

Compte rendu 3 : Analyse en composantes principales

Etienne JEAN

28 octobre 2017

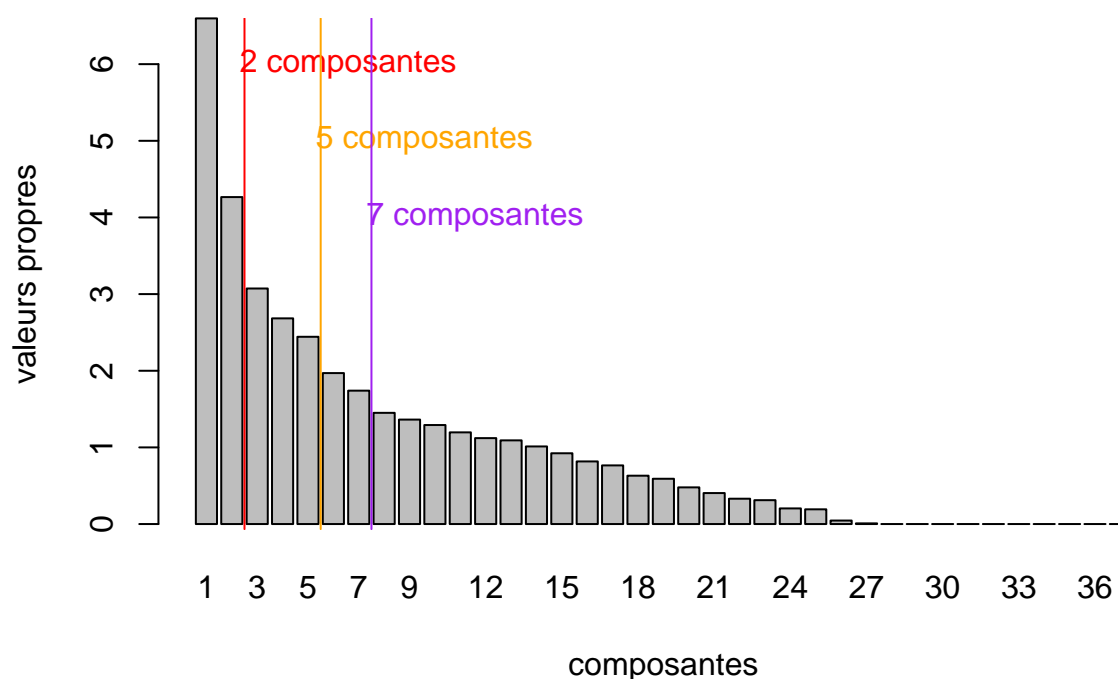
Introduction / Contexte

Analyse en composantes principales du jeu de données

Analyse préliminaire

Analyse des valeurs propres : Il faut considérer les composantes dont les valeurs propres associées sont élevées, avant une “chute” des valeurs propres. On détermine le nombre de composantes à analyser en observant l’histogramme des valeurs propres, à la recherche de cette chute. Ici, c’est soit 2, soit 5, soit 7. Mouais..

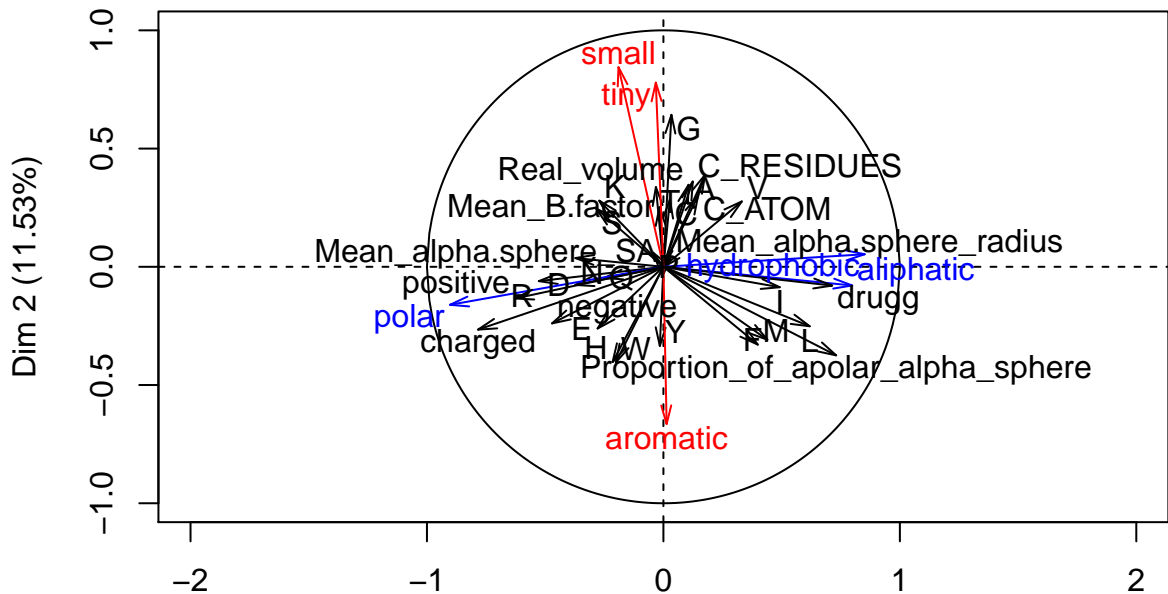
Nombre de composantes à considérer pour l'ACP



Graphique des variables

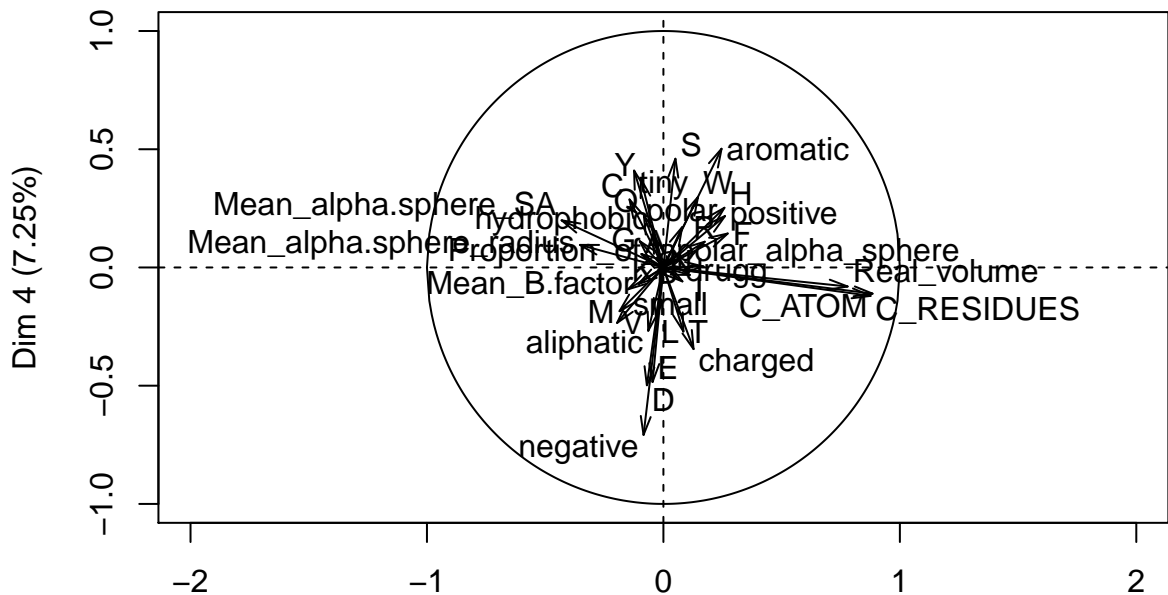
Dimension 1 : représentée principalement par les caractéristiques HYDROPHOBES+ALIPHATIC / POLAR des acides aminés présents dans les poches. Dimension 2 : représentée principalement par les caractéristiques SMALL+TINY / AROMATIC des acides aminés présents dans les poches.

Grahpique des variables



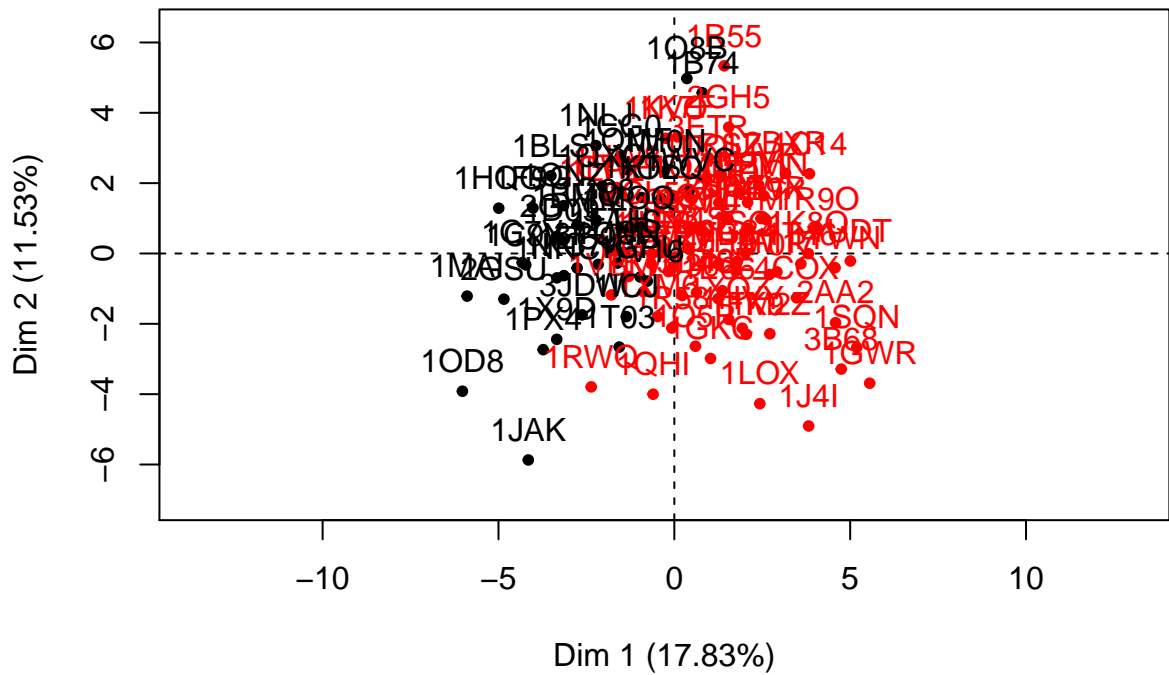
Dim 1 (17.83%)

Grahpique des var 34



Dim 3 (8.31%)

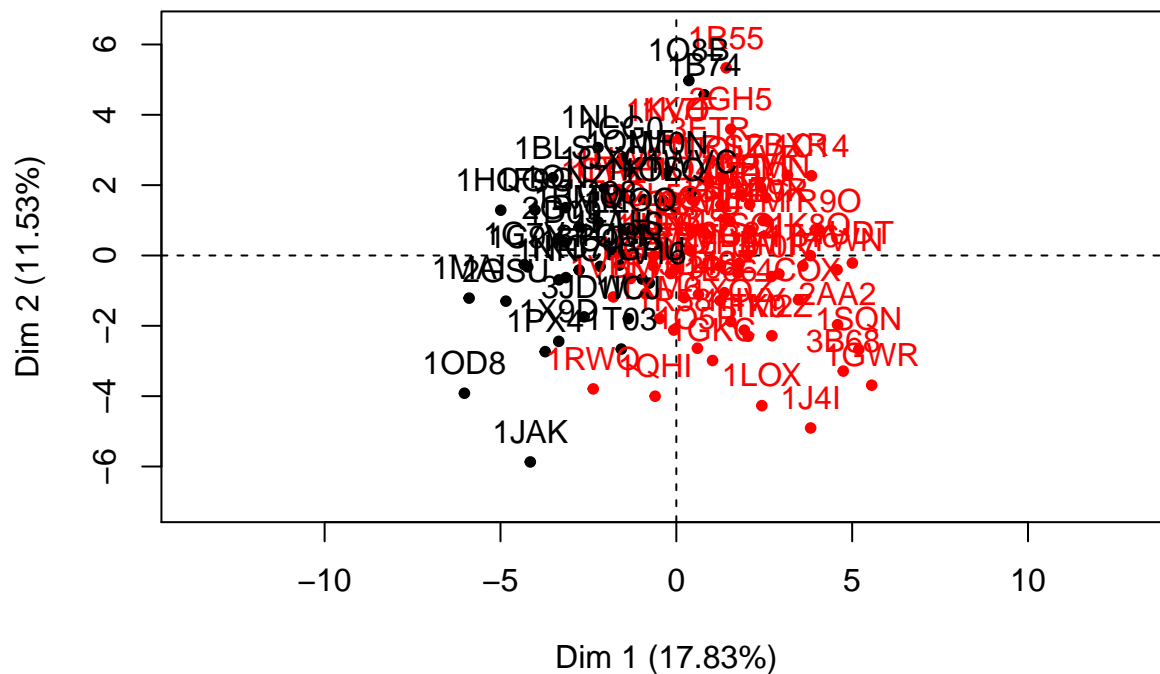
Grahpique des indiv 34



Graphique des individus

Les poches druggables sont plus hydrophobes et aliphatiques, alors que les poches non druggables sont plutôt polaires.

Grahpique des individus



Grahique des individus

