Université de Montpellier
Faculté des Sciences
M2 Statistiques et Sciences des Données

L'apport des conditions climatiques à la qualité des vins

Analyse et modélisation multivariée

-

Méthodes à deux tableaux

Auteurs:
Anas Zakroum

Enseigné par:
Pr. Xavier Bry

3 mars 2023

Table des matières

Introduction

Nous disposons de 34 observations de vins de bordeaux présentant trois niveaux de qualités : bonne, moyenne et mauvaise décrits par :

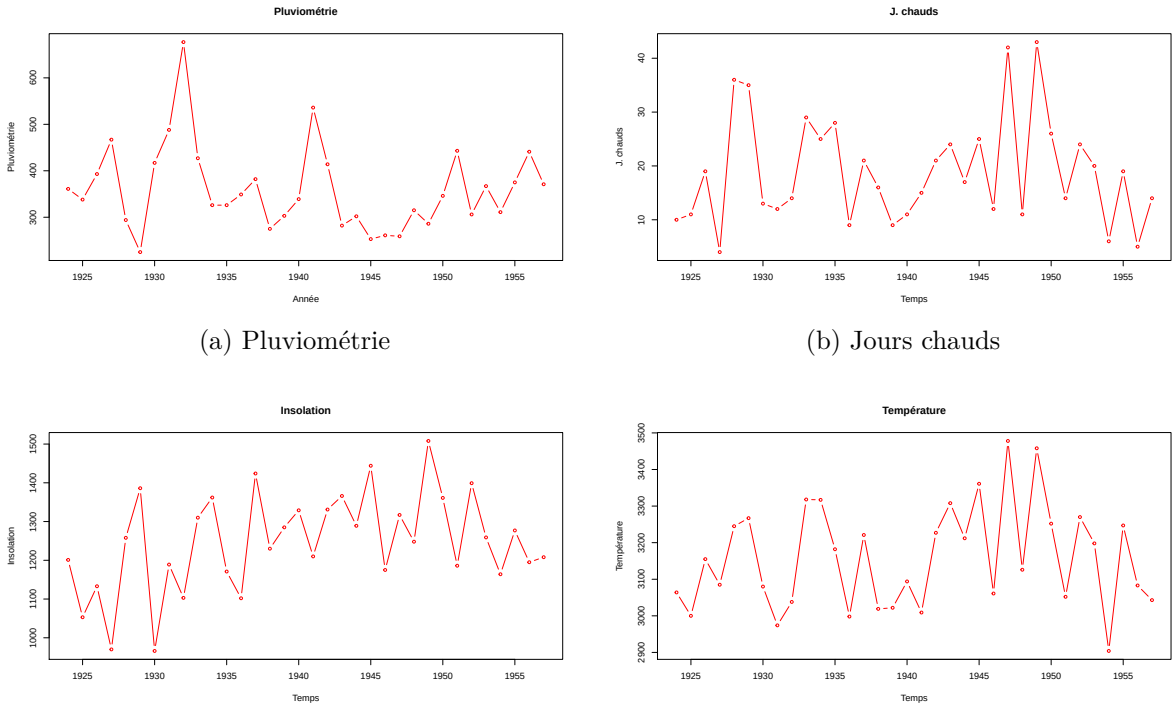
— L'année de récole
— Somme des températures moyennes quotidiennes sur l'année ($C^{\check{r}}$)
— Durée d'insolation (h)
— Nombre de jours très chauds
— Pluviométrie (mm)

L'objectif de cette analyse est d'extraire à partir des données récoltées, les caractéristiques permettant de discriminer entre les trois niveaux de qualité des vins.

1 Description des données

Evolution temporelle des descripteurs

Les données sur les vins ont été récoltées entre 1924 et 1957. L'allure des séries temporelles des descripteurs dans la Figure 1 est non stationnaire et ne semble pas présenter visuellement de tendances linéaires ou quadratiques.



(a) Pluviométrie

(b) Jours chauds

(c) Insolation

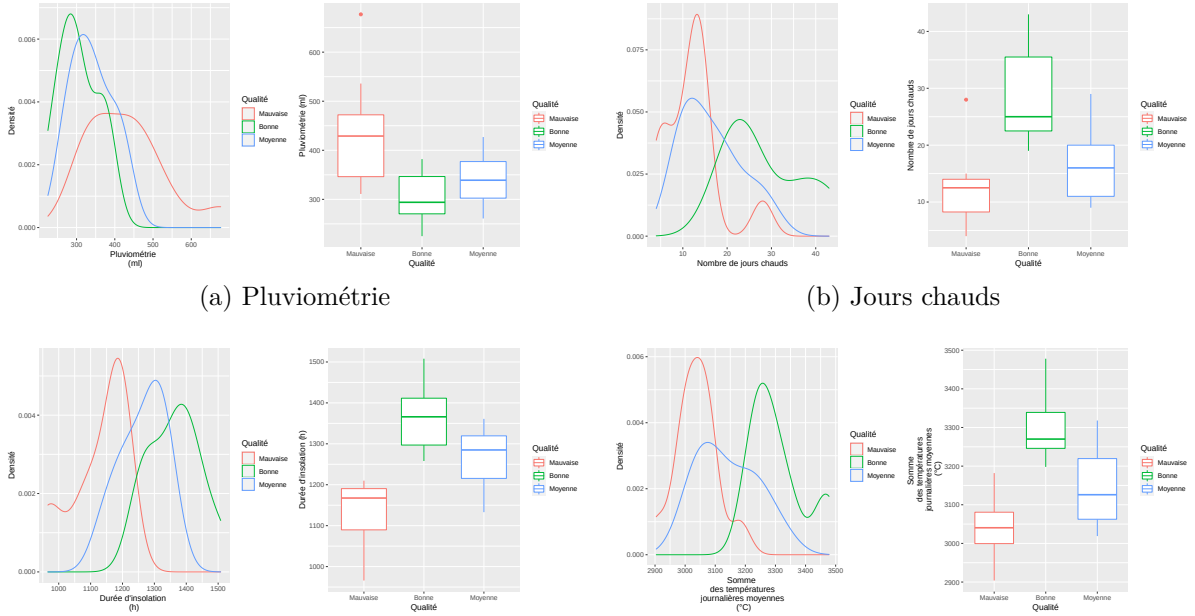
(d) Température

FIGURE 1 – Evolutions temporelles des descripteurs.

Statistiques descriptives des qualités des vins

Les 34 vins sont répartis selon leur qualité de la manière suivante : 12 de qualité mauvaise, 11 de qualité moyenne et 11 de bonne qualité. Nous proposons dans un premier temps de fournir une description des distributions des variables mesurées selon les qualités de vins.

A premier abord, nous observons à partir de la Figure 2 que la majorité des distributions des descripteurs possèdent des allures approximativement gaussiennes. Les médianes des descripteurs sont nettement différenciées entre les trois qualités de vins. Nous ne pouvons pas dire la même chose sur le reste des quartiles.



(a) Pluviométrie

(b) Jours chauds

(c) Insolation

(d) Température

FIGURE 2 – Distributions des mesures prises des vins

Il semble toutefois que les vins de bonne qualité ressortent pendant les années chaudes, années où les déscripteurs de chaleur (Insolation, Température, J. chauds) sont au plus haut. La tendence est inversée pour la pluviométrie ; la distribution de la pluviométrie pour les vins de mauvaise qualité se différencie nettement de celles des vins de qualité moyenne et mauvaise. La différence entre les vins de qualité mauvaise et moyenne est moins nette lorsqu'il s'agit de certains descripteurs de chaleur.

D'autre part, en regardant d'autres descripteurs statistiques (la moyenne et l'écart-type), nous observons que *(i)* la somme des températures quotidiennes moyennes et *(ii)* la durée d'insolation sont de variance minime comparées à la pluviométrie et le nombre de jours chauds.

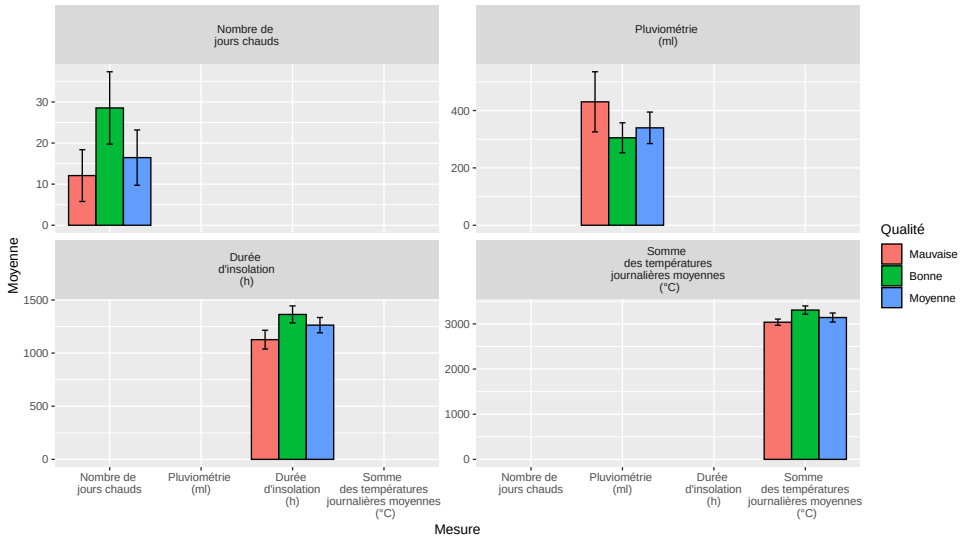


FIGURE 3 – Moyennes et écarts-types des déscripteurs par qualité

Nous pouvons distinguer des différences marquées entré les qualités sur les moyennes empiriques ; le nombre de jours chauds moyen permet la distinction entre le groupe de vin de bonne qualité et les groupes de vin de moyenne et mauvaise qualité. D'autre part, la pluviométrie anuelle moyenne permet de différencier entre le groupe des vins de mauvaise qualité et les groupes de vin de bonne et moyenne qualité, mais cette mesure ne permet pas la différenciation entre ces dernières.

2 Quelques analyses de variance préliminaires

Regardons maintenant d'un point de vue de la modélisation d'ANOVA quelles sont les variables aparaissant être les plus discriminatives de la qualité de vin lorsqu'elles sont prises une à une.

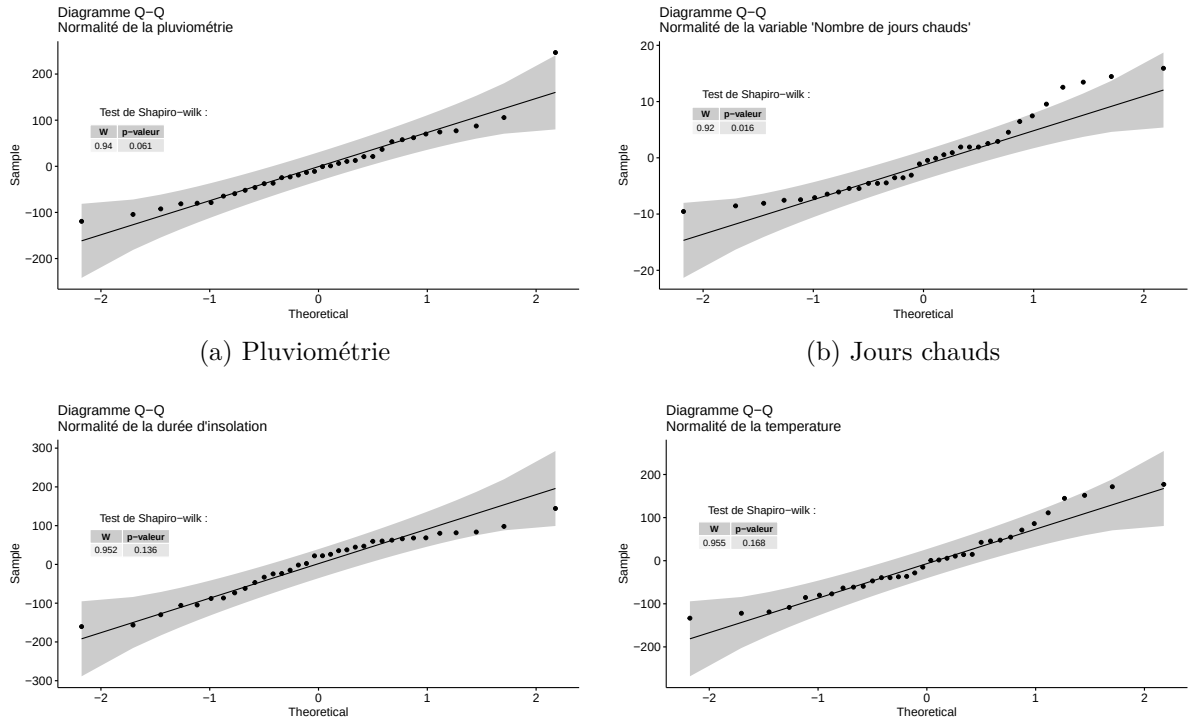
2.1 Vérification des hypothèses

Premièrement, l'ensemble des descripteurs ne comportent pas de valeur atypique extrême. Les valeurs atypiques extrême sont connues pour impacter la qualité de l'ajustement de l'ANOVA qui, étant un modèle linéaire est sensible aux valeurs êxtrèmes.

Hypothèse de normalité des descripteurs Il est de pratique courante de vérifier les hypothèses d'un modèle avant de procéder à son ajustement de risque à conduire des analyses érronées. L'ANOVA possède des hypothèses sur les distributions des données et sur l'homogénéité des variances qui sont en pratique atteintes de manière peu fréquente. Ainsi le but de cette vérification est plutôt de chercher si les données à disposition ne présentent pas une violation sévère des hypothèses du modèle. Le modèle met en équation

chaque variable quantitative en fonction d'une valeur μ augmentée de l'effet de groupe A_i plus une erreur de mesure ϵ supposée gaussienne.

Pour vérifier l'hypothèse de normalité des résidus, nous procédons à un diagnostic visuel en plus du test de Shapiro-Wilk qui, sous l'hypothèse nulle suppose la normalité des résidus comme présenté dans la Figure 4.



(a) Pluviométrie

(b) Jours chauds

(c) Insolation

(d) Température

FIGURE 4 – Diagnostic de la normalité des résidus des modèles d'ANOVA pour chaque descripteur.

Les valeurs critiques présentent un argument en défaveur du rejet de l'hypothèse nulle seulement pour la pluviométire, la température et l'insolation au risque de 5%. Toutefois, les graphiques de l'ensemble des résidus des descripteurs ne montrent pas de trop fortes déviations.

Homoscédasticité Une autre hypothèse de l'ANOVA est l'égalité des variances à travers les groupes. Le test de Levene stipule sous l'hypothèse nulle que les variances à travers les groupes sont égales.

$$H_0 : \quad \sigma_{Moy} = \sigma_{Mauv} = \sigma_{Bon} \quad \forall x^j, j \in \{1, \ldots, p\}$$

Au risque de 5%, le test associe des probabilités critiques (Voir Table 1)en faveur de l'acceptation de l'hypothèse d'égalité des variances à travers les groupes, et ce pour tous les descripteurs de vins

TABLE 1 – Test de l'égalité des variances pour les différentes qualités de vin.

Variable	W	Prob. Critique
N Jours chauds	0.642	0.533
Pluviométrie	2.336	0.114
Insolation	0.079	0.924
Température	0.917	0.41

Ainsi les descripteurs de vins ne présentent pas globalement des violations extrêmes des hypothèses de l'ANOVA.

2.2 Pouvoir discriminatif et analyse de la variance

Nous nous intéressons maintanenant à connaître les pouvoirs discriminatifs de la qualité de vin des déscripteurs à disposition. Nous utilisons pour celà deux critères, le coefficient de correlation R^2 de l'ANOVA et le Lambda de Wilks Λ.

$$\Lambda = \frac{\det(A)}{\det(A+B)}$$

où A la matrice de dispersion intra-classe

$$A = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{q} n_k \Sigma_{X|_{Y=k}}$$

et B est la matrice de dispersion inter-classe

$$B = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{q} n_k (\overline{X|_{Y=k}} - \overline{X})^T (\overline{X|_{Y=k}} - \overline{X}),$$

avec n le nombre d'individus et q le nombre de modalités de la variable Y.

En analyse discriminante le Lambda de Wilks est utilisé comme une mesure de la capacité discriminative d'une variable. Il est à valeur dans $[0, 1]$ où la valeur 0 indique une discrimination totale et 1 indique aucune discrimination et une valeur intermédiaire représente l'intensité du pouvoir discriminatif. La significativité de Λ dans l'apport à la discrimination d'une variable est mesurée par le test F.

TABLE 2 – Analyse des variances et du pouvoir de discrimination des variables

Variables	R^2	Wilk's Lambda	Stat. F	P-valeur
Année	0.029	0.971	0.467	**0.631**
Température	**0.639**	**0.361**	27.389	10^{-7}
Insolation	**0.618**	**0.382**	25.061	3×10^{-7}
N jours chaud	0.497	0.503	15.334	2×10^{-5}
Pluviométrie	0.353	0.647	8.44	0.001

La statistique de test F evalue le rapport de l'inertire inter-classe avec l'inertie intra classe induisant une mesure de la dispersion entre les barycentres de chaque classe (ici les classes étant les qualités de vin).

Ainsi la lecture du test F nous dit qu'au seuil de 5% les différences entre les barycentres des qualités de vin les plus importantes se trouvent au niveau de la temperature, l'insolation, le nombre de jours chauds et la pluviométrie. La lecture conjointe du Lambda de Wilks et du test F nous indique que

— La température et l'insolation sont les plus discriminantes.
— Le nombre de jours chauds et la pluviométrie sont à pouvoir discriminatif moyen.
— L'année des vendanges possède un pouvoir discriminatif nul et la différence entre les barycentres de chaque classe n'est pas statistiquement significative.

Comme nous pouvons le voir dans la Figure 5 les qualités de vin ne suggèrent pas d'évolution temporelle.

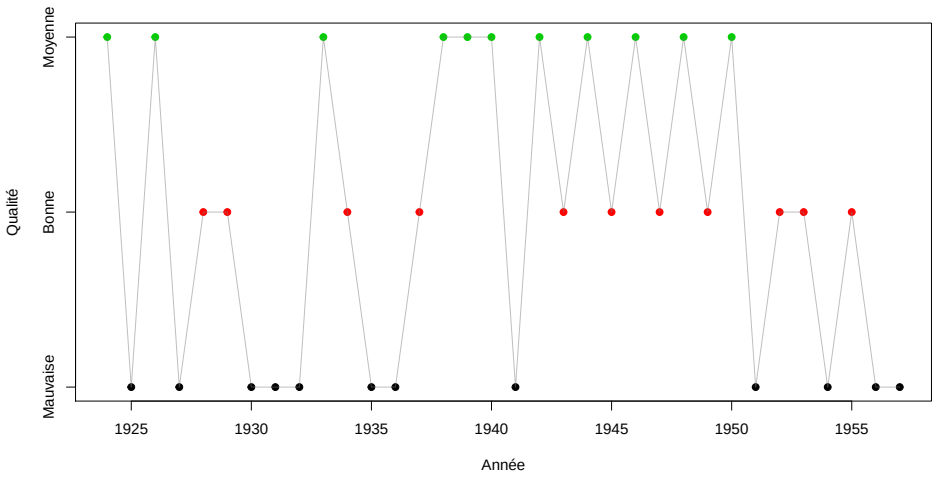


FIGURE 5 – Qualité des vins par année

3 Analyse discriminante classique

Nous cherchons maintenant, à partir d'une combinaison linéaire des variables d'origine X une nouvelle représentation de l'espace des variables qui permette une meilleur discrimination entre les modalités de la variable nominale Y représentant les trois qualités des vins en maximisant le critère suivant

$$\max_{f \in \langle X \rangle} \quad \cos^2_W(f, \langle Y \rangle). \tag{1}$$

L'année de récolte des raisins, possédant un pouvoir discriminatif nul a été omise de l'analyse discriminante. Le nombre de classes étant au nombre de $q = 3$, la discrimination entre les différentes qualités des vins se fait sur un espace à $q - 1 = 2$ dimensions.

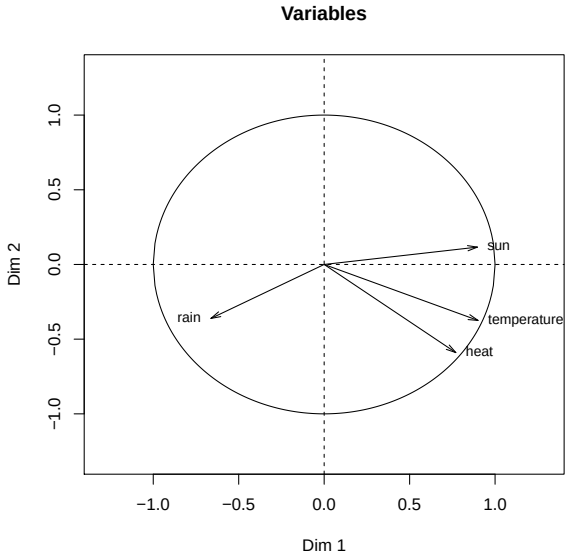


FIGURE 6 – Corrélation des variables avec les axes discriminants.

Les premier et deuxième axes factoriels possèdent respectivement les pouvoirs discriminatifs $\eta_1 = 0.73$ et $\eta_2 = 0.12$ et engendrent un sous-espace discriminatif de pouvoir

$$\eta_{E_{q-1}} = \frac{1}{q-1} \sum_{k=1}^{q-1} \eta_k = 0.42$$

. Le deuxième axe étant de pouvoir discriminatif faible, et donc ne permettant pas la différentiation entre les qualités des vins ne sera pas intérpreté.

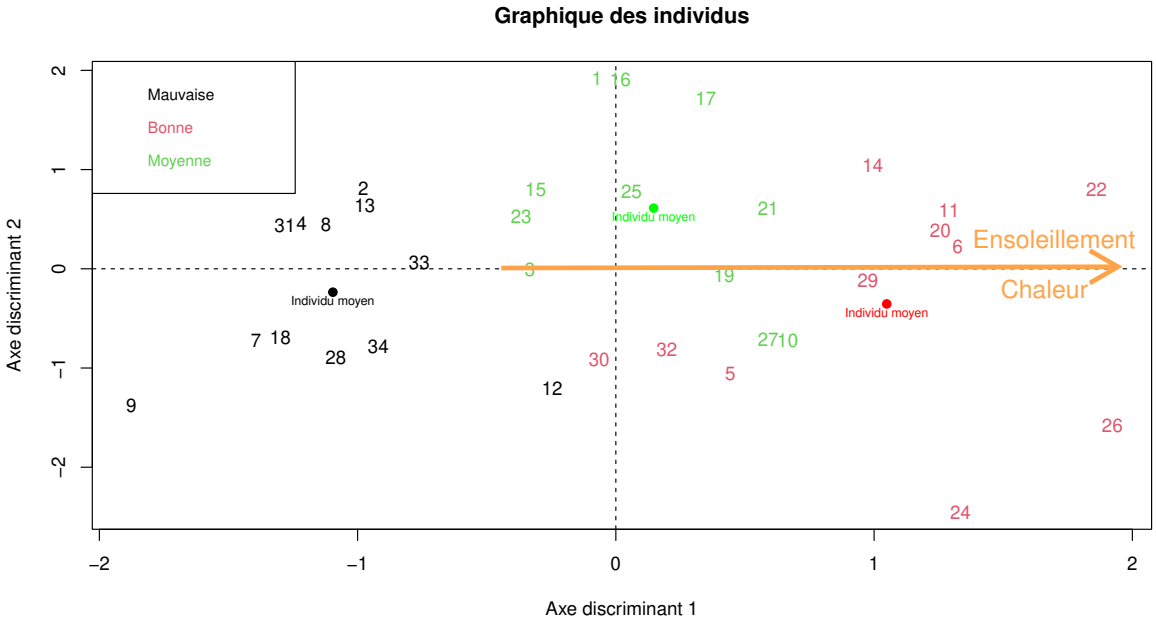


FIGURE 7 – Graphique des individus sur le sous-espace discriminant <1, 2>

3.1 Intérpretation

Au regard du graphique des individus dans la Figure 7, la distinction sur le premier axe discriminant est marquée entre les vins de mauvaise qualité et ceux de bonne et de moyenne qualité. En revanche, la différence entre les vins de moyenne qualité et ceux de bonne qualité est moins marquée.

D'autre part, le graphique des variables dans la Figure 6 indique les corrélations des variables avec les axes discriminants. Les variables les plus fortement corrélées avec le sous-espace formé par ces axes possèdent donc une bonne représentation sur celui-ci. Ainsi, les axes portent en eux la qualité des variables avec lesquelles ils sont le plus fortement corrélés ($\rho^2 > 0.7$).

La lecture jointe des deux graphiques de l'analyse discriminante nous indique alors que les vins de mauvaise qualité se caractérisent surtout à l'aide des indicateurs de chaleur à savoir une insolation, des températures cumulées et un nombre de jours chauds faibles. A l'inverse les vins de bonne qualité sont associés à des indicateurs de chaleur marqués et une pluviométrie faible.

4 Analyse discriminante PLS

Dans l'analyse discriminante ci-dessus, bien que le pouvoir discriminatif du premier axe factoriel semble assez correct, pas toutes les variables y sont fortement corrélées. L'analyse discriminante ne prenant pas en compte pas la force structurelle des composantes (Equation 1), l'ajustement peut se faire sur du bruit et par conséquent certaines variables pouvant participer à la discrimination se retrouvent mal représentées sur les sous-espaces de discrimination.
L'analyse discriminante PLS permet de remédier à ce problème en maximisant le critère suivant

$$\max_{f=Xu\ ,\ u'u=1} \quad \cos^2_W(f, \langle Y \rangle)\ ||f||^2_W, \tag{2}$$

qui prend en compte la force structurelle des composantes $||f||^2_W$.

La maximisation du critère dans l'Equation 2 permet d'éloigner les composantes du bruit en les rapprochant des variables originelles leur permettant d'avoir une force structurelle plus forte.

Le modèle de l'AD-PLS a été ajusté sur deux composantes par validation croisée sur une observation tournante (LOO).

4.1 Intérpretation des graphiques

La Table 3 reporte les corrélations des descripteurs des vins les composantes de l'AD-PLS et celles de l'AD classique.

TABLE 3 – Corrélations **en valeur absolue** des composantes AD-PLS et AD classique avec les variables.

	F1		F2	
Variables	AD-PLS	AD	AD-PLS	AD
Température	0.91	0.9	0.28 ↙	0.36
Insolation	0.87	0.89	0.18	0.13
J. Chauds	**0.89** ↖	0.77	**0.39** ↙	0.58
Pluviométrie	0.65	0.66	**0.62** ↖	0.37

Dans l'AD-PLS, les indicateurs de chaleur sont davantage capturées par la première composante, tandis que la deuxième composante s'en éloigne et se rapproche de la pluviométrie. Les variables possédent une meilleure représentation dans le sous-espace factoriel $\langle 1, 2 \rangle$. Elles sont alors reportées sur le graphique des individus.

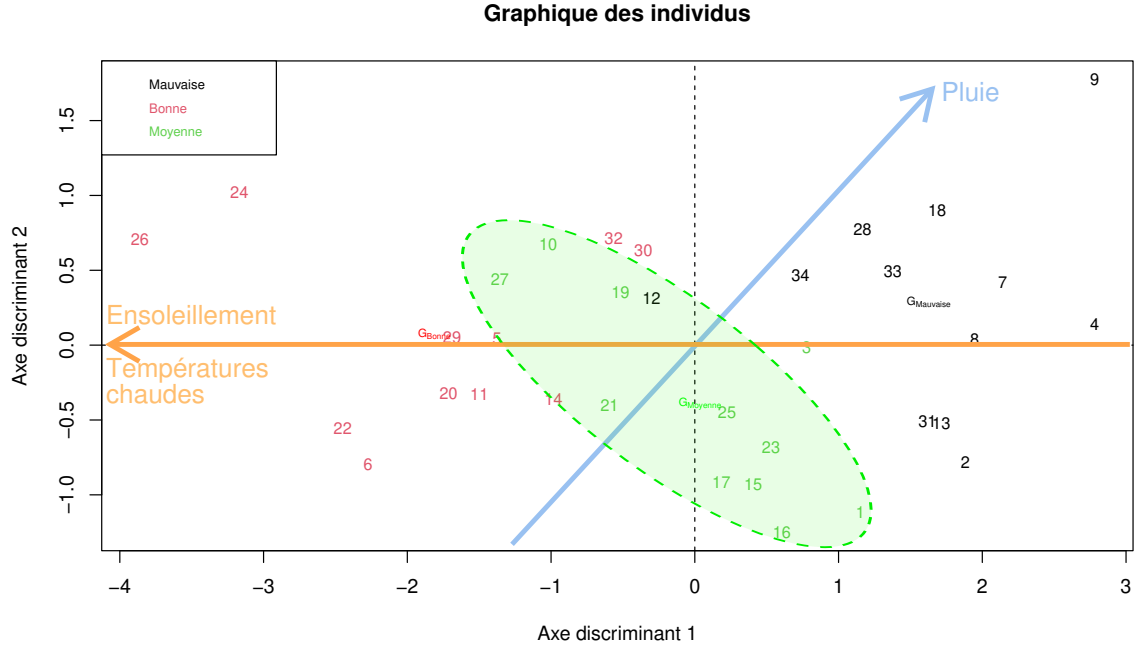


FIGURE 8 – Graphique des individus sur le plan factoriel $\langle 1, 2 \rangle$

L'AD-PLS permet un partitionnement plus clair entre les qualités des vins en contenant la dispersion des vins de moyenne qualité sur une zone plus serrée à l'origine du plan factoriel (voir ellipse dans la Figure 8), alors que l'AD leur attribuait une plus grande dispersion. Cela permet une meilleure discrimination surtout entre les vins de mauvaise qualité et ceux de bonne qualité. Encore une fois, le faible ensoleillement couplé a une pluviométrie forte caractérisent les vins de mauvaise qualité et l'inverse, les vins de bonne qualité. Les années ou ces descripteurs sont moyens résultent en des vins de qualité moyenne.

4.2 Évaluation du modèle

Le modèle de l'AD-PLS a été ajusté sur deux composantes par validation croisée sur une observation tournante (LOO). Le taux d'erreur global est de 20%.

La matrice de confusion est reportée ci-dessous et la performance du modèle est évaluée à l'aide des métriques de classification suivantes

$$\text{Sensibilité} = \frac{TP}{TP+FN} \quad , \qquad \text{Spécificité} = \frac{TN}{TN+FP}$$
$$\text{Val. Pred. Pos.} = \frac{TP}{TP+FP} \quad , \qquad \text{Val. Pred. Nég.} = \frac{TN}{TN+FN}.$$

		Vérité		
		Mauvaise	Bonne	Moyenne
Préd.	Mauvaise	10	0	2
	Bonne	1	11	3
	Moyenne	1	0	6
	Total	12	11	11

TABLE 4 – Matrice de confusion du modèle de l'AD-PLS

	Qualité		
Métriques	Mauvaise	Bonne	Moyenne
Sensibilité (Recall)	0.83	**1**	0.545
Spécificité	**0.91**	0.82	**0.95**
VPP (Precision)	**0.83**	0.73	0.85
VPN	**0.9**	**1**	0.81

TABLE 5 – Métriques de classification du modèle de l'AD-PLS

Intérpretation des métriques La lecture des résultats de la classification révèle que le modèle présente des difficultés à reconnaître les vins de moyenne qualité, chose qui se traduit par une sensibilité faible pour cette qualité de vin $\sim 54\%$). La règle de décision du modèle confond donc les vins de qualité moyenne avec ceux de bonne et de mauvaise qualité. D'autre part, quand le modèle est présenté des vins de qualité autre que moyenne (i.e bonne ou mauvaise), il ne leur attribue cette qualité-là (i.e moyenne) que dans

$$1 - \text{Spécificité} = 1 - 95\% = 5\% \quad \text{des cas.}$$

Et si le modèle reconnaît parfaitement les vins de bonne qualité quand ils lui sont présentés (Sensibilité de 100%), il arrive qu'il étiquètte à tort des vins comme de bonne qualité dans

$$1 - \text{Précision} = 1 - 73\% = 27\% \quad \text{des cas.}$$

Toutefois, en examinant la matrice de confusion, on observe que cette confusion se fait davantage avec les vins de qualité moyenne qu'avec les vins de qualité mauvaise.

Par ailleurs, de tous les vins de qualité non mauvaise, le modèle les reconnaît dans 91% des cas comme de qualité non-mauvaise(Spécificité) avec une VPN de 0.9% ce qui nous renseigne sur le fait que la confusion se davantage entre les vins de bonne qualité et ceux de qualité moyenne. Quand le modèle est présenté des vins de qualité mauvaise, il les reconnaît dans 83% des cas ce qui est plutôt correct.

En conclusion, les caractéristiques des vins de qualité moyenne représente cette zone grise pour laquelle le modèle peut prendre des vins de mauvaise et de bonne qualité pour des vins de moyenne qualité mais c'est que rarement que la confusion entre les vins de bonne qualité et ceux de mauvaise qualité se produit.

4.3 Discussion et mise en situation

Le fort de ce modèle est que face à des vins de bonne qualité, le taux de faux négatifs est nul, ce qui lui procure une sensibilité et une VPN optimale pour cette qualité de vin ($|FN| = 0$) et que les vins de mauvaise qualité ne sont attribués aux vins de bonne qualité que rarement.

Ceci indique que quand les indicateurs de chaleur pour l'année sont moyen dans la globalité, une attention particulière doit être portée pour la production de cette année là pour pouvoir correctement faire ressortir les vins de bonne et de mauvaise qualité. L'inverse est valable aussi, i.e les années de fortes chaleur ou de forte pluie, la récolte aura tendence à être plutôt bonne ou plutôt mauvaise respectivement.

Toutefois, les scores sont à orienter en fonction de l'usage que l'on souhaite faire du modèle, à savoir un outil d'annotation en complète autonomie ou un outil d'aide à l'annotation

Les scores de précision et de rappel pourraient être utilisés de manière efficace et être orientés selon les enjeux dans lequel se situe le besoin de l'utilisateur du modèle. Le score de précision, par exemple, nous renseigne sur la pertinence du modèle à ne pas se tromper lors de sa prédiction d'une qualité particulière, tandis que le rappel nous renseigne sur la capacité du modèle à reconnaître une certaine qualité. Ce sont deux notions très différentes, et bien que l'on aimerait avoir sous les mains un modèle performant dans les deux, elles prennent leur sens lorsque la dimension des enjeux liée à la classification est mise en contexte avec les besoins identifiés.

Une métrique à elle seule est loin d'être suffisante, et ce dans beaucoup de cas. Par exemple, un score de précision élevé et un score de rappel très bas signifierai que, malgré la tendance du modèle à ne pas se tromper lorsqu'il prédit une certaine qualité, son taux de réussite total reste tout de même bas en raison de son incapacité à reconnaître la qualité qui lui est présentée dans la grande partie des cas.

Ainsi, à notre sens, la complémentarité des métriques de la classification est frappante, et la valorisation de l'une en faveur de l'autre se doit d'être réfléchie tout en considérant le contexte dans lequel on souhaite les utiliser et également, de leur potentielles conséquences.