

Comparaison de nMDS et PCoA

— Point de vue de P. Legendre

En PCoA, la solution est trouvée par une analyse des valeurs et vecteurs propres. En nMDS, la solution est trouvée par un algorithme itératif.

Positionnement multidimensionnel non-métrique (nMDS)

1. L'algorithme itératif peut trouver des solutions différentes selon le point de départ du calcul. Le point de départ est habituellement une configuration aléatoire.
 2. Les distances sont déformées (étirées ou contractées) pendant le calcul de nMDS. C'est une propriété de la méthode. L'ordination ne correspond pas exactement aux distances de départ.
 3. La solution peut différer selon le critère que l'utilisateur (ou la fonction) décide d'optimiser : Stress.formula1, Stress.formula2, Sstress, Strain. Ces différents critères sont disponibles dans différentes fonctions nMDS. Il est difficile pour l'utilisateur peu expérimenté de déterminer quelle option est la meilleure pour un jeu de données particulier.
 4. Dans certaines fonctions nMDS, plusieurs paramètres sont disponibles qui peuvent produire des ordinations différentes. Il est difficile pour l'utilisateur de déterminer quelle option est la meilleure pour un jeu de données particulier. Pour cette raison, les utilisateurs optent habituellement pour les options par défaut de la fonction ou du programme.
 5. L'utilisateur doit déterminer le nombre de dimensions de l'ordination à calculer. S'il demande de trouver tous les axes d'une ordination, la solution n'est pas exacte car les distances sont déformées.
 6. La statistique de stress n'indique pas la fraction de la variance des données représentée dans l'ordination.
- => nMDS est utile, par exemple, s'il est nécessaire d'écraser en deux dimensions une solution d'ACP ou de PCoA qui requiert 3 ou 4 dimensions pour bien représenter les relations principales entre les objets.

Analyse en coordonnées principales (PCoA)

1. La PCoA trouve la solution, optimale et unique, directement par décomposition eigen().
2. Dans une ordination PCoA, les distances ne sont pas déformées.
3. PCoA peut être utilisé pour trouver les quelques premiers axes de l'ordination correspondant à une matrice de distances donnée. Ces axes maximisent la variance des observations
4. PCoA permet de trouver **tous** les axes de l'ordination correspondant à une matrice de distances donnée. La matrice des PCoA permet de reconstruire précisément les distances entre les objets. La raison est que la matrice de distances euclidiennes entre les objets, calculée à partir des coordonnées principales, est égale à la matrice de distances qui a été fournie à la fonction PCoA, quelle que soit la fonction de distance utilisée. Une preuve se trouve dans Gower (1966), reprise dans Legendre & Legendre (2012). La solution est unique et exacte.
5. Ainsi, l'ensemble {fonction de distance, méthode d'ordination} produit une transformation des données unique qui peut être reproduite exactement si on reprend le calcul. Cette solution peut être utilisée comme point de départ pour de nouvelles analyses, par exemple un partitionnement *K*-means.
6. La statistique pseudo- R^2 , calculée par le rapport entre la somme des valeurs propres des axes d'intérêt (par exemple les deux premiers) sur la somme de toutes les valeurs propres, indique la fraction de la variance des données représentée dans l'ordination.