### Wiener Biometrische Sektion der Internationalen Biometrischen Gesellschaft Region Österreich – Schweiz

http://www.akh-wien.ac.at/wbs/

#### Einladung zum

## Biometrischen Kolloquium

am Mittwoch, dem 26. Mai 2004, 16:30 Uhr im Kleinen Hörsaal der Histologie Schwarzspanierstraße 17 1090 Wien Eingang Hof links Hochparterre Gebäude d. Histologie

Es spricht Frau Dipl.Ing. Barbara Kavsek Siemens AG, Programmund Systementwicklung zum Thema:

# PLS (Partial Least Squares) Regression und ihre Anwendungen

Barbara Kavsek und Peter Filzmoser

Karl Moder Brannath Werner

Präsident

Sekretär

#### **Abstract**

Die PLS (Partial Least Squares) Regression gehört zur Familie der NILES (Nonlinear Iterative Least Squares) Methoden, die vor allem von H. Wold 1966 entwickelt wurden. Diese iterativen Verfahren bieten die Möglichkeit einer alternativen Schätzung verschiedener statistischer Methoden. Dazu zählen die Hauptkomponentenanalyse, die Kanonische Korrelationsanalyse, die Multiple Regression und die Faktorenanalyse.

In unserer Arbeit beschäftigen wir uns vor allem mit der Multiplen Regressionsanalyse, bei der PLS Regression verwendet werden kann. Zum besseren Verständnis des Aufbaus der PLS Regressionsmethode ist eine gründliche Analyse der von Wold vorgeschlagenen Methode zur Schätzung von Hauptkomponenten, genannt NIPALS (Nonlinear Estimation by Iterative Partial Least Squares), nötig. Wir werden diese beiden iterativen Methoden vorstellen und zeigen, dass die PLS Regression als eine zweifache Anwendung von NIPALS interpretiert werden kann. PLS Regression wurde bereits längere Zeit in den Sozialwissenschaften verwendet, hat aber später auch Einlass in die Analytische Chemie, vor allem die Massenspektrometrie, gefunden. Der Hauptgrund für die Verwendung von PLS Regression in diesen Fachgebieten ist die Möglichkeit, auch Datensätze, in denen mehr Variablen als Beobachtungen auftreten, zu analysieren.

Der Schwerpunkt dieses Vortrages liegt in der Präsentation der zugrunde liegenden Methodik der PLS Regression, ihrem mathematischen Hintergrund und theoretischen Aspekten sowie der Anwendung auf konkrete Datensätze.