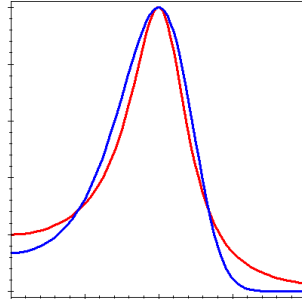


Die vollständige Regression der Pseudo-Voigt-Funktion



The complete regression of the pseudo-Voigt function

Dipl.-Ing. Björnsterne Zindler, M.Sc.

www.Zenithpoint.de

Erstellt: 1. April 2023 - Letzte Revision: 20. Februar 2026

Inhaltsverzeichnis

1	Regression	3
1.1	Methode I	3
1.2	Methode II	4
1.3	Methode III	5
1.4	Methode IV	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 $L(\gamma)$	17
3.2	Koeffizienten $G(\gamma)$	18
3.3	Koeffizienten $V(\gamma; \eta)$	19
3.4	Regression nach [Dip]	20

Literatur

[001] Keine für vorliegenden Text.

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

1 Regression der Pseudo-Voigt-Funktion

1.1 Methode I - $\omega_0 \in \mathbb{R}^+$; $0 \leq \eta \leq 1 \leftarrow$ Pseudo-Voigt I

Gegeben ist die Gaußfunktion:

[001] ff.

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

Gegeben ist die Lorentzfunktion:

Methode I

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

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:

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

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

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

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

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

Es gilt:

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

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

Methode II

Gegeben ist die Gaußfunktion:

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

Gegeben ist die Lorentzfunktion:

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

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 - $\omega_0 = 1; \eta = 0 \leftarrow$ Gauß

Gegeben ist die Gaußfunktion:

Methode III

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

Gegeben ist die Lorentzfunktion:

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

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:

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

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

Methode IV

Gegeben ist die Gaußfunktion:

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

Gegeben ist die Lorentzfunktion:

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

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:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{16 - \gamma^2 + \gamma^4}{\gamma^4} \\ &= 16 \cdot \gamma^{-4} - \gamma^{-2} + 1 \end{aligned}$$

$$a_1 = -64 \cdot \gamma^{-4}$$

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{96 + 2 \cdot \gamma^2}{\gamma^4} \\ &= 96 \cdot \gamma^{-4} + 2 \cdot \gamma^{-2} \end{aligned}$$

$$a_3 = -64 \cdot \gamma^{-4}$$

$$\begin{aligned} a_4 &= \frac{16 - \gamma^2}{\gamma^4} \\ &= 16 \cdot \gamma^{-4} - \gamma^{-2} \end{aligned}$$

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

Es gilt:

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

Zusätzlich:

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

2 Beispiele

2.1 Beispiel I

2.1.1 Lorentzverteilt

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

Beispiel L1

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

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

$$a_0 = +253$$

$$a_1 = -1024$$

$$a_2 = +1544$$

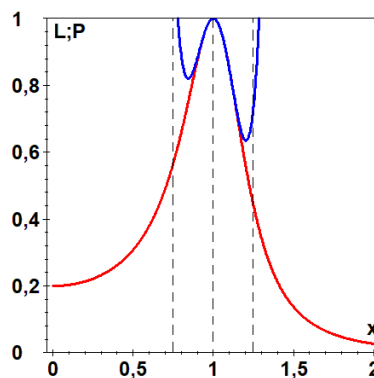
$$a_3 = -1024$$

$$a_4 = +252$$

⇒

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

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 $\tilde{P}(x)$.

$$\tilde{a}_0 = +81,9361173$$

$$\tilde{a}_1 = -347,761240$$

$$\tilde{a}_2 = +544,602378$$

$$\tilde{a}_3 = -369,570550$$

$$\tilde{a}_4 = +91,7863157$$

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

$$\tilde{\gamma}_0 = 0,66218201$$

$$\tilde{\gamma}_1 = 0,65497496$$

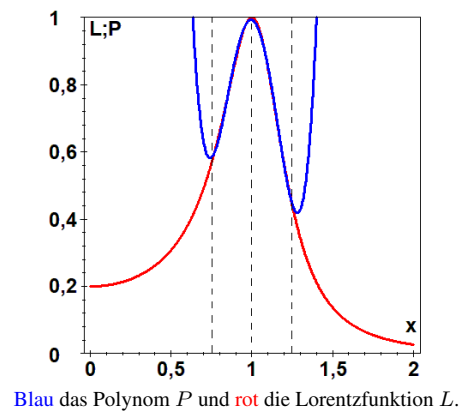
$$\tilde{\gamma}_2 = 0,64937805$$

$$\tilde{\gamma}_3 = 0,64509051$$

$$\tilde{\gamma}_4 = 0,64195177$$

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

Grafisch dargestellt:



Wobei:

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

2.1.2 Gaußverteilt

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

Beispiel G1

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

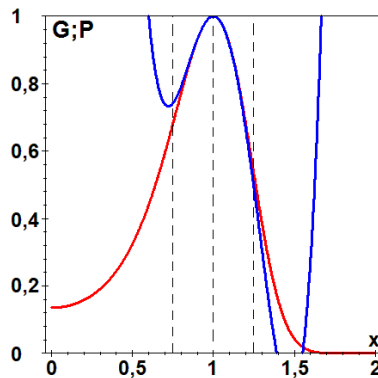
Das G regressierende Polynom $P(x)$ vierten Grades ist über die **Methode III** beschreibbar.

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

⇒

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

Grafisch dargestellt:



Blau das Polynom P und rot die Gaußfunktion G .

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

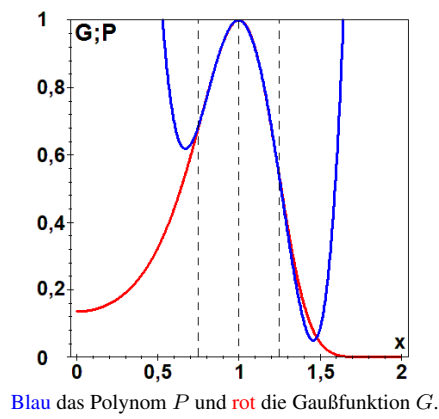
$$\begin{aligned} \tilde{a}_0 &= +23,5570849 \\ \tilde{a}_1 &= -101,575760 \\ \tilde{a}_2 &= +161,611353 \\ \tilde{a}_3 &= -108,678110 \\ \tilde{a}_4 &= +26,0851560 \end{aligned}$$

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:



Wobei:

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

2.1.3 Pseudo-Voigt-verteilt

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

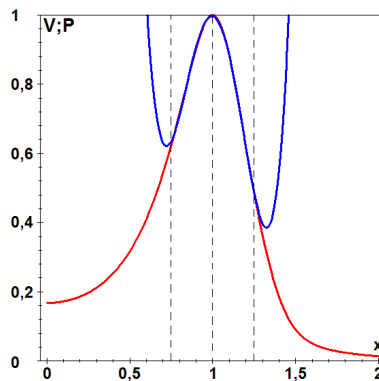
Beispiel V1

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

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

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

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.

⇒

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

⇒

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

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

$$\eta_0 = 0,2863271594$$

$$\eta_1 = 0,3063060989$$

$$\eta_2 = 0,3225019937$$

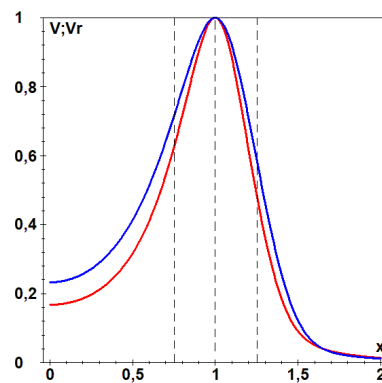
$$\eta_3 = 0,3352065788$$

$$\eta_4 = 0,3445133199$$

⇒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

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

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

$$\tilde{a}_0 = +68,50096119$$

$$\tilde{a}_1 = -272,2450373$$

$$\tilde{a}_2 = +409,4881523$$

$$\tilde{a}_3 = -272,2450373$$

$$\tilde{a}_4 = +67,50096119$$

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

$$\tilde{\gamma}_0 = 0,6924666583$$

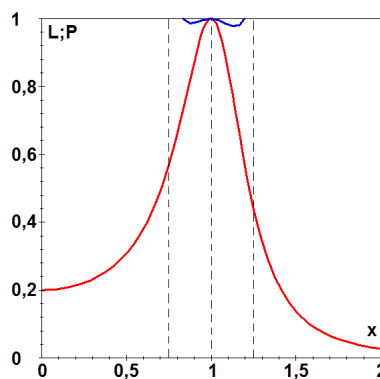
$$\tilde{\gamma}_1 = 0,6963137970$$

$$\tilde{\gamma}_2 = 0,6975939091$$

$$\tilde{\gamma}_3 = 0,6963137970$$

$$\tilde{\gamma}_4 = 0,6924666583$$

Grafisch dargestellt:



Blau das Polynom P und rot die Lorentzfunktion L .

2.2.2 Gaußverteilt

Beispiel G2

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

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

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

$$\tilde{a}_0 = +19,88548647$$

$$\tilde{a}_1 = -79,82479486$$

$$\tilde{a}_2 = +121,8786168$$

$$\tilde{a}_3 = -79,82479486$$

$$\tilde{a}_4 = +18,88548647$$

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

$$\tilde{\gamma}_0 = 0,5589780400$$

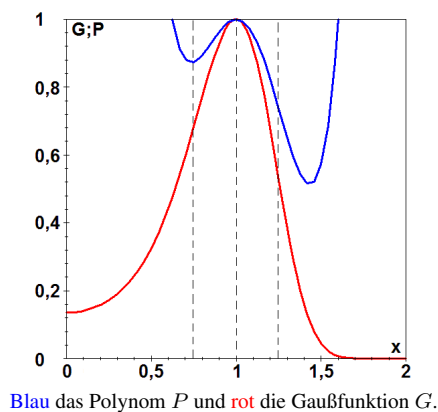
$$\tilde{\gamma}_1 = 0,5626496382$$

$$\tilde{\gamma}_2 = 0,5638354544$$

$$\tilde{\gamma}_3 = 0,5626496382$$

$$\tilde{\gamma}_4 = 0,5589780400$$

Grafisch dargestellt:



2.2.3 Pseudo-Voigt-verteilt

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

Beispiel V2

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

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

$$a_0 = +44,23912694$$

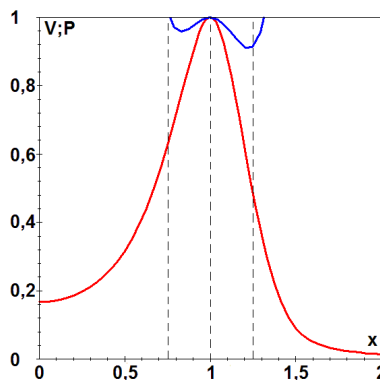
$$a_1 = -176,2189973$$

$$a_2 = +265,9597407$$

$$a_3 = -176,2189973$$

$$a_4 = +43,23912694$$

Grafisch dargestellt:



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

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

$$III\gamma_0 = 0,4575634069$$

$$III\gamma_1 = 0,4615931075$$

$$III\gamma_2 = 0,4629277220$$

$$III\gamma_3 = 0,4615931075$$

$$III\gamma_4 = 0,4575634069$$

\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.

$$IV\gamma_0 = 0,7725616510$$

$$IV\gamma_1 = 0,7763039788$$

$$IV\gamma_2 = 0,7775401015$$

$$IV\gamma_3 = 0,7763039788$$

$$IV\gamma_4 = 0,7725616510$$

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.

⇒

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

⇒

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

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

$$\eta_0 = 0,3246834466$$

$$\eta_1 = 0,3151137629$$

$$\eta_2 = 0,3119815550$$

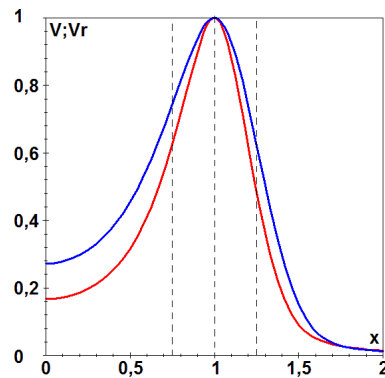
$$\eta_3 = 0,3151137629$$

$$\eta_4 = 0,3246834466$$

⇒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 \leftarrow 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 \leftarrow 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:

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

⇒

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

Eine dritte Randbedingung berechnet a_2 .

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

⇒

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

⇒

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

⇒

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

Mit diesem Regressionskern ist dann das Beispiel II berechenbar⁸.