{x^2\}}$$

$$I = X - \frac{\{x^6\}}{\{x^2\}} \qquad J = Y - \frac{\{x^2 \cdot y\}}{\{x^2\}} \qquad K = U - \frac{\{x^4\}}{\{x^3\}}$$

$$L = V - \frac{\{x^5\}}{\{x^3\}} \qquad N = X - \frac{\{x^7\}}{\{x^3\}} \qquad O = Y - \frac{\{x^3 \cdot y\}}{\{x^3\}}$$

Mit:

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

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:

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

$\Rightarrow$

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

Mit:

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

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

Mit:

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

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:

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

Mit:

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

$\Rightarrow$

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

1.2.5 Koeffizient a_0

$$a_0 = \left(\omega_0^2 + \gamma^2\right) \cdot \omega_0^2 = Y - X \cdot a_4 - W \cdot a_3 - V \cdot a_2 - U \cdot a_1$$

$\Rightarrow$

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

Mit:

$$V = \frac{\left\{x^2\right\}}{n} \qquad X = \frac{\left\{x^4\right\}}{n} \qquad Y = \frac{\{y\}}{n}$$

1.3 Qualitätskontrolle

Grundgedanke nach [Dipa] ist die Tatsache, dass ein Polynom vierten Grades vorliegt. Dementsprechend ist zur Berechnung der vorliegenden Maxima die erste Ableitung des Regressionspolynoms zu bilden und Null zu setzen. Sämtliche Maxima sind über die Cardanische Formel für den Fall „Casus irreducibilis“ berechenbar. Im Rechenweg erscheinen zwei Hilfsvariablen p und q.

$$p = \frac{8 \cdot a_2 \cdot a_4 - 3 \cdot a_3^2}{16 \cdot a_4^2} \qquad q = \frac{a_3^3 + 8 \cdot a_1 \cdot a_4^2 - 4 \cdot a_2 \cdot a_3 \cdot a_4}{32 \cdot a_4^3}$$

Zurückgeführt auf die Standardlorentzfunktion gilt dann:

$$a_4 = 1 \qquad a_3 = 0 \qquad a_1 = 0$$

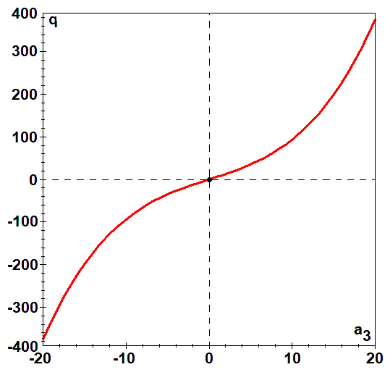
$\Rightarrow$

$$p = \frac{1}{2} \cdot a_2 \quad \rightarrow \quad p = -\omega_0^2 \qquad q = 0$$

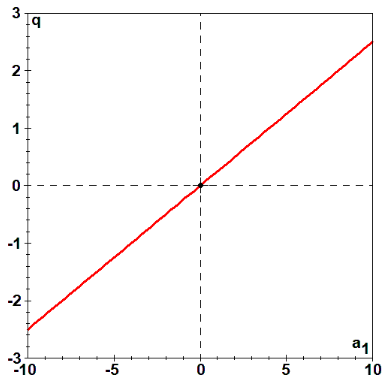
Von Interesse ist hier ausschließlich q.

Für eine Abweichung von Null sind die Koeffizienten a_3 und a_1 zuständig. Der Koeffizient $a_4 = 1$ beeinflusst nur dann q, wenn $a_3 \neq 0$ und/oder $a_1 \neq 0$.

Bei in [Dipa] genutztem Beispiel mit $a_4 = 1$, $a_0 = 650$, $a_2 = -50$ somit $\omega_0^2 = 25$ und $\gamma^2 = 1$ ergäbe sich beispielshaft grafisch für a_3:



Abschließend für a_1.



Es lässt sich q als „Qualitätsfaktor“ für die Regression einer Lorentzfunktion nutzen.

2 Zusammenfassung

2.1 Lorentzverteilt

Die Regression der Lorentzfunktion[2] erfolgt durch:

• Nachweis der Gültigkeit

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

$$\hat{B} - \hat{C} = 0 \qquad \text{und} \qquad \bar{A} - \bar{B} = 0$$

$\Rightarrow$

$$a_3 = 0 \qquad \text{und} \qquad a_4 = 1$$

• Ermitteln von ω_0^2

Für sicher lorentzverteilte Daten gilt:

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

$\Rightarrow$

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

• Ermitteln von γ^2

Für sicher lorentzverteilte Daten gilt:

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

$\Rightarrow$

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

• Für die Lorentzkoeffizienten gilt

$$\begin{aligned} \text{Ideal} &: a_4 = 1 \\ \text{Ideal} &: a_3 = 0 \\ \text{Ideal} &: a_2 < 0 \\ \text{Ideal} &: a_1 = 0 \\ \text{Muss} &: a_0 > 0 \end{aligned}$$

• Aus den Lorentzkoeffizienten ergibt sich der „Qualitätsfaktor“ q

$$q = \frac{a_3^3 + 8 \cdot a_1 \cdot a_4^2 - 4 \cdot a_2 \cdot a_3 \cdot a_4}{32 \cdot a_4^3}$$

Wobei hier $q = 0$ zu erwarten ist.

[2] eine weitere Möglichkeit ist in [Dipb] beschrieben

2.2 Nichtlorentzverteilt

Für den Fall das:

$$\hat{B} - \hat{C} \neq 0 \qquad \text{oder} \qquad \bar{A} - \bar{B} \neq 0$$

$\Rightarrow$

$$a_3 \neq 0 \qquad \text{oder} \qquad a_4 \neq 1$$

Die Regression der Lorentzfunktion erfolgt dann durch:

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

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

- **Das Kontrollprodukt**

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

- **Für die Lorentzkoeffizienten gilt**

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

$$\begin{aligned}
\hat{a}_4 &= 1 \\
\hat{a}_3 &= a_3/a_4 \\
\hat{a}_2 &= a_2/a_4 \\
\hat{a}_1 &= a_1/a_4 \\
\hat{a}_0 &= a_0/a_4
\end{aligned}$$

- **Aus den Lorentzkoeffizienten ergibt sich der „Qualitätsfaktor“ q**

$$q = \frac{a_3^3 + 8 \cdot a_1 \cdot a_4^2 - 4 \cdot a_2 \cdot a_3 \cdot a_4}{32 \cdot a_4^3}$$

Wobei hier $q \neq 0$ zu erwarten ist.

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**	-	-

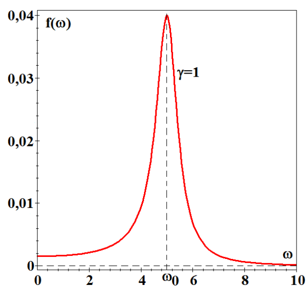
$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$

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

$\Rightarrow$



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

3.2 Nichtlorentzverteilt

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**	-	-

$\Rightarrow$

$$\hat{\omega_0^2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{25333 \cdot 55 - 55 \cdot 6528,2 + 52683,49 \cdot 11 - 220825 \cdot 11}{385 \cdot 55 - 3025 \cdot 11} = 33,690$$

$\Rightarrow$

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

bzw.

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

Da für beide Beispiele

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

gilt, ist:

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

$\LaTeX\,2_\varepsilon$

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