6

LINEÁRNÍ REGRESNÍ MODELY

Při budování regresních modelů se běžně užívá metody nejmenších čtverců. Metoda nejmenších čtverců poskytuje postačující odhady parametrů jenom při současném splnění předpokladů o datech a o regresním modelu. Pokud tyto předpoklady nejsou splněny, ztrácí metoda nejmenších čtverců své vlastnosti.

Základní předpoklady metody nejmenších čtverců (MNČ): Statistické vlastnosti odhadů $\hat{\boldsymbol{y}}_P, \hat{\boldsymbol{e}}, \boldsymbol{b}$ závisí na splnění jistých předpokladů. Pokud platí předpoklady I až IV, jsou odhady **b** parametrů **β** **n**ejlepší, **n**estranné a **l**ineární (NNLO). Navíc mají asymptoticky normální rozdělení. Pokud platí ještě předpoklad VII, mají odhady **b** normální rozdělení i pro konečné výběry.

I. *Regresní parametry β mohou nabývat libovolných hodnot.* V praxi však často existují omezení parametrů, která vycházejí z jejich fyzikálního smyslu.

II. *Regresní model je lineární v parametrech a platí aditivní model měření.*

III. *Matice nenáhodných, nastavovaných hodnot vysvětlujících proměnných X má hodnost rovnou právě m.* To znamená, že žádné její dva sloupce $\boldsymbol{x}_j$, $\boldsymbol{x}_k$ nejsou *kolineární*, tj. rovnoběžné vektory. Tomu odpovídá i formulace, že matice $\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}$ je symetrická regulární matice, ke které existuje inverzní matice a jejíž determinant je větší než nula.

IV. *Náhodné chyby ε_i mají nulovou střední hodnotu $E(\varepsilon_i) = 0$.* To musí u korelačních modelů platit vždy. U regresních modelů se může stát, že $E(\varepsilon_i) = K$, $i = 1, ..., n$, což znamená, že model neobsahuje absolutní člen. Po jeho zavedení bude $E(\varepsilon_i^{/}) = 0$, kde $\varepsilon_i^{/} = y_i - \hat{y}_{P,i} - K$.

V. *Náhodné chyby ε_i mají konstantní a konečný rozptyl $E(\varepsilon_i^2) = \sigma^2$.* Také podmíněný rozptyl $D(y/\boldsymbol{x}) = \sigma^2$ je konstantní a jde o *homoskedastický* případ.

VI. *Náhodné chyby ε_i jsou vzájemně nekorelované a platí $cov(\varepsilon_i\ \varepsilon_j) = E(\varepsilon_i\ \varepsilon_j) = 0$.* Pokud mají chyby normální rozdělení, jsou nezávislé. Tento požadavek odpovídá poža-davku nezávislosti měřených veličin *y*.

VII. *Chyby ε_i mají normální rozdělení $N(0, \sigma^2)$.* Vektor $\boldsymbol{y}$ má pak vícerozměrné normální rozdělení se střední hodnotou $\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}$ a kovarianční maticí $\sigma^2 \boldsymbol{E}$, kde $\boldsymbol{E}$ je jednotková matice.

Regresní diagnostika

Metoda nejmenších čtverců nezajišťuje obecně nalezení přijatelného modelu, a to jak ze statistického, tak i z fyzikálního hlediska. Musí být splněny podmínky, odpovídající složkám tzv. *regresního tripletu* [data, model, metoda odhadu].

Regresní diagnostika obsahuje postupy k identifikaci
a) vhodnosti dat pro navržený regresní model (složka *data*),
b) vhodnosti modelu pro daná data (složka *model*),
c) splnění základních předpokladů MNČ (složka *metoda*).

Základní rozdíl mezi regresní diagnostikou a klasickými testy spočívá v tom, že u regresní diagnostiky není třeba přesně formulovat alternativní hypotézu. Tímto pojetím se regresní diagnostika blíží spíše k *exploratorní regresní analýze*, která vychází z faktu, že "uživatel ví o analyzovaných datech přece jenom více než počítač". Počítač slouží jako nástroj analýzy dat, modelu a metody odhadu. Model je navrhován v interakci uživatele s programem. Tím by měl být omezen vznik formálních regresních modelů, které nemají fyzikální smysl a jsou v technické praxi obyčejně jen omezeně použitelné.

1. Data: mezi základní techniky diagnostiky patří stanovení rozmezí dat, jejich variability a přítomnosti vybočujících pozorování. K tomu lze využít grafů rozptýlení s kvantily a řady postupů průzkumové analýzy jednorozměrných dat z kap. 2. Přes svoji jednoduchost umožňuje diagnostika identifikovat ještě před vlastní regresní analýzou
a) *nevhodnost dat* (malé rozmezí nebo přítomnost vybočujících bodů),
b) *nesprávnost navrženého modelu* (skryté proměnné),
c) *multikolinearitu*,
d) *nenormalitu* v případě, kdy jsou vysvětlující proměnné náhodné veličiny.

Kvalita dat úzce souvisí s užitým regresním modelem. Při posuzování se sleduje především výskyt *vlivných bodů* (VB), které mohou být hlavním zdrojem řady problémů, jako je zkreslení odhadů a růst rozptylů až k naprosté nepoužitelnosti regresních modelů. Vlivné body lze rozdělit do tří skupin:

a) *Hrubé chyby*, které jsou způsobeny měřenou veličinou (*vybočující pozorování*) nebo nevhodným nastavením vysvětlujících proměnných (*extrémy*). Hrubé chyby jsou obyčejně důsledkem chyb při manipulaci s daty.

b) *Body s vysokým vlivem* (tzv. golden points) jsou speciálně vybrané body, které byly přesně změřeny, a které obvykle rozšiřují predikční schopnosti modelu.

c) *Zdánlivě vlivné body* vznikají jako důsledek nesprávně navrženého regresního modelu.

Podle toho, kde se vlivné body vyskytují, lze provést dělení na

1. *Vybočující pozorování* (outliers), které se liší v hodnotách vysvětlované (závisle) proměnné y od ostatních, a
2. *extrémy* (high leverage points), které se liší v hodnotách vysvětlujících (nezávisle) proměnných $\boldsymbol{x}$ nebo v jejich kombinaci (v případě multikolinearity) od ostatních bodů.

Vyskytují se však i body, které jsou jak vybočující, tak i extrémní. O jejich výsledném vlivu však především rozhoduje to, že jsou extrémy. K identifikaci vlivných bodů typu vybočujícího pozorování se využívá zejména různých typů reziduí a k identifikaci extrémů pak diagonálních prvků H_{ii} projekční matice $\boldsymbol{H}$.

2. Model: kvalitu regresního modelu lze posoudit v případě jedné vysvětlující proměnné x přímo z rozptylového grafu závislosti y na x. V případě více vysvětlujících proměnných a multikolinearity mohou však rozptylové grafy *mylně indikovat* nelineární trend i u lineárního modelu. Z řady různých grafů k posouzení vztahu y a x_j se omezíme na

a) parciální regresní grafy, a

b) parciální reziduální grafy.

Parciální regresní grafy byly Belseyem zařazeny mezi základní nástroje počítačové interaktivní analýzy regresních modelů. Umožňují nejenom posouzení kvality navrženého regresního modelu, ale indikují i přítomnost vlivných bodů a nesplnění předpokladů klasické metody nejmenších čtverců. Parciální regresní graf pro posouzení vztahu mezi y a i-tou vysvětlující proměnnou x_i je závislost *reziduí* $\boldsymbol{v}$ regrese y na sloupcích matice $\boldsymbol{X}_{(i)}$ a reziduí u regrese x_i na sloupcích matice $\boldsymbol{X}_{(i)}$. Přitom matice $\mathbf{X}_{(i)}$ vznikne z matice $\mathbf{X}$ vynecháním i-tého sloupce $\boldsymbol{x}_i$, odpovídajícího i-té vysvětlující proměnné. Parciální regresní grafy mají tyto vlastnosti:

a) Směrnice přímky v parciálním regresním grafu je stejná jako odhad b_j v nedělenéms modelu a úsek je roven nule. Tato lineární závislost platí pouze v případě, že navržený model je správný.

b) Korelační koeficient mezi oběma proměnnými parciálního regresního grafu odpovídá parciálnímu korelačnímu koeficientu $R_{yx_j(x)}$.

c) Rezidua v parciálním regresním grafu jsou shodná s klasickými rezidui e_i pro nedělený model.

d) V grafu jsou indikovány vlivné body a i některá porušení předpokladů metody nejmenších čtverců (heteroskedasticita).

Parciální reziduální grafy se označují také jako grafy *"komponenta + reziduum"*. Parciální reziduální grafy však poskytují poněkud odlišné informace než parciální regresní grafy:

a) Směrnice lineární závislosti je rovna b_j a úsek je nulový. Lineární závislost pak ukazuje na vhodnost navržené proměnné x_j v modelu.

b) Rezidua regresní přímky jsou přímo rezidua $\hat{e}_i$ pro nedělený model.

c) Pokud je úhel mezi $\boldsymbol{x}_j$ a některými sloupci matice $\boldsymbol{X}_{(j)}$ malý (*multikolinearita*), ukazuje parciální reziduální graf nesprávně malý rozptyl kolem regresní přímky $b_j\boldsymbol{x}_j$ a dochází navíc i k potlačení efektu vlivných bodů.

Parciální reziduální grafy se doporučují především k indikaci rozličných typů nelinearity v případě nesprávně navrženého regresního modelu.

3. Metoda: V praxi bývají některé předpoklady MNČ porušeny, což vede k použití jiných kritérií. K porušení předpokladů dochází v těchto základních případech:

a) Na parametry jsou kladena omezení, což vede na užití *metody podmínkových nejmenších čtverců (MPNČ).*

b) Kovarianční matice chyb není diagonální (autokorelace), příp. data nemají stejný rozptyl (heteroskedasticita), což vede na užití *metody zobecněných nejmenších čtverců (MZNČ)*, resp. *metody vážených nejmenších čtverců (MVNČ).*

c) Rozdělení dat nelze považovat za normální nebo se v datech vyskytují vlivné body. V takovém případě se místo kritéria metody nejmenších čtverců užije *robustního* kritéria, které je na porušení předpokladu o rozdělení chyb a na vlivné body málo citlivé. Z robustních kritérií jsou nejznámější *M-odhady*. Jedná se o maximálně věrohodné odhady pro vhodnou hustotu pravděpodobnosti chyb. Pro odhad parametrů ***b*** se užívá *iterační metody vážených nejmenších čtverců* (*IVNČ*).

d) Také proměnné x mohou být zatížené náhodnými chybami, což vede na užití *metody rozšířených nejmenších čtverců (MRNČ).* Pro případ regresní přímky je použití metody rozšířených nejmenších čtverců velmi jednoduché. Postačuje znalost poměru rozptylu σ_y^2 (vysvětlovaná proměnná) a σ_x^2 (vysvětlující proměnné), $K = \sigma_y^2/\sigma_x^2$. Pro odhad směrnice regresní přímky $y = a\,x + b$ pak platí

$$a = L + \operatorname{sign}(S_{yx})\,\sqrt{K + L^2}$$

kde

$$L = \frac{S_{yx} - K\,S_x}{2\,S_x}$$

a sign S_{yx} je znaménková funkce. Symboly S označují součty čtverců, odpovídajících proměnných

$$S_x = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 \quad , \quad S_y = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2 \quad ,$$

$$S_{yx} = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$

Při znalosti odhadu směrnice $\hat{a}$ se snadno určí odhad úseku $\hat{b}$ ze vztahu

$$\hat{b} = \bar{y} - \hat{a}\,\bar{x}$$

Pro případ stejných rozptylů, tj. $K = 1$ vede dosazení do výše uvedených vztahů k odhadům minimalizujícím kolmé vzdálenosti (*orthogonální regrese).* Pro odhady rozptylů odhadů $\hat{a}$, $\hat{b}$ se pak používá speciálních vztahů.

e) Pro špatně podmíněné matice $\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}$ se používá *metoda racionálních hodností*, vedoucí k systému vychýlených odhadů, kde vychýlení je řízeno jedním parametrem.

Výstavba lineárního regresního modelu (software ADSTAT):

1. Návrh modelu: začíná se vždy od nejjednoduššího modelu, u kterého vystupují jednotlivé vysvětlující proměnné v prvních mocninách a nevyskytují se žádné interakční členy typu $x_j\, x_k$. Pouze v případech, u kterých je předem známo, že model má obsahovat funkce vysvětlujících proměnných, může být výchozí model dle těchto požadavků upraven.

2. Předběžná analýza dat: sleduje se proměnlivost jednotlivých proměnných a možné párové vztahy. Užívá se proto rozptylových diagramů závislosti x_j na x_k nebo indexových grafů závislosti x_j na j. Posuzuje se významnost proměnných s ohledem na jejich proměnlivost a přítomnost multikolinearity. Přibližně lineární vztah mezi proměnnými v rozptylových grafech závislosti x_j na x_k indikuje multikolinearitu. Lze rovněž odhalit vlivné body, které způsobují multikolinearitu.

Podle volby uživatele se provedou požadované transformace původních proměnných. Zadává se, zda model obsahuje absolutní člen. Uživatel může volit polynomickou transformaci zadáním stupně polynomu, Taylorův rozvoj do 2. stupně a lineární model s interakcemi. Uživatel může zadat libovolnou mocninu původních proměnných včetně logaritmů. Ostatní typy transformací se provádějí při přípravě dat k výpočtu v datovém editoru. K odstranění případné heteroskedasticity, vzniklé nelineární transformací proměnné y, je možné zadat nestatistické váhy, jež odpovídají kvazilinearizaci.

Provádí se sestavení korelační matice $\boldsymbol{R}$ a její rozklad na vlastní čísla a vlastní vektory. Jsou vypočteny *VIF* k indikaci multikolinearity a tisknuta setříděná vlastní čísla. K určení inverzní matice $\boldsymbol{R}^{-1}$ se užívá metoda racionálních hodností pro standardně zadávané vychýlení $P = 10^{-15}$. Uživatel může zadat jinou hodnotu parametru vychýlení P, což však vede pro vyšší hodnoty P k vychýleným odhadům. Bývá proto vhodné volit P z tohoto intervalu $10^{-5} \le P \le 10^{-3}$.

3. Odhadování parametrů: odhadování parametrů modelu se provádí metodou racionálních hodností s volbou $P = 10^{-5}$, což je prakticky MNČ. Ze zobecněné inverzní matice $\boldsymbol{R}^{-1}$ jsou určovány odhady parametrů $\boldsymbol{b}$, jejich směrodatné odchylky $\sqrt{D(b_j)}$ a velikosti testačních statistik Studentova *t*-testu významnosti pro $\beta_j = 0$. Dále jsou provedeny testy významnosti odhadů b_j, vícenásobného korelačního koeficientu R a koeficientu determinace D. Je vhodné sledovat souhrnné charakteristiky regrese jako je střední kvadratická chyba predikce *MEP* a Akaikovo informační kritérium *AIC*, případně posoudit linearitu modelu.

4. Regresní diagnostika: s využitím pěti rozličných grafů je prováděna identifikace vlivných bodů, a to *grafy Wiliamsovým, Pregibonovým, McCulloh-Meeterovým, L-R,* a *grafem predikovaných reziduí*. Dále pak ověření splnění předpokladů metody nejmenších čtverců jako je homoskedasticita, nepřítomnost autokorelace a normalita rozdělení chyb. Pokud dojde k úpravě dat, je třeba provést znovu regresní diagnostiku se zaměřením na porušení předpokladů metody nejmenších čtverců a posouzení vlivu multikolinearity. V případě více vysvětlujících proměnných se posoudí vhodnost jednotlivých proměnných a jejich funkcí s využitím parciálních regresních grafů nebo grafů "komponenta + reziduum". Jsou tisknuty následující tabulky:

Tabulka výsledků obsahuje hodnoty predikce $\hat{y}_i$, rozptylů predikce $D(\hat{y}_i)$ a relativní odchylky predikce od experimentálních dat. Je uvedena i průměrná absolutní, resp. relativní odchylka a *RSC*. Následuje statistická analýza klasických reziduí.

Tabulka reziduí obsahuje klasická rezidua $\hat{e}_i$, normovaná rezidua $\hat{e}_{Ni}$, standardizovaná rezidua $\hat{e}_{Si}$ a Jackknife rezidua $\hat{e}_{Ji}$. Je uveden odhad autokorelačního koeficientu reziduí prvního řádu $\hat{\varrho}_1$.

Tabulka vlivných bodů obsahuje veličiny H_{ii}, H^*_{ii}, D_i, A_i, DF_i, $LD_i(\boldsymbol{b})$, $LD_i(\hat{\sigma}^2)$ a $LD_i(\boldsymbol{b}, \sigma^2)$. Hvězdičkou jsou označeny hodnoty silně vlivných bodů.

5. Konstrukce zpřesněného modelu: s využitím

a) *metody vážených nejmenších čtverců (MVNČ)* při nekonstantnosti rozptylů,

b) *metody zobecněných nejmenších čtverců (MZNČ)* při autokorelaci,

c) *metody podmínkových nejmenších čtverců (MPNČ)* při omezeních, kladených na parametry,

d) *metody racionálních hodností RH* u multikolinearity,

e) *metody rozšířených nejmenších čtverců (MRNČ)* pro případ, že všechny proměnné jsou zatížené náhodnými chybami,

f) *robustní metody* pro jiná rozdělení dat než normální a data s vybočujícími hodnotami a extrémy jsou odhadovány parametry zpřesněného modelu.

6. Zhodnocení kvality modelu: s využitím klasických testů, postupů regresní diagnostiky a doplňkových informací o modelované soustavě se provede posouzení kvality navrženého lineárního regresního modelu.

7. Kalibrační modely: u kalibračních modelů se pro daný signál y^* vypočte hodnota x^* spolu se svým konfidenčním intervalem. Před vlastním užitím kalibračního modelu je vhodné určit limitu detekce a limitu stanovení, které určují použitelnou dolní hranici kalibračního modelu nebo odpovídající metody. Postup je následující: provede se

7.1 Návrh modelu,

7.2 Statistická analýza reziduí,

7.3 Výpočet derivací a integrálů,

7.4 Určení kalibračních mezí,

7.5 Sestavení kalibrační tabulky.

8. Testování různých hypotéz: ve zvláštních případech, jako je porovnání několika přímek, atd., se provádí testování pomocí dalších testů k ověřování rozličných typů hypotéz.

6.7 Doporučená literatura

[1] Draper N. R. a Smith H.: *Applied Regression Analysis*. 2nd Ed., Wiley, New York 1981.

[2] Seber G. A. F.: *Linear Regression Analysis*. Wiley, New York 1977.

[3] Guttman I.: *Linear Models - An Introduction*. Wiley, New York 1982.

[4] Searle S. R.: *Linear Models*. Wiley, New York 1971.

[5] Anscombe F. J.: *Amer. Statist.* **27**, 17 (1973).

[6] Utts J.: *Commun. Statist.* **11**, 2801 (1982).

[7] Krämer W. a Sonnberger H.: *The Linear Regression Model under Tests.* Physica Verlag Heidelberg, 1986.

[8] Scott J. R.: *Appl. Statist.* **24**, 42 (1975).

[9] Cassela J.: *Amer. Statist.* **37**, 147 (1983).
[10] Suich R., Derringer G. C.: *Technometrics* **19**, 213 (1977).
[11] Kornilov A. N. a Smenina L. B.: *Žurnal fyzičeskoj chimiji* **44**, 1932 (1970).
[12] Militký J.: *Proc. Conf. ESC 87*, Praha září 1987.
[13] Phillip G. R., Harris J. M. a Eyring E. M.: *Anal. Chem.* **54**, 2053 (1982).
[14] Neil J. W. a Johnson D. E.: *Commun. Stat.* **13**, 485 (1984).
[15] Green J. R. a Margerison D.: *Statistical Treatment of Experimental Data*. Elsevier, Amsterdam 1978.
[16] Nash J. C.: *Compact Numerical Algorithms for Computer*, A. Hilger, Bristol, 1979.
[17] Antila A.-M. a Sikvonen M.-L.: *Fresenius Z. Anal. Chem.*, **327**, 799 (1987).
[18] Lawson Ch. a Hanson R.: *Solving Least-Squares Problems*. Englewood Cliffs, New Jersey, 1974.
[19] Dahlquist A. G. a Björck A.: *Numerical Methods*. Emglewood Cliffs, 1974.
[20] Marquardt D. M.: *Technometrics* **12**, 591 (1970).
[21] Belsey D. A., Kuh E. a Welsch R. E.: *Regression Diagnostics*. Wiley New York 1980.
[22] Atkinson A. C.: *Plot, Transformation, Regression*. Claredon Press, Oxford 1986.
[23] Weisberg S.: *Technometrics* **25**, 219 (1983).
[24] Cook R. D. a Weisberg S.: *Residuals and Influence in Regression*. Chapman and Hall, New York 1982.
[25] Joiner B.: *Amer. Statist.* **35**, 227 (1981).
[26] Chattarjee S. a Hadi A. S.: *Statist. Sci.* **1**, 379 (1986).
[27] Gorman M. A. a Myers R. M.: *Commun. Statist.* **16**, 770 (1987).
[28] Gray J. B.: *Proc. Stat. Comput. Sect.*, p. 159, ASA Washington 1983.
[29] Mallows C. L.: *Technometrics* **28**, 313 (1986).
[30] Cook R. D. a Weisberg S.: *Biometrika* **70**, 1 (1983).
[31] Querry N.: *Technometrics* **6**, 225 (1964).
[32] Jarque C. M. a Bera A. K.: *Int. Stat. Rev.* **55**, 163 (1987).
[33] Judge G. G. a Bock M. E.: *Statistical Implications of Pre-test and Stein Rule Estimators in Econometrics*. North Holland, Amsterdam 1978.
[34] Leary J. J. a Messick E. B.: *Anal. Chem.* **57**, 956 (1985).
[35] Horn S. D., Horn R. A. a Duncan D. B.: *J. Amer. Statist. Assoc.* **70**, 380 (1975).
[36] Fuller W. A.: *Measurement Error Models*. Wiley, New York 1987.
[37] Hill R. W. a Holland D. W.: *J. Amer. Statist. Assoc.* **72**, 828 (1977).
[38] Huber D. J.: *Robust Statistics*. Wiley, New York 1981.
[39] Li G. in Hoaglin D. C. a kol.: Eds., *Exploring Data Tables,Trends and Shapes*.Wiley, New York, 1985 (kap. 8).
[40] Phillip G. R. a Eyring E. M.: *Anal. Chem.* **55**, 1134 (1983).
[41] Nikuličev J. G., Kančenko G. a kol.: *Kolloidnyj Žurnal* **50**, 473 (1988).
[42] Malá J., Sláma I.: *Chem. Papers* **42**, 319 (1988).
[43] Krasker W. S. a Welsch R. E.: *J. Amer. Statist. Assoc.* **77**, 595 (1982).
[44] Hettmansperger T. P.: Austral. *J. Statist.* **29**, 1 (1987).
[45] Rousseuw P. J. a Leroy A. M.: *Robust Regression and Outliers Detection*. Wiley, New York 1987.
[46] Rosenblatt J. R. a Spiegelman C. H.: *Technometrics* **23**, 329 (1981).
[47] Ebel S. a Becht U.: *Fresenius Z. Anal. Chem.*, **158** (1987).
[48] Schwartz L. M.: *Anal. Chem.* **48**, 2287 (1976).

[49] Naszodi L. J.: *Technometrics* **20**, 201 (1978).
[50] Krutchkoff R. G.: *Technometrics* **9**, 425 (1967).
[51] Schwartz L. M.: *Anal. Chem.* **49**, 2062 (1977).
[52] Oppenhelmer L. a kol.: *Anal. Chem.*, **55**, 638 (1983).
[53] Schwartz L. M.: *Anal. Chem.* **55**, 1424 (1983).
[54] Ebel S., Kamm U.: *Fresenius Z. Anal. Chem.* **318**, 293 (1984).
[55] Ebel S.a Brockmeyer R.: *Fresenius Z. Anal. Chem.* **326**, 770 (1970).
[56] Himmelblau D.: *Process Analysis by Statistical Methods*. Wiley, New York 1969.
[57] Swed F., Eisenhart C.: *Annal of Math. Statist.* **14**, 66 (1943)
[58] Liteanu C., Rica I.: *Statistical Theory and Methodology of Trace Analysis,* Ellis Horwood, Chichester 1980.
[59] Davídek J. a kol.: *Laboratorní příručka analýzy potravin,* SNTL Praha 1981.
[60] Kraft G., Dosch H., Z. Anal. Chem. 271, 264 (1974).
[61] Truxová I.: *Diplomová práce,* VŠCHT Pardubice 1991.
[62] Rice J. A.: *Mathematical Statistics and Data Analysis,* Wadsworth & Brooks, California 1988.
[63] Cyhelský L. a kol.: *Úlohy k základům statistiky,* SNTL Praha 1988.
[64] Potocký R. a kol.: *Zbierka úloh z pravdepodobnosti a matematickej štatistiky,* ALFA Bratislava 1986.
[65] Kleinbaum D. G. a kol.: *Applied Regression Analysis and Other Multivariate Methods,* PWS-KENT Publishing Comp., Boston, 1988.
[66] Ebel S., G. Herold: *Z. Anal. Chem.* **270**, 20 (1974).
[67] Anderson R. L.: *Practical Statistics for Analytical Chemists,* van Nostrand Reinhold Company, New York 1987.
[68] Gottschalk G., *Z. Anal. Chem.* **282,** 1 (1976).
[69] Miller J. C., Miller J. N.: *Statistics for Analytical Chemistry,* Ellis Horwood, Chichester, 1984.
[70] Graybill F. A., Iyer H. K.: *Regression Analysis: Concepts and Applications*, Duxbury Press, International Thomson Publishing 1994.
[71] Neter J., Kutner M. H., Nachtsheim CH.J., Wasserman W.: *Applied Linear Statistical Models*, RICHARD D. IRWIN, Chicago 1990.