

Errata

In der 3. Mitt. von *J. Haas, N. Konopik, F. Mark* und *A. Neckel* (Mh. Chem. **95** [1964]) sind auf S. 1176 eine Reihe von Symbolen unrichtig abgedruckt worden. Der Abschnitt 1.: *Gauß*-sche Methode der kleinsten Fehlerquadrate, lautet richtig:

Ausgangspunkt für die Berechnung bildet die Gleichung für Z (I, 5). Zunächst linearisiert man die Funktion $Z(k_0, \dots, k_{N-1}; x_r)$ am Orte von $k = k_v^{(0)}$ und gelangt damit zu den R „Fehlgleichungen“

$$v_r = Z_r^{(n)} + \sum_v \frac{\partial Z_r^{(n)}}{\partial k_v} \Delta k_v - Z'_r, \quad (6)$$

$r = 1, 2, \dots, R$

in denen die Verbesserungen Δk_v als Unbekannte auftreten.

Die R Fehlgleichungen können in Matrixform geschrieben werden

$$\mathbf{v} = \mathbf{g} \Delta \mathbf{k} - \mathbf{l}, \quad (6a)$$

wobei die Elemente g_{rv} und l_r durch

$$g_{rv} = \frac{\partial Z_r^{(n)}}{\partial k_v} \quad \text{und} \quad l_r = Z'_r - Z_r^{(n)}$$

gegeben sind.

Die Bedingung, daß die Summe der Fehlerquadrate ein Minimum werde,

$$\sum_r v_r^2 = \text{Min} \quad (7)$$

erfordert eine Differentiation nach den N unbekanntenen Verbesserungen $\Delta k_v^{(n)}$, womit man die N „Normalgleichungen“ erhält:

$$\sum_r \frac{\partial Z_r^{(n)}}{\partial k_\mu} \sum_v \frac{\partial Z_r^{(n)}}{\partial k_v} \Delta k_v = \sum_r \frac{\partial Z_r^{(n)}}{\partial k_\mu} (Z'_r - Z_r^{(n)}); \quad (8)$$

$\mu = 0, \dots, N-1.$

In der 2. Zeile nach der Gl. (13) auf S. 1177 soll nicht nur im Zähler, sondern auch im Nenner ein Absolutwert stehen.

Der letzte Ausdruck in Gl. (14) und Gl. (15) soll nicht Δk heißen, sondern Δk_μ .