

# Regresní diagnostika při výstavbě regresního modelu v chemické laboratoři

Milan Meloun,

*Katedra analytické chemie, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice*

**Souhrn:** *Postup hledání regresního modelu je popsán obecně a dokumentován na 3 úlohách analytické laboratoře. Skládá se z těchto kroků: 1. Návrh modelu začíná vždy od nejjednoduššího modelu, lineárního. 2. Předběžná analýza dat sleduje proměnlivost proměnných na rozptylových diagramech, indexových grafech. Vyšetřuje se multikolinearita, heteroskedastičita, autokorelace a vlivné body. 3. Odhadování parametrů se provádí klasickou metodou nejmenších čtverců, následuje testování významnosti parametrů Studentovým t-testem. Střední kvadratická chyba predikce MEP a Akaikovo informační kritérium AIC jsou rozhodčí kritéria při hledání modelu. 4. Regresní diagnostika provádí identifikaci vlivných bodů a ověření předpokladů metody nejmenších čtverců. V případě více vysvětlujících proměnných se posoudí vhodnost proměnných pomocí parciálních regresních grafů a parciálních reziduálních grafů. 5. Konstrukce zpřesněného modelu: parametry zpřesněného modelu jsou odhadovány s využitím (a) metody vážených nejmenších čtverců (MVNČ) při nekonstantnosti rozptylu, (b) metody zobecněných nejmenších čtverců (MZNČ) při autokorelaci, (c) metody podmínkových nejmenších čtverců (MPNČ) při omezení kladených na parametry, (d) metody racionálních hodnot u multikolinearity, (e) metody rozšířených nejmenších čtverců (MRNČ) pro případ, že všechny proměnné jsou zatíženy náhodnými chybami, a konečně (f) robustních metod pro jiná rozdělení než normální a data s vybočujícími hodnotami a extrémy.*

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