Projet - Analyse des données

Axel Struys - Alexis Buckens

December 19, 2016

1 Introduction

Description générale Nous avons choisi une base de données en provenance de l'UCI Machine Learning Repository. Celle-ci est composée d'échantillons de vins rouges portuguais, ayant une appelation d'origine contrôlée "Vinho Verde". Ce vin provient du nord ouest du Portugal, réparti en 9 sous-régions ayant des sols et des climats différents. Cet éclatement de la production de ce vin à pour conséquence une grande variabilité des propriétés des différents échantillons. Dans ce dataset, chaque observation comporte une analyse des différentes propriétés physico-chimiques du vin, associées à une évaluation subjective, par un œnologue, de la qualité de ce vin.

1.1 Description des variables

Statistiques descriptives La table 1 présente les statistiques descriptives des variables du dataset. Dans l'annexe B se trouvent les boxplots, histogrammes, qq-plots et tests de Shapiro-Wilk de la normalité des variables. Nous pouvons constater que seules les variables density et pH ont une distribution qui suit une loi normale. Etant donné cette non-normalité, nous avons choisi d'utiliser la corrélation de Spearman afin de décrire les relations entre ces variables (voir table 2 de l'annexe A).

	Mean	Std.dev	Median	Min	Max
Fixed acidity (g/L)	8.23	1.67	7.80	5.00	13.40
Volatile acidity (g/L)	0.53	0.17	0.54	0.16	1.00
Citric acid (g/L)	0.27	0.19	0.26	0.00	0.68
Residual sugar (g/L)	2.45	1.12	2.20	1.20	8.80
Chlorides (g/L)	0.08	0.04	0.08	0.04	0.47
Free Sulfur Dioxide (mg/L)	14.69	8.92	13.00	3.00	45.00
Total Sulfur Dioxide (mg/L)	43.48	32.73	35.00	7.00	278.00
Density (g/mL)	0.997	0.002	0.997	0.992	1.002
pH	3.31	0.14	3.33	2.94	3.72
Sulphates (g/L)	0.64	0.13	0.62	0.37	1.31
Alcohol (vol. %)	10.49	1.06	10.20	9.00	14.00
Quality	5.65	0.83	6.00	3.00	8.00

Table 1: Statistiques descriptives (Moyenne, Ecart-type, mediane, minimum et maximum) des 12 variables

Afin de mieux comprendre les analyses ultérieures, nous allons brièvement décrire les variables et ce qu'elles représentent.

Fixed acidity Cette variable représente la concentration en acide tartarique présente dans le vin. C'est l'acide primaire présent dans les grappes de raisins, et son rôle est très important dans le goût du vin. De plus, il permet de contrôler la prolifération bactérienne en agissant comme conservateur.

Volatile acidity C'est une mesure de l'acide acétique présente dans le vin. Cette acide est produite par l'activité métabolique des bactéries et levures. La concentration doit être idéalement de 0,3g/L; Une plus haute concentration peut altérer l'expérience gustative en donnant un goût sûr au vin.

Citric acid C'est un composant intermédiaire du cycle de l'acide citrique, permettant aux bactéries et aux levures de produire de l'énergie. Normalement, presque toute l'acide citrique est consommée durant la fermentation du vin, mais les vignerons peuvent en ajouter afin de donner un goût frais au vin.

Sulfur dioxide Le dioxide de soufre est un sous-produit de la fermentation, mais il est aussi utilisé comme additif par les vignerons. Il régule la croissances des bactéries et levures. Mais son intérêt majeur réside dans ses propriétés antioxidantes. En effet, le vieillissement du vin produit de l'acetaldehyde, molécule qui à l'odeur d'une pomme brunie. Le dioxide de souffre va se lier avec cette molécule, la rendant inodore. Le dioxide de souffre permet donc de préserver le goût fruité du vin. Néanmoins, trop de dioxide de soufre donne une odeur soufrée au vin, irritant les parois nasales. Il est présent à la fois sous forme dissoute et sous forme gazeuse (free sulfur dioxide)

Density C'est la masse du vin par unité de volume. L'éthanol étant peu dense (0.789 g/mL), plus un vin est alcoolisé, moins il est dense.

Résidual sugar Ce sont les sucres restant après la fermentation du sucre en alcool par les bactéries et levures. Ceci permet de distinguer un vin sec (¿4g/L) d'un vin moelleux (entre 12 g/L et 45 g/L). Le sucre à une grande importance dans les caractéristiques sensorielles du vin, permettant de balancer son amertume et donnant un goût fruité agréable.

pH Mesurant l'acidité, le pH ne corrèle pas totalement avec les autres variables représentant l'acides, car il est une mesure totale de l'acidité, incluant d'autres acides mineurs non représentés dans ce dataset.

Chlorides C'est la concentration en ions chlorures dans le vin. Ils proviennent de la dissolution du chlorure de sodium (sel). Ils contribuent au goût salé du vin, mais trop de sel peut influencer négativement le goût.

Sulphate (sulphate de potassium) C'est un engrais qui permet de compenser le manque en potassium du sol, favorisant la croissance des vignes. En outre, le sulphate est nécessaire pour la synthèse des protéines de la plante, et à un rôle bénéfique dans la formation de sucres et des composés organoleptiques (qui ont un rôle dans la perception du goût). Il a un effet sur les niveaux de sucres et donc d'alcool.

2 Préparation des données

Avant de procéder à l'analyse proprement dite, il convient de rapidement préparer nos données. Tout d'abord, comme nous ne disposons que de variables continues, il est nécessaire de transformer certaines d'entre elles en variables discrètes afin de pouvoir ultèrieurement procéder à la l'analyse en correspondance multiples. Cette transformation peut être faite en séparant les

valeurs des 5 premières variables du dataset, à savoir fixed.acidity, volatile.acidity, citric.acid, residual.sugar and chlorides en 5 intervalles et en attribuant chaque intervalle a une catégorie.

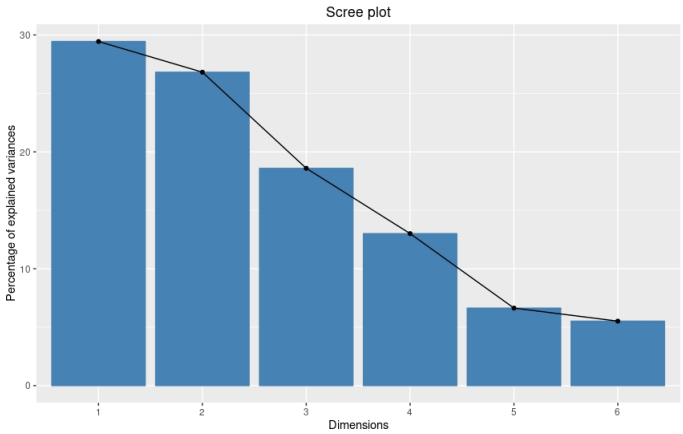
On peut également faciliter les analyses des sections suivantes en réduisant la taille dataset, comme convenu au préalable avec les assistants. La méthode la plus simple est procéder à un échantillonage. Nous avons décidés ici de nous limiter a garder 200 variables.

3 PCA

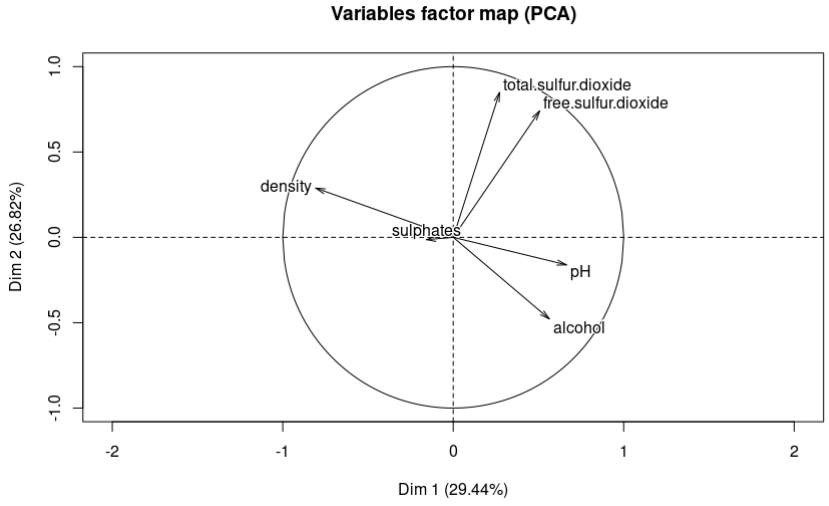
Nous allons commencer par nous intéresser aux variables continues en effectuant une ACP. Deux premières questions peuvent être posées : à partir de combien de dimensions suffisent à capturer l'essentiel de l'information, et comment les différentes variables contibuent-elles aux premières composantes.

Il nous est possible de répondre à la première question en observant les valeurs propres de l'analyse en composante principale. On peut observer que, comme prévu, la proportion de la variance expliquée par chacune des composantes est décroissante et que les 3 premières composantes permettent d'expliquer pratiquement 75% de la variance.

Le graphique suivant nous permet d'avoir une illustration visuelle et assez immediate de la proportion de la variance expliquée par chacune des composantes principales :



La question de savoir comment les différentes variables contribuent aux deux premières composantes principales peut également être illustrée par un graphique :

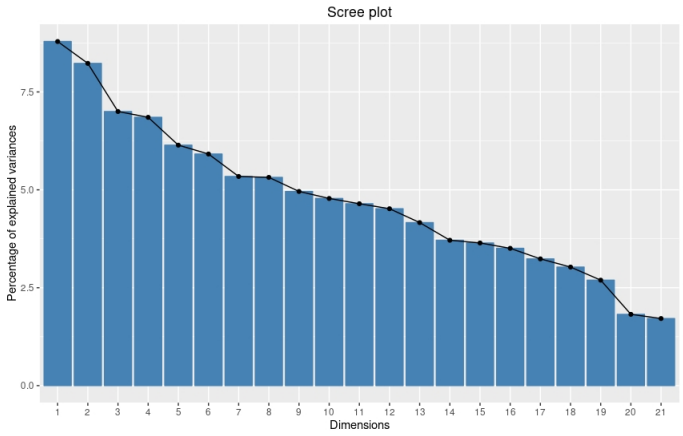


On peut voir sur celui-ci que la première dimension est plus liées au variables "Ph" et "Density", et dans une moindre mesure "sulphates", tandis que la seconde dimension est elle plus liée aux variables "total.sulfur.dioxides" et "free.sulfur.dioxides", qui semblent elles-même proches l'une de l'autres (ce qui n'est naturellement pas surprenant).

4 MCA

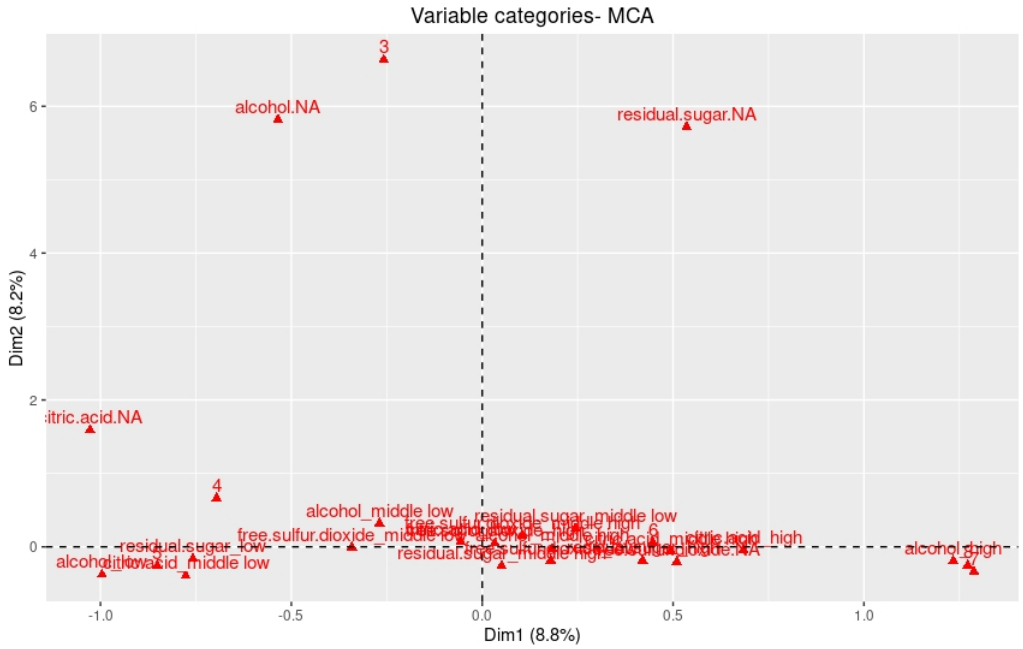
L'étape suivante consiste à effectuer une analyse en correspondance multiple. Pour cette analyse nous avond besoin de variables discrètes. La variables "quality" étant déjà une variable discrète, elle sera naturellement utilisée. Pour ce qui est des autres variables, nous les sélectionnerons sur basedu nombres de levels qu'elles prennent si ont les considérait comme factors, afin de prendre celles qui naturellement semblent les plus proches d'une variable discrètes et sur base de la non-linearité de leur relations. Les variables selectionnées seront alcool, citric acid, residual.sugar et free.sulfur, et ces variables seront transformées en variables discrètes avec 5 catégories.

La première question est de savoir combien de dimensions conserver. Pour répondre à cette question, on peut de nouveau utiliser les varleurs propres et d'inéresser aux dimensions avec les valeurs propres les plus élevées. Si on trace un graphique reprenant les valeurs propres, de la plus élevée à la plus faible, on obtient le graphique suivant :



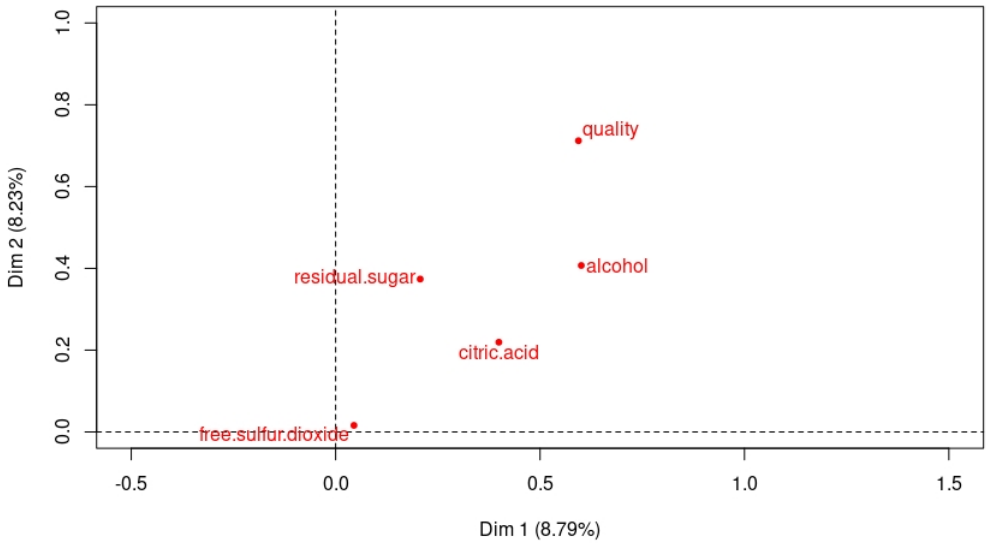
On peut donc constater que la proportion de variance expliquée par les différentes dimensions décroît lentement. Puisqu'il nous faut choisir un nombre de dimensions restreint pour expliquer nos données, il nous faut choisir également un critère de décision. Un premier critère est celui du "coup de coude" : Il s'agit de choisir le nombre de dimension à partir duquel la valeur des valeurs propres décroit brusquement. Un "coup de coude" peut être trouvé a plusieurs endroits, entre autre aux alentours de la 4eme dimension (mais également après deux dimensions), mais en ne choisissant que 4 dimensions, on ne peut expliquer que 30% de la variance. Un second critère consiste à choisir les dimensions pour lesquelles la valeur propres est supérieure à $\frac{1}{nbvar}$. Ce second critère nous pousse à choisir 10 dimensions, ce qui est fort élevé. On pourrait également choisir comme critère le % de variance expliquée, en fixant par exemple le seuil à 60%. Ce critère nous pousserait également à choisir 10 variables. On utilisera donc au final les 4 premières dimensions.

On peut également s'intéresser aux positions des individus, variables et categories dans les deux premières dimensions :



Sur ce graphique, on peut observer les catégories des variables (triangles rouges associés aux noms des variables), et les individus (ronds bleus). On peut ainsi voir quelles catégories/individus sont similaires. En l'occurence, le graphe est un peu difficile à comprendre du fait que la plupart des valeurs sont proches de l'origine, à l'exeption de deux outliers et des valeurs correspondant aux valeurs manquantes pour alcohol et residual.sugar qui s'en éloignent singulièrement. Néanmoins on peut déjà observer une certaine similarité entre les catégories "basses" de residual.sugar, citric.acid et alcohol, et on peut constater que alcohol "low" et alcohol "high" sont chacun à une des extremites de l'axe correspondant à la première dimension. La première dimension semble donc correspondre essentiellement au taux d'alcool dans le vin. On pourra vérifier cela ultérieurement en observant les contributions des différentes variables au premières dimensions. Finalement les vins de mauvaise qualité (4) se trouvent du coté gauche (alcohol low) tandis que les vins de bonne qualité (7) se trouvent du coté droit (alcohol high).

On peut aussi ne s'intéresser qu'aux variables analysées et tracer un graphique des coordonnées des variables dans le plan formé par les deux premières dimensions :



Aucune des variables ne semble être particulièrement associée avec l'un ou l'autre axe.

5 Conclusion

6 Annexes

A Matrice de corrélation

	alcohol	chlorides	citric.acid	density	fixed.acidity	free.sulfur.dioxide	pH	quality	residual.sugar	sulphates	total.sulfur.dioxide	volatile.acidity
alcohol	1.00	-0.25	0.11	-0.41	-0.04	-0.03	0.13	0.48	0.19	0.21	-0.20	-0.18
chlorides	-0.25	1.00	0.06	0.31	0.12	0.09	-0.16	-0.11	0.23	-0.13	0.15	0.10
citric.acid	0.11	0.06	1.00	0.43	0.63	-0.17	-0.57	0.27	0.16	0.36	-0.00	-0.62
density	-0.41	0.31	0.43	1.00	0.65	-0.17	-0.31	-0.07	0.35	0.20	0.02	-0.02
fixed.acidity	-0.04	0.12	0.63	0.65	1.00	-0.23	-0.70	0.09	0.20	0.22	-0.06	-0.20
free.sulfur.dioxide	-0.03	0.09	-0.17	-0.17	-0.23	1.00	0.22	0.05	0.08	0.04	0.77	0.05
pH	0.13	-0.16	-0.57	-0.31	-0.70	0.22	1.00	-0.01	-0.03	-0.07	0.04	0.21
quality	0.48	-0.11	0.27	-0.07	0.09	0.05	-0.01	1.00	0.12	0.41	-0.07	-0.36
residual.sugar	0.19	0.23	0.16	0.35	0.20	0.08	-0.03	0.12	1.00	0.02	0.14	0.10
sulphates	0.21	-0.13	0.36	0.20	0.22	0.04	-0.07	0.41	0.02	1.00	-0.00	-0.43
total.sulfur.dioxide	-0.20	0.15	-0.00	0.02	-0.06	0.77	0.04	-0.07	0.14	-0.00	1.00	0.06
volatile.acidity	-0.18	0.10	-0.62	-0.02	-0.20	0.05	0.21	-0.36	0.10	-0.43	0.06	1.00

Table 2: Matrice de corrélation des 12 variables, en utilisant la corrélation de Spearman

B Normalité

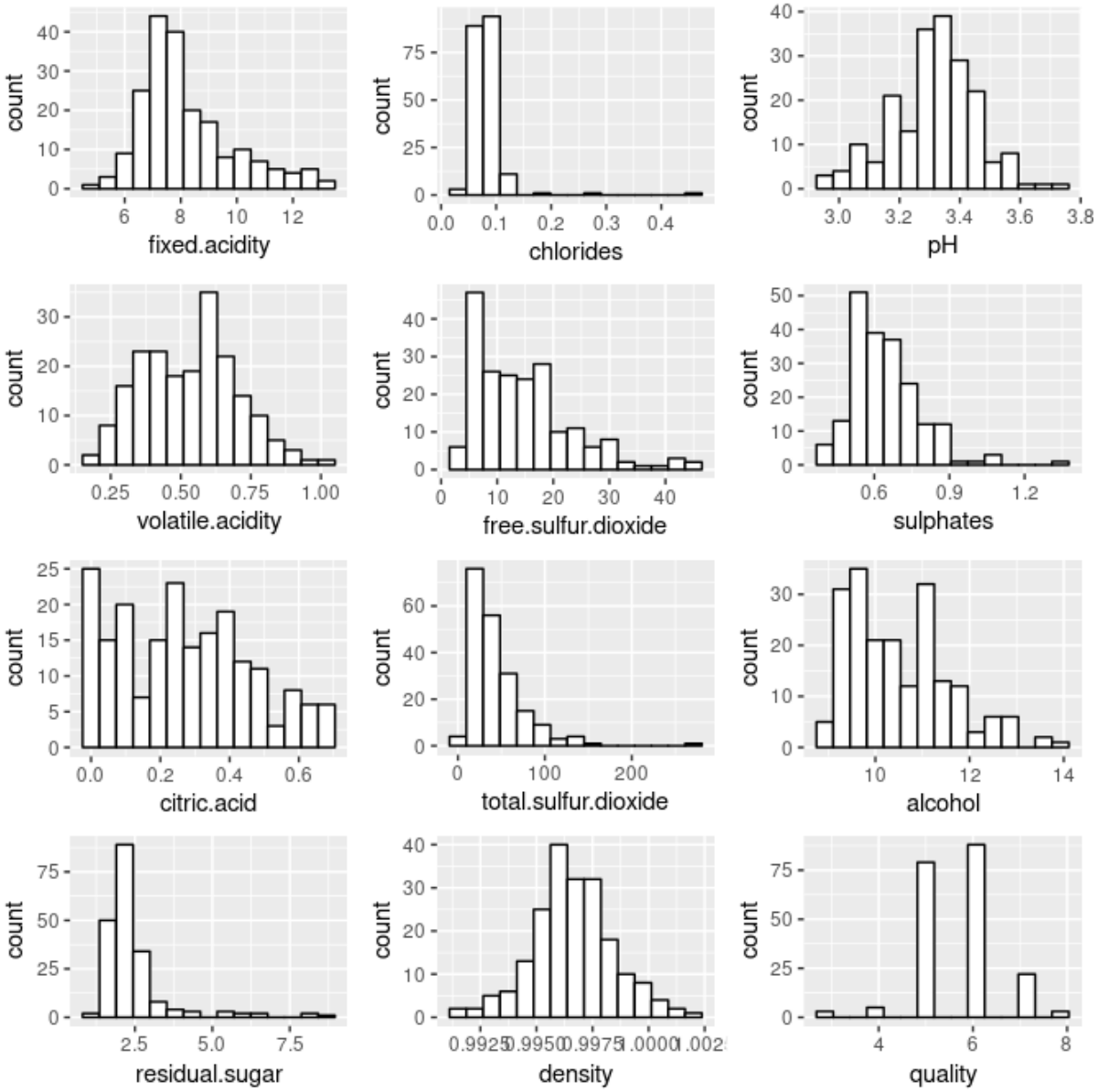


Figure 1: Histogrammes

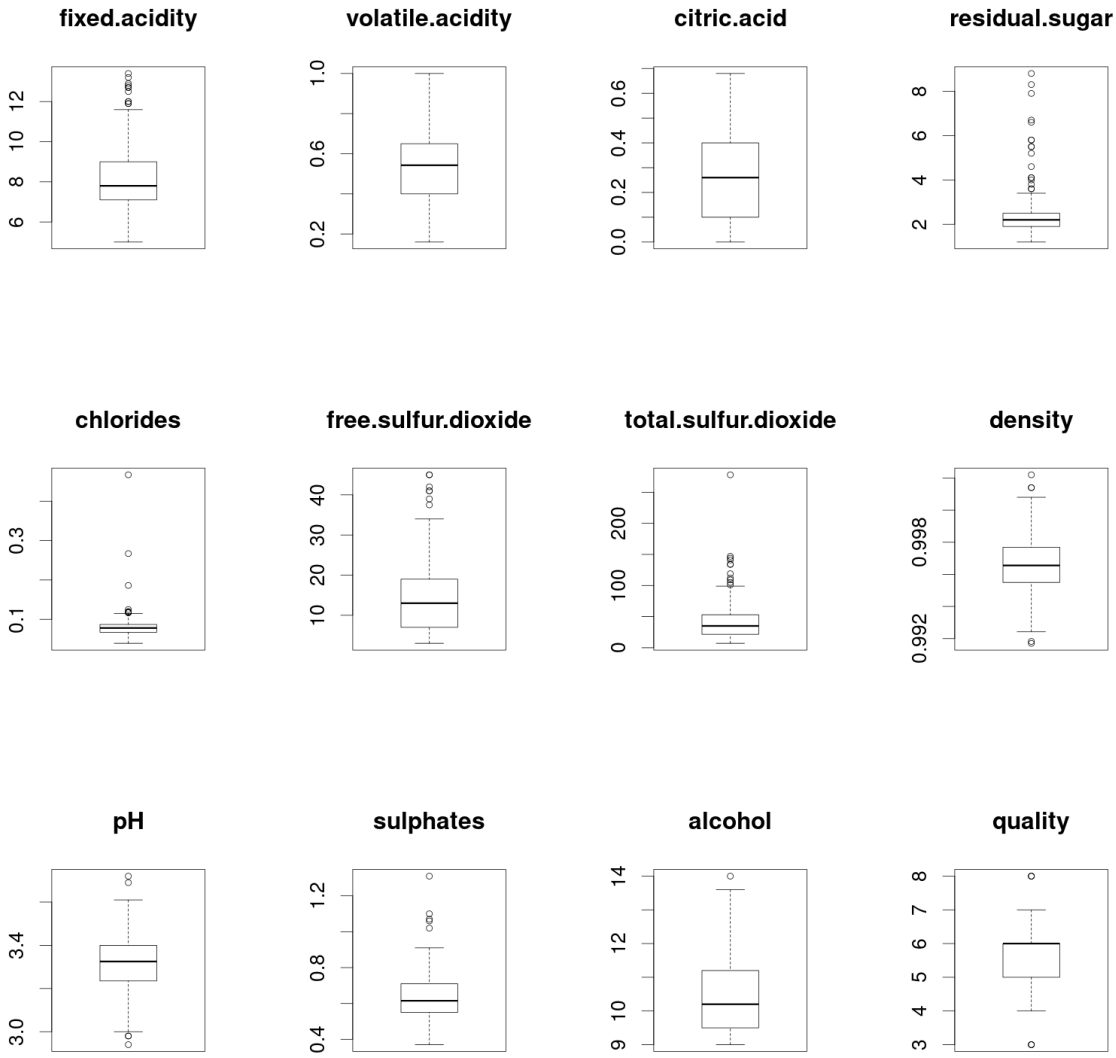


Figure 2: Boxplots

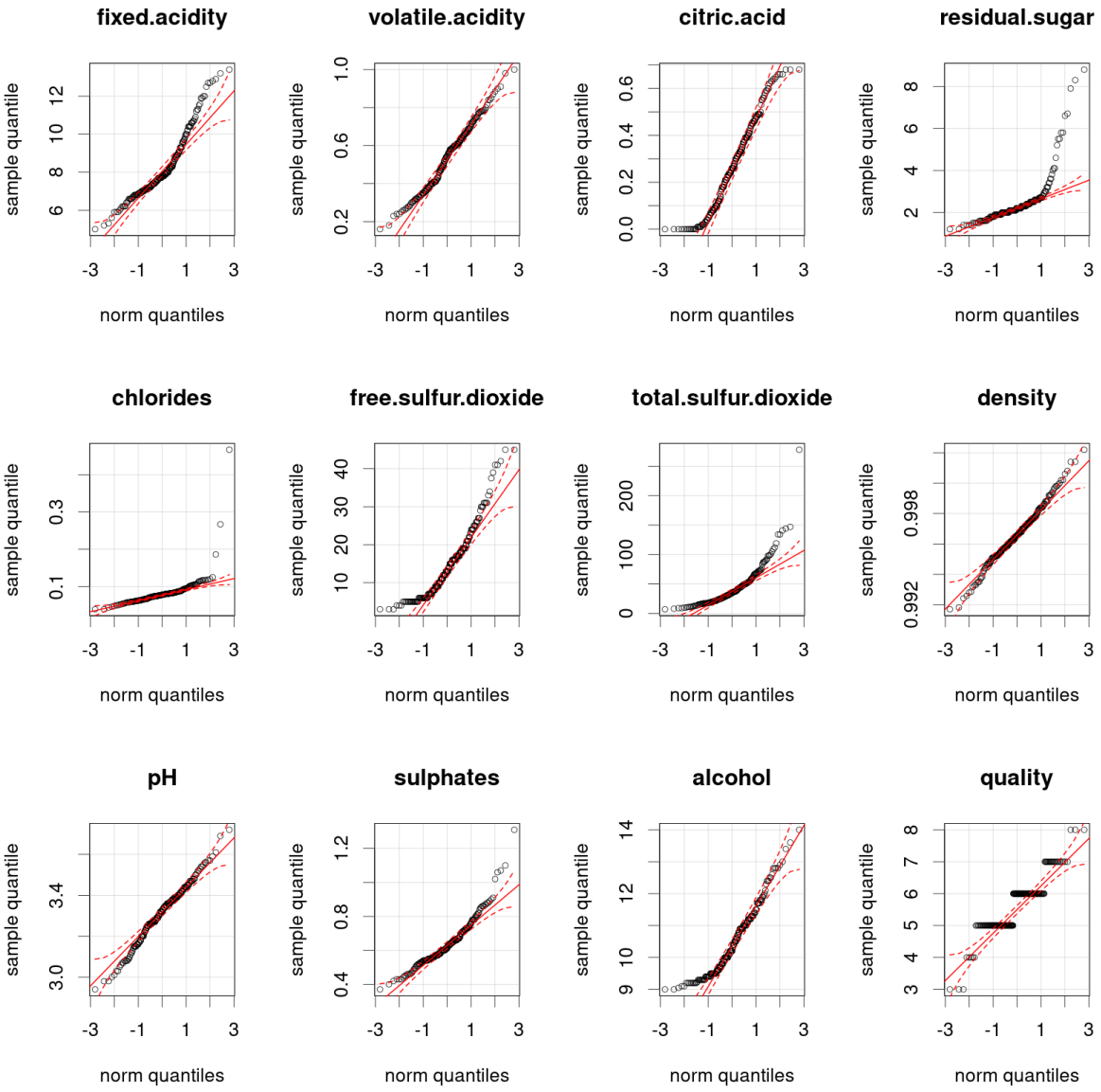


Figure 3: Q-Q Plots

	Statistic	p.value
fixed.acidity	0.916	0.000
volatile.acidity	0.985	0.029
citric.acid	0.954	0.000
residual.sugar	0.627	0.000
chlorides	0.481	0.000
free.sulfur.dioxide	0.904	0.000
total.sulfur.dioxide	0.778	0.000
density	0.993	0.411
pH	0.991	0.286
sulphates	0.925	0.000
alcohol	0.933	0.000
quality	0.857	0.000

Table 3: Test de Shapiro-Wilk de normalité des variables

C Code R

##Code ici