AgroParisTech /

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

# Analyses multivariées

Eric Marcon

15 février 2024

AgroParisTech /

Analyses multivariées

Eric Marcon

#### Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

### Généralités



# **Objectifs**

Analyses multivariées

Eric Marcon

#### Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Comprendre les principes des méthodes d'ordination, aussi appelées analyses multivariées.

Connaître les principales méthodes et savoir les appliquer.



### Pour quoi faire?

Analyses multivariées

Eric Marcon

#### Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Discipline cible : écologie des communautés.

Problématique : analyse des effets de nombreux facteurs sur de nombreuses espèces, sans modèle (ou presque).

Méthode : réduction de dimensionnalité.



## Typologie des méthodes

#### Analyses multivariées

Eric Marcon

#### Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

#### Statistiques multivariées :

- Classification (automatique).
- Ordination : arrangement d'espèces le long de gradients
  - Analyse directe.
  - Analyse indirecte.



### Forme des données

Analyses multivariées

Eric Marcon

#### Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

#### Tableaux de données :

- Lignes = échantillons (sites).
- Colonnes = présence / absence ou abondance d'espèces.

Pour les méthodes d'analyse directe, colonnes supplémentaires = facteurs environnementaux (quantitatifs ou qualitatifs).



### **Particularités**

#### Analyses multivariées

#### Eric Marcon

#### Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Grand nombre de dimensions dans les données brutes, mais hypothèse que les relations importantes se résument à un nombre réduit (2 ou 3 dimensions dans l'idéal).

Données avec de nombreux zéros, très bruitées et redondantes : peu adaptées à des modèles classiques (du type présence de l'espèce  $s\sim$  environnement).

Méthodes exploratoires seulement.

AgroParisTech /

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Réponse linéaire, analyse indirecte



# Analyse en Composantes Principales

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralité

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Pearson, K. (1901) On lines and planes of closest fit to systems of points in space. *Philosophical Magazine* 2:559-572. Anglais: PCA, Français: ACP.

Objectif : représenter un tableau de données multidimensionnel par réduction du nombre de dimensions.

Modèle : Réponse linéaire de la présence des espèces aux gradients.



### ACP: Méthode

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Rotation du nuage de points original (espèces dans l'espace des sites). Les données peuvent être centrées et réduites.

Le premier axe représente la variabilité maximale.

Les axes suivants sont orthogonaux et représentent le maximum de variabilité résiduelle.

### AgroParisTech **Exemple**

Analyses multivariées

Fric Marcon

Généralités

Réponse linéaire. analyse indirecte

Réponse non linéaire. analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

#### Simulation de données corrélés en 3 dimensions

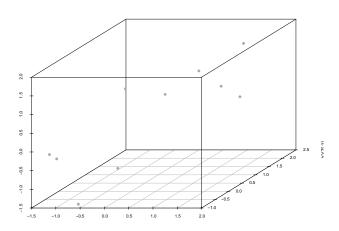
```
library(MASS) # Attention à MASS::select()
# Matrice de covariance
Sigma <- matrix(</pre>
  c(
    1, 0.8, 0.6,
    0.8, 1, 0.8,
    0.6, 0.8, 1
  ),
  nrow = 3
# Simulation de X et Y
XYZ \leftarrow mvrnorm(10, mu = rep(0, 3), Sigma = Sigma)
```

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe



### Premier axe

Analyses multivariées

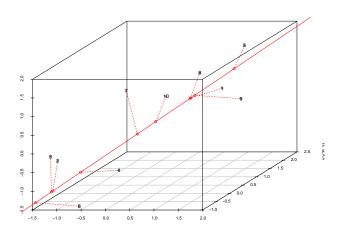
Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe



### Deuxième axe

Analyses multivariées

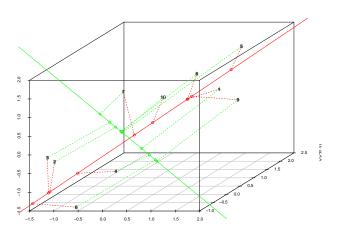
Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe



Analyses multivariées

Fric Marcon

Généralités

Réponse linéaire. analyse indirecte

Réponse non linéaire. analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

stats::prcomp() ou ade4::dudi.pca() ou

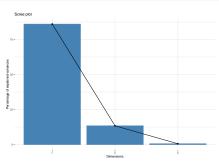
FactoMineR::PCA(). Visualisation avec factoextra.

# ACP

XYZ\_pca <- prcomp(XYZ, scale = TRUE)</pre>

library("factoextra")

fviz\_eig(XYZ\_pca)



Affichage des valeurs propres.

Analyses multivariées

Fric Marcon

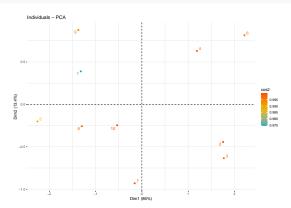
Généralités

Réponse linéaire. analyse indirecte

Réponse non linéaire. analyse indirecte

Analyse directe

```
fviz_pca_ind(
 XYZ_pca,
  col.ind = "cos2", # Color by the quality of representation
  gradient.cols = c("#00AFBB", "#E7B800", "#FC4E07"),
 repel = TRUE  # Avoid text overlapping
```



Analyses multivariées

Fric Marcon

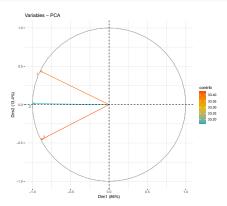
Généralités

Réponse linéaire. analyse indirecte

Réponse non linéaire. analyse indirecte

Analyse directe

```
fviz_pca_var(
 XYZ_pca,
  col.var = "contrib", # Color by contributions to the PC
  gradient.cols = c("#00AFBB", "#E7B800", "#FC4E07"),
 repel = TRUE # Avoid text overlapping
```



```
Analyses
multivariées
```

Eric Marcon

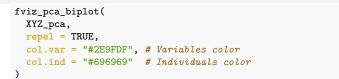
Généralités

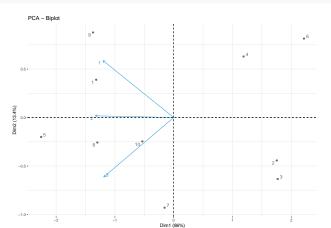
#### Réponse linéaire. analyse

indirecte Réponse non linéaire.

analyse indirecte

Analyse directe







# Analyse des Correspondances Multiples

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralité

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Tenenhaus, M. & Young, F.W. (1985) An analysis and synthesis of multiple correspondence analysis, optimal scaling, dual scaling, homogeneity analysis ans other methods for quantifying categorical multivariate data. *Psychometrika*, 50:91-119.

Anglais: MCA, Français: ACM



## ACM: objectif

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Identique à l'ACP mais les données sont toutes qualitatives (factors dans R) et les catégories ne sont pas ordonnées.

Chaque variable est éclatée en autant de variables que de modalités.

ade4::dudi.acm().



### Analyse de Hill-Smith

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Hill, M. O., and A. J. E. Smith. 1976. Principal component analysis of taxonomic data with multi-state discrete characters. *Taxon*, 25:249-255.

Objectif : traiter des données mixtes quantitatives et qualitatives ordonnées ou non.

ade4::dudi.hillsmith().



# Analyse en Coordonnées Principales

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Gower, J. C. (1966) Some distance properties of latent root and vector methods used in multivariate analysis. *Biometrika*, 53: 325–338.

Anglais: PCoA

Objectif : identique à l'ACP, mais on dispose d'une matrice de distances entre relevés, pas de coordonnées.



### PCoA: Méthode

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Si la matrice de distance est euclidienne, les relevés sont représentés dans l'espace, une ACP suit pour les projections.

Pas de biplot : seules les distances entre relevés sont connues.

ade4::dudi.pco().

AgroParisTech /

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Réponse non linéaire, analyse indirecte



# Analyse Factorielle des Correspondances

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Hirschfeld, H.O. (1935) "A connection between correlation and contingency", *Proc. Cambridge Philosophical Society*, 31: 520–524

Anglais: CA, Français: AFC.

Objectif : identique à l'ACP, mais la métrique est différente.

ade4::dudi.coa().



## AFC: moyennes réciproques

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralité

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

On suppose que la réponse des espèces aux gradients est unimodale (et non linéaire).

Reciprocal Averaging Algorithm; Intuition en 1D:

- le score du site j représente sa position sur le gradient environnemental. L'optimum environnemental pour l'espèce i est la moyenne des scores des sites pondérée par la fréquence de l'espèce.
- ullet Raisonnement symétrique pour le score de l'espèce j : sa position sur le gradient est la moyenne pondérée des scores des sites où elle est présente.



## AFC: moyennes réciproques

#### Analyses multivariées

#### Eric Marcon

#### Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

#### Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

En réalité, la niche est en n-1 dimensions, les espèces sont au centre de gravité des sites et inversement.

Les sites proches ont les mêmes "caractéristiques environnementales". Les espèces proches "occupent la même niche".

Une espèce est proche d'un site si les caractéristiques du site correspondent aux préférences de l'espèce.

Ne s'applique qu'à des données de comptage.

# AgroParisTech AFC: métrique

#### Analyses multivariées

#### Fric Marcon

Réponse linéaire. analyse indirecte

Réponse non linéaire. analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Méthode équivalente : Benzécri, J.P. (1973) L'analyse des données. Il L'analyse des correspondances, Bordas, Paris.

Chaque donnée  $y_{i,j}$  de la matrice de départ est transformée en fréquence :  $p_{i,j} = y_{i,j}/y_{++}$ 

Les coordonnées des points sont  $p_{i,j} - p_{i+}p_{+j}$ 

L'inertie totale est la statistique du  $\chi^2$  fois  $y_{++}$  : l'écart à l'indépendance des lignes et des colonnes. L'inertie d'un point est sa contribution à cette statistique.

La projection capture le maximum d'inertie.



Analyses multivariées

Fric Marcon

Généralités

Réponse linéaire. analyse indirecte

Réponse non linéaire. analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Le jeu de données dune du package vegan contient des données d'abondance de 30 espèces végétales sur 20 sites.

```
library("vegan")
data(dune)
library("FactoMineR")
dune_ca <- CA(dune, graph = FALSE)</pre>
```

## 

```
Analyses
multivariées
```

#### Eric Marcon

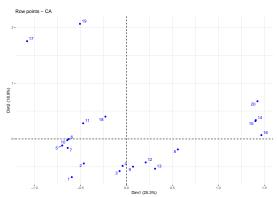
Généralités

Réponse linéaire. analyse indirecte

Réponse non linéaire. analyse indirecte

Analyse directe

```
fviz_ca_row(
 dune_ca,
 repel = TRUE
                 # Avoid text overlapping
```



## 

```
Analyses
multivariées
```

#### Eric Marcon

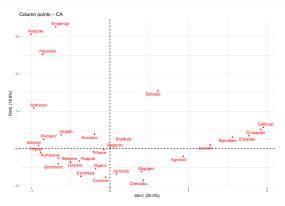
Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

```
fviz_ca_col(
  dune_ca,
  repel = TRUE  # Avoid text overlapping
)
```



```
Analyses
multivariées
```

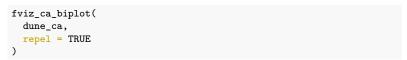
Eric Marcon

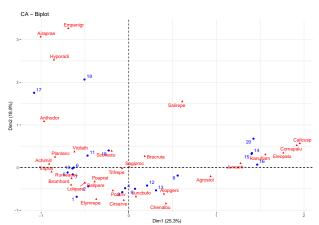
#### Généralités

Réponse linéaire. analyse indirecte

#### Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe







# Detrended Correspondence Analysis

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Hill, M.O. and Gauch, H.G. (1980). Detrended Correspondence Analysis: An Improved Ordination Technique. *Vegetatio* 

Anglais: DCA

42 47 - 58

Objectif: éliminer l'effet Guttman (arch effect).



### DCA: méthode

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Après l'AFC, l'arc est découpé en segments qui sont ensuite alignés.

vegan::decorana.

Limites : faible support mathématique.



# Non-Metric Multidimensional Scaling

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Kruskal, J.B. 1964. Multidimensional scaling by optimizing goodness of fit to a nonmetric hypothesis. *Psychometrika* 29:1-27

Anglais : NMDS

Objectif : identique à la PCoA mais sans projection. Les sites sont placés dans un espace de dimension choisie de façon à maximiser la corrélation entre l'ordre de leurs distances dans les deux espaces.



### NMDS: méthode

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Optimisation par itération : les points sont déplacés aléatoirement. Calcul très lourd, risque de minimum local.

Le choix de la métrique est important.

Critère de choix : le stress, mesure le désaccord entre l'ordination obtenue et une ordination parfaite.



# NMDS: pratique

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

 ${\tt vegan::metaMDS(),\ distance\ de\ Bray-Curtis\ par\ d\'efaut}.$ 

AgroParisTech /

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

# Analyse directe



# Objectif

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Expliquer un tableau de contingence d'espèces par un tableau de variables environnementales.

### Méthode

#### Analyses multivariées

#### Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Le tableau des espèces Y est d'abord régressé sur le tableau de l'environnement X (les lignes sont les sites, communs, chaque colonne de Y est régressée séparément).

Résultat :  $\hat{Y}$ , part de Y expliquée par X.

Ensuite, ACP ou AFC sur  $\hat{Y}$ .



# Analyse de Redondance

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

Rao, C.R. 1964. The use and interpretation of principal component analysis in applied research, *Sankhyaá*, *Ser. A*, 26:329-358.

Anglais: Redundancy Analysis (RDA)

Méthode: ACP.

Pratique: ade4::pcaiv().



# Analyse Canonique de Correspondance

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralité

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

ter Braak, C. 1986, Canonical Correspondence Analysis: A New Eigenvector Technique for Multivariate Direct Gradient Analysis. *Ecology*, 67:1167-1179.

Anglais: Canonical Correspondence Analysis (CCA)

Méthode: AFC. Il existe une DCCA (Detrended CCA)

Pratique: ade4::pcaiv().

AgroParisTech /

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion



#### Choix de la méthode indirecte

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

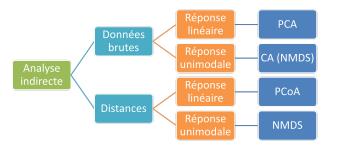
Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

knitr::include\_graphics("images/indirect.png")





#### Choix de la méthode directe

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

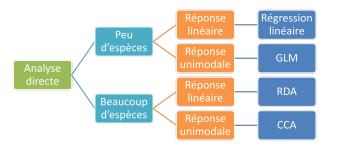
Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse indirecte

Analyse directe

Conclusion

knitr::include\_graphics("images/direct.png")



AgroParisTech /

Analyses multivariées

Eric Marcon

Généralités

Réponse linéaire, analyse indirecte

Réponse non linéaire, analyse

indirecte Analyse

directe

Conclusion