

↪ plscalibration

Régression “Partial Least-Squares” linéaire dans le cadre de l’étalonnage multidimensionnel de spectres proches de l’infrarouge. Les lignes de la matrice X des prédicteurs fournissent l’échantillon des spectres, les colonnes correspondent aux longueurs d’onde, ou aux temps... Un élément de X est la mesure d’absorbance pour la longueur d’onde de l’échantillon correspondant. Les colonnes de la matrice Y fournissent les valeurs des mesures des réponses sur les échantillons.

```
plscalibration(X,Y,spect=1:nrow(X),standY=T,Xtest,Ytest,spectest=
1:nrow(Xtest),byscale=1,A=2,prop=0.1,steps=F,steporder=T,askpar=F,
ptypar='m',cexpar=0.7,colpar=1,titlestring='Training Sample',
matcol=3,matrow=1)
```

<i>entrées</i>	<i>description</i>	<i>défaut</i>
X,Y	matrices des var. explicatives et des réponses.	
spect	vecteur d’entiers, numéros des lignes de l’échantillon d’apprentissage.	1:nrow(X)
Xtest	matrice, échantillon test des prédicteurs, si manquant, Xtest=X.	manquant
Ytest	matrice, échantillon test des réponses pour validation; si Xtest manquant, alors Ytest=Y; si manquant, prédiction par Xtest .	manquant
spectest	vecteur d’entiers, numéros des lignes de Xtest et Ytest.	1:nrow(Xtest)
byscale	entier positif, on ne prend qu’une colonne de X sur byscale.	1
A	entier positif, nombre de dimensions PLS.	2
standY	booléen, si T, standardisation des réponses.	T
prop	réel positif, proportion des échantillons enlevés-prédits dans la V.C.	0.1
steps	booléen; si T, visualisation des spectres 1 par 1 selon steporder.	F
steporder	booléen, si T visualisation par ordre croissant.	T
askpar	booléen, T pour visualiser les plots avec contrôle clavier.	F
ptypar	”s” ou ”m” pour des plots carrés ou de dim. maximale.	”m”
cexpar	scalaire, coeff. d’agrandissement du texte des plots.	0.7
colpar	numéro de la première couleur	1
titlestring	chaîne de caractères, titre des plots.	“ Training Sample”
matcol, matrow	entiers, dim de la matrice des plots : spectre moyen, dérivées 1 et 2.	3, 1

Exemple :

```
attach(fromCLE)# CLE==1 donne les indices de l’échantillon d’apprentissage;
# CLE==2, les indices de l’échantillon test
plscalibration(fromX,fromY,spect=(1:nrow(fromX))[CLE==1],spectest=(1:nrow(fromX))[CLE==2])
# ou de façon équivalente
plscalibration(fromX[CLE==1, ],fromY[CLE==1, ],Xtest=fromX[CLE==2, ],Ytest=fromY[CLE==2, ])
```