SAISIR©

Structure Analytique Intelligente pour la Sélection, l'Information et la Représentation

UN ENVIRONNEMENT POUR L'EXPERIMENTATION EN CHIMIOMETRIE SOUS MATLAB ®

MODE D'EMPLOI

Package *SAISIR*©

Révision Octave, Scilab
Dominique Bertrand
INRAe Nantes
dataframe@free.fr

Révision Matlab
Christophe B.Y. Cordella
LARTIC, Dpt Sciences des Aliments,
Université Laval, QC, Canada
christophe.cordella@fsaa.ulaval.ca

Révision 2024

Avis à l'utilisateur

- Il n'est pas possible de démarrer l'utilisation des fonctions Saisir, sans lire ce document jusqu'au paragraphe 3 (ce n'est pas très long !).

- L'utilisation de l'environnement ***SAISIR©*** *nécessite de connaître un peu l'environnement Matlab.*

- Toutes les fonctions ont une petite aide que l'on peut obtenir par la commande
help <fonction>.
La liste des fonctions disponibles est donnée par la commande help saisir

- Si le résultat donné par une fonction n'est pas clair, on peut toujours taper le nom de l'argument de sortie, puis les champs de ces résultats pour savoir la nature des paramètres de sortie.
Par exemple :
```
>>p = pca(ble) ; %effectue une ACP sur le fichier ble
```
Mais que contient donc p *?*
```
>>p
```

```
score: [1x1 struct] eigenvec: [1x1 struct]eigenval: [1x1 struct] average: [1x1 struct]
info: 'PCA 08-Jan-2024 16:06:46'
```

On peut alors imaginer que p.score *contient les scores,* p.eigenvec *les vecteurs propres (eigenvector) et ainsi de suite.*

Bon courage !

SAISIR©

***S**tructure **A**nalytique **I**ntelligente pour la **S**élection, l'**I**nformation et la **R**eprésentation*

UN ENVIRONNEMENT POUR L'EXPERIMENTATION EN CHIMIOMETRIE SOUS MATLAB ®

MODE D'EMPLOI

Table des matières

Introduction :

La manipulation des grands fichiers de données provenant d'études chimiométriques, en particulier lorsque certaines des mesures sont obtenues avec des instruments physiques (spectromètres, chromatographes, pénétromètres, caméra hyperspectrales, fluorimètre 3D …) n'est pas toujours possible de façon aisée dans des environnements statistiques habituels.
Afin de disposer d'un outil de manipulation de données, adapté à cette situation (tableaux comportant plusieurs milliers de lignes ou de colonnes, ensembles de données multimodaux), nous avons développé un ensemblede procédures, sous l'environnement MATLAB, susceptible de faciliter le travail des expérimentateurs, et de permettre aisément l'extension du système.
Cet environnement a été créé initialement pour manipuler des données spectrales et estdésigné par le sigle « ***SAISIR©*** » (***S****tructure* ***A****nalytique* ***I****ntelligente pour la* ***S****élection, l'****I****nformation et la* ***R****eprésentation, en anglais* ***S****mart* ***A****nalytical* ***I****nfrastructure for* ***S****election,* ***I****nformation, and* ***R****epresentation*). Il comprend des fonctions de chargement et sauvegarde des données, de manipulation, des outils graphiques et des procédures statistiques : analyse multidimensionnelles, discrimination, régression, analyse de variance …
L'utilisation des procédures de ***SAISIR©*** suppose une certaine connaissance del'environnement et de la programmation sous MATLAB.

1. Principe général

L'environnement SAISIR© repose presque exclusivement sur la manipulation de tableaux de données, sous la forme de matrices de nombres réels. Le principe fondamental, respecté dans toutes les procédures, et que les colonnes et les lignes des matrices de données comportent des identificateurs, qui « suivent » l'ensemble des manipulations. Examinons, par exemple, le fichier de données suivant (Note d'analyse sensorielle de 3 pommes nommées « GALA1 »,
« FUJI1 », « FUJI2 », pour les trois caractéristiques odeur globale : « OGLO », odeur de terre «OTER », odeur de cave « OCAV »

	OGLO	OTER	OCAV
GALA1	2.8	1.2	0.3
FUJI1	2.6	0.5	0.4
FUJI2	7.5	0.3	0

(Le séparateur décimal est le point et non la virgule)

Ce fichier comporte 3 lignes et 3 colonnes. Les lignes (ou *individus*) possèdent des identificateurs (« GALA1 », « FUJI1 » et « FUJI2 ») de même que les colonnes (ou *variables*) sont identifiées par « OGLO », « OTER » et « OCAV ». Enfin les données formentla matrice :

2.8 1.2 0.3
2.6 0.5 0.4
7.5 0.3 0

Pour conserver complètement le tableau, il est nécessaire de garder ces trois informations. Sous MATLAB, le format ***SAISIR©*** pour conserver un tableau de données est *une structure*avec les champs « i » pour les identificateurs des individus (lignes), « v » pour les variables(« colonnes ») et « d » pour les données. Par exemple, si le fichier de données est conservédans la structure « POMME », on aura :

```
>> POMME =
    d: [3x3 double]
    i: [3x5 char]
    v: [3x20 char]
```

On peut, bien sûr, extraire chaque champ en utilisant la commande MATLAB « . » d'extraction, par exemple :

```
>> POMME.i
GALA1
FUJI1
FUJI2
```

Il est donc toujours possible de « revenir » aux matrices simples de MATLAB, par exemple :

```
>> X = POMME.d

X =

    2.80    1.20    0.30
    2.60    0.50    0.40
    7.50    0.30       0
```

Il faut noter que les champs « i » et « v » de la structure ***SAISIR©*** sont des matrices de caractères et non des cellules (*cell array*).

Un cas particulièrement important concerne les données qui sont sous la forme de courbes numérisées (spectres IR, RMN, Raman, etc., chromatogrammes, électrophorégrammes …). Dans ce cas, les données sont le plus souvent représentées par des matrices avec *en ligne* chaque courbe. Les identificateurs des variables sont alors des *nombres mis sous la forme de chaînes de caractères* représentant la graduation en x de la courbe (longueur d'onde, temps de rétention, longueur de déplacement …). Voici par exemple, un fichier (simplifié) de données de spectresproche infrarouge :

	1100	1102	1104	1106	1108
1br01	0.20541	0.20723	0.20908	0.21099	0.21293
1br51	0.21421	0.21611	0.21805	0.22002	0.22201
1fu21	0.17093	0.1725	0.1741	0.17574	0.17741
1fu71	0.17365	0.17514	0.17667	0.17823	0.17981

Comme précédemment « 1br01 », « 1br51 », « 1fu21 », « 1fu71 » sont des identificateurs d'individus.
« 1100 », « 1102 », « 1104 », « 1106 », « 1108 » sont des chaînes de caractères représentant les identificateurs des variables. Supposons que la structure SAISIR© de ces données s'appelle spectre, on a:

```
>>spectre =

    d: [4x5 double]
    i: [4x31 char]
    v: [5x4 char].
```

et

```
>> spectre.v
1100
1102
1104
1106
1108
```

La nature numérique des descripteurs de variables est exploitée dans les représentations de courbe (fonctions curve, curves, tcurve, tcurves).

2. Utilisation de l'environnement Saisir

On peut avoir une liste des fonctions de ***SAISIR©*** par l'instruction

```
>>help saisir
```

Pour chaque fonction, l'instruction help « nom_de_la_fonction_saisir » donne un (court !) texte explicatif de l'utilisation de la fonction.

2.1 Prise en main (*Getting started*)

Pour pouvoir travailler dans l'environnement ***SAISIR©***, il faut disposer de données sous la forme de tableaux rectangulaires (matrices). Dans son état actuel, l'environnement ne gère pas les données manquantes dans les procédures numériques.

2.1.1 Chargement, création et sauvegarde de fichier *SAISIR©*

Création à partir de matrices déjà sous MATLAB

A partir de matrices déjà chargées dans l'environnement MATLAB, on peut « manuellement » créer une structure ***SAISIR©***.

Si on ne dispose que de la matrice de valeurs numériques, on peut utiliser l'instruction matrix2saisir. Le signe « 2 » est dans la logique (anglaise) de MATLAB, et veut dire « to », c'est à dire « transformé en ».

Par exemple :

```
>>a = rand(5,2) ;            % commande MATLAB : matrice de nombres aléatoires 5x2
>>b = matrix2saisir(a) ;
b =
    d: [5x2 double]
    i: [5x1 char]
    v: [2x1 char]
```

Dans ce cas, les identificateurs des lignes et des colonnes sont simplement des chaînes de caractères représentant le numéro de la ligne ou de la colonne.

Notez que dans le code le caractère % marque le début d'un commentaire, c'est-à-dire un texte qui ne sera pas interprété par Matlab. Cela permet de donner une information de ce que fait le code pour vous-même lorsque vous reviendrez sur ce code plus tard, ou si vous transmettez votre code à un autre développeur.

Ainsi

```
>> b.i

1
2
3
4
5
```

On peut ajouter un préfixe sur les lignes et les colonnes, par exemple :

```
>> b = matrix2saisir(a,'ligne','col')
b =
    d: [5x2 double]
    i: [5x6 char]
    v: [2x4 char]
```

On a alors, par exemple :

```
>> b.v
col1
col2
```

Si l'utilisateur dispose d'identificateurs d'individus ou de variables, il peut toujours créer « complètement manuellement » la structure ***SAISIR©***.Par exemple :

```
>>identificateur = {'objet', 'chose', 'concept', 'element', 'entité'}

identificateur =
  1×5 cell array
    {'objet'}    {'chose'}    {'concept'}    {'element'}    {'entité'}

>>b.i = char(identificateur)
b =
  struct with fields:

    i: [5×7 char]
```

pour visualiser le contenu du champ .i de la variable b :

```
>> b.i
val =
    'objet  '
    'chose  '
    'concept'
    'element'
    'entité '
```

Il faut noter la conversion de *array of cells* concrétisé par l'utilisation des accolades { et } en

matrice de caractères par l'instruction MATLAB char.

Chargement à partir de fichiers EXCEL
Il est possible de charger des fichiers Excel possédant une forme simple (imposée par***SAISIR©***).
Le seul format admis par ***SAISIR©*** est par exemple le suivant :

	OGLO	OTER	OCAV
GALA1	2.8	1.2	0.3
FUJI1	2.6	0.5	0.4
FUJI2	7.5	0.3	0

La première ligne contient, dans chaque cellule, l'identificateur de la colonne.La première colonne du ficher Excel contient les identificateurs des lignes.
Les autres cellules contiennent des *valeurs numériques*, avec *le séparateur décimal « . » et non « , »*.
La cellule en position (1,1) n'est pas conservée par ***SAISIR©***.

Le fichier Excel doit être préalablement sauvegardé sous le format Excel (ASCII) « .CSV ». Dans le menu Excel, cliquez sur enregistrer sous puis CSV (Séparateur point-virgule).
Le chargement sous MATLAB s'effectue par l'instruction :
res = excel2saisir(filename) ;
filename est une chaîne de caractères indiquant le fichier à charger (depuis le répertoire de travail).
res est la structure ***SAISIR©*** dans MATLAB.
Par exemple :
essai = excel2saisir('donnees') charge le fichier Excel donnees.csv et le place dans la structure ***SAISIR©*** essai.
Le fichier Excel contient en première colonne les identificateurs des lignes, qui forment les éléments du champ res.i. Ainsi la première colonne de res.d, soit res.d(:,1) correspond à la deuxième colonne du fichier Excel ;

La fonction excel2saisir supprime entièrement les colonnes ou les lignes qui ne contiennent que des cellules vides. Sinon, les cellules Excel vides ou celles contenant des données non numériques sont remplacées par la valeur NaN (*not a number*).
On peut créer un fichier sans données manquantes (en perdant soit des lignes, soit descolonnes du fichier de départ) par l'instruction eliminate_nan1.
Exemples :
reduit = eliminate_nan1(tableau,0) ; % maximum de lignes, au dépend des colonnes
reduit = eliminate_nan1(tableau,1) ; % maximum de colonnes, au dépend des lignes
reduit = eliminate_nan1(tableau) ; % tentative d'optimisation : plus faible perte de données.
La commande eliminate_nan1 avec un seul argument tente d'éliminer des lignes ou des colonnes en perdant le moins possible de données.

Sauvegarde de fichiers ***SAISIR©***
L'instruction saisir2excel permet de sauvegarder les données dans un format lisible par Excel.
Syntaxe :
saisir2excel(saisir, filename)

Exemple de commande :
saisir2excel(tableau, 'essai')
Sauvegarde la structure ***SAISIR©*** tableau sous le nom essai.CSV
Attention ! le premier argument est une variable de MATLAB désignant une structure ***SAISIR©***,

tandis que le deuxième est une chaîne de caractère (d'où la nécessité des signes apostrophes « ' »).

Le fichier est sauvegardé avec ses identificateurs de lignes et de colonnes, au format. CSV de MATLAB (séparateur : point-virgule).
Si le nombre de colonnes dépasse 255, Excel ne sait plus lire la totalité du fichier.
Lorsque le nombre de lignes est inférieur au nombre de colonnes, on peut éventuellement transposer la structure ***SAISIR©*** avant la sauvegarde, par l'instruction saisir_transpose.

2.1.2 Manipulation élémentaire des données

*Nota : dans la suite, nous désignerons les structures **SAISIR©** sous le nom « matrices ».*

Les manipulations élémentaires concernent la concaténation, la suppression de ligne et de colonne dans des matrices. Dans le nom des fonctions, les lignes sont désignées par row et lescolonnes par col.

La concaténation est désignée par append, et la délétion par delete

On a ainsi les commandes :

appendrow, deleterow, appendcol et deletecol

Exemple de concaténation

Soit deux structures matrice *ayant le même nombre de colonnes*.

L'instruction **saisir3 = appendrow(saisir1, saisir2)** concatène les matrices saisir1 et saisir2 en augmentant le nombre de lignes.

Par exemple, soit tableau1 avec 10 lignes et 25 colonnes, et tableau2 avec 30 lignes et 25 colonnes.

L'instruction :

complet = appendrow(tableau1, tableau2)

construit une matrice appelée complet représentant un seul tableau de 40 lignes et 25 colonnes. Les noms des variables et des individus sont évidemment correctement recopiés dans complet.v et complet.i .

Il est possible de concaténer un nombre arbitraire de matrices par l'instruction appendrow1. Sa syntaxe est (par exemple) :

saisir = appendrow1(saisir1, saisir2, saisir3, saisir4).

appendcol et appendcol1 fonctionnent de la même manière, selon les colonnes. Dans cecas, le nombre de lignes des matrices à concaténer doivent être identique.

Par exemple, si A représente une matrice de 25 lignes et 3 colonnes, et B une matrice de 25 lignes et 12 colonnes, l'instruction

C = appendcol(A,B)

construit une matrice C de 25 lignes et 12 colonnes.

Suppression de lignes et de colonnes

On dispose des instructions :

deleterow, deletecol, selectrow et selectcol.

Exemple d'utilisation :

Soit A une matrice de 15 lignes et 20 colonnes.L'instruction

C = deletecol(A,1)

construit une matrice C à partir de A avec suppression de la première colonne de A.

Ainsi C possède 15 lignes et 19 colonnes.

C'est le même principe pour les lignes, avec deleterow.

On peut également désigner les colonnes que l'on veut garder. Par exemple, l'instruction

C = selectcol(A,1 :2 :8)

Sélectionne les colonnes 1, 3, 5, 7 de A et les place dans C. C'est le même principe avec les lignes (instruction selectrow).

Attention ! Il faut bien noter que dans le cas des données de type spectral ou temporel

(courbes numérisées), les variables sont des mesures à des temps ou des longueurs d'onde.

Cependant, il n'y a en général pas de correspondance immédiate entre l'identificateur de la variable (chaîne de caractère représentant un nombre) et son indice (rang).
Par exemple, dans un fichier de spectres proche infrarouge dont le début est :

	1100	1102	1104	1106	1108
1br01	0.20541	0.20723	0.20908	0.21099	0.21293
1br51	0.21421	0.21611	0.21805	0.22002	0.22201
1fu21	0.17093	0.1725	0.1741	0.17574	0.17741
1fu71	0.17365	0.17514	0.17667	0.17823	0.17981

La variable d'indice 1 représente la longueur d'onde « 1100 » .La variable d'indice 4 représente la longueur d'onde « 1106 » .

Les instructions précédentes s'appliquent sur les indices, et non sur les descripteurs !

Ainsi, pour sélectionner la colonne correspondant à la longueur d'onde « 1104 », il faut écrire, par exemple :

`lo1104 = selectcol(spectre, 3)` ; et non `lo1104 = selectcol(spectre, 1104)`

Il est parfois fastidieux (dans des grandes matrices), de retrouver le numéro d'instruction d'un individu ou d'une variable, connaissant son identificateur. Pour trouver ce numéro, on peut utiliser l'instruction `seekstring`, par exemple

`index = seekstring (spectre.v, '1104')`
renvoie les numéros d'instruction des variables qui portent le nom « 1104 ».

On peut faire de même
`index = seekstring (spectre.i, 'golden')`
Renvoie les numéros d'instruction de tous les individus qui ont la chaîne « golden » dans leur nom. Les minuscules et les majuscules sont considérées comme différentes.

Si on dispose de données de type "spectral", on peut utiliser la commande :
`index = find_index(spectre.v,1104);`
L'avantage de cette commande est qu'il n'y a pas la nécessité d'avoir une correspondance exacte des charactères. Par exemple, cette commande trouvera l'index approprié même si la variable « 1104 » est en fait codée par la chaine « 1103.9996 ».

Utilisation des identificateurs comme clé d'extraction
Il est très avantageux, et pratiquement indispensable pour de grandes matrices, d'utiliser un système de noms d'individus pouvant servir de clé d'extraction. De nombreuses procédures (analyse discriminante, analyse en composantes principales, analyse de variance, graphique) sont simplifiées si l'utilisateur a respecté ce principe.
Le principe est simple à expliquer sur un exemple.
Supposons qu'un essai porte sur trois variétés de blé (*Camp Rémi*, *Talent* et *Arminda*),cultivés dans deux lieux de culture (*Paris* et *Montpellier*). On effectue 20 répétitions par essais.
Dans ce cas, un descripteur correct d'échantillon peut être, par exemple :CRPA09 qui signifie : *Camp Rémi*, cultivé à *Paris*, répétition 9.

On a ainsi décidé d'utiliser deux lettres (ici CR) pour désigner la variété, deux lettres pour la région de culture (PA), *deux* lettres pour la répétition. La répétition numéro 9 est désignée par '09' et non '9' pour que l'on n'ait pas de problème lorsqu'on dépasse 9 répétitions !
De même, on aura TAMO19 : *Talent*, cultivé à *Montpellier*, répétition *19*.
Il faut, dans l'exemple, surtout éviter de changer de dimensions des champs de caractères. Par exemple, CRMO12 et ARMPA1 ne sont pas compatibles, car le code CR comprend 2 caractères, tandis que le code ARM en comprend 3 !
On peut utiliser les codes des identificateurs pour extraire des sous-fichiers avec l'instruction select_from_identifier, qui a la syntaxe suivante :

[saisir1] = select_from_identifier(saisir,startpos,str)
Où startpos (position de départ) indique l'emplacement dans la chaîne de caractère à partirde laquelle la chaîne str (*string*) est recherchée.

Par exemple l'instruction : Paris = select_from_identifier(ble, 3 ,'PA') cherche dans la matrice ble les identificateursde lignes qui possède la chaîne PA en 3ème et 4ème position. Après cet instruction, la matrice Pariscontient les seuls échantillons dont l'identificateur de ligne contient cette chaîne.
De la même manière, dans l'exemple :
talent = select_from_identifier(ble, 1,'TA') recherche les individus de type TA et les place dans la matrice talent.

2.1.3 Deux exemples de traitement complet : l'analyse en composantes principales
L'analyse en composantes principales peut permettre un premier examen des données, avant d'appliquer d'autres méthodes. De plus, cette méthode présente l'ensemble des éléments et les graphiques de l'environnement ***SAISIR©***.

Un premier exemple porte sur le jeu de données *Huiles d'olive* décrit dans l'article :
M. Forina and C. Armanino, Eigenvector Projection and Simplified Non-Linear Mapping of Fatty Acid Content of Italian Olive Oils, Annali di Chimica 72:127-141, (1987).

Afin de caractériser des huiles d'olives provenant de différentes régions de l'Italie, les auteursont dosé 8 acides gras (*Palmitic*, *Palmitoleic*, *Stearic*, *Oleic*, *Linoleic*, *Eicosanoic*, *Linolenic*, *Eicosenoic*) de 572 échantillons d'huile d'olive, collectés dans 9 régions. Les données sont dans un tableau récupéré sous Excel. Les lignes forment les 572 individus. La matricecomprend 9 colonnes correspondant au groupe qualitatif de la région suivi des 8 dosages d'acide gras. On a ainsi une matrice dimensionnée 572 x 9.

Les identificateurs des individus comprennent, deux caractères indiquant la région de culture.
Par exemple :
olive.i(5,:)
>>Ca005
Indique que le 5ème individu a été collecté dans la région Ca.

Après avoir mis les données au format Excel (fichier olive.csv), la matrice est chargée dans Maltab :
olive = excel2saisir('olive')
>>olive =
>> v: [9x20 char]
>> d: [572x9 double]
>> i: [572x20 char]

Pour effectuer une ACP, il faut disposer d'une matrice, *sans données manquantes*, *necontenant que les lignes et les colonnes qui font partie de l'analyse (individus et variablesactifs). Dans le cas particulier de ce fichier excel*, la première colonne de valeurs numériquesdu fichier contient les groupes qualitatifs désignant les régions de culture. Pour faire uneACP, nous devons retirer cette colonne, qui ne sert pas dans cette analyse : olive1 = deletecol(olive,1);
Les données possédant des instructions de grandeur différents, il est nécessaire de réduire (ou normer) les colonnes, c'est à dire diviser chacune d'elles par l'écart-type de la variable correspondante.

- Attention ! Contrairement à ce qui apparaît dans de nombreux logiciels, l'ACP de ***SAISIR©*** n'est pas systématiquement effectuée sur des données réduites !! Cela est effectué par l'instruction norm_col.

```
olive2 = norm_col(olive1);
```

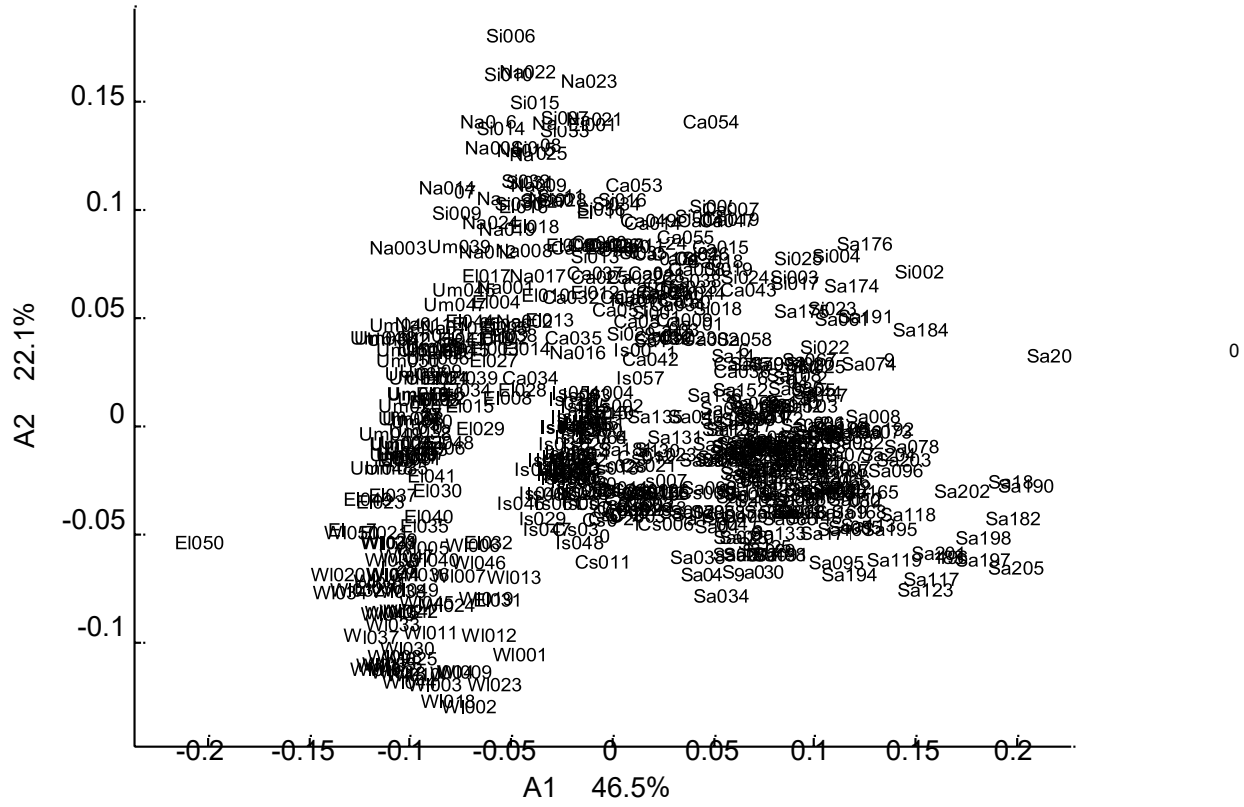
On effectue maintenant l'ACP par l'instruction :

```
res = pca(olive2)
>>res =

>>       score: [1x1 struct]
>>   eigenvec: [1x1 struct]
>>    eigenval: [1x1 struct]
>>     average: [1x1 struct]
        info: 'PCA 06-Dec-2002 08:44:24'
```

Dans l'exemple, res est une structure contenant tous les résultats d'une ACP. Chaque champ de cette structure (score, eigenvec, eigenval, average) est une structure ***SAISIR©*** complète. On peut évidemment s'intéresser à chacun des résultats. Le plus important est res.score (matrice des coordonnées factorielles). Chaque ligne représente un individu, et chaque colonne une composante, dans l'instruction décroissant des valeurs propres. Les identificateurs des lignes de res .score sont donc (logiquement) la recopie des identificateurs de olive1.i. Les identificateurs des colonnes de res .score sont créés par la commande pca elle-même, et sont de la forme :

```
A1    46.5%
A2    22.1%
A3    12.7%
A4     9.9%
A5     4.2%
A6     3.1%
A7     1.5%
A8       0%
```

Les premiers caractères représentent le numéro de la composante (« axe »), puis le nombre indique le pourcentage d'inertie de cette composante. Les *cartes factorielles* sont des représentations de paires de colonnes (choisies par l'utilisateur) de res.score sous la forme de graphiques X-Y. On peut représenter ces paires par l'instruction map et ses variantes.
map(res.score , 1, 2)

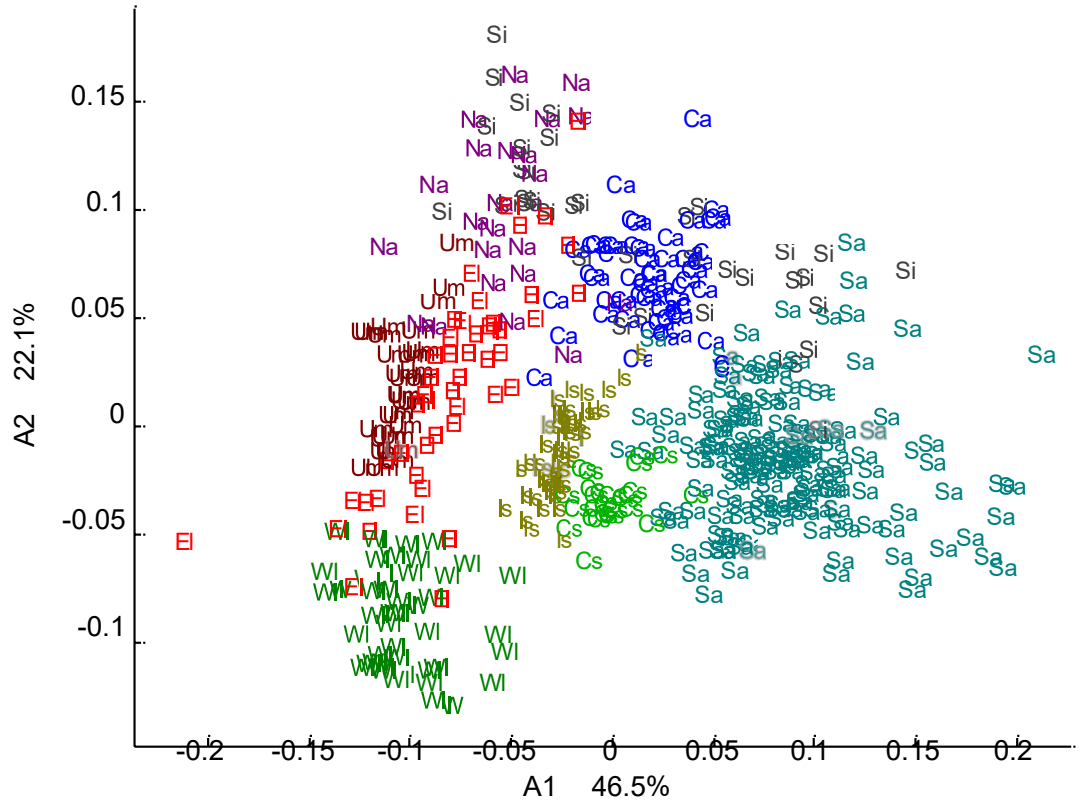


Cette carte n'est pas très lisible sous cette forme. On peut, sur cette collection, se poser la question de l'influence de la région de culture. Il est très facile d'obtenir une carte coloriée parl'instruction colored_map1.

colored_map1(gca, res.score, 1, 2, 1, 2) ;

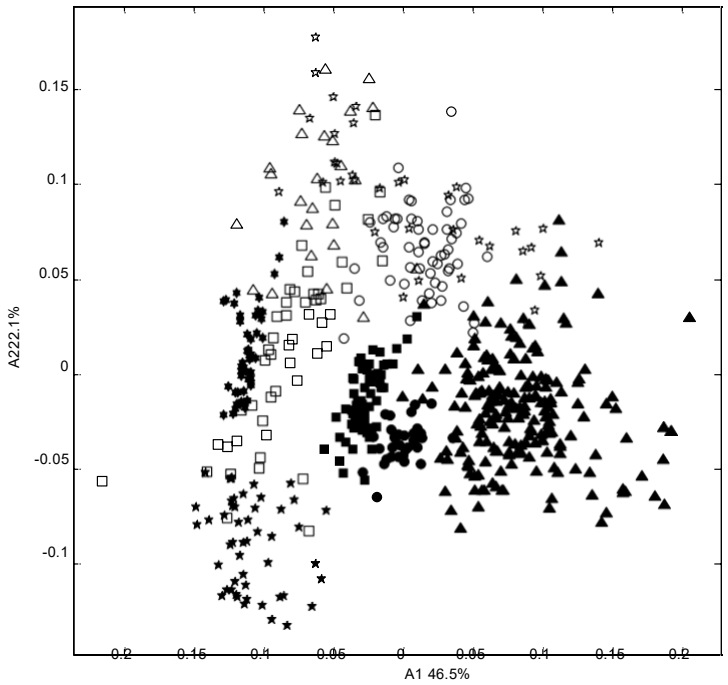
Cette commande indique que l'on souhaite représenter les colonnes 1 et 2 de la matrice res.score, en coloriant la carte selon la clé indiquée par les deux derniers arguments. Ces arguments (1 et 2) indiquent la position, dans la chaîne de caractères de chaque identificateur, des codes qui servent à la coloration. La fonction recherche dans tous les descripteurs, la chaîne de caractères qui commence en première position et finit en deuxième position et attribue une couleur particulière à chaque chaîne différente rencontrée.

gca est une fonction qui renvoie le handle de la figure courante. Il s'agit d'un nombre unique qui définit en mémoire la figure dans laquelle vous construisez la courbe ou le graphique produit par la fonction colored_map1. Pour le moment, utilisez toujours gca sans vous en préoccuper plus.



On voit très clairement que les régions de culture ont une influence marquée sur lacomposition en acide gras des huiles d'olive.
L'instruction colored_map2 procède exactement de la même manière, mais affiche les identificateurs complets des lignes. Il existe des arguments optionnels à ces commandes par exemple : colored_map2(s,col1,col2,startpos,endpos,labcol1,labcol2,titre,charsize,marg)
labcol1 et labcol2 : légende des lignes et des colonnes (remplace les légendes par défauts,qui sont les identificateurs des variables)
titre : titre du graphe
charsize : taille des caractères
marg : marge éventuelle pour améliorer la représentation des identificateurs longs.

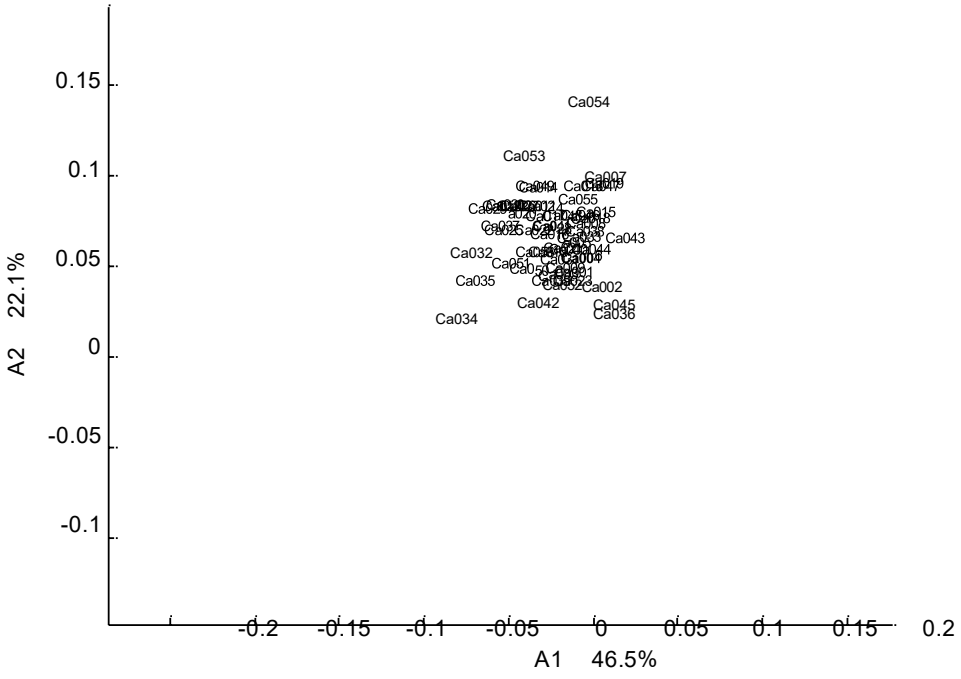
Il est également possible, selon le même principe de représenter les groupes en leur affectantun symbole par l'instruction symbol_map. Par exemple :
symbol_map(res.score,1,2,1,2)



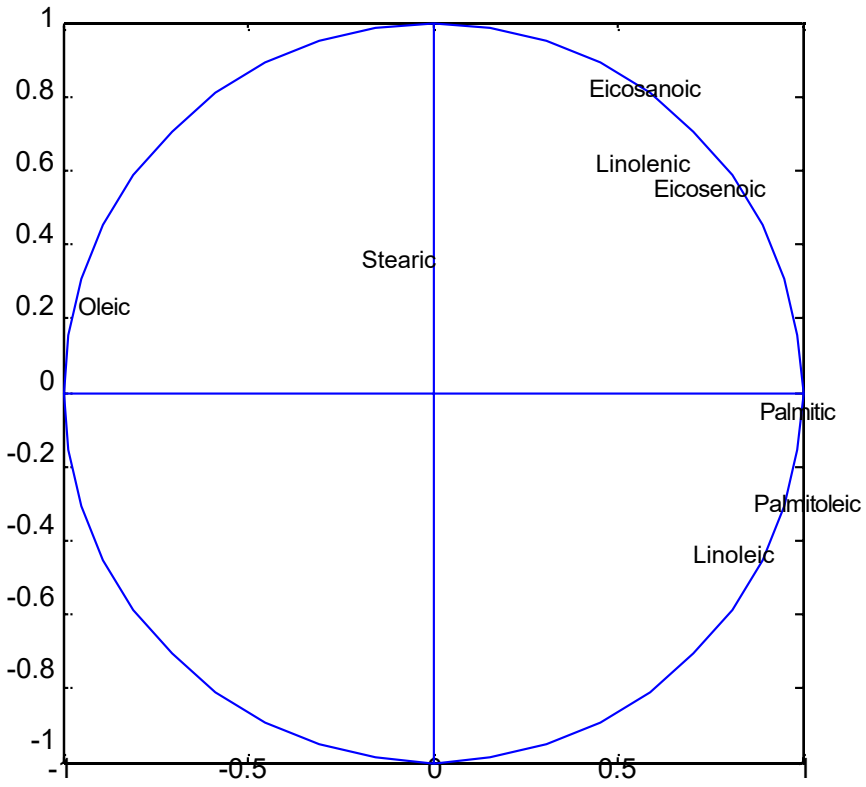
Enfin, lorsque de nombreux points sont superposés, il peut être nécessaire de faire des cartes séparées de chaque groupe d'individus. Dans ce cas, on souhaite en général que l'échelle des abscisses et des ordonnées soient celles de la carte principale. L'instruction submap permet cette représentation. Par exemple :

submap(res.score,1,2,'Ca') ;

représente les seuls individus possédant la chaîne Ca dans leurs noms d'identificateurs.



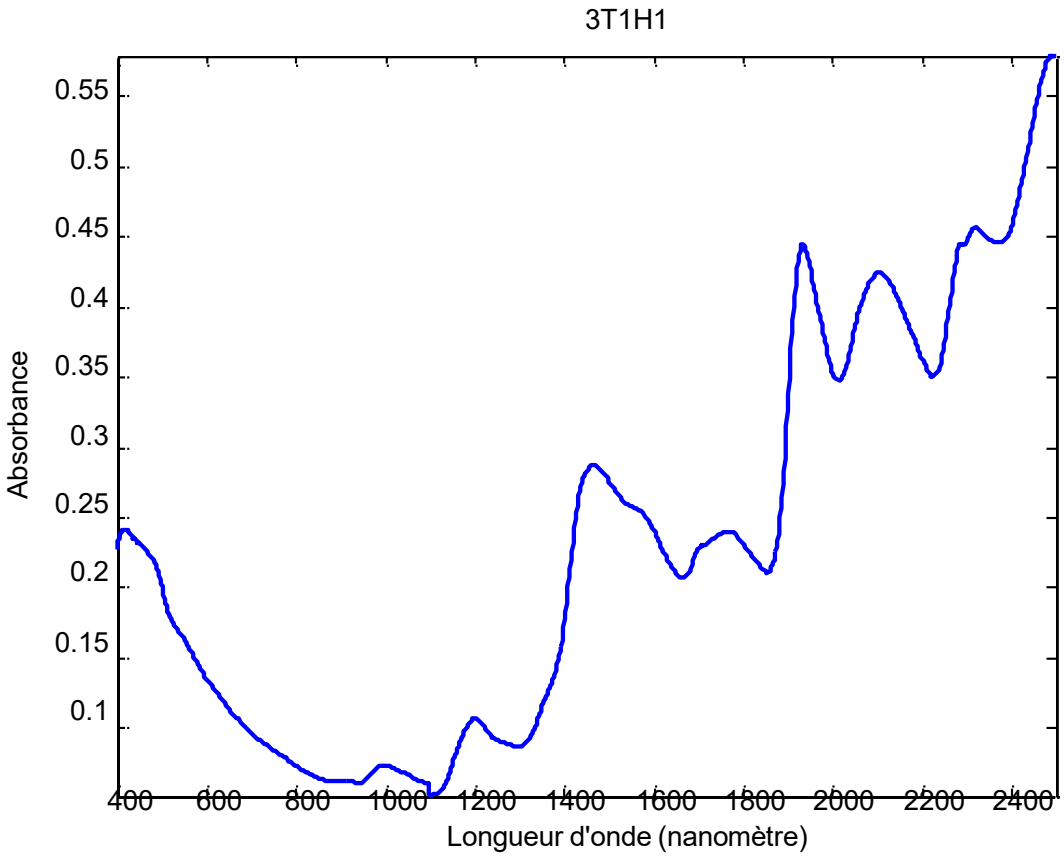
Il estfaciled'obtenirlecercledecorrélationparlacommande
correlation_plot(score,col1,col2, saisir1,saisir2, ...);
Le premier argument de cette fonction est une matrice dont les colonnes sont orthogonales entre-elles. col1 et col2 donne les numéros des composantes à représenter. Par exemple, la commande :
correlation_circle(res.score,1,2,olive2) ;
permet d'obtenir le cercle de corrélation des deux premières composantes.



Deuxième exemple : ACP sur des courbes numérisées
Ce deuxième exemple porte sur une collection de 140 spectres visible-proche infrarouge de farines de blé. Les descripteurs des individus comportent un code indiquant successivement l'année de culture (3 : 1993 ; 4 : 1994 ; la nature *dure* (D) ou *tendre* (T) du blé étudié, le numéro de la variété et les conditions agronomiques H1, H2, A1, A2.
Les spectres sont enregistrés à des longueurs d'onde comprises entre 400 et 2500 nanomètres, avec un pas de mesure de 2 nanomètres. On a ainsi 1050 mesures par spectre étudié.

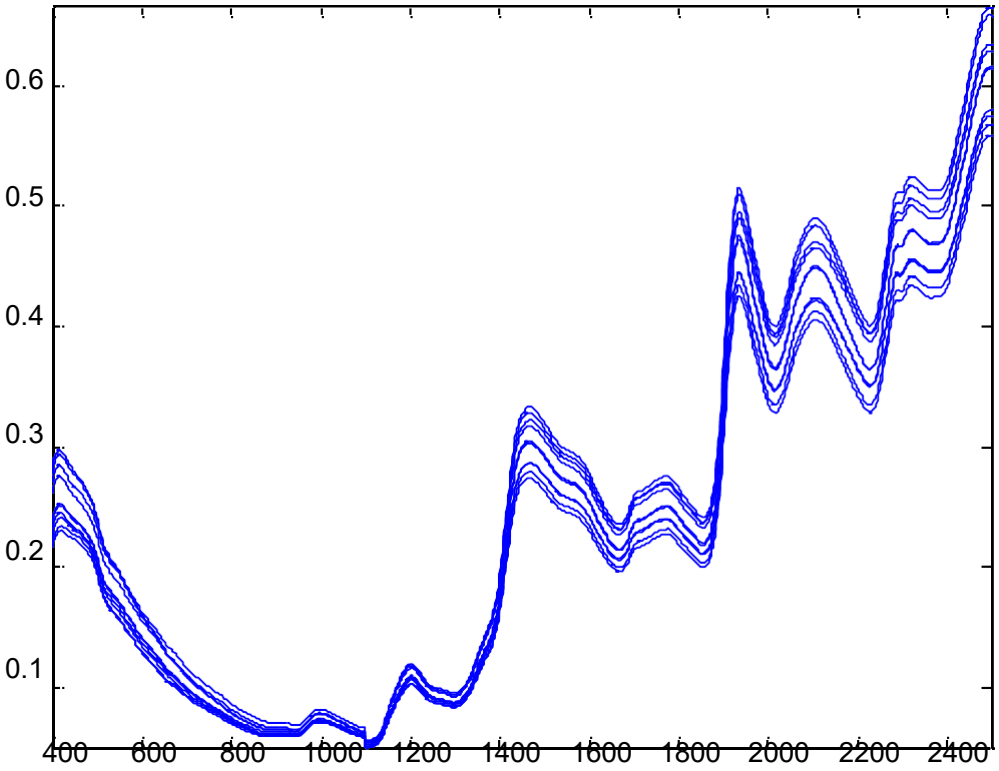
La matrice des données spectrales est désignée par ble.ble =
d: [140x1050 double]i: [140x10 char]
v: [1050x10 char]

On peut examiner les données spectrales par l'instruction curve, par exemple :
curve(ble,3,'Longueur d''onde (nanomètre)','Absorbance') représente le troisième spectre de la collection :



Il faut noter que l'axe des X est correctement gradué selon les longueurs d'onde. L'instruction direct (MATLAB) plot(ble.d(3,:)) effectue presque le même graphique, mais l'échelle des X est simplement graduée de 1 à 1050 (nombre de points de mesures).
La fonction curve tente d'interpréter les identificateurs de variables comme des nombres, de manière à graduer correctement l'axe des X. Si ce n'est pas possible (les descripteurs de variables ne représentant pas des nombres), l'axe des X est gradué selon les numéros d'instruction des variables.

La fonction curves permet de représenterplusieurs courbe sur le même graphique. Par exemple, la commande curves(ble,1:10) représente les 10 premiers spectres superposés.



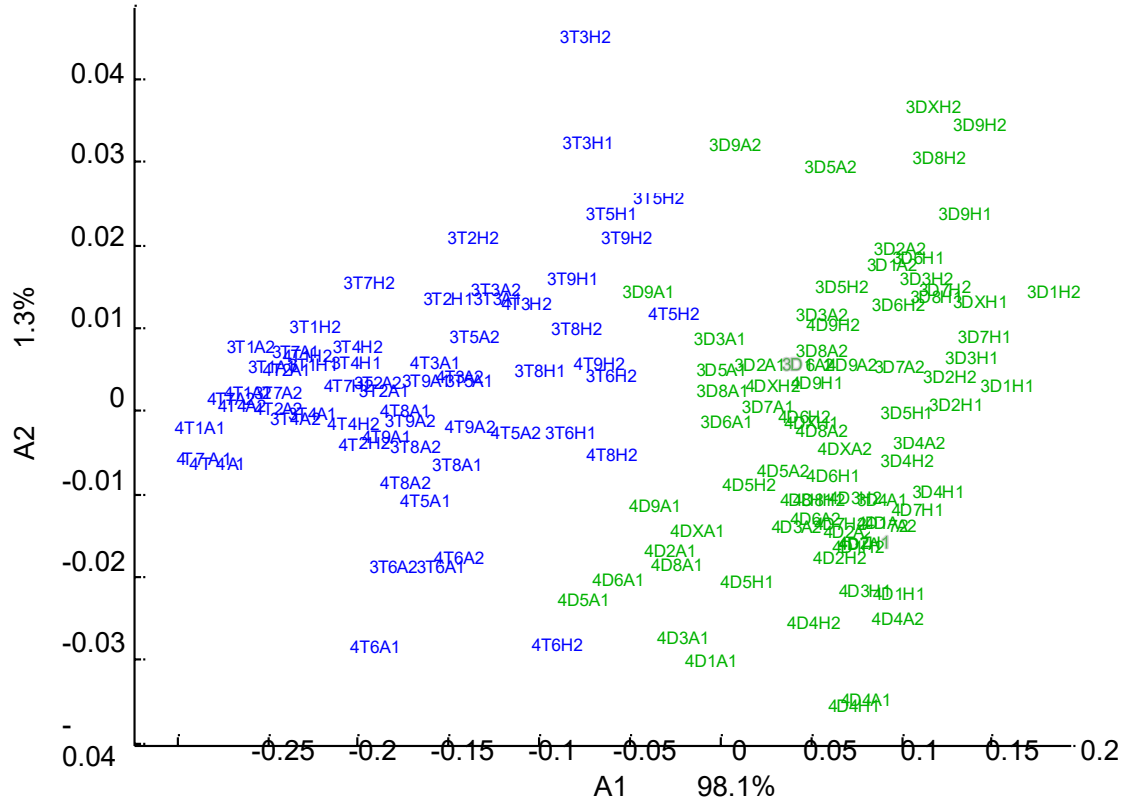
On peut rapidement « feuilleter » l'ensemble des spectres par l'instruction browse.browse(ble)
Right button to go down, Left button to go up, Ctrl C to exit
Les courbes défilent dans la fenêtre graphique. Chaque click droit de la souris fait afficher la courbe suivante. Un click gauche permet de « remonter » d'une courbe. On ne peut sortir qu'en pressant les touches [Ctrl C].
Avec l'instruction curve, il est toujours possible d'utiliser l'instruction MATLAB ginput, qui permet de connaître avec précision les coordonnées d'un point sur le graphe. Cela est utile pour repérer les sommets et les minima des courbes.

L'ACP sur des courbes numérisées est très voisine de celle effectuée sur des variablesdiscrètes. Il faut cependant remarquer que, dans ce cas, les intensités relatives des variablesont un sens et qu'il ne faut donc pas réduire la matrice des données.

Dans l'exemple, on a par exemple, la commande
```
acp_ble = pca(ble)
```

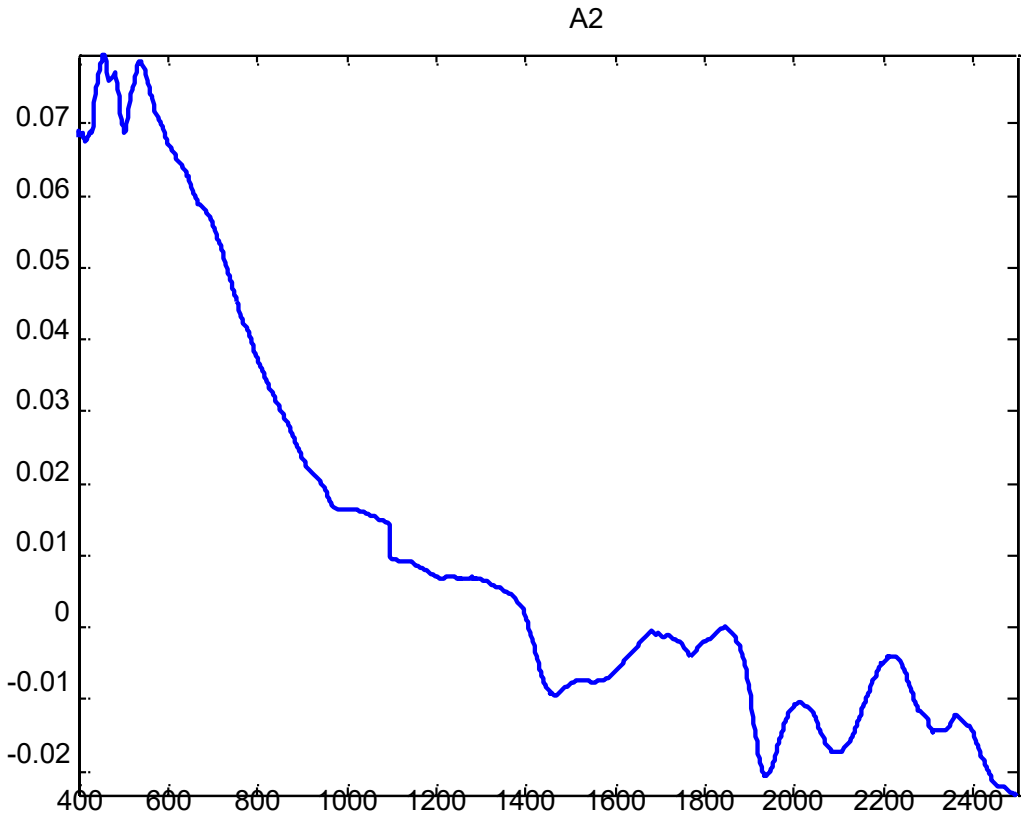
```
acp_ble =

    score: [1x1 struct]
    eigenvec: [1x1 struct]
    eigenval: [1x1 struct]
    average: [1x1 struct]
     info: 'PCA 09-Dec-2002 16:14:57'
```

Le programme calcule la totalité des composantes possibles (ici au nombre de 140). Les cartes factorielles s'obtiennent comme précédemment, par exemple :
```
colored_map2(acp_ble.score,1,2,2,2)
```
représente le premier plan factoriel, en utilisant les caractères en deuxième position (commençant et finissant en position 2) pour colorier la carte.



La nature *tendre/dure* des blés est très clairement visible.

Lorsqu'on effectue une ACP sur des courbes numérisées, il n'est pas très efficace de représenter le cercle de corrélation. En revanche, les vecteurs propres peuvent s'interpréter comme des « profils » qui indiquent les zones de la courbe qui jouent un rôle important dans la création des composantes. On montre facilement que l'ACP peut être vue comme une méthode permettant de décomposer les courbes comme des sommes des vecteurs propres, pondérés par les coordonnées factorielles correspondantes. Les vecteurs propres (*en colonnes)* sont rassemblés dans le champ eigenvec de la structure pcatype.
On peut les examiner (comme des profils) par la commande tcurve (courbe sur matrice transposée). Ainsi tcurve (acp_ble.eigenvec ,2) représente le deuxième vecteur propre comme un profil.



On voit ici, par exemple que les absorbances dans la région 400-800 nanomètres (lumière visible) jouent un rôle important dans la création de la deuxième composante. Ainsi, selon cette composante, les spectres des blés sont essentiellement séparés selon leur couleur (dans le Visible).

3 Traitements statistiques de base

De manière à montrer la logique des fonctions de ***SAISIR©***, les méthodes de régression et de discrimination sont présentées en détail (paragraphes 3.1 et 3.2). Les autres fonctions, sont présentées plus loin dans l'instruction alphabétique (paragraphe 4), et par thématique (paragraphe 5).

3.1 Régressions

Plusieurs méthodes de régression sont disponibles : *Partial least square* (PLS), Régression en composantes principales (PCR), régression *ridge*, régression en variables latentes, régression pas-à-pas.
D'une manière un peu hétérogène, on dispose de nombreux outils permettant la validation croisée.
On peut avoir une liste (non exhaustive) des méthodes de régression disponibles parla commande regression.
Pour développer une méthode de régression, il faut disposer d'une matrice **X** comprenant *n* lignes et *p* colonnes (variables prédictives), et d'un vecteur **y** comprenant *n* lignes (variable à prédire) au format ***SAISIR©***. Les lignes de **X** et de y doivent évidemment se correspondre (voir l'instruction reorder en cas de non-correspondance initiale)
Les fonctions associées à PLS sont présentées de manière détaillée. Les autres méthodes ont des fonctions similaires.

3.1.1 PLS (Partial least square)

La régression PLS est probablement la méthode la plus connue. Elle est efficace même lorsque les données **X** présentent une forte colinéarité. La « complexité » du modèle établi dépend d'un paramètre appelé « dimension ». Plus le modèle est complexe, plus il est précis. Cependant, la complexité est source d'instabilité. Il est en général nécessaire de trouver un compromis entre la complexité et la stabilité. Le choix du nombre de dimensions peut se faire par une méthode de validation croisée (*cross validation*, voir plus loin).
Les différentes fonctions sont indiquées ici les unes après les autres, classées approximativement dans l'instruction de leur complexité. Dans la suite, ndim est un nombre indiquant le nombre de dimensions du modèle retenu.

BASIC_PLS

exemple :

```
res = basic_pls(X, y, ndim)
```

```
res =
T: [1x1 struct]
P: [1x1 struct]
beta: [1x1 struct]
beta0: [1x1 struct]
meanx: [1x1 struct]
meany: [1x1 struct]
predy: [1x1 struct]
error: [1x1 struct]
corcoef: [1x1 struct]
BETA: [1x1 struct]
BETA0: [1x1 struct]
loadings: [1x1 struct]
Q: [1x1 struct]
PREDY: [1x1 struct]
RMSEC: [1x1 struct]
r2: [1x1 struct]
```

res.T = variables latentes du modèle PLS (*scores*)
res.P = *loadings* du modèle PLS (tels que **X = TP**)
res.loadings : *loadings* du modèle PLS (tels que**T = X*loadings**). Ce sont les projecteursPLS donne en effet deux sortes de loadings
res.corcoef corrélation simple entre variable prédites et observées.
res.PREDY contient toutes les prédictions pour 1 à ndim dimensions.

Attention basic_pls n'admet qu'une seule variable y qui est ici un vecteur ! En revanche, il donne les résultats associés à toutes les dimensions de 1 à ndim.

APPLYPLS

```
[predy] = applypls(X,plsmodel,(knowny))
```

Prédit les valeurs de y, connaissant la matrice **X** et le modèle PLS donné dans plsmodel.
plsmodel est l'argument de sortie de basic_pls.

Exemple d'utilisation :

```
res = basic_pls(Xcal, y, ndim) % étalonnage
```

```
predy = applypls(Xval, res) % validation
```

Si l'argument optionnel knowny (yconnu) est donné, la fonction donne également des statistiques sur l'erreur de ce jeu de validation.
knowny doit posséder autant de lignes que X.

Example:

```
test = applypls(X,modele_pls,y)
test =
   PREDY: [1x1 struct]        valeur de y prédit
   RMSEV: [1x1 struct]        erreur résiduelle de validation
    r2: [1x1 struct]          coefficient de détermination sur le jeu de validation
```

CROSSVALPLS1A

res = crossvalpls1a(X, y, ndim ,selected)

```
res =
    calibration: [1x1 struct]
    validation: [1x1 struct]
```

et

```
res.validation
    PREDY: [1x1 struct]
    RMSEV: [1x1 struct]
    r2: [1x1 struct]
    T: [1x1 struct]
```

Etablit une validation sur le modèle PLS comprenant ndim dimensions. y ne représente qu'une seule variable (une seule colonne).
selected est un *vecteur* (MATLAB) et non une structure ***SAISIR©***, comprenant n éléments qui indiquent comment les données **X** et **y** sont séparées en jeux d'étalonnage (calibration) et de validation. Les éléments de selected doivent avoir la valeur 0 ou 1. les individus correspondant aux valeurs 0 de selected sont placés dans le jeu d'étalonnage. Les autres sont placés dans le jeu de validation. La fonction divise la collection en jeux d'étalonnage et de vérification. Le modèle PLS est calculé sur les étalons et appliqué sur le jeu de validation.
OBSY et PREDY sont respectivement les valeurs observées et prédites du jeu de validation. Comme les données sont découpées par cette fonction, il est utile de pouvoir disposer du vecteur OBSY.
Par exemple, la commande xy_plot(res.validation.OBSY,1,res.validation.PREDY,3) affiche, pour le jeu de validation, le couple variable observée/variable prédite pour le modèle PLS à 3 dimension.

RMSEV est la racine carrée de la somme des carrés des écarts entre valeurs observées et prédites du jeu de validation.
En anglais : RMSEV *Root mean square error of validation*.
Le vecteur selected peut être établi de manière aléatoire par l'instruction random_select.
selected = random_select(nel, nselect)
nel est le nombre d'élément du vecteur selected (qui prennent la valeur 0 ou 1).
nselect est le nombre d'éléments prenant aléatoirement la valeur 1.Faire help random_select pour plus de détails.

3.1.2 Régression en composantes principales

La régression en composantes principales est une régression ordinaire, appliquée sur les composantes de l'ACP des données prédictives **X**. Comme dans la méthode PLS, il peut être intéressant de ne former le modèle prédictif qu'avec les composantes auxquelles sont associées les plus grandes valeurs propres.

PCR

```
pcrres = pcr(X,y, dimmax)

res =
        pca: [1x1 struct]
        beta: [1x1 struct]
        predy: [1x1 struct]
        r2: [1x1 struct]
    averagey: 12.62
    beta1: [1x1 struct]
    obsy: [1x1 struct]
    rmsec: [1x1 struct]
```

Effectue une régression en composantes principales pour estimer **y** (une seule variable),connaissant **X**.
La fonction PCR établit tous les modèles comprenant 1 à dimmax composantes introduites,et donne tous les résultats de chacun de ces modèles. Les composantes sont introduites dans l'instruction des valeurs propres. Par exemple, le modèle prédictif 1, est établi avec la première composante de l'ACP. Le modèle prédictif 5 est établit à partir des composantes 1 à 5.
La structure PCRRES contient tous les résultats pour chacun des modèles (soit maxdim modèles). Ainsi, par exemple, le champ predy est une structure ***SAISIR©***, avec en ligne les individus, et en colonnes, les valeurs prédites de y pour chacun des maxdim modèles.
L'erreur résiduelle (rmsec, *root mean square error of calibration*) est calculée avec n-k-1 degré de liberté, avec n : le nombre d'individus et k la dimension du modèle.
Les autres champs ont les mêmes significations que ceux employés dans la méthode PLS.
Les champs beta et beta1 contiennent respectivement les coefficients de la régression appliqués sur les coordonnées factorielles (beta) ou sur les données d'origine. Le champ PCA est une structure contenant les résultats de l'ACP sur X (voir paragraphe 2.1.3).

APPLYPCR

```
predy = applypcr(pcrtype, Xval)

>>predy =
>>   d: [140x10 double]
>>    i: [140x10 char]
>>    v: [10x6 char]
```

Prédit la valeur y, connaissant Xval, à partir des modèles prédictifs donnés par PCRTYPE.
PCRTYPE est le résultat de l'application de la fonction PCR.

DIMCROSSPCR1

```
pcrres1 = dimcrosspcr1(X, y, maxdim, selected)
>>pcrres1 =
>>       r2: [1x1 struct]
>>     predy: [1x1 struct]
>>    rmsecv: [1x1 struct]
>>      obsy: [1x1 struct]
>>   pcrtype: [1x1 struct]
```

Effectue une validation de la régression en composantes principales.
Voir la commande dimcrosspls1a pour les détails
pcrtype contient le modèle prédictif établi sur le jeu d'étalonnage.3.1.3 Régression pas à pas

STEPWISE_REGRESSION

(Exemple tiré du manuel « G. Saporta, Probabilités, analyse des données et statistique,Editions Technip, Paris, 1990, page 396).
On cherche à prédire le prix d'une voiture (vecteur y) connaissant différentes variables caractéristiques *: CYL*, *PUIS*, *LON*, *LAR*, *POIDS*, *VITESSE* (matrice **X**).
Le seuil d'entrée ou de sortie de variables du modèle est fixé à 0.15.

```
>> stepwise_type = stepwise_regression(x,y,0.15)
>>Entering variable
PUIS
>>error = 4076.0077
>>Entering variable
POIDS
>>error = 3916.3302
>>Entering variable
CYL
>>error = 3974.3516
>>Finished at previous step

stepwise_type =

    [1x1 struct]    [1x1 struct]     []
```

La régression introduit la variable PUIS, suivi de la variable POIDS. L'introduction de la variable suivante, CYL ne donne pas une probabilité suffisamment faible, et cette variable et rejetée.
stepwise_type contient les résultats de tous les modèles respectant le seuil de probabilité. Ces résultats sont dans des structures de cellules (*Array of cells*). On accède aux éléments deces cellules par les signes « {} » et non par « () ». Chaque indice donne les résultats associés àun pas donné de la régression.

On a par exemple

```
>>stepwise_type{2}
>>       message: 'Entering variable POIDS              at step 2'
>>           res: [1x1 struct]
>>     intercept: 1.7756e+003
>>          RMSE: 3.9163e+003
>>            r2: 0.6866
>>   adjusted_r2: 0.6448
>>             F: 16.4331
>>         probF: 1.6614e-004
>>         ypred: [1x1 struct]
```

Le champ res est une matrice ***SAISIR©***, donnant les résultats associés à chacun des termes du modèle. On peut, par exemple, transférer cette matrice sous Excel par la commande :
saisir2excel(stepwise_type{2}.res, 'res2');

Le tableau Excel ainsi obtenu est le suivant :

	Lower reg. coef. conf	**Highe r conf**	**Std reg.coef.**	**t reg. coeff.**	**Preg. coef.**
PUIS	172.97	18.608	327.33	72.42	2.3884	0.030509
POIDS	16.451	-6.5141	39.416	10.774	1.5269	0.1476

Les variables sont indiquées en lignes.
Les colonnes donnent successivement : les coefficients de la régression, les limites basses et hautes au seuil P<0.05 de ces coefficients, leur écart-type, le test de t, et la probabilité de l'hypothèse nulle : « *les coefficients sont égaux à 0* ».

APPLY_STEPWISE_REGRESSION

```
res = apply_stepwise_regression(stepwise_type,x,(y))
```

```
>>res =
   predy: [1x1 struct]
   rmsev: [1x1 struct]
   r2: [1x1 struct]
```

Même principe que dans les méthodes précédentes. Tous les modèles (correspondant à toutes les étapes de la régression pas à pas) sont appliqués. Si le paramètre optionnel y (valeur observée) est donné, la fonction donne également les coefficients de corrélation et les erreurs résiduelles attachés à chacun de ces modèles.

DIMCROSS_STEPWISE_REGRESSION

```
function[res] = dimcross_stepwise_regression(x,y,selected,Pthres)
```

Même logique que les méthodes précédentes. **X** est la matrice des données prédictives, y le vecteur de la variable à prédire. selected donne la division en étalon et vérification.
Pthres (*Probability threshold*) est le seuil d'introduction ou d'élimination des données.

3.2 Discrimination

On peut avoir une liste non exhaustive des méthodes de régression disponibles par la commande discrimination.

Toutes les méthodes de discrimination demandent une matrice de données explicatives **X** et un vecteur désignant les groupes, que nous appellerons gr, dans la suite. Si **X** est de dimension $n \times p$, gr est un vecteur de dimension n x 1. Ce vecteur contient des nombres entiers, qui peuvent prendre des valeurs allant de 1 à maxgroup, où maxgroup est le nombre de groupes qualitatifs. Il est nécessaire que chaque groupe soit représenté au moins une fois dans la collection d'étalonnage. Dans ***SAISIR©***, gr doit être une structure. gr.i indique les identificateurs des individus (normalement identiques à X.i). gr.d est un vecteur colonne d'entiers indiquant les groupes, et gr.v contient un seul identificateur, par exemple « group ».

CREATE_GROUP1, CREATE_GROUP

Lorsque les descripteurs des individus sont des clés pouvant désigner les groupes qualitatifs, ilest très facile de créer le vecteur gr en exploitant ces noms. Ainsi dans l'exemple « *huiles d'olive* » donné au paragraphe 2.1.3, les régions de récolte des olives sont désignées par les deux premières lettres.

L'instruction create_group1 peut être appliqué.

```
gr = create_group1(oil1,1,2);

>>gr =
>>    d: [572x1 double]
>>    i: [572x20 char]
>>    v: 'group'
>>    g: [1x1 struct]
```

Les groupes sont créés en exploitant oil.i et en recherchant les chaînes de caractères qui commencent en position 1 du nom et finissent en position 2. Les échantillons ayant des chaînes extraites identiques font partie du même groupe.

la structure gr.g donne les effectifs de ces groupes, et les lettres qui correspondent.

gr.g.i	*gr.g.d*
Ca	56
Cs	33
El	50
Is	65
Na	25
Sa	206
Si	36
Um	51
Wl	50

Ainsi, 36 observations font partie du 7ème groupe, la région Si.

Attention ! Si les chaînes de caractères servant à former les groupes sont déjà des nombres, la fonction ne garantit pas que l'on aura la correspondance {« 1 », groupe 1}, {« 2 », groupe 2} et ainsi de suite. En effet, les numéros sont associés aux groupes de manière arbitraire. Pour éviter cette difficulté, lorsque l'on veut imposer les numéros de groupes, on peut utiliser l'instruction create_group

gr = create_group(saisir,code_list,startpos,endpos)
Par exemple la commande
gr = create_group(qualite, ['1' ; ''2' ; '3' ;] ,2 , 2)

Recherche dans la matrice qualite, les descripteurs qui ont, en position 2, les chaînes de caractères « 1 », « 2 » ou « 3 », et établit le fichier gr correspondant. La fonction signale sides observations n'ont pas de chaînes de la liste code_list. Dans ce cas, il faut résoudre le problème avant de continuer.
Seules quelques méthodes sont présentées ici.

MAHA1, MAHA3, MAHA4, MAHA5, MAHA6

Discriminations ascendantes par calcul de la distance de Mahalanobis.
Ces fonctions sont très voisines, et repose sur le calcul de la distance de Mahalanobis sur la covariance totale.
Les méthodes se distinguent seulement par :
1) Le mode de sélection des variables :
- Soit par la maximisation du pourcentage d'observations correctement classées
- Soit par la maximisation de la trace de $T^{-1}B$

(*Cf. JM Romeder, Méthodes et programmes d'analyse discriminante, Dunod, Paris,1973)*
2) La possibilité d'avoir un jeu de validation.

On dispose des méthodes suivantes (les numéros de ces méthodes n'ont pas de sens)

Sans validation : function[discrtype] = maha3(saisir,group,maxvar)Maximisation de la trace de $T^{-1}B$

function[discrtype] = maha4(saisir,group,maxvar)
Pourcentage d'échantillons correctement classés

Avec validation :
function[discrtype1] = maha1(calibration,calibration_group,maxvar,test,test_group)
Pourcentage d'échantillons correctement classés. Deux jeux de données.

function[discrtype] = maha5(saisir, group, maxvar, selected)
Pourcentage d'échantillons correctement classés. Un seul jeu de données, divisé selon les valeurs du vecteur selected.

function[discrtype] = maha6(saisir,group,maxvar,selected)
Maximisation de la trace de $T^{-1}B$.

Exemple d'utilisation (avec validation), sur l'exemple *huile d'olive*

```
>>sel = random_select(572,200)          % 200 observations en validation
>>dis = maha6(oil1,gr,8,sel)            % discrimination avec maximisation de la trace
```

```
>>dis =

>>     ncorrect: [1x1 struct]
>>    nscorrect: [1x1 struct]
>>      classed: [1x1 struct]
>>     sclassed: [1x1 struct]
>>    confusion: [9x9 double]
>>      varrank: [5 8 7 2 3 6 4 1]
>>   sconfusion: [9x9 double]
```

Le préfixe 's' comme dans sclassed ou nscorrect désigne les individus de validation (*supplémentaires*).
Les champs classed, sclassed et confusion, sconfusion donnent les résultats associés au dernier pas de la méthode ascendante. Pour avoir des pas intermédiaires, il faut utiliser la fonction à nouveau, avec une valeur différente de maxvar.

Par exemple, dis = maha6(oil1,gr,5,sel) « reconstitue » le pas n° 5.
confusion et sconfusion donne les matrices d'affectation des échantillons, avec en ligne : les groupes réels, et en colonnes, ceux trouvés par le calcul.

PLSDA, CROSSPLSDA

```
function[type] = plsda(x, group, ndim)
```

Analyse discriminante par la méthode PLS, avec ndim dimensions.

La méthode PLS consiste tout d'abord à établir un modèle linéaire PLS2. Dans ce modèle, les variables Y à prédire sont les indicatrices de groupe.

On peut ensuite procéder de deux manières différentes (désignées par 0 ou 1).
Méthode 0 :
On prédit les valeurs des indicatrices. Chaque individu à classer est affecté dans le groupe donnant la plus grande valeur de l'indicatrice.

Méthode 1 :
Les variables latentes de PLS (scores T) deviennent les variables d'une analyse discriminante linéaire classique.

Exemple d'utilisation :

```
>> pl = plsda(oil1,gr,8)

>> pl =

>> beta          : [1x1 struct]
>> beta0         : [1x1 struct]
>> t             : [1x1 struct]
>> predy         : [1x1 struct]
>> classed       : [1x1 struct]
>> ncorrect      : 478
>> confusion     : [1x1 struct]
>> classed1      : [1x1 struct]
>> ncorrect1     : 533
>> confusion1    : [1x1 struct]
>> tbeta         : [1x1 struct]
>> tbeta0        : [1x1 struct]
>> linear        : [1x1 struct]
>> linear0       : [1x1 struct]
>> info          : [1x76 char]
```

Voici la définition de ces champs :

beta et beta0 : coefficients des modèles linéaires permettant de prédire les indicatrices.

t : variables latentes PLS (scores)

predy : indicatrices prédites (autant que de groupes qualitatifs)

classed : groupes prédits selon la méthode 0

ncorrect : nombre d'affectation correctes selon la méthode 0confusion : matrice de confusion obtenue avec la méthode 0 classed1: groupes prédits selon la méthode 1

ncorrect1 : nombre d'affectation correctes selon la méthode 1

confusion1 : matrice de confusion obtenue avec la méthode 0

tbeta et tbeta0 : coefficients des modèles linéaires permettant de prédire les variables latentes PLS.

linear et linear0 : forme linéaire permettant d'affecter rapidement les échantillons

Pour une observation inconnue x, on peut calculer le vecteur test = x' * linear + linear0. Ce vecteur à autant d'éléments qu'il y a de groupes qualitatifs. La règle d'affectation est donnée par l'indice du minimum de test.

La fonction crossplsda permet de valider le modèle, par exemple.
res = crossplsda(oil1,gr,5,sel)

```
res =

confusion1          : [1x1 struct]
ncorrect1           : 328
nscorrect1          : 171
sconfusion1         : [9x9 double]
confusion           : [1x1 struct]
ncorrect            : 289
nscorrect           : 150
sconfusion          : [9x9 double]
info                : [1x76 char]
```

Nota : La méthode 1 est en général supérieure à la méthode 0

FDA1, FDA2 et famille FDA

Ces méthodes d'analyse factorielle discriminante (*FDA : factorial discriminant analysis*) sont bien adaptées aux tableaux possédant de nombreuses variables très redondantes, comme les données de mesures physiques (chromatogrammes, spectres).
D'une manière similaire à la régression en composantes principales, elles procèdent en deux étapes : ACP sur les données, suivi d'une analyse discriminante linéaire. Elles offrent la possibilité de donner des cartes factorielles discriminantes. La méthode de base a été présentée dans l'article : *Bertrand et al., J of Chemometrics, Vol . 4, 413-427 (1990)*.

FDA1

Analyse factorielle discriminante ascendante sur les coordonnées factorielle d'une ACP.
function[fdatype] = fda1(pcatype, group, among, maxvar)

Exemple :

```
>>p = pca(oil1) ;
>>fdatype = fda1(p,gr,8,3)

>>fdatype =

>> introduced       : [1x1 struct]
>> ncorrect         : [1x1 struct]
>> beta             : [1x1 struct]
>> datafactor       : [1x1 struct]
>> centroidfactor   : [1x1 struct]
>> eigenval         : [1x1 struct]
>> confusion        : [1x1 struct]
>> average          : [1x1 struct]
```

La méthode demande comme premier argument, le résultat d'une ACP (argument de sortie dela fonction pca).
Le deuxième argument est le vecteur de groupe, gr, comme précédemment.
Le troisième argument indique le sous-ensemble des composantes que l'on souhaiteconsidérer dans l'analyse. Par exemple, si among (*parmi*) vaut 5, la fonction ne choisira lesvariables prédictives que parmi les 5 premières composantes. Le dernier argument, maxvar,indique le nombre maximal de composantes introduites dans le modèle. On doit avoir : maxvar ≤ among.
La fonction établit des modèles prédictifs comprenant 1 à maxvar composantes. Lescomposantes sont introduites, comme précédemment, de manière à maximiser $T^{-1}B$,

Le résultat est une structure contenant des matrices ***SAISIR©***, comme dans les méthodes précédentes. Les champs ont la même signification que précédement ;

fdatype.datafactor donne les facteurs, qui peuvent être représentés sous forme de cartes factorielles, exactement comme pour l'ACP (fonction pca).
fdatype.centroidfactor donne les barycentres des groupes dans l'espace de projection.
fdatype.beta contient les coefficients du modèle linéaire qui s'appliquent sur le tableau X d'origine centré pour donner les facteurs.
fdatype.eigenval donne les valeurs propres de l'analyse factorielle discriminante.

FDA2

Analyse factorielle discriminante ascendante sur les coordonnées factorielle d'une ACP, avec validation.

```
Res = fda2(X,gr,among,maxvar,selected)

res =

introduced      : [1x1 struct]
ncorrect        : [1x1 struct]
nscorrect       : [1x1 struct]
beta            : [1x1 struct]
datafactor      : [1x1 struct]
centroidfactor  : [1x1 struct]
eigenval        : [1x1 struct]
confusion       : [6x6 double]
average         : [1x1 struct]
sconfusion      : [6x6 double]
```

Mêmes principes que précédemment, avec une validation. Attention ! Contrairement à FDA1,la fonction FDA2 admet comme premier argument le tableau **X** des variables explicatives, et non le résultat d'une ACP.

Voir aussi les fonctions :
APPLYFDA1 et CROSSFDA1

4 Dictionnaire des fonctions disponibles

Par instruction alphabétique. (Voir aussi la liste par thème au paragraphe 5)
On peut (en général !) obtenir une aide succincte par la commande help suivi du nom de la fonction.
L'importance et l'intérêt pratique des fonctions sont notés par le signe * (de * à ****).Les descriptions sont essentiellement celles données par l'instruction help (en anglais)

ADDCODE*

function str1 = addcode(str,code,deb_end)
add the string "code" BEFORE or AFTER any string of vector str
function str1 = addcode(str,code)
useful for recoding identifier
if deb_end = = 0: addition before (default)

ALPHABETIC_SORT

Sort the rows of the saisir file according to the alphabetic order of rows identifiers
function s1 = alphabetic_sort(s,start_pos:end_pos)
useful in colouring maps
startpos endpos indique sur quelle partie des caractères des identificateurs porte le classement.
Par exemple: identificateurs
'1mais ''3ble '
Si startpos = 2 et endpos = 5, seront classés à partir des chaînes de caractères 'mais' et 'ble '

ANAVAR1****

One way analysis of variance on spectral data
function res = anavar1(X,g)
Performs a one-way analysis of variance for each of the column of X.g is the ***SAISIR©*** file indicating the groups.
The function returns
res.F : vector of Fisher values for each variable in Xres.p : vector of associated probabilities.
Note: res.F and res.p can be examined as curves (using CURVE function)or by the command SHOW_VECTOR (discrete variables)
Cette fonction est très utile pour examiner très rapidement les relations entre des jeux de variables et des groupes qualitatifs.

ANOVAN1 ****

N-way analysis of variance (ANOVA) on data matrices.
function res = anovan1(X,model,gr1, gr2, ...)
Performs as many N-way analyses of variance as the number of columns in XX: matrix of response values
model: see ANOVAN, gives the level of desired interactions (1 = no interactions studied; 2: first degree of interactions) gr1; gr2 ... (variable number of arguments): qualitative groupsforming a factor of the ANOVA
The function returns:
res.F : the F value associated with each effect and interaction

res.P : probability
res.df : (characters): degrees of freedom
res.singular: singularity of the model. If the singularity = = 1, the modelis redundant and a lowest level of interaction must be tested.
see also: ANOVAN, ANOVA, ANAVAR1

appendbag1

- Merge an arbitrary number of structure bags according to rowsusage: [saisir] = appendbag1(saisir2,.....)
saisir is a structure i,v,d
the number of columns in saisir files must be equal

La structure bag (sac) est utilisée lorsque l'on doit manipuler des tableaux de chaînes de caractères.
C'est une structure comme saisir, avec les champs ".i" et ".v" servant à étiquetter le lignes etles colonnes.
En revanche le champ "d" ne contient pas des valeurs numériques mais des chaines de caractères.
Exemple : fichier sous Excel, sauvegardé en format ".csv" sous le nom "exemple.csv"

	nom	prénom
personne1	DUPONT	Jean
personne2	DURAND	Paul
personne3	MARTIN	Jacques

La commande
[saisir, mybag] = excel2bag('exemple',['B';'C'])
La structure saisir est ici vide (voir la commande excel2bag).

mybag est une structure bag.mybag =
v: [2x20 char]
d: [3x20x2 char]i: [3x20 char]
Le champ .d est ici un tableau 3voies de caractères. Attention ! C'est le deuxième indice qui désigne la chaine.

Par exemple: bag.d(2,:,1)

>>DURAND

APPENDCOL ****
Merges two files according to columnsusage: [X] = appendcol(X1,X2) saisir is a structure i,v,d
the number of rows in X1 and X2 must be equal

APPENDCOL1 ****
Merge an arbitrary number of files according to columns
usage: [X] = appendcol(X1, X2,...)
the number of rows in X1 and X2 files must be identical

APPENDROW****
Merge two files according to rows
usage: [X] = appendrow(X1,X2)
The number of columns in X1 and X2 must be equal

APPENDROW1****
Merge an arbitrary number of files according to rows
usage: [X] = appendrow(X1, ...)
the number of columns in files must be equal

APPLY_MULTIPLE_REGRESSION
Applies multiple_regression on "unknown" data function[res] =
apply_multiple_regression(x,type,(y)) Using the models (in type) as returned by the function "multiple_regression"
if y (optional) is given, gives also the Root mean square error on y
Ne fonctionne qu'en parallèle avec la fonction multiple_regression

APPLY_RIDGE_REGRESSION **
Apply ridge regression on "unknown data"
function[res] = apply_ridge_regression(ridgetype,x,(y))
if y is given, the verification stats (RMSEV are also assessed)

APPLY_STEPWISE_REGRESSION**
Apply stepwise_regression on "unknown" data
function[res] = apply_stepwise_regression(type,x,(y))
Using the models (in type) as returned by stepwise_regression
Build as many models as available in type
if y (optional) is given, gives also the Root mean square error on y

APPLYFDA1 **
Application of factorial discriminant analysis on PCA scores
function[res] = applyfda1(X,fda1type,(actual_group))
predict the qualitative group on X, the model is contained in fda1type
if actual_group is given, assess also the confusion matrix (actual *versus* predicted)

APPLYLR1**
Apply basic latent root model on saisir data x
function [predy] = applylr1(lr1type,x)
creates as many y predicted as allowed by the dimensions in lr1typelr1type is the output argument of the function LR1

APPLY_NUEE *
apply Nuee dynamique (KCmeans)

function[res] = nuee(X,barycenter)
X : a matrix of dimension n x p
Barycenter : a matrix defining the barycenter k x p with k groups
Barycenter is possibly the field "center" of the output of function "nuee"
Cette fonction affecte les observations dans X dans des groupes à partir des barycentres contenus dans barycenter
Les individus sont affectés au barycentre le plus proche, au sens de la distance euclidienne usuelle.

APPLYPCA**
Assess the scores of supplementary observationsfunction [supscores] = applypca(pcatype, X)
assess the scores of supplementary observations
pcatype is the structure resulting of the application of pca on principal observationsThe number of columns of X must be compatible with pcatype.
If normed_pca was applied, X is divided by the std of the principal observation prior to projection

APPLYPCR**
Assesses a basic PCR on data
function [predy] = applypcr(pcrtype,X)
apply a basic pcr (in pcrtype) on X
creates as many y predicted as allowed by the dimensions in pcrtype

APPLYPLS**
Applies a pls model on an unknown data set function [predy] = applypls(x,plsmodel) plsmodel is the structure obtained from saisirplsreturns predy

APPLYPLSDA *
Applies pls discriminant analysis after model assessment using plsdafunction[res] = applyplsda(x,model,actual_group)
return the predicted group on "unknown" data X
'model' is the structure returned by function 'plsda'

APPLYSPCR*
Applies a stepwise PCR
function [predy] = applyspcr(spcrtype,X)
applies a pcr with selection (in spcrtype) on saisir data X
creates as many y predicted as allowed by the dimensions in pcrtype

APPLY_QUADDIS

- Application of Quadratic discriminant analysis

function result = apply_quaddis(quaddis_type,x,(known_group));Application of quadratic discriminant analysis (test)

= =

-- Inputg args:

quaddis_type	: output of function "quaddis" (structure)
x	: predictive data matrix (n x p)
known_group	: true groups of observations in x (n x 1) (optional)

-- Ouput args:

predgroup	: predicted groups (n x 1)
density	: pseudo-density (n x gmax)
proba	: probability of belonging to a given group (n x gmax)if "known_group" defined
nscorrect100	: percentage of correct classification (number)
sconfus	: confusion matrix (gmax x gmax)

BAG2GROUP

use the identifiers in bag to create groups function [group_type] = bag2group(bag) Use the identifiers for creating groups.

Build an array of cells. In each cell, the column of bag.d (matrix ofchar) are processed in order to form a vector of group

creates as many group as different strings in the column of bag.d

Cette fonction est un peu complexe, elle est utile pour manipuler des fichiers Exces dans lesquels des groupes qualitatifs sont désignés par des chaînes de caractères.

Voir la fonction Excel2group.

BASIC_PLS**

Basic pls with keeping loadings and scores

function[res] = basic_pls(X,y,ndim)

A single y and 1 to ndim dimensions

res =

T	: scores PLS
P	: paramétre P
Beta	: beta (termes de la regression applicables sur X) du modèle à ndim dimensions
beta0	: constante du modèle à ndim dimensions
meanx	: moyenne de x meany: moyenne de y
predy	: y prédit du modèle à ndim dimensions
error	: [1x1 struct] erreur quadratique du modèle à ndim dimensions
corcoef	: [1x1 struct] coefficient de correlation du modèle à ndim dimensions
BETA	: beta (terme de la regression applicables sur X) de tous les modèles
BETA0	: constantes de tous les modèles
Loadings	: loading pls
Q	:coefficients de la regression sur les T

PREDY : y prédit sur tous les modèles
RMSEC : erreur résiduelles de tous les modèles
r2 : coefficients de détermination de tous les modèles

BASIC_PLS2**

PLS2 on several variables, several dimensionsfunction result = basic_pls2(X,Y,maxdim)
returns result.T : the latent variables
result.res: cells corresponding to each final predicted variable
Ce programme établit tous les modèles PLS2 avec **X** comme variables predictives et **Y** une matrice de variables à prédire.
La matrice result.T contient les composantes (scores PLS) sous la forme d'une matrice.
result.res est un vecteur de cellule (accolade et non parenthèse). Chacune des cellulescontient des structures donnant les resultants associé à chaque variable.
Exemple:

```
>>xcal =
   d: [32x801 double]i: [32x2 char]
   v: [801x4 char]
>>cv =
   i: [32x10 char] d: [32x3 double]v: [3x1 char]
>>manip = basic_pls2(xcal,cv,10);% prediction des variables dans cv, à l'aide de xcal,10 dimensions maximum.
>>manip.T % scores de PLSans =
   d: [32x10 double]i: [32x2 char]
   v: [10x2 char]
>> manip.res; % vecteur de cellules contenant les resultants associés à chaque variable
ans =
   [1x1 struct]    [1x1 struct]    [1x1 struct]
% Résultats associés à la deuxième variable:
manip.res{2}% remarquez les accolades { }ans =
   nom: 'R' % la deuxième variable s'appelle 'R''BETA: [1x1 struct] % coefficients du
   modèle BETA0: [1x1 struct] % constantes du modèle PREDY: [1x1 struct] % variable
   Y prédite
   RMSEC: [1x1 struct] % Root mean square errors of calibrationr2: [1x1 struct] %
     coefficients de détermination
```

Il faut noter que, tous les modèles (comportant dans l'exemple de 1 à 10 dimensions) sont calculés.
Par exemple:

```
>>manip.res{2}.BETAd: [801x10  double]i: [32x2 char]
```

v: [10x2 char]
Les coefficients du modèle à 5 dimensions pour la variable 2, peuvent par exemple être examines par:
tcurve(manip.res{2}.beta,5)

BMAHA **

Assess a simple backward discriminant analysis
function discrtype] = bmaha(saisir,group)
assess a simple linear discriminant analysis introducing rows to 1 variables
at each step, the less discriminating variable (according to the percentage of correctclassification) are discarded. Only backward

BROWSE***

Browses a series of curves
function browse(X)
Display the rows of the matrix X as curves
Right button to go down, Left button to go up, Ctrl C to exit

BUILD_INDICATOR *

- build a disjoint table

function [indicator, groupings] = build_indicator(x);
each column of X must contain integer valuesbuild the complete table of indicators
Useful for computing multiple correspondence analysis
Chaque colonne de X est considérée comme étant représentative de groupes qualitatifs codés par des nombres entiers.
Pour chaque colonne de X, le tableau des indicatrices est formé. Il y a autant d'indicatricespar colonnes que de nombres entiers différents dans cette colonne. Le nom des variables dans indicator est formé par le nom initial de la variable dans X, suivi d'un numéro indiquant le nombre originalement présent dans X.
Par exemple, une colonne de X contenant les seuls nombres 0, 3, 5 de nom quality sera à l'origine de 3 indicatrices quality0, quality3 quality5. La matrice de sortie indicator contienttoutes les indicatrices de toutes les colonnes de X.

CA ***

CORRESPONDENCE ANALYSIS
function ca_type = ca(N);
Compute correspondence analysis from the contingency table in N
If only groupings are available, the contigency table must be computed before using this function (see for example function "contingency_table")
= =
Fields of the output

score	: CA scores of rows followed by CA scores of columns
eigenval	: eigenvalues, percentage of inertia, cumulated percentage
contribution	: contribution to the component rows, then columns
squared_cos	: squared cosinus row, then columns
khi2	: khi2 of the contingency table
df	: degree of freedom
probability	: probability of random values in contigency table

= =

The identifiers of rows of 'score' (whic are the identifiers of rows and columns of N (N.i and N.v)
are preceded with the letter 'r' or 'c'.
It is therefore possible to use color for emphazising row and columns inthe simultaneous biplot of rows and columns

Source : G. Saporta. Probabilités, analyse des données et statistiques.: Edition Technip, page 198 and followings.

REMARK : use function ca_map to plot the biplot observation/variable

CA_MAP **
Colored map for correspondence analysis: using a portion of the identifiers as labels
ca_map(X,col1,col2,startpos,endpos,(col1label),(col2label),(title),(charsize),(margin))
Biplot of two columns as colored map useful for correspondance analysis (from function ca)
The coloration of the displayed descriptors depends on the arguments startpos and endpos. If one of this argument is zero: single (black) color
Otherwise, from the names of individual, the string name(sartpos:endpos) is extracted. Two observations
for which these strings are different, are also colored differently.

SPECIFIQUE A L'ANALYSE FACTORIELLE DES CORRESPONDANCES :
If the first letter of the identifier is either *c* (column) or *r* (row), this letter is removed in the name.
The letter *c* produces an italic display. This allows a representation in which the variables arein italic letter

MAP****
Graph of map of data using identifiers as names
function map(X,col1,col2,(col1label),(col2label),(title),(charsize),(margin))

Biplot of two columns as a map, with display of the identifiers
margin : expansion of axis in order to cope with the long identifiers

MAP3D ***
Draw a 3D map
function map3D(X,col1,col2,col3,(labcol1),(labcol2),(labcol3),(title),(charsize))
Display columns col1, col2, col3 as X, Y and Z values of a 3D plot.

Options:
labcol : label of axes
charsize : size of the characters (default :6)

BARYCENTER_MAP **
graph of map of barycentre
function barycenter_map(s,col1,col2,gr)
Display two columns as a map
Each observation is linked to its own barycentre by a straight line
- s : saisir data file;
- col1 col2 : index of the columns to be displayed
- gr : qualitatitative groups

COLORED_MAP1****
colored map : using a portion of the identifiers as labels
colored_map1(hgraph,X,col1,col2,startpos,endpos,(col1label),(col2label),(title),(charsize),(m argin))
Biplot of two columns as colored map
The coloration of the displayed descriptors depends on the arguments startpos and endpos. From the names of individual, the string name(starpos:endpos) is extracted. Two observations for which these strings are different, are also colored differently.

COLORED_MAP2****
Colored map : using a portion of the identifiers as labels
colored_map2(X,col1,col2,startpos,endpos,(col1label),(col2label),(title),(charsize),(margin))
Biplot of two columns as colored map
The coloration of the displayed descriptors depends on the arguments startpos and endpos. From the names of individual, the string name(startpos:endpos) is extracted. Two observations for which this strings are different, are alos colored differently.
Contrary to carte_couleur1, the complete identifiers are displayed.

COLORED_MAP4 ****
Colored map according to given choice
colored_map4(X,col1,col2,color_choice,(symbol_choice));
Biplot of two columns as colored map
The coloration of the displayed descriptors depends on the argumentschoice (either matrix of char, vector of number or saisir structure); with number of elements equal to the number rows in s;

if the elements of "choice" are different, they are also colored differently.
if "symbol_choice" is also defined (either matrix of char, vector of numberor saisir structure) different symbols are used. The color of the point is then given by "choice", and the shape of the symbol depends on"symbol_choice"

Example of use:
Colored text with color determined by the second character in wheat.i
colored_map4(wheat,1,50,wheat.i(:,2));

Colored symbol: shape determined by the second character in wheat.icolor determined by the third character in wheat.i
colored_map4(ble,1,50,ble.i(:,2),ble.i(:,3));

SYMBOLE_MAP ****

Map with symbols : using a portion of the identifiers for
symbole_map(X,col1,col2,startpos,endpos,(col1label),(col2label),(title),(charsize))Biplot of two columns as a map with symbols
The symbols of the different observations depend on the arguments
startpos and endpos.
From the names of individual, the string name(starpos:endpos) is extracted. Two observations for which this strings are different, are represented with different symbols.

CENTER *

Subtracts the average row to each row
function X = center(X1)

CHANGE_NAME

- change the name of the observations of file X
function res = change_name(x,old_name,new_name);

old_name must contain at least all the identifiers in X.i;
new_name must have the same number of row than old_name;

CHANGE_SIGN *

Changes the sign of a component and of associated eigenvector
function [pcatype] = change_sign(pcatype,ncomp)
Lorsqu'on effectue plusieurs ACP sur des données similaires, il peut être avantageux d'avoirdes composantes homologues représentées sur les cartes factorielles, avec le même signe.
Cette fonction offre la possibilité de changer la direction d'une composante à la fois.

CHECK_NAME*

Controls if some strings are strictly identical in a string array
function [detected,names] = check_name(string)
find the string witch are strictly identical in s.
Principalement utilisé en liaison avec l'instruction REORDER.

COL_MAP1

Colored map : using a portion of the identifiers as labels
col_map1(X,col1,col2,char_range,(col1label),(col2label),(title),(charsize),(margin)) Biplot of two columns as colored map
Fait la même chose que ***colored_map1*** La seule différence réside dans la manière de désignerles caractères de la coloration: char_range est ici un vecteur.
Par exemple, si char_range = [1 3 8] les observations seront coloriées en fonction des caractères en position [1 2 8].

COLORED_CURVES

- displays curves coloured according to groupsfunction h = coloured_curves(s,range,group)
range is a vector indicating the rows to be displayed
group *peut-être le résultat de la fonction create_group1*

COMDIM **

Finding common dimensions in multitable data (saisir format)
function[res] = comdim(col,(ndim),(threshold))

Finding common dimensions in multitable according to method 'level3' proposed by *E.M. Qannari, I. Wakeling, P. Courcoux and H. J. H. MacFiein Food quality and Preference 11 (2000) 151-154*

threshold (optional) : if the difference of fit<threshold then breaks the iterative loop
ndim : number of common dimensions
default : threshold = 1E-10; ndim = number of tables

Returns:

Q : nrow x ndim the observations loadings
explained : 1 x ndim, percentage explanation given by each dimension
saliences : ntable x ndim weight of the original tables in each dimensions.
col is an ARRAY OF CELLS of saisir files (the numbers of rows in each table must be equal) .

CONTINGENCY_KHI2**

compute khi2 stats on a contingency table
function res = contingency_kh2(table);

table can be computed from contingency_table
res =

theo	: [1x1 struct]	Distribution théorique
khi2	: [1x1 struct]	Valeur du KHI2
dll	: [1x1 struct]	Degrés de liberté du KHI2
P	: [1x1 struct]	Probabilité de l'hypothèse nulle

CONTINGENCY_TABLE**

Compute a contingency table
function table = contingency_table(g1,g2)

g1 and g2 are the group files possibly computed from "create_group1".
g1.d and g2.d are vectors of integer values with the same number of elements.In these vectors, a same number indicates the belonging to the same group.

CORMAP***

Assesses the correlation between two tables
function [cor] = cormap(X1,X2)

The tables must have the same number of rows
The results is a p1 x p2 matrix (with p1 and p2 the numbers of rows of X1 and X2 respectively)
An element cor.d(a,b) is the correlation coefficient between the column a of X1 and b of X2

CORRELATION_CIRCLE **

Assesses and displays the correlation circle after PCA
function[res] = correlation_circle(pcatype,X,col1,col2)

pcatype is the result of the order pcatype = pca(X)
X is the original data matrix
col1 and col2 are the ranks of the components to be represented.

CORRELATION_PLOT

- Draw a correlation between scores and tables
function handle = correlation_plot(scores, col1, col2, saisir1, saisir2, ...);

Input argument:
scores : ORTHOGONAL scores obtained by multidimensional analysis
col1 and col2 : Indices of the scores to be plotted
saisir1, saisir2, ... : Arbitrary number of tables giving the variables to be plottedThe number of rows in the scores and other tables must be identical

Chaque tableau saisir1, saisir2 *est associé à une couleur différente.Le cercle en pointillé indique 50% de la variable expliquée*
Si l'argument scores *n'a pas des colonnes orthogonales, la représentation se fait, mais un message d'avertissement apparaît.*

CORRECT_BASELINE

simple linear baseline correction, using intensity
function [saisir] = correct_baseline (saisir1,col1,col2)
The baseline is modeled by a straight line going from data points col1 to col2

CURVE****

Represent a row of a matrix as a curve
usage handle = curve(X,(nrow), (xlabel),(ylabel),(title))

CURVES****

Represents several rows of a matrix as curves
usage handle = curves(saisir,range,(xlabel),(ylabel),(title))
range is a vector indicating the rows to be displayed

COVMAP **

Assesses the covariances between two tables
function [cov] = covmap(X1,X2)
the tables must have the same number of rows
The results is a p1 x p2 matrix (with p1 and p2 the numbers of rows of X1 and X2 respectively)
An element cov.d(a,b) is the covariance between the column a of X1 and b of X2

COVARIANCE_PCA**
-assesses principal component analysis when knowing the covariance (of variables)
function[pcatype] = covariance_pca(covariance_type,(ncomponent)) Performs PCA on the covariance matrix as calculated by % "cumulate_covariance"returns scores, eigenvector, eigenvalues, average of the observations
The input argument "covariance_type" is the result of the function cumulate_covariancesuch as :
covariance_type1 = cumulate_covariance([],covariance_type);%% finishing
if ncomponent is defined, only this number of component is assessed.Default: all
This function is useful fo to carrying on PCA with huge data set (see
cumulate_covariance for an example of use)

CREATE_GROUP**
Create a vector of number indicating groups from identifiers
function [saisir] = create_group(saisir1,code_list,startpos,endpos)
use the identifier for creating groups.
the codes of the groups are in code_list , and the positions where to find the letterare in startpos and endpos
see also create_group1

CREATE_GROUP1***
function [saisir] = create_group1(s,startpos,endpos)
use the identifier for creating groups.
creates as many group means as different strings from startpos to endpos
s: saisir file, startpos and endpos : position of discriminating characters

CROSS_RIDGE_REGRESSION**
Ridge regression with crossvalidation function[res] =
cross_ridge_regression(x,y,krange,selected)divides a collection in calibration and verification set
applies ridge_regression on the validation set

CROSSFDA1**
crossvalidation of discrimination according to fda1 (directly on data)function[res] =
crossfda1(X, group, among, maxvar, ntest) applies fda1 by dividing X into calibration and verification set
ntest observations in each group are randomly (with no repeat) placed in test group.applied directly on X data
maxvar is the maximum number of components introduced, among is the highest rank of the possibly introduced component.

CROSSMAHA1**
Crossvalidation on discrimination according to maha1 (*directly on data*)
function[discrtype2] = crossmaha(X,group,maxvar,ntest)
Applies maha1 by dividing X into calibration and verification set
ntest observations in *each group* are randomly (with no repeat) placed in test group.

CROSSPLSDA **
cross-validation on PLS discriminant analysis
function[res] = crossplsda(x, group, dim, selected)

selected is a VECTOR with 0 = calibration sample, 1 = verification sample

CROSSVALPLS1a
crossvalidation of pls with up to ndim dimensions.
function [res] = crossvalpls1a(x, y, ndim, selected)

ndim = PLS dimension;
Performs a single crossvalidation test. "selected" is a vector
giving the samples in verification set. 1 = in verification; 0 = in calibration set
returns predicted y and observed y in cross validation obtain from 1 to ndim dimension
returns also rmsev the root mean square error of crossvalidation and corr the correlation coefficient

CROSSVAL_MULTIPLE_REGRESSION
crossvalidation of multiple regression.
function[res] = crossval_multiple_regression(x, y, selected)

Performs a single crossvalidation test. "selected" is a vector
giving the samples in verification set. 1 = in verification; 0 = in calibration set
returns predicted y and observed y
returns also rmsev the root mean square error of crossvalidation and r2 the squared correlation coefficient

CROSSVAL_QUADDIS
crossvalidation of quadratic dis. analysis
function res = crossval_quaddis(x, group, selected)

Input args:
x : matrix of predictive data (n x p)
group : vector of known groups (integers, n x 1)selected : MATLAB vector (n x 1)
with elements 0: selected in the calibration set1: selected in the validation set
Output args res with fields:
calibration: structure quaddis_type as defined in function "quaddis"validation : structure as defined in "apply_quaddis"

CUMULATE_COVARIANCE *
calculate covariance on huge data set
function [covariance_type] = cumulate_covariance(x, covariance_type1);

if status = 0 or undefined calculate X'X in X_X, Sum of row in SX,and n the number of processed observation
if the first argument = [], assess the covariance in the SAISIR© format
single argument : starting the work
A complete script must therefore be something like

```
cov = cumulate_covariance(collection1);
%% starting cov = cumulate_covariance(collection2,cov);
%% cumulating valuescov = cumulate_covariance(collection3,cov);
%% cumulating values
...
cov = cumulate_covariance(collection_n,cov);        %% cumulating values
covariance = cumulate_covariance([],cov);           %% finishing
```

Cette fonction est surtout utilisée pour faire des analyses en composantes principales sur des données qui ne tiennent pas en mémoire vive, en combinaison avec la fonction ***covariance_pca***.

D2_FACTORIAL_MAP ***
Assesses a factorial map from a table of *squared* distances
function [ftype] = d2_factorial_map(saisir)

Uses the Torgerson approach to transform squared distance into pseudo scalar products.

DELETECOL ****
Deletes columns of saisir structures
[X] = deletecol(X1, index)

The deleted columns are indicated by the vector index (numbers of Booleans)

DELETEROW ****
Deletes rows
[X] = deleterow(X1, index)

The rows to be deleted are indicated by the vector index (numbers of Booleans)

DENDRO **
Dendrogram using euclidian metric and Ward linkage
function z = dendro(saisir, (topnodes))

Voir les fonctions dendrogram *et* linkage *de MATLAB, pour plus de détails*.

DIMCROSS_STEPWISE_REGRESSION **
Test models obtained from stepwise regression
function[res] = dimcross_stepwise_regression(x, y, selected, Pthres,(confidence))

divides the collection into calibration and verification samples using selected samples/observations in selected: 0 calibration samples; 1 verification samples

Pthres : probability threshold of entering or discarding variable
confidence (optional): confidence interval for the correlation coefficient

DIMCROSSPCR1**
Crossvalidation of PCR (samples in validation are selected)
function [pcrres] = dimcrosspcr1(x, y, dimmax, selected)

dimmax = max number of PCR dimension;
selected: vector of samples selected as calibration set (= 0) and verification set (= 1)
returns predy,rmsecv,corr
rmsecv is the root mean square error of crossvalidation
y must contain a single variable !
Components introduced in the order of the eigenvalues

DISTANCE **
Assesses the Euclidian distances between the two tables
function D = distance(X1, X2)
the tables must have the same number of columns

ELIMINATE_NAN ***
Suppresses "not a number" data in a saisir structure
function [saisir1] = eliminate_nan(saisir, (row_or_col))
From a given saisir structure possibly containing NaN values (not determined values) create a file of known values
if row_or_col = 0 tries to have the maximum number of rows
if row_or_col = 1 tries to have the maximum number of columns

ELLIPSE_MAP

plots the ellipse confidence interval of groups(useful in discriminant analysis and related methods)
function ellipse_map(X, col1, col2, gr, centroid_variability,(confidence),(point_plot))
arguments:
- X: data matrix
- col1, col2: represented columns
- gr: qualitative groups (referred as integer number)
- centroid_variability : either 0 (variability of individual data points), or 1 : variability of the centroid itself (default: 0)
- confidence: P value of the confidence interval (default: 0.05)
- point_plot: if point_plot = 0, plots also the individual points assymbols (inactivated if centroid_variability set to 1)

EXCEL2BAG *
read an excel file and creates the corresponding text bag (array of caracter)
function [saisir, bag] = excel2bag(filename, ref_text_col, (nchar), (deb), (xend))

the excel file includes the identifers of rows and columns
filename : excelfile in the '.csv' format
nchar : number of characters read in each cell of the excel files(the other are ignored)
ref_text_col : an array of string giving the reference of columns designed as forming the columns of bag.d.

THESE COLUMNS ARE DESIGNATED USING THE EXCEL STYLE ('AA','AB')
deb : number of the first row decoded
xend : final row decoded
output : saisir follows the usual logic.
bag : is a structure (bag.d,bag.i,bag.v), with bag.d being here a matrix of char

saisir contains the numerical values from the excel file, with the exception of the columns referenced by ref_text_col
bag contains the character values from the excel file, referenced by ref_text_col

Example:
>>[value,bag] = excel2bag('olive',['A'; 'B'],20)
the columns 'A' and 'B' from excel are read as text (in output bag) the other columns are read as number respecting the saisir structure.

Cette fonction est un peu complexe, elle est utile pour manipuler des fichiers Excels dans lesquels des groupes qualitatifs sont désignés par des chaînes de caractères.
Voir la fonction bag2group.

EXCEL2SAISIR ****
Reads an excel file
function [saisir] = excel2saisir(filename,(nchar),(start),(xend))

reads an excel file which has been saved under the format .csv (the delimiters are ';')
the excel file includes the identifiers of rows and columns
start : number of the first row decoded,
xend: final row decoded

FDA1 ***
stepwise factorial discriminant analysis on PCA scores
function[fdatype] = fda1(pcatype, group among, maxvar)

assesses a stepwise factorial discriminant analysis according to Bertrand et al., J of Chemometrics, Vol . 4, 413-427 (1990).
the basic idea is to assess a factorial discriminant analysis on the scores of
a previous pca.
The criterion of score selection is the maximisation of the trace.
group is the saisir file of group, among is the number of the first components on which the selection is applied
maxvar is the maximum number of components possibly introduced in the model

FDA2 ***
stepwise factorial discriminant analysis on PCA scores with verification
function[fdatype] = fda2(x, g, among, maxvar, selected)

criterion: maximisation of trace of $T^{-1}B$
selected : VECTOR indicating samples in calibration set(0), or in validation set (1);

FIND_INDEX
find the index corresponding to the closest value
function index = find_index(str, value);

useful for finding the wavelength index in strings

Ne fonctionne que dans le cas ou str est une chaîne de caractères interprétables comme des nombres.

FIND_MAX
gives the indices of the max value of a MATLAB Matrix
function [row,col,value] = find_max(matrix)
Attention ! Il s'agit bien d'une matrice Matlab.
Exemple:
[row,col,value] = find_max(ble.d)

FIND_MIN
-gives the indices of the min value of a MATLAB Matrix
function [row,col,value] = find_max(matrix)
Attention! Il s'agit bien d'une matrice Matlab !

FIND_PEAKS
-find peaks greater than a threshold value
function vect = find_peaks1(saisir, row, threshold, gap, startvalue)

inside a window of size (data points) defined by gap. gap is a odd numberreturn the VECTOR of positions

GROUP_CENTERING
Center data according to groups
function res = group_centering(X, group);
Centre les observations selon les groupes donnés par le fichier de groupe group.
Surtout utile pour centrer les notes par juge en analyse sensorielle.

ISI2SAISIR ** ISI2SAISIR1**ISI2SAISIR2**ISI2SAISIR3**ISI2SAISIR4**

Load NIR data obtained with ISI software from disk
function [saisir] = isi2saisir(filename)
The NIR data obtained from ISI software (on a NISsystems instruments) must be firstconverted into ASCII files by using the management program (option print data files)with printer off. In this way, it is possible to obtain ASCII files with the extension ".DAT".
The program reads the files and give them the SAISIR© format.
A few extra work is needed to adapt the program for other situation
En cas de difficultés, ces fonctions sont à essayer successivement.

LABELLED_HIST ***
Draws an histogram in which each name is considered as a colored label
function labelled_hist(s, col, startpos, endpos, (nclass), (charsize))

with

s	: a saisir structure
col	: the column from which the histogram is drawn
startpos and endpos	: the position in the row identifier strings considered as keys for coloration
nclass	: number of desired classes
charsize	: the size of character on the graph

LEAVE_ONE_OUT_PLS1

PLS1 with leave_one out validation

function res = leave_one_out_pls1(x, y, ndim);

A n'utiliser que sur des fichiers avec peu d'observations.

LEAVE_ONE_OUT_PLS2

- PLS2 with leave_one out validation

function res = leave_one_out_pls2(x, y, ndim);

y may represent several variables

A n'utiliser que sur des fichiers avec peu d'observations.

LIST

Lists rows (only with a small number of columns)

function list(X)

Pour des fichiers de grande taille, il faut utiliser la fonction saisir2excel, et examiner le fichier sous Excel.

LR1

Assesses a Latent root 1 model

function [lr1type] = lr1(x, y, maxdim, ratioxy)

assess a basic lr1 model on files following the saisir formatreturns lr1type

returns the individual predictors and the y predicted with 1 to maxdim latent variables best choice obtained from a weighted sum of the predicted y according to *Vigneau et al.*ratioxy(optional): positive number greater than 0 less than 1

giving the relative importance of x and y. 1: x important; 0 x not importantdefault : 0.5 (x and y have the same importance)

MAHA**

Simple discriminant analysis forward introducing variables no validation samples

function[discrtype] = maha(saisir, group, maxvar)

Assesses a simple quadratic discriminant analysis introducing up to maxvar variableat each step, the more discriminating variable (according to the percentage of correctclassification) is introduced. Only forward

MAHA1**

forward discriminant analysis DIRECTLY ON DATA with validation samples

function[discrtype1] = maha1(calibration, calibration_group, maxvar, test, test_group)

Assesses a simple linear discriminant analysis introducing up to maxvar variable at each step, the more discriminating variable (according to the percentage of correct classification of the calibration set) is introduced. Only forward

MAHA3**

Simple discriminant analysis forward introducing variables no validation samples

function[discrtype] = maha3(saisir,group,maxvar)

assess a linear discriminant analysis introducing up to maxvar variableat each step, the more discriminating variable

(according to the maximization of the trace of $T^{-1}B$ is introduced)

MAHA4**
Simple discriminant analysis forward introducing variables no validation samples
function[discrtype] = maha(saisir, group, maxvar)
Assesses a linear discriminant analysis introducing up to maxvar variableat each step, the more discriminating variable
(according to the maximization of the number of correctly classified samples)

MAHA5**
Simple discriminant analysis forward introducing variables with validation samples
function[discrtype] = maha5(saisir, group, maxvar, selected)
Assesses a linear discriminant analysis introducing up to maxvar variableat each step, the more discriminating variables are selected
according to the maximisation of the number of correctly classifed samples

MAHA6**
Simple discriminant analysis forward introducing variables with validation samples
function[discrtype] = maha6(saisir, group, maxvar, selected)
Assesses a linear discriminant analysis introducing up to maxvar variableat each step, the more discriminating variable
according to the maximization of the trace of $T^{-1}B$ is introduced
the collection is divided in cal. sample and test samples according to selected:selected = 0 , sample placed in calibration, = 1 verification

MATRIX2SAISIR***
Transforms a MATLAB matrix in a saisir structure
saisir = matrix2saisir(data, coderow, codecol)

coderow or codecol indicates the caracters before the rank number of the identifier(optional)

MFA**
Multiple factor analysis
function res = mfa(collection)

collection : ARRAY OF CELL of SAISIR© structure
example of building a collection : collection col{1} = table1;col{2} = table2; col{3} = table3
in which table1, table2, table3 are SAISIR© structure
NOTE HERE THE USE OF { } (ACCOLADE) AND NOT ( ) (BRACKET);

Each table must include the same observations, but not necessarily the same variables.
WARNING! In this version, the variables are not normalised !
Let n be the number of observations, and t the number of tables
Let WHOLE be the matrix of appended tables normalized according to MFA (dimensions n x m)
Let k be the rank of WHOLE

Fields of the output:
score (n x k) : scores of the individuals (compromise)
eigenvec (m x k) : eigenvectors of the PCA on WHOLE (no direct use)
eigenval (1 x k) : eigenvalues of the PCA on WHOLE

average (1 x m) : averages of the variables of WHOLEvar_score (m x k) : scores of the variables
proj {1xt cell} : projectors for computing the projection of new observations of each table
first_eigenval (1xt) : first eigenvalues of the individual PCAS on each table
observation_score (q x k) : individual score of each row of each table (q = total numberof rows in all the tables)
id_group (q x 1) : identification of the belonging of the observation_score into agiven table
table_score (t x k) : scores of the tables

Information on FMA can be found in SPAD TM Version 5.0 (procédure AFMUL);

MIR_STYLE *
Changes the sign of the variables of MIR spectra
function [names] = mir_style(names1)
In order to have the usual sense on the graph of mid infrared spectra

MULTIPLE_REGRESSION
Simple Multiple linear regression (all the variables)
function res = multiple_regression(x, y);

A single y variable !!!!
A utiliser seulement dans des situations dans lesquelles les colonnes de X ne sont pas quasi-colinéaires ou colinéaires.

MULTIWAY_PCA **
Multi way principal component analysis
function res = multiway_pca(collection);

collection : ARRAY OF CELL of SAISIR© structure
example of building a collection : collection col{1} = table1;col{2} = table2; col{3} = table3
in which table1, table2, table are SAISIR© structure
NOTE HERE THE USE OF {} (ACCOLADE) AND NOT () (BRACKET);
Each table must include the same observations, but not necessarily the same variables.
WARNING! In this version, the variables are not normalised !

Let n be the number of observations, and t the number of tablesLet WHOLE be the matrix of appended tables
Let k be the rank of WHOLE

Fields of the output
score (n x k) : scores of the individuals (compromise)
eigenvec (m x k) : eigenvectors of the PCA on WHOLE (no direct use)
eigenval (1 x k) : eigenvalues of the PCA on WHOLE
average (1 x m) : averages of the variables of WHOLE
var_score (m x k) : scores of the variables
proj {1xt cell} : projectors for computing the projection of new observations of each table
trajectory (q x k) : individual score of each row of each table (q = total number of rows in all the tables)
id_group (q x 1) : identification of the belonging of the observation_score into a given table

table_score (t x k) : scores of the tables

Cette fonction (expérimentale) permet de traiter des tableaux multiples avec une approche très simple, plus logique que celle de la fonction MFA.

MSC*
Applies a multiplicative scatter correction on spectra
function [x] = msc(x1, (reference))

Multiplicative scatter correction, reference is the reference spectrumIf only one argument, the reference is the average spectrum

NORM_COL**
Divides each column by the corresponding standard deviation
function [saisir] = norm_col(saisir1)

NORMED_PCA****
PCA with normalisation of data
function[pcatype] = normed_pca(saisir)

NUEE **
Nuee dynamique (Kcmeans)
function[res] = nuee(X, ngroup)
Clusters the data into ngroup according to the KCmeans method ("nuée dynamique");

NUM2STR1 *
Justified num2str
function str = num2str1(number, ndigit);

Exemple num2str1(12,5)
00012
La sortie est une chaîne de caractère. Utile pour créer des champs dans les noms d'individus.

PCA ****
Assesses principal component analysis on raw data
function [pcatype] = pca(saisir, info)

Assesses principal component analysis (on not normalised data)
returns
score, eigenvector, eigenvalues, average.

pcatype is a structure containing
scores : observations' coordinates
eigenvec : eigenvectors (loadings)
eigenval : eigenvalues
average : average observation

PCA_CANO **

Generalized canonical analysis after PCAs on each table

function res = pca_cano(col, ndim, graph)

input argument :

ndim : dimension of each individual PCA (must be less than the smallest number of variables

graph : if different from 0 : display examples of graph

fields of the output :

let n be the number of observations in each table, k the number of tables compromises : PCA giving the compromise

observation_score : scores of each observation of each table (nxk rows)

id_group : groups identifying each observation in observation_score (for graph)

projector : struct array giving the vectors allowing the projection of each data set

score_correlation : correlations between compromise and each scores of each table

table_average : struct array giving the average of each original data table

Adapted from G. Saporta. Probabilités, analyse des données et statistiques : Edition Technip, page 192 and followings.

La fonction effectue l'analyse canonique sur la collection de tableau col après des ACP tableau par tableau. Les coordonnées factorielles des différents tableaux sont ensuite concaténées en ligne, en ne tenant compte que de *ndim* dimensions. Soit ***C*** ce tableau.

C est alors réduit (divisé par les racines carrées des valeurs propres correspondantes), puis une autre ACP est effectuée sur ***C*** réduit.

Le fichier res.compromise.score contient les coordonnées factorielles de cette ACP; qui sont les points compromis de chaque observation vue par tous les tableaux.

On peut projeter individuellement chaque observation de chaque tableau dans un espace factoriel commun. projector donne, tableau par tableau, la matrice des projecteurs (transformations linéaires) utilisable sur chaque tableau d'origine centré. Pour pouvoir éventuellement projeter les individus supplémentaires d'un tableau donné, les moyennes des colonnes de chacun des tableaux sont conservées dans res.table_average.

Observation_score donne les scores des observations tableau par tableau (*n x k* lignes). Pour pouvoir effecter des représentations barycentriques, id_group contient les numéros desrangs des individus dans chacun des tableaux (*n x k* lignes, *1* colonne).

Exemple d'utilisation :

```
%% fichier de démonstration de PCA_cano
%% analyse canonique sur coordonnées d'ACP

load ble;
%% on simule un système multitableau
clear col;
for i = 1:4
    col(i) = selectcol(ble,((i-1)*250+1):i*250);%
end

res = pca_cano(col,10,1);    %% version avec graphique: dernier paramètre = 1;
figure;
```

```
tcurve(res.projector(1),1);    % examen d'un projecteur
%% Ou
proj= [ ];
for i = 1:4
   proj = appendrow1(proj,res.projector(i));          % création d'une courbe (continue ?) de tous
                                                      les projecteurs
end
tcurve(proj,1);
```

PCA_CROSS_RIDGE_REGRESSION **
PCA ridge regression with crossvalidation
function[res] = cross_ridge_regression(x, y, krange, selected)

divide a collection in calibration and verification set
apply ridge_regression on the validation set
some trick about range (which is the cutting component)

see PCA_ridge_regression

PCA_RIDGE_REGRESSION **
Assess a basic ridge regression after PCA
function[ridgetype] = pca_ridge_regression(pcatype, y, range)

ONLYONE VARIABLE TO BE PREDICTED (scan the dimensions) return as many beta as the number of elements in range warning! range is NOT a range of kvalue it is arank of component. k is in fact the eigenvalue of the corresponding PCA component
The rationale of this, is that k in ridge_regression is very difficult to find it is agood idea to test a value in the range of the observed eigenvalues

PCARECONSTRUCT *
Reconstructs original X data from PCA and a file of score
function[res] = pcareconstruct(pcatype, score, maxdim)

from the previously assessed score rebuild the original data matrix.
the precision of the reconstruction is depending on the number of introduced components in maxdim)

PCA_STAT
Gives some complementary statistiques on PCA observations
function res = pca_stat(pca_type, col1, col2);

Input arguments :
pca_type : result of function pca
comp1, comp2 : number of the PC components of the PCA to be analyzed

Output arguments :
Saisir Matrix with 7 columns : QTL, col1 CO2col1, CTRcol1, col2, CO2col2, CTRCol2 QLT : squared cosinus with the plan (quality of the representation of the observations CO2
col1 and CO2
col2 : squared cosinus of the angle between the observation and the axis
We have QLT = CO2col1 + CO2col2
CTRcol1 and CTRcol2 : Contribution of the observation to the component.

From G.Saporta, Probabilités analyse des données et statistiques, Ed Technip, page 182

PCR***
Assesses a basic model of PCR (components introduced in the order of eigenvalues
function [pcrtype] = pcr(x,y,maxdim)

returns
pcrtype: pca, beta, predy, correlation coeff with 1 to maxdim elements, averagey
ONLY ONE VARIABLE TO BE PREDICTED (scan the dimensions)

PCR1 **
Assess a basic model of PCR (components introduced in the order of eigenvalues
function [pcrtype] = pcr1(x,y,dim)

returns
pcrtype: pca, beta, predy, correlation coeff with dim elements, averagey
SEVERAL VARIABLES CAN BE PREDICTED (no scan of the dimensions)

PLOTMATRIX1
-biplots of columns of matrices with colors
function plotmatrix1(s,startpos,endpos,charsize)

Même logique que la commande Matlab plotmatrix, mais avec des identificateurs en couleur.

PLSDA ***
Assesses pls discriminant analysis following the saisir format
function[type] = plsda(x,group,ndim)

returns (in structure type):
beta :coeff for predicting the indicator matrix
beta0 :intercept for predicting the indicator matrix
t :PLS latent variable
predy :predicted indicator matrix
classed :predicted groups according to method #0
ncorrect :number of rightly classified samples according to method #0(attribution to index of max of predicted Y)
confusion :confusion matrix according to method #0
ncorrect1 :number of rightly classified samples according to method #1(mahalanobis distance on latent variable t)
confusion1 :confusion matrix according to method #1
tbeta :coeff for predicting the latent variables t
tbeta0 :intercept for predicting the indicator matrix
linear :linear form for direct prediction of group
linear0 :%the min of x'*linear + linear0 gives the predicted group

QUADDIS **
Quadratic discriminant analysis
function quadis_type = quaddis(x,group);

Quadratic discriminant analysis (Training)
A multinormal distribution is assumed in each qualitative group

Input args:

x: predictive data set (matrix n x p)
g: qualitative groups (matrix n x 1) with integer ranging from 1 to maximum number of groups (gmax)

Output args:

quaddis_type with fields:

ncorrect100	: percentage of correct classification (number)
confus	: confusion matrix (gmax x gmax)
mean	: means according to each group (gmax x p)
predgroup	: predicted groups (integer) (n x gmax)
density	: pseudo-densities of each observation (n x gmax)
proba	: probability of belonging to a given group (n x gmax)

model: predictive model with fields:

inv	: Matlab matrices of Mahalanobis metrics (cube p x p x gmax)
Mut	: Matlab matrices of means according to each group (gmax x p)
Det	: Matlab vector of determinants of covariance matrices of each group (1 x gmax)

See also apply_quaddis, crossval_quaddis

QUICKPLS

Quick PLS regression from 1 to ndim dimensions

function [plstype] = saisirpls(x, y, ndim)

assesses a pls1 model
Only a single variable can be predicted, but with all the dimensions computed
Rapide, mais n'utilise pas l'algorithme NIPALS de référence

RANDOM_SELECT***

Random selection of samples

function[selected] = random_select(nel, nselect, (nrepeat))

returns a vector containing 1 in random position
among nel elements, nselect elements are set to 1
nrepeat (optional) randomly selects nselect values, but organised by block of nrepeat groups .For example, if nrepeat = 3 a possible result is [0 0 0 1 1 1 0 0 0 1 1 1 1 1 1 ...] This is useful for dividing a collection in calibration and verification set when the repetitionsare consecutive.
Normally nselect is an integer multiple of nrepeat.

RANDOM_SPLITROW *

Random selection of samples

function[X1,X2] = random_split(X, nselect)

randomly divide a collection in two collections nselect samples in X1 and n-nselect samples in X2where n is the number of rows in X

RANDOMIZE *

Build a file of randomly attributed rows

function X1 = randomize(X)

the row vector in X are randomly attributed to each obs.X may be the result of function 'create_group1'
Peut être utile lorsque l'on veut comparer une prédiction à celle obtenue par hasard.

READIDENT **
Loads a file of strings
[res,nindent] = readident(filename, (namesize))

loads an array of string in a matrix format
namesize gives the maximum number of characters in each string

REGRESSION_SCORE
build a factorial space for regression
function res = regression_score(x, beta, (y))

Input arguments :
x : data matrix (n x p)
beta : vector of regression coefficients (p x 1)
y : (optional) known y value

Output argument :
res with fields
score : regression scores (also y split)
reconstructed_norm2 : squared norms of the scores cumulated_norm2: cumulated squared norms of the scores
projector : matrix such as score = x*projector
eigenvec_sum : sum of the eigenvectors of PCA (linked to the theory)
xmean : mean of x
r2 : if (y defined) r2 of the cumulated model

Given a data matrix x and the regression coefficients beta,the function build up a matrix of orthogonal scores
such as predicted y is equal to the sum of this scores
The scores can be used to examine the observations "oriented" in theprediction of y.
As the scores are ranked as a function of their ability to predict y,
It is possible to examine the observations beginning by the first scores.

Cette fonction peut être utile pour créer un espace factoriel "orienté" pour prédire y.
Cette fonction demande en entrée des coefficients de régression beta calculés précédemment (par PLS, ridge régression ou autre).

REPEAT_STRING
build a matrix of char by repeating a string
function str1 = repeat_string(str,ntimes);

Input arg:
- str : a character string
- ntimes: number of repetition

Output arg:
- str1 the matrix of char with the repeated string.example:

```
>> repeat_string('Vanessa',3)
ans = VanessaVanessaVanessa
```

Utile pour manipuler des noms.

REDUCE_NVARIABLE **
Reduces variable number with averaging
[X] = reduce_nvariable(X1, nvar)

From the original data, averages nvar neighbouring columns.
The number of resulting variables is roughly equal to nvariable/nvarA few variables (less than nvar) might be lost at the end of the data nvar is preferably an odd value

REORDER ****
Reorder the data of files s1 and s2 according to their identifiers
function [B1 B2] = reorder(A1, A2)

This function makes it possible to realign the rows of A1 and A2, in order to have the identifiers corresponding.
This is necessary for any predictive method (particularly regressions).
The function discards the observations which are not present in A1 and A2.The matrix B1 corresponds to A1 and matrix B2 to A2
Fails if A1 or A2 contains identical identifiers of rows.

RIDGE_REGRESSION ***
Assesses a basic ridge regression
function [ridgetype] = ridge_regression(x, y, krange)

ONLY ONE VARIABLE TO BE PREDICTED (scan the dimensions)return as many beta as the number of elements in krange

RIDGE_REGRESSION1
Basic ridge regression at a given norm
function [ridgetype] = ridge_regression1(x, y, normrange)

ONLY ONE VARIABLE TO BE PREDICTED (scan the dimensions)return as many beta as the number of elements in normrange

ROW_CENTER
- subtracts the average column to each column
function [X] = center(X1)

SAISIR_CHECK ****
Check if the data respect the saisir stucture
function check = saisir_check(X)

check = 1 if x is in the SAISIR© format (no warning) check = 2
if x is in the SAISIR© format (with warning)
check = 0 if x is not in the SAISIR© format (fatal error)
Cette fonction permet de tester si un fichier est bien au format de SAISIR©.

Indique une '*fatal error*' si quelque chose est incorrecte.
Un '*warning*' si les données peuvent poser des problèmes dans les autres fonctions.

SAISIR2EXCEL ****
Saves a saisir file in a format compatible with Excel
function saisir2excel(X, filename)

Transforms a saisir file into a .CSV file and saves it on disk
This file can then be read as an excel file (separator : ";")

SAISIR_LINKAGE *
Assesses a simple linkage vector from a matrix of distance
function z = saisir_linkage(dis)

Extracts the "unfolded" triangular matrix in order to enter the MATLAB program
linkage with the option ward
Returns the z vector as required by dendrogram function

SAISIR_MEAN **
Assesses the mean of the columns, following the saisir format
function[average] = saisir_mean(X)

SAISIR_DERIVATIVE
n-th order derivative using the Savitzky-Golay coefficients
[saisir] = saisir_derivative(saisir1, polynome_order, window_size, derivative_order)

Example : res = saisir_derivative(x,3,21,2);
Compute the second derivative using a polynom of power 3 as model and a window size of 21

SAISIR_SORT *
Sorts the rows of s according to the values in a column
function [s1 s2] = saisir_sort(s, col)

s1 : data sorted according to the column col
s2 : a column rank is added (fro using graph functions)

SAISIR_STD **
Assesses the standard deviations of the columns, following the saisir format
function[st] = saisir_std(saisir)

SAISIR2ASCII *
Saves a saisir file into a simple ASCII format
function saisir2ascii(X, filename, separator)

Transform a saisir file into a simple .txt file and save it on diskseparator is a single character like ' ' or ';' or its ASCII code;

SAISIR_TRANSPOSE **
Transpose a data matrix
function [saisir] = saisir_transpose(saisir1)

SAISIRPLS ***
PLS regression with dim dimensions
function [plstype] = saisirpls(x, y, dim)

returns plstype.beta, plstype.beta0, plstype.predy

SDIMCROSSPCR1 **
Crossvalidation of stepwise PCR
function [pcrres] = sdimcrosspcr1(x, y, dimmax, maxrank, selected, (corr_cov))

(samples in validation are selected)
dimmax : max number of PCR dimension;
maxrank : the selection of components is limited to the first maxrank components
selected : vector of samples selected as calibration set (= 0)and verification set (= 1)

returns predy, rmsecv, corr
rmsecv is the root mean square error of crossvalidation
y must contain a single variable !
corr_cov = 1 : introduction of components in the order of r2 between y and component
corr_cov = 0 : introduction in the order of covariance between y and component

SEEKSTRING ***
Returns a vector giving the indices of string in matrix of char x in which 'str' is present
function index = seekstring(x, str1)

Cette fonction sert essentiellement à déterminer le numéro d'instruction d'une variable ou d'uneobservation dont on connaît l'identificateur.

SELECT_FROM_IDENTIFIER ***
Uses identifiers of rows for selecting samples
function [X1] = select_from_identifier(X, startpos, str)

Creates the data collection X1 which is the subset of X
the identifiers of which contain the string str, in starting position startpos

SELECT_FROM_VARIABLE **
use identifier of columns for selecting variables
function [saisir1] = select_from_variable(saisir, startpos, str)

Creates the data collection "saisir1" which is the subset of "saisir"

the names of variables of which contain the string str, in starting position startpos

SELECTCOL ****
Creates a new data matrix with the selected columns
function X1 = selectcol(X, index)

The resulting file correspond to the selected columns
index is a vector of indices (integer) or of booleans

SELECTROW ****
Creates a new data matrix with the selected rows
function [X1] = selectrow(X, index)

The resulting file correspond to the selected rows
index is a vector of indices (integer) or of booleans

SENSO_ANOVAN
2-way analysis of variance (ANOVA) on judge x product data matrices.
function res = senso_anovan(saisir, judge, product)

Performs as many N-way analyses of variance as the number of columns in X JUDGE ARE SEEN AS RANDOM EFFECT.
L'instruction *paramètre 2* = *juge*, *paramètre 3* = produits doit être respecté !!

SENSORY_PROFILE
Graphical representation of sensory profile
function[h] = sensory_profile(X, range, max_score,(title))

Graphical display of sensory profiles in a "circular" representation.
-X : matrix of data to be displayed
-range : vector of the indices of the rows to be displayed
-max_score : maximal score used in the scale
-title : (optional) title of the graph.
Warning: will not work properly with more than 15 variables
Preferably reduce the identifiers of variables to 3-4 characters

SHOW_VECTOR ***
Represents a row of a matrix as a succession identifiers
function handle = show_vector(X, nrow , (xlab), (ylab), (title))

The identifiers of the columns are plotted with X being the index of the variable and Y the actual value of the variable for the selected row nrow
xlab, ylab, title: optional xlabel, ylabel, title.

SIMPLE_REGRESSION
mono_linear regressions
function [beta beta0] = simple_regression(X, y);

y is predicted by each column i of X according to ypred = X.d(:,i) * beta.d(i) + beta0.d(i);
Thus as many models as the number of columns in X

SMART_COORD
- Smart coordinates
function res = smart_coord(x);

Multiply the columns of x by 1 or -1 in order to have the maximum absolute value positive
Useful for an easy comparison of several factorial maps (PCA or others)
Two maps rotationnaly equivalent will be identical after this modification
Utile pour orienter des cartes factorielles identiques dans le même sens.
Attention ! Cette fonction ne fait pas "suivre" logiquement les vecteurs projecteurs tels queles vecteurs propres d'une ACP

SNV **
Applies a standard normal variate correction on spectra
function [X1] = snv(X)

SNV is commonly used in spectroscopy. It basically consists in centeringand standardizing the ROWS (not the columns) of the data matrix.
This procedure may reduce the scatter deformation of spectra

SPCR **
Stepwise Principal component regression
function [spcrtype] = spcr(x, y, maxdim, (maxrank)(corr_cov))

Calculates a PCR model
returns spcrtype: pca, beta, selected_component, predy,
correlation coeff with 1 to maxdim elements, averagey
The components are introduced in the order of their regression coefficient or their covariance with y
maxdim: maximal number of components in the model
maxrank: (optional) maximal rank of the components possibly introduced in the model (the components of higher rank are not considered).
Default value: all components possibly introduced.
corr_cov : 1 introduction according to correlation coeff (corr_cov = 1, default);
or : 0 introduction according to covariance

SPLIT_AVERAGE **
Averages observations according to the identifiers
function average_type = split_average(X, startpos, endpos)

Uses the identifier for averaging
Creates as many average as different strings from startpos to endpos
Returns average_type.average and average_type.
effectif: number of obs. in each group.

SPLITROW *
split a data matrix into 2 resulting matrices
function: [X1, X2] = splitrow(X,index) Divides X into two matrices X1 and X2

The first one (X1) correspond to kept rows (according to index)
The second one is the complement
index is either a vector of indices of the rows (integers) or of Booleans.

SPLIT_STD
Computes the standard deviation according to the identifiers
function std_type = split_std(X,startpos,endpos,(option))

Use the identifier for compututing standard-deviation
Creates as many vector of standard deviation as different strings from startpos to endpos
Returns std_type.std and std_type.g: effectif in each group.
option: 0 : division by N-1; 1: division by N (default : 0)

STANDARDISE *
Divides each column of a matrix with the corresponding standard deviation
function[X1] = standardize(X2)

STATIS **
STATIS - Multiway method STATIS
function res = statis(col);

The STATIS method is described in "C.Lavit, Analyse conjointe de tableaux qualitatif,Masson pub, 1988."
Basically the method attempts to establish a factorial compromise between table havingthe same number of observations.
col is an **array of cells** containing all the 2-D data tables (SAISIR© format).
Each table must include the same observations, but not necessarily the same variables.
Let *n* be the number of observations, and *t* the number of tablesthe field of the outpout argument res are:

-RV: [1x1 struct] matrix t x t of the RV value indicating the agreement between the table (max value = 1)
-eigenval1: [1x1 struct] first eigenvalue of the RV matrix
-eigenvec1: [1x1 struct] first eigenvector of the RV matrix (t x 1) . Indicates theweight associated with each table
-Wk: {1x t cell} cell of n x n array giving the scalar products between observations
-W_compromise n x n array giving the compromise of the array WK
-eigenval2: [1x1 struct] r eigenvalues of W_compromise, with r the rank ofthe W compromise.
-observation_score: [1x1 struct] (n x r) Scores of the compromise of the observations. Canbe represented as factorial map
-trajectory: [1x1 struct] (n*t x r) Projection of each row vector of each table in the space of observation_score
-group: [1x1 struct] (n*t x 1) table giving the belonging of a givenrow_vector to a table
group is useful with the command 'carte_barycentre'

For example, a command such as "carte_barycentre(res.trajectory,2,3, res.group)" will produce the representation of the row vector of each table for the score 2 and 3. The representation shows the compromise point and its link to each vector of the tables.

- table_score: [1x1 struct] (t x r) scores of the tables obtained from diagonalisation of RV.
-table_eigenval: [1x1 struct] (r x 1) eigenvalues of RV . The first one is the same as eigenval1

STEPWISE_REGRESSION ***
Stepwise regression between x and y
function[result] = stepwise_regression(x, y, Pthres, (confidence))

Pthres is the probability threshold for entering or discarding a variable
confidence (default = 0.05) is the probability of the confidence interval for the regression coefficients
The function returns an array of cells corresponding to each step of the regression
message : gives the name of the entered or discarded variable'
res : a structure described below
intercept : constant value (beta0) of the current model
RMSE : root mean square error of the model
r2 : determination coefficient
adjusted_r2 : adjusted determination coefficient (taking into account of the dimensions
F : Fisher F value of the current modelprobF : probaility value assiciated with F
ypred : predicted y values

res : the rows indicate the variables introduced
the columns give information on the corresponding regression coefficients:
regression coefficients
Lower confidence limit
Higher confidence limit
Std of regression coeff.
t value of reg. coeff.
Prob. of reg. coef.
Rank of variables

STRING2SAISIR *
creation of a saisir file from a string table (first column = name)
function [saisir] = string2saisir(data)

Cette fonction n'a pas d'utilisation directe.

STRING2TEXT *
save a vector of string in a .txt format
function string2text(str, filename)

SUBMAP *
Represents only the observations whose indentifiers contains the string xstring
function submap(X, col1, col2, xstring, labcol1, labcol2, titre, charsize, marg)

The scale of the COMPLETE map is used.
Utile lorsque l'on veut faire des représentations factorielles d'une partie des observations.

SUBTRACT_VARIABLE *
Subtracts a given variable to all the others
function [saisir] = subtract_variable(saisir1, ncol)

Subtract the variable of index ncol to each other variables of the observations

SURFACE1 *
Represent a surface in three dimensions
function [zmin, zmax] = surface1(saisir)

SURFACE_STD *
Divides each row by the sum of the corresponding columns
function [X1] = surface_std(X)

TCURVE **
Representation of a column of a given matrix
function tcurve(X, ncol, (xlabel),(ylabel),(title))

TCURVES
Represents several columns of a matrix as curves
function tcurves(X, select_col, (xlabel),(ylabel),(title))

select_col gives the indices of the selected columns

TRAJECTORY_CURVE
Plots coloured XYcurves
function handle = trajectory_curve(x, col1, col2, startpos, endpos);

The function represents the columns col1 and col2 as curves (ark)
The observations which have the same strings in their identifiers are joined.The points are joined consecutively according to their order (rank) in x.

Input arguments:
X : saisir matrix
col1, col2 : columns of x to be represented (integer number).
startpos, endpos : positions in identifiers indicating which identifiers are to be joined.

exemple of use : time series
identifiers of rows (x.i) like A01; A02; A03... A100; B01 ... B100; C01 ...with 1 ... 100 indicating times, and A B .. observations varying with time
Command:
trajectory_curve(x,1,2,1,1);
Join the point labelled 'A' together; the ones labelled 'B' ... and so on

XY_PLOT

Biplot of one column of X versus one column of Y
function handle = xy_plot(X, xcol, X, ycol,start_pos,end_pos);

X, Y : saisir files
xcol, ycol : rank number of the columns to be plotted

If start_pos and end_pos defined: plot colored according to the characters of the identifiersof rows in position start_pos:end_pos.

5 Liste thématique des fonctions disponibles

Seuls les noms des fonctions et un court descriptif sont donnés ci-dessous. Une information plus complète peut-être obtenue en consultant le dictionnaire (paragraphe 4) ou par la commande help de MATLAB, suivi du nom de la fonction.
On retrouvera cette liste en tapant « help saisir » sous MATLAB.

5.1 Chargement et sauvegarde des fichiers

EXCEL2SAISIR ****
Reads an excel file

EXCEL2BAG *
-read an excel file and creates the corresponding text bag (array of caracter)

ISI2SAISIR ** ISI2SAISIR1**ISI2SAISIR2**ISI2SAISIR3**
Load NIR data obtained with ISI software from disk

MATRIX2SAISIR***
Transform a MATLAB matrix in a saisir structure

READIDENT **
Loads a file of strings

SAISIR_CHECK ****
Check if the data respect the saisir stucture

SAISIR2EXCEL ****
Saves a saisir file in a format compatible with Excel

SAISIR2ASCII *
Saves a saisir file into a simple ASCII format

STRING2SAISIR *
creation of a saisir file from a string table (first column = name)

STRING2TEXT *
save a vector of string in a .txt format

5.2 Manipulations élémentaires des données

APPENDCOL ****
Merge two files according to columns

APPENDCOL1 ****
Merge an arbitrary number of files according to columns

APPENDROW****
Merge two files according to rows

APPENDROW1****
Merge an arbitrary number of files according to rows

CHANGE_NAME
Change the name of the observations of file X

CREATE_GROUP**
Create a vector of number indicating groups from identifiers

CREATE_GROUP1***
Create a vector of number indicating groups from identifiers

DELETECOL ****
Deletes columns

DELETEROW ****
Deletes rows

DISTRIBUTE_DATA
distribute the values of model according to row_identifier

ELIMINATE_NAN1 ***
Suppresses "not a number" data in a saisir structure

MATRIX2SAISIR***
Transform a MATLAB matrix in a saisir structure

RANDOM_SELECT***
Random selection of samples

RANDOM_SPLITROW *
Random selection of samples

RANDOMIZE *
Build a file of randomly attributed rows

REORDER ****
Reorder the data of files s1 and s2 according to their identifiers

SAISIR©_TRANSPOSE **
Transposes a data matrix

SEEKSTRING ***
Returns a vector giving the indices of string in matrix of char x in which 'str' is present

SELECT_FROM_IDENTIFIER ***
Uses identifiers of rows for selecting samples

SELECT_FROM_VARIABLE **
use identifier of columns for selecting variables

SELECTCOL ****
Creates a new data matrix with the selected columns

SELECTROW ****
Creates a new data matrix with the selected rows

SPLIT_AVERAGE **
Averages observations according to the identifiers

SPLITROW *
split a data matrix into 2 resulting matrices

5.3 Transformation élémentaires des données

CENTER *
subtracts the average row to each row

CORRECT_BASELINE*
simple linear baseline correction, using intensity

DERIVATIVE2
Simple computation of second derivative

SAISIR_DERIVATIVE
n-th order derivative using the Savitzky-Golay coefficients

DISTRIBUTE_DATA
distribute the values of model according to row_identifier

GROUP_CENTERING
Center data according to groups

MSC*
Applies a multiplicative scatter correction on spectra

NORM_COL**
Divides each column by the corresponding standard deviation

REDUCE_NVARIABLE **
Reduces variable number with averaging

ROW_CENTER
Subtracts the average column to each column

SAISIR_SORT *
- sorts the rows of s according to the values in a column

SAISIR_TRANSPOSE **
Transposes a data matrix

SMART_COORD
- Smart coordinates

SNV **
Applies a standard normal variate correction on spectra

SPLIT_AVERAGE **
Averages observations according to the identifiers

SPLIT_STD
Computes the standard deviation according to the identifiers

STANDARDISE *
Divides each column of a matrix with the corresponding standard deviation

SUBTRACT_VARIABLE *
Subtracts a given variable to all the others

SURFACE_STD *
Divides each row by the sum of the corresponding columns

5.4 Représentations graphiques

BROWSE***
Browses a series of curves

CA MAP
Représentation factorielle de l'analyse des correspondances (lignes et colonnes de la matrice)

CARTE****
Graph of map of data using identifiers as names

CARTE3D ***
Draw a 3D map

CARTE3D_COULEUR1 ***
Draw a coloried 3D map

BARYCENTER_MAP**
Graph of map showing the barycentre of qualitative groups

COLORED_MAP1****
colored map : using a portion of the identifiers as labels

COLORED_MAP2****
Colored map : using a portion of the identifiers as labels

COLORED_MAP4****
Colored map according to given choice

SYMBOL_MAP ****
Map with symbols : using a portion of the identifiers for

COL_MAP1
Colored map : using a portion of the identifiers as labels

COLOURED_CURVES
- displays curves coloured according to groups

CORRELATION_CIRCLE **
Assesses and displays the correlation circle after PCA

CORRELATION_PLOT**
- Draw a correlation between scores and tables

CURVE****
Represent a row of a matrix as a curve

CURVES****
Represents several rows of a matrix as curves

ELLIPSE_MAP
Plot the ellipse confidence interval of groups

FIND_PEAKS**
Represents a curve showing its peaks

IMAGE1 **
Represent a surface in false color

LABELLED_HIST ***
Draws an histogram in which each name is considered as a colored label

LIST
Lists rows (only with a small number of columns)

MIR_STYLE *
Changes the sign of the variables of MIR spectra

PLOTMATRIX1
-biplots of columns of matrices with colors

SHOW_VECTOR ***
Represents a row of a matrix as a succession identifiers

SUBMAP *
Represents only the observations whose indentifiers contains the string xstring

SURFACE1 *
Represent a surface in three dimensions

TCURVE **
Representation of a column of a given matrix

TCURVES

Represents several columns of a matrix as curves

TRAJECTORY_CURVE
Plots coloured XYcurves

XY_PLOT**

Biplot of one column of X versus one column of Y

5.5 Méthodes statistiques

5.5.1 Analyse de variance et statistiques élémentaires

ANAVAR1****
One way analysis of variance on spectral data

ANOVAN1 ****
N-way analysis of variance (ANOVA) on data matrices.

CONTINGENCY_KHI2**
compute khi2 stats on a contingency table

CONTINGENCY_TABLE**
Compute a contingency table

CORMAP***
Assesses the correlation between two tables

COVMAP **
Assesses the covariances between two tables

DISTANCE **
Assesses the Euclidian distances between the two tables

DISTANCE_STRESS *
Estimates the stress (default of the reconstruction of distances)

SAISIR_LINKAGE *
Assesses a simple linkage vector from a matrix of distance

SAISIR_MEAN **
Assesses the mean of the columns, following the saisir format

SAISIR_STD **
Assesses the standard deviations of the columns, following the saisir format

SENSO_ANOVAN
2-way analysis of variance (ANOVA) on judge x product data matrices.

5.5.2 ACP

APPLYPCA**
Assess the scores of supplementary observations

CHANGE_SIGN *
Changes the sign of a component and of associated eigenvector

CORRELATION_CIRCLE **
Assesses and displays the correlation circle after PCA

COVARIANCE_PCA**
-assesses principal component analysis when knowing the covariance (of variables)

CUMULATE_COVARIANCE *
calculate covariance on huge data set

MULTIWAY_PCA **
Multi way principal component analysis

NORMED_PCA****
PCA with normalisation of data

PCA ****
Assesses principal component analysis on raw data

PCARECONSTRUCT *
Reconstructs original X data from PCA and a file of score

PCA_STAT
- Gives some complementary statistiques on PCA observations

SMART_COORD
- Smart coordinates

5.5.3 Régressions

APPLY_MULTIPLE_REGRESSION
Applies multiple_regression on "unknown" data

APPLY_RIDGE_REGRESSION **
Apply ridge regression on "unknown data"

APPLY_STEPWISE_REGRESSION**
Apply stepwise_regression on "unknown" data

APPLYLR1**
Apply basic latent root model on saisir data x

APPLYPCR**
Assesses a basic PCR on data

APPLYPLS**
Applies a pls model on an unknown data set

APPLYSPCR*
Applies a stepwise PCR

BASIC_PLS**
Basic pls with keeping loadings and scores

BASIC_PLS2
Basic pls2 with keeping loadings and scores

CROSS_RIDGE_REGRESSION**
Ridge regression with crossvalidation

CROSSVAL_MULTIPLE_REGRESSION
crossvalidation of multiple regression.

CROSSVALPLS1a **
crossvalidation of pls with ndim dimensions.

DIMCROSS_STEPWISE_REGRESSION **
Test models obtained from stepwise regression

DIMCROSSLR1a **
Cross validation of latent root model LR1

DIMCROSSPCR1**
Crossvalidation of PCR (samples in validation are selected)

DIMCROSSPLS1a**
crossvalidation of PLS (changing the dimensions)

LEAVE_ONE_OUT_PLS2
- PLS2 with leave_one out validation

LR1
Assesses a Latent root 1 model

PCA_CROSS_RIDGE_REGRESSION **
PCA ridge regression with crossvalidation

PCA_RIDGE_REGRESSION **
Assess a basic ridge regression after PCA

PCR***
Assesses a basic model of PCR (components introduced in the order of eigenvalues

PCR1 **
Assess a basic model of PCR (components introduced in the order of eigenvalues

QUICKPLS
Quick PLS regression from 1 to ndim dimensions

REGRESSION_SCORE *
build a factorial space for regression

RIDGE_REGRESSION ***
Assesses a basic ridge regression

SAISIRPLS ***
PLS regression with dim dimensions

SDIMCROSSPCR1 **
Crossvalidation of stepwisePCR

SIMPLE_REGRESSION
Mono_linear regressions

SPCR **
Stepwise Principal component regression

STEPWISE_REGRESSION ***
Stepwise regression between x and y

5.5.4 Discriminations

APPLY_QUADDIS
Application of Quadratic discriminant analysis

APPLYFDA1 **
Application of factorial discriminant analysis on PCA scores

APPLYPLSDA *
Apply pls discriminant analysis after model assessment using plsda

BAG2GROUP
use the identifiers in bags to create groups

BMAHA **
Assess a simple discriminant analysis

CREATE_GROUP**
Create a vector of number indicating groups from identifiers

CREATE_GROUP1***
Create a vector of number indicating groups from identifiers

CROSSFDA1**
crossvalidation on discrimination according to fda1 (directly on data)

CROSSMAHA**
Crossvalidation on discrimination according to maha1 (*directly on data*)

CROSSMAHA1**
Cross validation (random) of discriminant analysis *applied after PCA*

CROSSPLSDA **
Cross-validation on PLS discriminant analysis

CROSSVAL_QUADDIS
crossvalidation of quadratic dis. analysis

FDA1 ***
Stepwise factorial discriminant analysis on PCA scores

FDA2 ***
Stepwise factorial discriminant analysis on PCA scores with verification

MAHA**
Simple discriminant analysis forward introducing variables no validation samples

MAHA1**
Forward discriminant analysis DIRECTLY ON DATA with validation samples

MAHA3**
Simple discriminant analysis forward introducing variables no validation samples

MAHA4**
Simple discriminant analysis forward introducing variables no validation samples

MAHA5**
Simple discriminant analysis forward introducing variables with validation samples

MAHA6**
Simple discriminant analysis forward introducing variables with validation samples

PLSDA ***
Assesses pls discriminant analysis following the saisir format

QUADDIS
Quadratic discriminant analysis

5.5.5 Méthodes factorielles diverses

accpsNew
Finding common dimensions in multitable data (saisir format)

APPLY_NUEE *
apply Nuee dynamique (KCmeans)

CA ***
Analyse des correspondances

COMDIM **
Finding common dimensions in multitable data (saisir format)

D2_FACTORIAL_MAP ***
Assesses a factorial map from a table of *squared* distances

MFA**
Multiple factor analysis

MULTIWAY_PCA **
Multi way principal component analysis

NUEE **
Nuee dynamique (Kcmeans)

PCA_CANO **
Generalized canonical analysis after PCAs on each table

STATIS **
Factorial processing of multitable data using the STATIS method

5.6 Divers

CHANGE_NAME
- change the name of the observations of file X

CHECK_NAME*
Controls if some strings are strictly identical in a string array

SAISIR_CHECK
Check if the data respect the saisir stucture

DENDRO **
Dendrogram using euclidian metric and Ward linkage

DENDRO1 **
Dendrogram using euclidian metric and Ward linkage

DURBIN_WATSON *
Assess the Durbin Watson value on the column of a table1
function [saisir] = durbin_watson(X)

FIND_INDEX
- find the index corresponding to the closest value in variable names

FIND_PEAKS**
Represents a curve showing its peaks

FORMAT1 **
-format input arguments for display

LIST**
Lists rows (only with a small number of columns)

MIR_STYLE *
Changes the sign of the variables of MIR spectra

MSC*
Applies a multiplicative scatter correction on spectra

NUM2STR1 *
Justified num2str

NUEE **
Nuee dynamique (Kcmeans)

REPEAT_STRING
build a matrix of char by repeating a string

SAISIR_LINKAGE *
Assesses a simple linkage vector from a matrix of distance

SEEKSTRING ***

Returns a vector giving the indices of string in matrix of char x in which 'str' is present

Recommandations au développeur

(Ces règles ne sont que des suggestions)

Il peut être utile de modifier ou de développer des fonctions spécifiques utilisables dans l'environnement SAISIR©.

Voici quelques règles qui devraient faciliter la portabilité des fonctions, et permettre d'enrichir progressivement l'environnement disponible.

L'environnement SAISIR© ne comprend pas de script mais seulement des fonctions, de la forme
function [result, result1] = name(param1,param2, ...)

Nom des fonctions

Les fonctions doivent être écrites en anglais-américain, aussi bien en ce qui concerne le nom de la fonction que le code Matlab et les remarques.

Le nom d'une nouvelle fonction doit être forgé, si possible, selon la logique de MATLAB, avec un emploi systématique des mêmes lexèmes lorsqu'ils existent (par exemple : str pour *string*, num pour *number*, nan pour *not a number* etc.).

Instruction des paramètres

Les paramètres d'entrée sont donnés dans l'instruction de leur importance, avec en premier les matrices sur lesquelles porte la fonction, suivis des paramètres de la fonction. Les matrices d'entrée, doivent (sauf cas exceptionnel) être elles-mêmes formées selon la logique de SAISIR©, avec les trois champs .d, .i, .v .

Les paramètres optionnels sont donnés en dernier.

Remarques d'entête

Les premières lignes de la fonction doivent être des remarques qui peuvent être consultées parla fonction help.
La première ligne de remarque (qui est lue par la fonction help <directory>) doit impérativement redonner le nom de la fonction, suivi d'espaces, suivi d'une brève définition tenant sur une ligne. Par exemple, la première ligne de remarque de la fonction pca est :

```
%pca                    - Principal component analysis on raw data
```

Cette ligne est impérativement suivie de la recopie de l'entête de la fonction. Par exemple :

```
%function [pcatype] = pca(x, info)
```

Si la fonction comprend des paramètres optionnels, ils sont indiqués entre parenthèses. Par exemple :

```
%function [x1] = norm_col(x,(mode))
%mode (optional): 0 or 1 division by  n or by n-1 respectively
%default : 0
```

Si il y a des paramètres optionnels, leur valeur par défaut doit être donnée dans les remarques d'entête.
Le reste des remarques d'entête donne la signification des arguments d'entrée, puis celles des arguments de sortie.

A partir de la version 7 de Matlab, le nom de la fonction doit être identique au nom du fichier « .m » de la fonction en respectant les lettres majuscules et minuscules. Ainsi, une fonction appelée demo, sera bien reconnue si le fichier s'appelle DeMo.m par exemple, mais conduiraà l'affichage d'un warning Matlab « inexact Matching ». Pour cette raison, nous conseillons d'écrire tous les noms de fonctions en minuscules, avec correspondance exacte du nom du fichier.

De plus la première ligne, qui est donnée par la commande Matlab help <directory> doit êtreécrite de la manière suivante : par exemple
%demo[espace][espace]-[espace]Fonction de démonstration
L'enchainement nom de fonction, espace(s), tiret , espace , texte permet que la fonction soit reconnue par Matlab dans le help, qui est alors interactif et prend la forme d'un « lien hypertexte ».

Arguments de sortie

Lorsque les arguments de sortie sont des vecteurs ou des matrices, ils doivent impérativement respecter la logique de SAISIR© avec les trois champs. Par exemple, une fonction matsum qui fait la somme de deux matrices doit être écrite de la manière suivante :

```
function [x3] = matsum(x1,x2)
%MATSUM                    - sum of two matrices
%function [x3] = matsum(x1,x2)
% Returns the matrix sum x1 + x2

[n1,p1] = size(x1.d);
[n2,p2] = size(x2.d);

if((n1~ = n2)|(p1~ = p2)) error('Irrelevant dimensions')
end;

x3.d = x1.d+x2.d;x3.i = x1.i; x3.v = x1.v;
```

La fonction vérifie que les dimensions sont compatibles, mais, pour des raisons de rapidité, nevérifie pas la cohérence complète des identificateurs des individus ou des variables.

Lorsque une fonction retourne de nombreuses informations, il est souhaitable de regrouper les arguments de sortie dans un petit nombre de structures (en général, une seule !) dont chaque champ contient une information au format de SAISIR©.
Par exemple, la fonction PCA (analyse en composantes principales) n'a qu'un argument de sortie qui est une structure. On aurait par exemple :
p = pca(x) ;p =

score: [1x1 struct] eigenvec: [1x1 struct]eigenval: [1x1 struct] average: [1x1 struct]

Chaque champ est une structure SAISIR©. Lorsque les matrices de sortie sont créées par la fonction (comme les coordonnées factorielles de l'ACP, dans le champ score) le développeurdoit se soucier de construire lui-même les identificateurs de variables et d'individus. On aainsi :

```
>>p.score.v

A1    81.5%
A2    16.9%
A3     0.6%
A4     0.3%
A5     0.2%

>>size(p.score.v)5 11
```

Dans l'exemple, p.score.v est une matrice de caractère, dont la deuxième ligne est, par exemple : « A2 16.9% » (11 caractères).

Organisation des répertoires

Il est préférable de ne pas modifier une fonction de l'environnement SAISIR© en lui gardantson nom d'origine. Les nouvelles fonctions créées par le développeur doivent être sauvegardée tout d'abord (pour test) dans un répertoire, qui fait partie du chemin d'accès (*path*) de MATLAB. Lorsque ces fonctions sont validées, elles peuvent être placées dans le répertoire SAISIR©, si elles ont un intérêt général.

Transmission des fonctions développées et signalement des bogues

Les fonctions d'intérêt général, respectant le format SAISIR© et développées par les utilisateurs peuvent être envoyées par e-mail à christophe.cordella@fsaa.ulaval.ca.
Il est alors utile que la fonction comprenne une remarque indiquant les coordonnées de l'auteur. L'utilisateur faisant cette démarche (bénéfique) admet implicitement que la fonction peut alors être diffusée librement, sans redevance ou droit de propriété. Dans les articles et les communications, les utilisateurs sont tenus de citer les auteurs des fonctions originales.

Quelques lexèmes des fonctions SAISIR©

(A utiliser dans les noms et les arguments des fonctions) 2 : 'to' indique une transformation (par exemple num2str)

apply : appliquer (un modèle construit ailleurs)
append : concaténer
bag : structure de type saisir dans laquelle la partie .d est formée de matrice de chaine decaractère
col : numéro de colonne ou collection de tableaux
delete : retirer
dim : dimension
group : groupe qualitatif (en général : vecteur SAISIR© de nombre entiers)
load : charger
map : carte
range : vecteur (Matlab) de valeurs qui désignent un choix
read : lire
row : ligne d'un tableau
startpos endpos : désigne le début et la fin d'une zone à sélectionner
saisir : nom d'un fichier saisir
sel : vecteur de sélection
x : fichier saisir

6 Annexe : Pourquoi ça plante ?

Vous pouvez signaler des bogues ou erreurs à : Christophe.Cordella@fsaa.ulaval.ca

Cette annexe tente de donner des idées pour rechercher la cause d'un dysfonctionnement de SAISIR© dans l'environnement MATLAB

1) Aucune des fonctions de SAISIR© n'est reconnue

Exemple :
Je tente d'exécuter la fonction <xxxx>, et je reçois l'avertissement Matlab
?? Undefined function or variable 'xxxx'.
Diagnostic :
Tapez help saisir
Si la réponse est
?? Undefined function or variable 'saisir'.
Cela veut dire que le répertoire de SAISIR© n'est pas dans le chemin des répertoires de Matlab.

Dépannage :
Aller dans le menu File ; set path ; add folder de Matlab, et ajouter le répertoire SAISIR© qui doit exister et contenir les fonctions de SAISIR©. Demander à ce que cette modification soit conservée d'une session à l'autre.

2) Problème de format

Exemple :
J'ai un fichier X , je tape X1 = pca(X,) (acp sur X) et je reçois l'avertissement Matlab :
> x1 = pca(x)
??? Reference to non-existent field 'd'.Error in = = > c:\matlab\saisir\pca.m
On line 17 = = > [n,p] = size(saisir.d);
Diagnostic :

Utilisez l'instruction saisir_check pour identifier l'erreur de format
>> saisir_check(x)

FATAL ERROR: the field '.d'does not exist. See the manual for more information, or/and function MATRIX2SAISIR
The manual is in the PDF file 'Manuel SAISIR.PDF'

Dépannage :
Tenter d'examiner les champs qui forment **X**. Si **X** est une matrice Matlab (et non une structure SAISIR©), on peut rapidement le mettre au format par la commande X = matrix2saisir(X). Dans ce cas, les identificateurs X.i et X.v sont simplement les numéros des indices. C'est rustique mais ça marche.

3) Problème de chargement de fichier

Ces problèmes sont (hélas) les plus difficiles à résoudre.

3.1 Chargement divers

Lorsque l'on a, par une commande Matlab ou par un instruction « copier coller », réussi à charger une matrice X Matlab, on peut la transformer en fichier SAISIR© par l'instruction X = matrix2saisir(X).
Pour avoir des identificateurs spécifiques, on peut écrire des instructions du type :
donnee.d = X ; donnee.i = nom_ligne ; donnee.v = nom_colonne ;
Dans cet exemple, les noms des lignes ou des colonnes sont crées en dehors de l'environnement SAISIR©.
Attention ! les champs .i et .v sont des matrices de caractères et non des cellules.
On peut éventuellement utiliser l'instruction char pour convertir une cellule en chaine de caractère.Par exemple :
donnee.i = char(nom_ligne);
Les données provenant d'appareils de mesure (chromatographe, spectromètres …) demandenten général que l'utilisateur écrive des fonctions spécifiques ! Voir l'instruction Matlab dlmread.

4.1 difficultés associées à certaines commandes saisir

D'une manière générale, l'instruction saisir_check indique si le format des matrices SAISIR© est correct. Les « warnings » (avertissements) de cette fonction doivent être examinés avec attention.
Par exemple, la présence de données manquantes n'est généralement pas tolérée par les commandes de SAISIR©. Seules les difficultés spécifiques aux fonctions sont présentées ici.

anovan1
Il faut vérifier dans le champ singular de l'argument de sortie si les données ne sont pas singulières, c'est à dire qu'il y a assez de répétions pour utiliser le modèle avec les interactions demandées. Si il y a singularité, il faut réduire le degré des interactions à tester. Il s'agit du deuxième paramètre d'entrée (model).

appendcol, appendcol1,appendrow,appendrow1
Confusion entre les lignes et les colonnes.

Nombre de lignes ou de colonnes non identiques dans les arguments. Matrice totalement vide !

comdim
Les collections de signaux sont dans un vecteur de cellule (accolade {}) et non parenthèse ().
Les tableaux regroupés doivent avoir le même nombre de ligne

cormap
En changeant l'instruction des arguments d'entrée, on change les variables qui sont placées enlignes ou en colonnes. Il faut en général choisir l'instruction le plus pratique

create_group1
L'instruction des groupes ne dépend pas de l'instruction alphabétique ou numérique des codes. Parexemple, les codes '1 ', '2', '3' ne sont pas forcément attachés aux groupes 1, 2, 3.

d2_factorial_map
Un paramètre d'entrée est bien la distance au carré.

deletecol, deleterow
Confusion entre lignes et colonnes

excel2saisir
excel2saisir(filename)
filename est bien une chaine de caractère (entre ' '). Le fichier a charger doit être un fichier avec l'extension .csv , selon le format impérativement demandé. (voir le détail dans la liste des fonctions et dans le début de ce manuel).

isi2saisir isi2saisir1isi2saisir2isi2saisir3isi2saisir4
Les fabriquants d'appareils on tendance à changer de format sans prévenir !Hélas, il faut réétudier le chargement au cas par cas.
Un bug connu : absorbances négatives, que isi2saisir4 sait traiter.

labelled_hist
Ne marche que pour des tableaux ayant assez peu de lignes (moins de 500) Il faut tester des valeurs de nclass et charsize pour avoir un graphique lisible.

list
Ne fonctionne que sur de très petits tableaux. Sinon, il faut sauvegarder les données par saisir2excel et les examiner sous Excel.

msc
Si un spectre a un écart type nul, la ligne sera formée de NaN.

norm_col
Résultats incertains si une colonne a un écart-type nul

normed_pca
Résultats incertains si une colonne a un écart-type nul

nuee
Le nombre de groupes en résultats peut-être inférieur à celui demandé, si des groupes se sont trouvés être vides au cours d'une itération

pca
Plante si le fichier contient des valeurs NaN.

plotmatrix1
Ne donne des résultats lisibles qu'avec des matrices ayant peu de lignes et de colonnes

random_select

Retourne un vecteur MATLAB, et non une structure SAISIR©.

readexcel
Sauf exception, ne pas utiliser cette commande directement, passer par excel2saisir.

reorder
Renvoie une erreur si l'une des matrices argument d'entrée contient des identificateurs de lignes identiques. Si c'est le cas, il faut retirer les observations ayant le même identificateurs. Si la moyenne des observations de même nom est une solution acceptable, on peut sans sortir par l'instruction split_average.

ridge_regression
krange est un vecteur MATLAB et non une structure saisir.
krange est difficile à choisir. Voir pca_ridge_regression.

saisir2excel
Le premier argument est une matrice SAISIR©. Le deuxième est une chaîne de caractère.
Le résultat est un fichier « .CSV ». Pour le lire correctement, il faut le charger depuis Excel, et non cliquer sur son icône à partir de l'exporateur windows.

saisir_check
Les *warnings* sont à considérer avec attention ! Les programmes de régression ou d'analyse discriminante ne supportent pas les colonnes d'écart-type nul. La plupart des fonctions de SAISIR© refuse les données manquantes.

show_vector
Donne un graphique illisible si les identificateurs des variables sont très longs, ou qu'il y atrop de variables. On peut toujours faire des graphiques partiels en découpant (par selectcol) le vecteur à examiner.

split_average
Les moyennes sont dans le champ average de la sortie de cette fonction.

stepwise_regression
La fonction retourne un argument de sortie qui contient un champ res. Ce champ est lui même un vecteur de cellules (*array of cells*) . Chacune des cellules correspond à un pas de l'algorithme stepwise. De plus le dernier élément de res est parfois vide, c'est à dire que l'introduction des variables s'est arrêtée à l'étape précédente.

xcomdim
Pas d'utilisation directe, passer par comdim.