

Calcul des coefficients de régression et du PRESS en régression PLS1

Marie Chavent, Brigitte Patouille

Mathématiques Appliquées de Bordeaux (UMR 5466)

Université Bordeaux 1,

351 cours de la libération,

33405 Talence cedex

Email : chavent@math.u-bordeaux1.fr, be@sm.u-bordeaux2.fr

1 Introduction

Lors de l'implémentation sous Splus de l'algorithme de régression PLS1 tel qu'il est présenté dans [Tenenhaus, 1998], nous avons utilisé une formule de récurrence simple pour le calcul des coefficients de régression et précisé certains choix nécessaires pour le calcul du PRESS. Nous allons rappeler dans un premier temps l'algorithme PLS1 afin d'introduire les notations, puis donner dans un second temps la formule de récurrence permettant d'implémenter le calcul des coefficients de régression. Enfin, nous montrerons dans une dernière partie les différentes alternatives possibles pour le calcul du PRESS, et la solution adoptée. Cette solution permet en effet de retrouver certains résultats numériques présentés dans [Tenenhaus, 1998] et obtenus avec le logiciel SIMCA-P. Les fonctions Splus suivantes sont disponibles auprès des auteurs : $PLS1(X, y, H)$ pour le modèle à H composantes et $PLS1cv(X, y)$ pour le modèle avec choix du nombre de composantes par validation croisée.