



REGRESNÍ ANALÝSA

J. Fiala¹, M. Kolega²

¹ŠKODA Výzkum s.r.o., 31600 Plzeň, Česká republika

²Keramika Horní Bříza a.s., 33012 Horní Bříza, Česká republika

Abstract

Regression analysis means estimating parameters in relationships between variables. This paper provides an introduction to the principles and procedures of (linear and nonlinear) regression analysis, discussing grid method, gradient method, expansion method, gradient-expansion method, ravine method and simplex method in some detail.

Keywords: regression, curve fitting, calibration, optimization, error analysis

1. Úvod

Faustovými slovy “abych to všechno vyzvěděl jaký je světa vnitřní tmel” vyjádřil Johan Wolfgang Goethe svou představu o tom, co má být v obecnosti smyslem konání vědců. Matematicky se to dá formulovat jako úloha najít vztah

$$f(\bar{x}, \bar{c}) = 0 \quad (1)$$

mezi měřitelnými, navenek se projevujícími charakteristikami $\bar{x} \in X$ a vnitřními (přímo neměřitelnými) parametry $\bar{c} \in C$ zkoumaného systému nebo procesu, které veškeré vnější charakteristiky resp. projevy tohoto systému či procesu určují. f je funkcionál definovaný na kartézském součinu Banachových resp. (a tedy) Hilbertových prostorů X a C , který představuje zkoumaný přírodní zákon a často bývá “nesymetrický”. Totiž v tom smyslu, že stanovení \bar{c} na základě měřených hodnot \bar{x}

$$\bar{c} = \hat{Z}\bar{x} \quad (2)$$

(kde \hat{Z} je operátor zobrazující X na C) je obtížnější než výpočet \bar{x} pro dané \bar{c} (tedy počítačová syntéza, simulace odezvy daného systému či procesu [1-3]) z rovnice

$$\bar{x} = \hat{Y}\bar{c} \quad (3)$$

(operátor \hat{Y} zobrazuje C na X). Tato operátorová rovnice je alternativním vyjádřením základního problému (1). Je to rovnice pro určení vnitřních parametrů \bar{c} zkoumaného systému (procesu) na základě jeho změřených (vnějších) charakteristik \bar{x} . Metodika řešení rovnice (3) patří s ohledem na stochastický charakter přírodních zákonitostí, fluktuace a chyby měřených veličin, jakož i na šíření těchto chyb v průběhu řešení rovnice, do statistiky [4-14] a nazývá se (z historických důvodů [15]) regresní analýza [16-21].

V důsledku toho, co bylo výše řečeno, bývá někdy výhodné postupovat při řešení této rovnice tak, že se pomocí ní nasimuluje odezva $\{\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_k\} = X_1$ pro celou řadu

hodnot $\bar{c}_1, \bar{c}_2, \dots, \bar{c}_k$ a hledané parametry (\bar{c}_i) se potom odhadují na základě porovnání skutečně naměřených hodnot \bar{x}_e se simulovaným spektrem odezvy $\{\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_k\}$ [22, 23]. V matematice se v té souvislosti mluví o aproximaci naměřené charakteristiky \bar{x}_e takovým prvkem \bar{x}_i podmnožiny X_1 Banachova prostoru X , pro který by

$$\|\bar{x}_e - \bar{x}_i\|$$

bylo minimální ($\|\cdot\|$ znamená normu). \bar{x}_i je tedy prvek X_1 nejbližší naměřené charakteristice \bar{x}_e (\bar{x}_i je nejlepší aproximací charakteristiky \bar{x}_e). Takováto nejlepší aproximace existuje a je jednoznačně určena například v případě, že X je Hilbertův prostor se skalárním součinem (\bar{f}, \bar{g}) a X_1 jest jeho podprostorem. Tou nejlepší aproximací je ortogonální projekce \bar{x}_e na podprostor X_1 , to jest takový prvek \bar{x}_i , že

$$(\bar{x}_i - \bar{x}_e, \bar{h}) = 0$$

pro všechny prvky $\bar{h} \in X_1$ [24]. Obecně však (jednoznačné) řešení rovnice (3) nemusí existovat, anebo může být nestabilní vzhledem k malým změnám naměřených dat \bar{x} (malá změna \bar{x} způsobí velkou změnu \bar{c}). V tom případě říkáme, že úloha je nekorektní [25]; pro nalezení přibližného a přitom stabilního řešení takové úlohy můžeme využít několik zvláštních postupů popsaných v literatuře [26, 27]. Snad nejuniwersálnější z nich je regularizační metoda udávající pro odhad vnitřních parametrů hodnotu \bar{c}_r , která minimalisuje funkcionál

$$m_a(\bar{c}) = \|\bar{x}_d - \hat{Y}_d \bar{c}\| + a \|\bar{c}\|^2$$

$$m_a(\bar{c}_r) = \inf m_a(\bar{c})$$

V této formuli představují

$$\|\bar{x}_d - \bar{x}\| \leq \delta, \quad \|\hat{Y}_d - \hat{Y}\| \leq \delta$$

toleranci (neurčitost, možnou chybu) naměřených dat a operátoru \hat{Y} ; a je parametr regularisace [28].

Jednotlivé měřené charakteristiky zkoumaného systému (procesu), to jest složky vektoru \bar{x} , jsou vzájemně propojeny (souvisí s) hledanými vnitřními (přímému měření nedostupnými) parametry \bar{c} rovnicí (3) resp. požadkem, aby residuum

$$R(\bar{c}) = \|\bar{x} - \hat{Y}\bar{c}\| \quad (4)$$

bylo minimální. V tomto smyslu můžeme říci, že provedená měření \bar{x} nám zprostředkují určení \bar{c} . Výsledkem měření jednotlivých charakteristik zkoumaného fenoménu (jednotlivých složek \bar{x}) jsou pokudé jiné hodnoty vnitřních parametrů \bar{c} a úkolem regresní analýzy je zpracovat tyto vzájemně nesouhlasné výsledky a vypočítat nejdůvěry-

hodnějši hodnotu \bar{c} . Mluvíme o vyrovnání zprostředkujících pozorování a v tomto pojetí se regresní analýza nazývá také vyrovnávacím počtem [29-31]. Instrumentem regresní analýzy je optimalisace [32]: hledané vnitřní parametry zkoumaného systému nebo procesu jsou takové hodnoty $\bar{c} \in C$, při kterých je shoda mezi \bar{x} a $\hat{Y}\bar{c}$ nejlepší a tedy residuum $R(\bar{c}) = \|\bar{x} - \hat{Y}\bar{c}\|$ nejmenší. Jestliže říkáme “nejmenší”, máme přitom samozřejmě na mysli globální minimum $R(\bar{c})$ a způsob jak je vyhledat, to jest globální optimalisaci. To není nikterak lehká úloha a řeší se například tak, t'ě nadplochu

$$R = R(\bar{c})$$

zmapujeme (“prosondujeme”) v hrubé síti bodů a v okolí každé provedené “sondy” (to jest bodu \bar{c} , v němž jsme hodnotu $R(\bar{c})$ vypočítali) pak hledáme lokální minimum metodami diferenciálního počtu, variačního počtu nebo matematického programování [33 - 37] - provádíme lokální optimalisaci. Operátor \bar{Y} je obecně nelineární a my pak hovoříme o nelineární regresi. Regresní analýza se ovšem velmi zjednoduší v případě, t'ě operátor \bar{Y} je lineární, tedy v případě lineární regrese.

2. Lineární regrese

Typickou úlohou lineární regrese je (kvantitativní) fázová analýza (identifikace směsi) na základě porovnání spektra (difraktogramu) analysované látky (směsi) \bar{x} s referenčními spektry $\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n$ látek, o kterých se dá předpokládat, t'ě se v ní (jako komponenty analysované směsi) vyskytují. Spektra jsou kódována jako vektory Hilbertova prostoru, jejichž souřadnice vyjadřují intenzitu příslušného signálu např. difraktovaného rtg záření v odpovídajícím kanálu (pro daný Braggův úhel) [38-41]. Hledáme koncentrace c_1, c_2, \dots, c_n jednotlivých komponent analysované směsi na základě analýzy jejího spektra \bar{x} , tedy ze vztahu mezi \bar{x} a $\bar{c} = \{c_1, c_2, \dots, c_n\}$ vyjádřeného pořadavkem, aby čtverec residua

$$R^2 = R^2(\bar{c}) = R^2(c_1, c_2, \dots, c_n) = \|\bar{x} - \hat{Y}\bar{c}\|^2 = \left(\bar{x} - \sum_{i=1}^n c_i \bar{y}_i, \bar{x} - \sum_{i=1}^n c_i \bar{y}_i \right) \quad (5)$$

byla minimální. (Aby lineární superposice $\sum_{i=1}^n c_i \bar{y}_i$ spekter $\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n$ jednotlivých komponent s koeficienty, které představují jejich koncentrace v analysované směsi c_1, c_2, \dots, c_n , co nejlépe aproximovala spektrum analysované směsi.)

Operátor \hat{Y} je v tomto případě lineární, takt'ě čtverec residua je kvadratickou funkcí hledaných parametrů c_1, c_2, \dots, c_n

$$R^2(c_1, c_2, \dots, c_n) = \|\bar{x}\|^2 - 2 \sum_{i=1}^n c_i (\bar{x}, \bar{y}_i) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_i c_j (\bar{y}_i, \bar{y}_j) \quad (6)$$

Pořadavek, aby čtverec residua nabyl minimální hodnoty, vede k soustavě normálních rovnic

$$\frac{\partial R^2}{\partial c_j} = 0, \quad j=1, 2, \dots, n \quad (7)$$

ze kterých hledané koncentrace c_1, c_2, \dots, c_n jednotlivých komponent vypočítáme. Normální rovnice (7) se často zapisují v jednom z následujících ekvivalentních tvarů:

$$(\bar{x}, \bar{y}_j) = \sum_{i=1}^n c_i (\bar{y}_i, \bar{y}_j); \quad j=1, 2, \dots, n \quad (8)$$

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^n c_i \bar{y}_i + \bar{d}; \quad (\bar{d}, \bar{y}_j) = 0, \quad j=1, 2, \dots, n \quad (9)$$

$$\left(\frac{\partial R^2}{\partial c_j} \right)_{\bar{c}=\bar{o}} = - \sum_{i=1}^n c_i \left(\frac{\partial^2 R^2}{\partial c_i \partial c_j} \right); \quad j=1, 2, \dots, n \quad (10)$$

$$\text{grad } R^2(\bar{o}) = -\bar{c} \hat{H} \quad (11)$$

$$\bar{B} = \bar{c} \hat{A} \quad (12)$$

Zde jsme použili označení $\text{grad } R^2(\bar{o})$ pro gradient čtverce residua (jako funkce parametrů c_1, c_2, \dots, c_n) v bodě $\bar{c} = \bar{o}$:

$$\text{grad } R^2(\bar{o}) = \left[\frac{\partial R^2}{\partial c_1}, \frac{\partial R^2}{\partial c_2}, \dots, \frac{\partial R^2}{\partial c_n} \right]_{\bar{c}=\bar{o}} = -2[(\bar{x}, \bar{y}_1), (\bar{x}, \bar{y}_2), \dots, (\bar{x}, \bar{y}_n)]$$

$$\bar{B} = -1/2 \text{grad } R^2(\bar{o}) = [(\bar{x}, \bar{y}_1), (\bar{x}, \bar{y}_2), \dots, (\bar{x}, \bar{y}_n)]$$

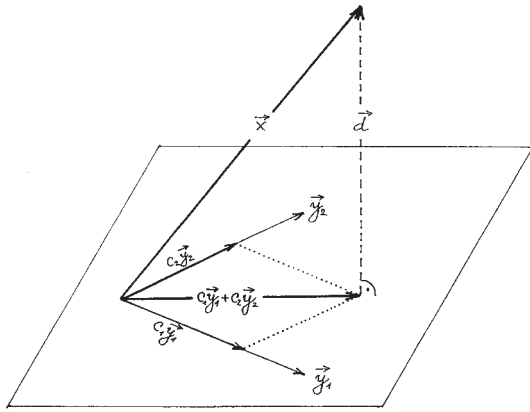
Písmenem \hat{H} je označen Hessián čtverce residua $R^2(c_1, c_2, \dots, c_n)$

$$\hat{H} = \left[\frac{\partial^2 R^2}{\partial c_i \partial c_j} \right] = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 R^2}{\partial c_1^2} & \frac{\partial^2 R^2}{\partial c_1 \partial c_2} & \dots & \frac{\partial^2 R^2}{\partial c_1 \partial c_n} \\ \frac{\partial^2 R^2}{\partial c_2 \partial c_1} & \frac{\partial^2 R^2}{\partial c_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 R^2}{\partial c_2 \partial c_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 R^2}{\partial c_n \partial c_1} & \frac{\partial^2 R^2}{\partial c_n \partial c_2} & \dots & \frac{\partial^2 R^2}{\partial c_n^2} \end{bmatrix} = 2 \begin{bmatrix} (\bar{y}_1, \bar{y}_1) & (\bar{y}_1, \bar{y}_2) & \dots & (\bar{y}_1, \bar{y}_n) \\ (\bar{y}_2, \bar{y}_1) & (\bar{y}_2, \bar{y}_2) & \dots & (\bar{y}_2, \bar{y}_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\bar{y}_n, \bar{y}_1) & (\bar{y}_n, \bar{y}_2) & \dots & (\bar{y}_n, \bar{y}_n) \end{bmatrix}$$

a písmenem \hat{A} Gramián soustavy vektorů $\{\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n\}$ to jest matice soustavy normálních rovnic (8)

$$\hat{A} = 1/2 \hat{H} = [(\bar{y}_i, \bar{y}_j)]$$

Řešením soustav normálních rovnic (12) dostáváme pro koncentrace $\bar{c} = \{c_1, c_2, \dots, c_n\}$ jednotlivých komponent analysované směsi



Obrázek 1. Geometrie lineární regresní analýzy: hledané koeficienty c_1 a c_2 rozkladu $\vec{x} = c_1\vec{y}_1 + c_2\vec{y}_2$ určují patu kolmice spuštěné z \vec{x} na rovinu faktorů \vec{y}_1 a $\vec{y}_2:0$
 $d = (\vec{x} - c_1\vec{y}_1 - c_2\vec{y}_2) \perp \vec{y}_1, \vec{y}_2$.

$$\hat{c} = \hat{B}\hat{A}^{-1} = \hat{B}\hat{E} = [(\vec{x}, \vec{y}_1), (\vec{x}, \vec{y}_2), \dots, (\vec{x}, \vec{y}_n)].$$

$$\begin{bmatrix} (\vec{y}_1, \vec{y}_1) & (\vec{y}_1, \vec{y}_2) & \dots & (\vec{y}_1, \vec{y}_n) \\ (\vec{y}_2, \vec{y}_1) & (\vec{y}_2, \vec{y}_2) & \dots & (\vec{y}_2, \vec{y}_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\vec{y}_n, \vec{y}_1) & (\vec{y}_n, \vec{y}_2) & \dots & (\vec{y}_n, \vec{y}_n) \end{bmatrix}^{-1} \quad (13)$$

kde $\hat{E} = \hat{A}^{-1}$ je inverzní matice soustavy normálních rovnic. Směrodatná odchylka c_i ($i = 1, 2, \dots, n$) jest

$$R \cdot \sqrt{[E_{ii} / (N - n)]}$$

kde R je residuum (4), E_{ii} je i -tý diagonální prvek matice \hat{E} a N je počet kanálů měřených spekter.

Geometrický význam lineární regresní analýzy pro případ dvou parametrů znázorňuje obr.1.

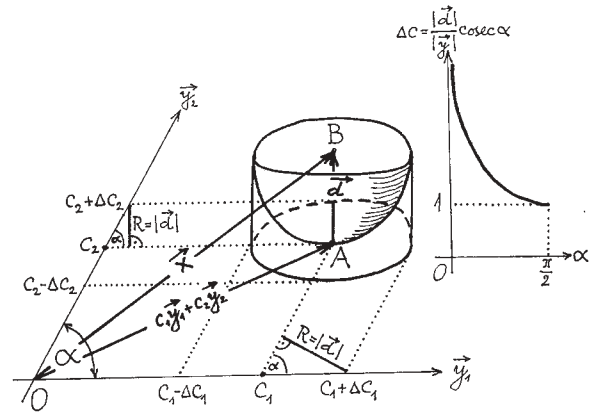
Aby aproximace naměřených dat \vec{x} lineární superposicí daných faktorů \vec{y}_1 a \vec{y}_2 byla optimální

$$R = |\vec{d}| = |\vec{x} - c_1\vec{y}_1 - c_2\vec{y}_2| = \min$$

musí být $c_1\vec{y}_1 + c_2\vec{y}_2$ patou kolmice spuštěné z koncového bodu vektoru \vec{x} na rovinu faktorů \vec{y}_1 a \vec{y}_2 . Jinými slovy, hledané parametry c_1 a c_2 jsou koeficienty takové lineární kombinace faktorů \vec{y}_1 a \vec{y}_2 , která určuje patu kolmice spuštěné s \vec{x} na rovinu faktorů \vec{y}_1 a \vec{y}_2 . Residuální vektor $\vec{d} = \vec{x} - c_1\vec{y}_1 - c_2\vec{y}_2$ musí být kolmý jak k vektoru \vec{y}_1 tak k vektoru \vec{y}_2 . Z toho dostáváme normální rovnice - srovnej (8) nebo (9). Residuum, to jest modul residuálního vektoru

$$R = |\vec{d}| = |\vec{x} - c_1\vec{y}_1 - c_2\vec{y}_2|$$

se rovná nule v případě, že změřená data \vec{x} lze vyjádřit lineární superposicí faktorů \vec{y}_1 a \vec{y}_2 beze zbytku (t.j. v případě, že aproximace \vec{x} výrazem $c_1\vec{y}_1 + c_2\vec{y}_2$ je dokonalá a vektor \vec{x} leží v rovině faktorů \vec{y}_1 a \vec{y}_2). V případě, že vektor \vec{x} v rovině faktorů \vec{y}_1 a \vec{y}_2 neleží, stává se význam jeho aproximace lineární superposicí $c_1\vec{y}_1 + c_2\vec{y}_2$ ilusorní; tím ilusornější, čím je koncový bod vektoru \vec{x} od roviny



Obrázek 2. Šíření chyb při lineární regresní analýze: $c_1 \rightarrow c_1 \pm \Delta c_1, c_2 \rightarrow c_2 \pm \Delta c_2$

faktorů \vec{y}_1 a \vec{y}_2 odlehlejší (čím je větší $R = |\vec{d}|$). V tomto smyslu pak mluvíme o "neurčitosti" hodnot hledaných parametrů c_1 a c_2 , jeť se odvozuje od velikosti $R = \overline{AB}$ (viz obr.2) hypotetického chybového vektoru, který vychází z bodu B a může mít libovolný směr. Intervalovým odhadem koncového bodu vektoru \vec{x} na úrovni spolehlivosti odpovídající hodnotě R je tedy koule se středem v B a poloměrem R . Průřezem této koule do roviny faktorů \vec{y}_1 a \vec{y}_2 je kruh, jehož tečny rovnoběžné s vektory \vec{y}_1 a \vec{y}_2 určují intervaly spolehlivosti c_1 a c_2 . Šířka těchto intervalů je $R \cdot \text{cosec } \alpha$, kde α je úhel faktorů \vec{y}_1 a \vec{y}_2 . Jsou-li tedy faktory ortonormální, je neurčitost hledaných koeficientů dána odchylkou

$$R = |\vec{d}| = |\vec{x} - c_1\vec{y}_1 - c_2\vec{y}_2|$$

měřených dat \vec{x} od dat vypočtených (modelových, to jest $c_1\vec{y}_1 + c_2\vec{y}_2$). Jestliže však faktory korelují, dochází k rozšíření tolerančního intervalu, jeť je tím větší, čím silněji ty faktory korelují.

3. Nelineární regrese

Typickou úlohou nelineární regrese je určení (zpřesnění) krystalové struktury zkoumané látky na základě změření jejího difraktogramu \vec{x} , který je funkcí $\vec{y} = \vec{y}(\vec{c})$ parametrů \vec{c} popisujících (vnější) tvar a (vnitřní) strukturu základní buňky (zejména poloha a teplotní kmity atomů, jeť buňku tvoří)

$$\vec{x} = \vec{y}(\vec{c}) \quad (14)$$

Tedy \vec{x} jsou změřená data, \vec{c} jsou hledané strukturální parametry a \vec{y} je známá nelineární funkce [42].

Na rozdíl od případu, kdy funkce $\vec{y}(\vec{c})$ je lineární a hodnoty vnitřních parametrů \vec{c} studovaného systému (procesu) vypočteme z jeho změřených vnějších charakteristik \vec{x} (lineární regresní analýzou) v jediném kroku, přímo, pak v případě, že funkce $\vec{y}(\vec{c})$ je nelineární, sestává výpočet (nelineární regresní analýza) z mnoha dílčích kroků, iterací, kterými se k hledaným hodnotám vnitřních parametrů

\bar{c} přibližujeme od nějaké jejich “nulové proximace” postupně. Na to existuje řada metod, z nichž ty nejdůležitější popíšeme v následujícím.

3.1 Síťová metoda

Minimum residua (nadplochy)

$$R = R(\bar{c}) = R(c_1, c_2, \dots, c_n) = |\bar{x} - \hat{Y}\bar{c}| = |\bar{x} - \bar{y}(\bar{c})| \quad (15)$$

se hledá postupem, který sestává ze tří do sebe vlotřených cyklů (iterací):

- podle uzlů ortogonální souřadnicové sítě parametrického prostoru $[c_1 + j_1 \Delta c_1, c_2 + j_2 \Delta c_2, \dots, c_n + j_n \Delta c_n]$;
- podle jednotlivých parametrů c_i ; $i = 1, 2, \dots, n$ (souřadnicových os sítě);
- podle hodnoty $c_i(j)$; $j = 0, 1, 2, \dots, k_i$ každého parametru c_i ; $i = 1, 2, \dots, n$.

Začne se vnitřním cyklem:

1. parametr c_i se zvětší o Δc_i , přičemž znaménko a velikost Δc_i se volí tak, aby se $R(\bar{c}) = |\bar{x} - \bar{y}(\bar{c})|$ zmenšil;
2. parametr c_i se pak opakovaně zvětšuje o totéž Δc_i [$c_i + \Delta c_i, c_i + 2\Delta c_i, c_i + 3\Delta c_i, \dots, c_i + k_i \Delta c_i$] ať do okamžiku, kdy se R začne zvětšovat; velikost Δc_i se přizpůsobuje tak, aby počet iterací o Δc_i byl $k_i \sim 5$;
3. aproximujeme R v okolí jeho minima parabolou a polohu tohoto minima R odhadneme hodnotou c_i , pro kterou nabývá minima aproximující parabola;

a pokračuje se cykly vnějšími. Jako globální minimum se potom bere nejmenší ze všech lokálních minim (nalezených v okolí všech uzlových bodů vytyčené souřadnicové sítě parametrického prostoru). Jsou-li parametry c_1, c_2, \dots, c_n závislé, může být konvergence tohoto algoritmu pomalá.

3.2 Gradientní metoda

Na rozdíl od síťové metody, při které residuum

$$R(\bar{c}) = R(c_1, c_2, \dots, c_n)$$

mapujeme v ortogonální souřadnicové síti bodů parametrického prostoru $[c_1 + j_1 \Delta c_1, c_2 + j_2 \Delta c_2, \dots, c_n + j_n \Delta c_n]$, to znamená, že sekvencně měníme hodnoty jednotlivých parametrů c_1, c_2, \dots, c_n , u gradientní metody měníme simultánně hodnoty všech parametrů a residuum mapujeme podél přímků ve směru jeho “minus gradientu” (nejrychlejšího spádu residua). Gradientní metoda je tedy efektivnější (vyžaduje méně kroků) než síťová metoda. Stejně jako u síťové metody musíme ovšem i u gradientní metody celý postup mnohokrát opakovat, vycházejíce postupně z jednotlivých uzlů víceméně husté sítě. Takto se prosouduje celý parametrický prostor, abychom se vyhnuli nebezpečí, že nějaké lokální minimum bude mylně považováno za minimum globální. Pro každý uzel souřadnicové sítě provádíme následující operace:

- určíme směr \vec{s} gradientu residua $R(\bar{c})$ ve vybraném uzlovém bodu (\bar{c}_1) a zvolíme si určitou absolutní hodnotu iteračního kroku $|\Delta \bar{c}| = K$;

- počítáme hodnotu residua postupně v bodech $\bar{c}_1 - jK\vec{s}$; $j = 0, 1, 2, \dots$ ať do okamžiku, kdy (původně klesající) posloupnost $\{R(\bar{c}_1 - jK\vec{s})\}_{j=0,1,2,\dots}$ začne růst;
- aproximujeme R v okolí jeho minima na přímce $\bar{c} = \bar{c}_1 + l\vec{s}$ parabolou a polohu minima R_m residua R odhadneme bodem parametrického prostoru \bar{c}_m , pro který nabývá minima tato parabola

Za globální minimum se opět bere nejmenší ze všech lokálních minim nalezených v okolí jednotlivých uzlů opěrné souřadnicové sítě.

3.3 Expansní metoda

Název této metody je odvozen z toho, že se při ní vychází z lokálního Taylorova rozvoje (expanse) čtverce residua v okolí výchozího bodu $\bar{c}_0 = [c_1^0, c_2^0, \dots, c_n^0]$ prostoru parametrů $\{c_1, c_2, \dots, c_n\}$

$$\begin{aligned} R^2(\bar{c}) &= R^2(\bar{c}_0 + \delta c) = |\bar{x} - \bar{y}(\bar{c})|^2 = |\bar{x} - \bar{y}(\bar{c}_0 + \delta \bar{c})|^2 \doteq \\ &= |\bar{x} - \bar{y}(\bar{c}_0)|^2 - 2 \sum_{i=1}^n \delta c_i (\bar{x} - \bar{y}(\bar{c}_0), \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_i}) \\ &\quad + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \delta c_i \delta c_j \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial c_i}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_j} \right) \end{aligned} \quad (16)$$

Potřadavek, aby residuum nabylo minimální hodnoty, vede k soustavě normálních rovnic

$$\frac{\partial R^2}{\partial c_j} = \frac{\partial R^2}{\partial (\delta c_j)} = 0; \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (17)$$

ze kterých vypočítáme přírůstky $\delta \bar{c} = [\delta c_1, \delta c_2, \dots, \delta c_n]$, čímž dostaneme nové hodnoty parametrů, tedy bod parametrického prostoru

$[c_1^1, c_2^1, \dots, c_n^1] = [c_1^0 + \delta c_1, c_2^0 + \delta c_2, \dots, c_n^0 + \delta c_n]$, ve kterém je model $\bar{y}(\bar{c})$ přesnější aproximací dat \bar{x} než ve výchozím bodě parametrického prostoru $[c_1^0, c_2^0, \dots, c_n^0]$ (při výchozích hodnotách parametrů $c_1^0, c_2^0, \dots, c_n^0$). V následujícím kroku iteračního procesu se stane opěrným bodem parametrického prostoru $[c_1^1, c_2^1, \dots, c_n^1]$ a pomocí soustvy normálních rovnic z něj přejdeme do bodu $[c_1^2, c_2^2, \dots, c_n^2]$, jenž odpovídá ještě přesnější aproximaci dat \bar{x} modelem $\bar{y}(\bar{c})$, atd. Celý postup mnohokrát opakujeme, vycházejíce přitom ze sítě opěrných bodů a jako globální minimum bereme nejmenší z takto nalezených lokálních minim. Normální rovnice (17) se často zapisují v jednom z následujících ekvivalentních tvarů:

$$\left(\bar{x} - \bar{y}(\bar{c}_0), \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_j} \right) = \sum_{i=1}^n \delta c_i \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial c_i}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_j} \right); \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (18)$$

$$\bar{x} = \bar{y}(\bar{c}_0) + \sum_{i=1}^n \delta c_i \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_i} + \delta \bar{c}; \quad \left(\delta \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_i} \right) = 0; \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (19)$$



$$\left(\frac{\partial R^2}{\partial c_j} \right)_{\vec{c}=\vec{c}_0} = -\sum_{i=1}^n (c_i - c_i^0) \frac{\partial^2 R^2}{\partial c_i \partial c_j}; \quad j=1,2,\dots,n \quad (20)$$

$$\text{grad } R^2(\vec{c}_0) = -(\vec{c} - \vec{c}_0) \hat{H} = -\delta \vec{c} \hat{H} \quad (21)$$

$$\vec{\beta} = (\vec{c} - \vec{c}_0) \hat{\alpha} = \delta \vec{c} \hat{\alpha} \quad (22)$$

Zde jsme použili označení $\text{grad } R^2(\vec{c}_0)$ pro gradient čtverce residua (jako funkce parametrů c_1, c_2, \dots, c_n) v bodě $\vec{c} = \vec{c}_0$

$$\begin{aligned} \text{grad } R^2(\vec{c}_0) &= \left[\frac{\partial R^2}{\partial c_1}, \frac{\partial R^2}{\partial c_2}, \dots, \frac{\partial R^2}{\partial c_n} \right]_{\vec{c}=\vec{c}_0} = \\ &= -2 \left[\left(\bar{x} - \bar{y}(\vec{c}_0), \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_1} \right), \left(\bar{x} - \bar{y}(\vec{c}_0), \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_2} \right), \dots, \left(\bar{x} - \bar{y}(\vec{c}_0), \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_n} \right) \right] \end{aligned}$$

$$\vec{\beta} = -\frac{1}{2} \text{grad } R^2 = \begin{bmatrix} \left(\bar{x} - \bar{y}(\vec{c}_0), \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_1} \right), \left(\bar{x} - \bar{y}(\vec{c}_0), \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_2} \right), \\ \dots, \left(\bar{x} - \bar{y}(\vec{c}_0), \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_n} \right) \end{bmatrix}$$

Písmenem \hat{H} je označen Hessián čtverce residua $R^2(c_1, c_2, \dots, c_n)$

$$\hat{H} = \left[\frac{\partial^2 R^2}{\partial c_j \partial c_k} \right] = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial c_1}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_1} \right) & \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial c_1}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_2} \right) & \dots & \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial c_1}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_n} \right) \\ \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial c_2}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_1} \right) & \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial c_2}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_2} \right) & \dots & \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial c_2}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_n} \right) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial c_n}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_1} \right) & \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial c_n}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_2} \right) & \dots & \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial c_n}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_n} \right) \end{bmatrix}$$

a písmenem $\hat{\alpha}$ Gramián soustavy vektorů $\left\{ \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_1}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_2}, \dots, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_n} \right\}$ to jest matice soustavy normálních rovnic (18)

$$\hat{\alpha} = \frac{1}{2} \hat{H} = \left[\left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial c_i}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_j} \right) \right]$$

Řešením soustavy normálních rovnic (22) dostáváme pro přesnější aproximaci $\vec{c} = \vec{c}_0 + \delta \vec{c}$ vnitřních parametrů analysovaného systému (procesu)

$$\vec{c} = \vec{c}_0 + \delta \vec{c} = \vec{c}_0 + \vec{\beta} \hat{\alpha}^{-1} = \vec{c}_0 + \vec{\beta} \hat{E}$$

$$\begin{aligned} [c_1, c_2, \dots, c_n] &= [c_1^0, c_2^0, \dots, c_n^0] + \\ & \left[\left(\bar{x} - \bar{y}(\vec{c}_0), \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_1} \right), \left(\bar{x} - \bar{y}(\vec{c}_0), \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_2} \right), \dots, \left(\bar{x} - \bar{y}(\vec{c}_0), \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_n} \right) \right] \cdot \\ & \left[\left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial c_i}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial c_j} \right) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (23)$$

kde $\hat{E} = \hat{\alpha}^{-1}$ je inverzní matice soustavy normálních rovnic. Směrodatná odchylka zpřesnění δc_i ($i = 1, 2, \dots, n$) i -tého strukturního parametru jest

$$R \cdot \sqrt{[E_{ii} / (N - n)]}$$

kde R je residuum (16), E_{ii} je i -tý diagonální prvek matice \hat{E} a N je počet kanálů změřeného difraktogramu \bar{x} .

3.4 Gradientně expansní metoda

Hledáme-li minimum čtverce residua

$$R^2(\vec{c}) = |\bar{x} - \bar{y}(\vec{c})|^2$$

expansní metodou, potom se přechod od i -té aproximace hledaných parametrů \vec{c}_i k přesnější ($i+1$)-ní aproximaci \vec{c}_{i+1} provádí podle vzorce

$$\vec{c}_{i+1} = \vec{c}_i - \left[\frac{\partial^2 R^2(\vec{c}_i)}{\partial c_j \partial c_k} \right]^{-1} \text{grad } R^2(\vec{c}_i) \quad (24)$$

Tím se přiblížíme minimu lépe, než když použijeme gradientní metodu, pomocí které se přechod od i -té aproximace k ($i+1$)-ní aproximaci hledaných parametrů \vec{c} provádí podle vzorce

$$\vec{c}_{i+1} = \vec{c}_i - K^2 \text{grad } R^2(\vec{c}_i) \quad (25)$$

(kde reálné číslo K určuje velikost iteračního kroku). U gradientní metody je přechod $\vec{c}_i \rightarrow \vec{c}_{i+1}$ ve směru "minus gradientu" čtverce residua; u expansní metody je ten přechod ve směru, který je vůči "minus gradientu" pootočen účinkem matice

$$\left[\frac{\partial^2 R^2(\vec{c}_i)}{\partial c_j \partial c_k} \right]^{-1}$$

To je "lepší" (adekvátnější) aproximace jenom potud, pokud bude adekvátní Taylorův rozvoj (16), ze kterého se při expansní metodě vychází. Taylorův rozvoj residua je tím adekvátnější, čím jsme blíže jeho hledanému minimu. Na začátku našeho hledání, když máme k minimu ještě daleko, nemusí být Taylorova aproximace dobrá a gradientní odhad (25) je často správnější než expansní odhad (24).

Proto je výhodné obě metody zkombinovat: mluvíme pak o gradientně expansní metodě. Na začátku iteračního procesu se postupuje podle vzorce (25), tedy gradientní metodou a když se velikost residua zmenší (tak, aby se dalo předpokládat, že expansní metoda se stane účinnější

neť gradientní metoda), “přepneme” na metodu expansní, to jest na formuli (24).

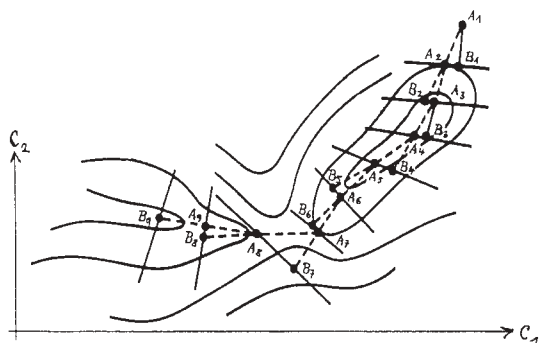
3.5 Údolní metoda

Jak gradientní, tak i expansní metoda však ztrácejí svou účinnost, když se během iteračního procesu k hledanému minimu residua $R(\vec{c}) = |\bar{x} - \bar{y}(\vec{c})|$ dostaneme dost blízko. Pak se totiž výpočet gradientu čtverce residua, jenť se vyskytuje jak ve vzorci (25), tak i ve vzorci (24), stává nestabilní. To je způsobeno tím, že ve výrazu pro gradient figuruje v tom případě rozdíl dvou malých hodnot (čtverce residua $R^2(\vec{c}) = |\bar{x} - \bar{y}(\vec{c})|^2$) a (malé leč nikoli nulové) chyby měřených veličin \bar{x} mohou způsobit (změnu znaménka tohoto rozdílu a tedy) radikální změnu směru gradientu čtverce residua ať o 180° .

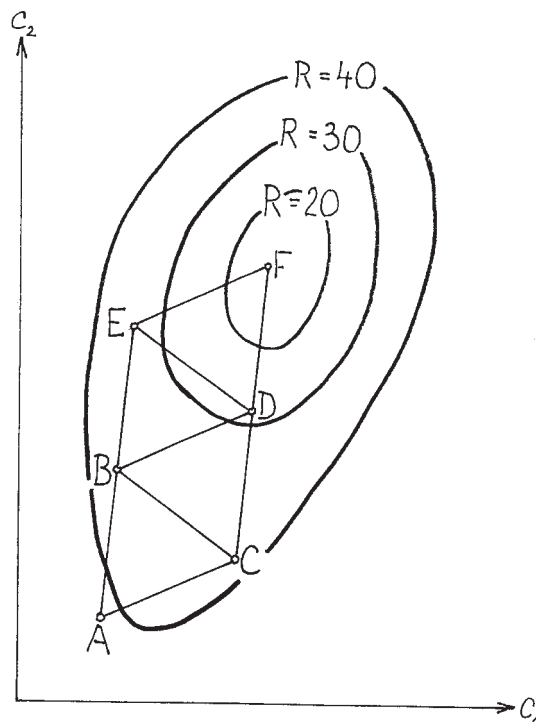
Proto se hledají postupy, které by vůči takové nestabilitě byly odolné. K takovým algoritmům patří metoda údolní, kdy se minimum residua hledá podél trajektorie konstruované v parametrickém prostoru podle způsobu, jakým si při své cestě terénem hloubí své koryto horský potok. Je to dvojstupňový iterační proces $A_1 - B_1 - A_2 - B_2 - \dots - A_i - B_i - A_{i+1} - B_{i+1} - \dots$ jehoť průběh pro případ dvojrozměrného parametrického prostoru ilustruje obr. 3:

- bod B_i leťí ve vzdálenosti l od A_i ve směru $\text{grad } R(A_i)$; l je koeficient, jehoť hodnotu můžeme volit a tím ovlivňovat průběh iteračního procesu;
- A_{i+1} je bod, v němť nabývá minimum $R(\vec{c}) = R(c_1, c_2)$ na přímce vycházející z bodu B_i ve směru $\text{grad } R(B_i)$ (lokální optimalisace odpovídající přizpůsobení vodního toku aktuální situaci v terénu);
- B_{i+1} leťí na přímce $A_i A_{i+1}$ ve vzdálenosti l od A_{i+1} (extrapolace odpovídající setrvačnosti vodního toku).

Konstrukce tohoto algoritmu zaručuje, že oscilace, ke kterým by v průběhu optimalisačního procesu mohlo dojít, budou vymezeny “korytem” (lokální geometrií nad-) plochy residua $R = R(\vec{c})$, které posléze usměrní iterační proces (proud) do směru globálního poklesu hodnoty minimalisovaného residua.



Obrázek 3. Údolní metoda globální optimalizace dvojrozměrného residua $R(c_1, c_2) = |\bar{x} - \bar{y}(c_1, c_2)|$, křivky jsou vrstevnice plochy $R = R(c_1, c_2)$.

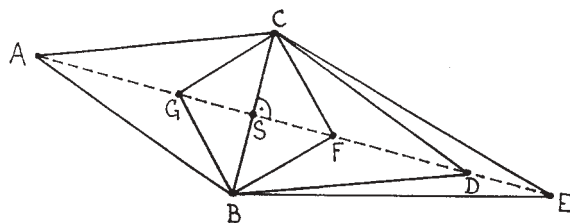


Obrázek 4. Simplexová metoda hledání minima residua $R = R(c_1, c_2)$.

3.6 Simplexová metoda

Jiným velmi účinným postupem, který se využívá při hledání minima residua $R(\vec{c}) = |\bar{x} - \bar{y}(\vec{c})|$ v mnohazměrném prostoru parametrů $c = [c_1, c_2, \dots, c_n]$, je simplexová metoda. Při jejím pouťití se vychází z hodnoty residua vypočteného v $n + 1$ bodech c_1, c_2, \dots, c_{n+1} nadplochy $R = R(c)$, kde n je počet parametrů. Body c_1, c_2, \dots, c_{n+1} tvoří tzv. simplex (resp. vrcholy simplexu). V případě, že parametrický prostor je dvojrozměrný (určujeme dva parametry c_1, c_2 z podmínky, aby $R(c_1, c_2) = |\bar{x} - \bar{y}(c_1, c_2)|$ bylo minimální), bude simplexem trojúhelník (většinou rovnostranný nebo rovnoramenný). Simplexová metoda je iterační proces spočívající v postupné náhradě i -tého simplexu za simplex $(i + 1)$ -ní, jehoť poloha je hledanému minimu blíže: jsou-li (v případě dvojrozměrného parametrického prostoru) vrcholy i -tého simplexu body A, B a C a je-li $R(A) = \text{Max} \{R(A), R(B), R(C)\}$, pak novým simplexem bude BCD , jehoť vrchol D sestrojíme jako bod souměrně sdružený s bodem A podle úsečky BC . Tímto způsobem se (stále inovovaný) simplex posléze přiblíží ať k minimu residua $R(\vec{c})$ (obr. 4).

Protože strany (obecně vlastně hrany) simplexu jsou konečné, odpadají problémy infinitesimálních inkrementů, které ohrožují stabilitu (a tím v konečném důsledku limitují účinnost) gradientní a expansní metody. Zvýšení účinnosti simplexové metody se dosahuje tím, že hrany simplexu nejsou stejné a jejich délka se přizpůsobuje lokální geometrii plochy odezvy $R = R(\vec{c})$ - viz obr. 5.



Obrázek 5. Modifikovaná simplexová metoda minimalizace dvojparametrické funkce R . Výchozí simplex je ABC , $R(A) > R(B) > R(C)$. Nový simplex je BCD resp. BCE nebo BCG podle toho, jak velká je hodnota $R(D)$ v bodě D souměrně sdruženém s bodem A podle úsečky BC .

Budeme to opět ilustrovat na případě dvojrozměrného parametrického prostoru, kdy vrcholy i -tého simplexu jsou body A, B, C a platí $R(A) > R(B) > R(C)$. Iterační proces je dvojstupňový. V prvním stupni přejdeme k simplexu BCD stejně jako u konvenční simplexové metody (bod D je zkonstruován jako bod souměrně sdružený s bodem A podle úsečky BC). V druhém stupni iteračního procesu pak simplex BCD ještě dále modifikujeme, a to následujícím způsobem:

- je-li $R(C) > R(D)$, přejdeme k simplexu BCE , kde E leží na polopřímce SD ve vzdálenosti $\overline{SE} = k \cdot \overline{SD}$ od bodu S , což je průsečík BC s AD a $k > 1$ je volitelný parametr, kterým můžeme řídit průběh iteračního procesu;
- je-li $R(C) < R(D) < R(B)$, simplex BCD nebudeme modifikovat;
- je-li $R(B) < R(D) < R(A)$, přejdeme k simplexu BCF , kde F leží na polopřímce SD ve vzdálenosti $\overline{SF} = l \cdot \overline{SD}$ od bodu S a $l < 1$ je volitelný parametr pro řízení průběhu iteračního procesu;
- je-li $R(D) > R(A)$, přejdeme k simplexu BCG , kde G leží na polopřímce SA ve vzdálenosti $\overline{SG} = m \cdot \overline{AS}$ od bodu S a $m < 1$ je volitelný parametr, jímž můžeme průběh iteračního procesu ovlivňovat.

4. Softwarové prostředky

Dobrym zdrojem informací je internetová adresa <http://www.trilobyte.cz>, kde lze nalézt řadu odkazů. Ze softwarových produktů v současnosti dostupných na trhu lze doporučit produkt firmy MathSoft **S-plus** <http://www.mathsoft.com>. Jedná se o velmi mocný a podporovaný balík, obsahuje velmi rozsáhlou knihovnu procedur, je založen na objektově orientovaném jazyku S, takže si lze tvořit svoje vlastní aplikace.

5. Závěr

Technika regresní analýzy je dobře propracovaná a hlavní problémy, jež se dnes kolem regresní analýzy vyskytují, nesouvisí ani tak s tím, jak tuto techniku efektivně aplikovat, jako spíše s tím, aby se regresní analýzy nezneužívalo. Problém není jak řešit rovnici

$$\bar{x} = \hat{Y} \bar{c}$$

či minimalisovat residuum

$$R(\bar{c}) = \|\bar{x} - \hat{Y} \bar{c}\|$$

ale to, čeho my často dost dobře (správně, přesně) neznáme tvar operátoru \hat{Y} , vyjadřujícího vztah mezi manifestními (přímo měřitelnými) veličinami \bar{x} a hledanými vnitřními či latentními (přímému měření nedostupnými) veličinami \bar{c} , popisujícími příslušný jev. Tak třeba rozšíření difrakčních linií \bar{x} může být způsobeno malou velikostí zrna a mikropnutí (\bar{c}) a Warren s Averbachem našli kvantitativní vyjádření této závislosti

$$\bar{x} = \hat{Y} \bar{c}$$

Jestliže změříme rozšíření difrakčních linií \bar{x} na daném difraktogramu, můžeme pak vypočítat velikost zrna a mikropnutí (\bar{c}) regresní analýzou, to jest jako takové hodnoty \bar{c} , které minimalisují residuum

$$\|\bar{x} - \hat{Y} \bar{c}\|$$

Ve skutečnosti však mohlo být rozšíření difrakčních linií v daném případě způsobeno parakrystalinitou a naše tvrzení o velikosti zrna a mikropnutí bude nesprávné a scestné, bez ohledu na to, čeho námi provedená regresní analýza byla formálně zcela dokonalá a bezchybná. Testování adekvátnosti strukturní hypotézy (\hat{Y}), na základě které regresní analýzu provádíme, by mělo být nedílnou součástí každé procedury, v níž regresní analýzu využíváme. Potíže je v tom, čeho takové testování a porovnávání adekvátnosti alternativních hypotéz bývá mnohem obtížnější a pracnější než vlastní regresní analýza a vyžaduje hlubokou znalost předmětné problematiky, nikoli jen formální aplikaci statistického softwaru.

Leckdy přitom pomůže faktorová analýza [43-45]. Můžeme to demonstrovat na příkladu kvantitativního určování fázového složení, což představuje typické využití lineární regresní analýzy: hledáme koncentrace c_i ($i = 1, 2, \dots, n$) látek, jejichž směs tvoří analyzovaný preparát; vycházíme přitom z difraktogramu toho preparátu (\bar{x}) a máme k dispozici referenční difraktogramy $\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n$ těch komponent. Platí, čeho

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^n c_i \bar{y}_i \quad (+ \text{neurčitost!})$$

takže hodnoty c_1, c_2, \dots, c_n určujeme z podmínky minima residua

$$R = R(c_1, c_2, \dots, c_n) = \|\bar{x} - \sum_{i=1}^n c_i \bar{y}_i\| = \min \quad (26)$$

Potíže je v tom, čeho reálná struktura komponent v námi analyzovaném vzorku je jiná než reálná struktura vzorků, jež byly použity při měření referenčních difraktogramů. Difraktogramy komponent našeho vzorku jsou tedy $\bar{y}'_1, \bar{y}'_2, \dots, \bar{y}'_n$ a nikoli $\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n$ a jejich skutečné obsahy c'_1, c'_2, \dots, c'_n ve zkoumaném vzorku nedostaneme ze vztahu (26), ale z podmínky

$$\|\bar{x} - \sum_{i=1}^n c'_i \bar{y}'_i\| = \min \quad (27)$$

Pokud bychom při regresní analýze vyšli z neadekvátní hypotézy (26), t.e. analysovaná směs je tvořena komponentami, jejichž difraktogramy jsou $\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n$ byl by výsledek (regresní analýzy, tedy kvantitativního stanovení fázového složení) nesprávný. Pro formulaci adekvátní hypotézy (27) potřebujeme znát skutečné difraktogramy komponent $\bar{y}'_1, \bar{y}'_2, \dots, \bar{y}'_n$. Ty můžeme určit proměněním a porovnáním difraktogramů

$$\bar{x}_j = \sum_{i=1}^n c_{ji} \bar{y}'_i; \quad j = 1, 2, \dots, m$$

několika (m) frakcí vyseparovaných z analysovaného vzorku, když použijeme standardní procedury faktorové analýzy [46].

Literatura

1. D.Potter: Computational Physics. London 1973. John Wiley.
2. J.W.Frazer, D.J.Balaban & J.L.Wang, *Analytical Chemistry*, **55** (1983) 904-908.
3. J.Kuneš, O.Vavroch & V.Franta: Základy modelování. Praha 1989. SNTL.
4. M.Meloun & J.Militký: Statistické zpracování experimentálních dat. Praha 1994. Plus.
5. J.Czerminsky, A.Iwasiewicz, Z.Paszek & A.Sikorski: Statistical Methods in Applied Chemistry. Warszawa - Amsterdam 1990. PWN - Elsevier.
6. D.McCormick & A.Roach: Measurement, Statistics and Computation. Chichester 1987. John Wiley.
7. B.L.van der Waerden: Mathematical Statistics. Berlin 1969. Springer.
8. L.Jánossy: Theory and Practice of the Evaluation of Measurement. Oxford 1965. Oxford University Press.
9. L.Sachs: Statistische Auswertungsmethoden. Berlin 1968. Springer.
10. B.Ostle: Statistics in Research. Ames 1954. Iowa State College Press.
11. K.A.Brownlee: Statistical Theory and Methodology in Science and Engineering. New York 1960. John Wiley.
12. J.Hátle & J.Likeš: Základy počtu pravděpodobnosti a matematické statistiky. Praha 1974. SNTL.
13. S.Brandt: Statistical and Computational Methods in Data Analysis. Amsterdam 1976. North Holland.
14. T.H.Wonnacott & R.J.Wonnacott: Statistika pro obchod a hospodářství. Praha 1993. Victoria Publishing.
15. G.W.Snedecor & W.G.Cochran: Statistical Methods. Ames 1968. Iowa State University Press.
16. P.R.Bevington: Data Reduction and Error Analysis. New York 1969. McGraw-Hill.
17. D.R.Sadler: Numerical Methods for Nonlinear Regression. St.Lucia 1975. University of Queensland Press.
18. E.J.Williams: Regression Analysis. New York 1959. John Wiley.
19. P.G.Guest: Numerical Methods of Curve Fitting. Cambridge 1961. Cambridge University Press.
20. N.R.Draper & H.Smith: Applied Regression Analysis. New York 1968. John Wiley.
21. K.Zvára: Regresní analýza. Praha 1989. Academia.
22. J.Fiala & J.Fialová, *Silikáty*, **31** (1987) 275-286.
23. S.J.Haswell: Practical Guide to Chemometrics. New York 1992. Marcel Dekker.
24. A.Kufner: Geometrie Hilbertova prostoru. Praha 1973. SNTL.
25. J.Hadamard: Le probleme de Cauchy et les equations aux dérivées partielles linéaires hyperboliques. Paris 1932. Hermann.
26. A.N.Tichonov & V.Ja.Arsenin: Metody řešení nekorrektních zadač. Moskva 1986. Nauka.
27. A.N.Tichonov, A.V.Gončarskij, V.V.Stěpanov & A.G.Jagola: Regularizirujuščie algoritmy i apriornaja informacija. Moskva 1983. Nauka.
28. U.Tautenhahn, *Inverse Problems*, **13** (1997) 1427 - 1437.
29. J.Böhm: Vyrovnávací počet. Praha 1964. SNTL.
30. J.Böhm, V.Radouch & M.Hampacher: Teorie chyb a vyrovnávací počet. Praha 1990. Geodetický a kartografický podnik.
31. E.Hultsch: Ausgleichsrechnung mit Anwendungen in der Physik. Leipzig 1966. Akademische Verlagsgesellschaft.
32. M.Mañas: Optimalizační metody. Praha 1979. SNTL.
33. I.V.Girsanov: Lekcii po matěmaticeskoi teorii ekstremalnych zadač. Moskva 1970. Izdatělstvo moskovskogo universiteta.
34. J.Havrdá: Matematické programování. Praha 1972. SNTL.
35. M.Havaldá: Nelineárne programovanie. Bratislava 1972. Alfa.
36. R.Bellman & S.E.Dreyfus: Applied Dynamic Programming. Princeton 1962. Princeton University Press.
37. F.I.Karpelevič & L.E.Sadovskij: Elementy linějšnoj algebry i linějnogo programmirovanija. Moskva 1967. Nauka.
38. J.Fiala, *Journal of Physics D: Applied Physics*, **5** (1972) 1874-1876.
39. J.Fiala, *Journal of Applied Crystallography*, **9** (1976) 429-432.
40. J.Fiala, *Analytical Chemistry*, **52** (1980) 1300-1304.
41. H.Martens & T.Naes: Multivariate Calibration. Chichester 1989. John Wiley.
42. R.A.Young, ed.: The Rietveld Method. Oxford 1993. Oxford University Press.
43. P.Blahuš: Faktorová analýza a její zobecnění. Praha 1985. SNTL.
44. R.P.McDonald: Faktorová analýza. Praha 1991. Academia.
45. E.R.Malinowski & D.G.Howery: Factor Analysis in Chemistry. New York 1980. John Wiley.
46. J.Fiala: Identification of x-ray diffraction patterns of multivariate mixtures; v knize: X-ray and Neutron Structure Analysis in Materials Science, J.Hašek, ed. New York 1989. Plenum Press; pp.3-13.