

**ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS NO ESTUDO DE ÓLEOS
ESSENCIAIS DA ESPÉCIE *Lippia origanoides* Kunth
Taiara Souza Costa¹ ; Maurício Santana Lordêlo²**

1. Bolsista PROBIC/UEFS, Graduando em Agronomia, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail:

taiiarauefs@gmail.com

2. Orientador, Departamento DEXA, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail:

mslordelo@gmail.com

PALAVRAS-CHAVE: análise multivariada; óleo essencial; planta medicinal.

INTRODUÇÃO

A Estatística mostra-se, cada vez mais, como uma poderosa ferramenta para a análise e avaliação de dados, em várias áreas do conhecimento. Até o advento dos computadores, a única forma de se analisar as variáveis era de forma isolada, e a partir dessa análise fazer inferências sobre a realidade. Sabe-se que essa simplificação tem vantagens e desvantagens (VINICI & SOUZA, 2005).

Portanto, muitas vezes há necessidade de ferramentas estatísticas que apresentem uma visão mais global do fenômeno do que aquela possível numa abordagem univariada, com isso deve se fazer o uso de métodos de análise multivariados. Quando o interesse é verificar como as variáveis se relacionam, destacam-se o método: análise de componentes principais (ACP).

A ACP pretende-se determinar as variáveis de maior influência na formação de cada componente, que serão utilizadas para estudos e permite identificar padrões nos dados e expressá-los de uma maneira tal que suas semelhanças e diferenças sejam destacadas. Uma vez, encontrados padrões nos dados, é possível comprimi-los, ou seja, reduzir suas dimensões, sem muita perda de informação (LUNA & SANTOS, 2005).

A espécie alvo desta parte do projeto de pesquisa é a *Lippia origanoides* Kunth, sendo usada principalmente no tratamento de desordens no aparelho digestivo e para antisepsia de mucosas e feridas (OLIVEIRA et al., 2007). No Estado da Bahia populações de *L. origanoides* ocorrem de forma silvestre (SALIMENA & MÚLGURA, 2015), especialmente na região da Chapada Diamantina e no Norte do Estado, sendo desconhecida a existência de variação fitoquímica entre essas populações.

Devido às pressões antrópicas, visto que a espécie é obtida por meio do extrativismo, são necessárias medidas com a finalidade de conservar esse recurso genético vegetal. A ecogeografia pode ser um auxílio, ao indicar em que ambiente uma espécie medicinal nativa ocorre, gerando subsídios para o cultivo, bem como indicando locais com genótipos de interesse (BOLDT, 2014; MARTINS, 2014).

Este trabalho tem como objetivo caracterizar os ambientes de ocorrência natural de populações de *Lippia origanoides* no Estado da Bahia, quanto às características ecogeográficas, bem como averiguar se existem variações na composição química do óleo essencial produzido pelas diferentes populações da espécie, relacionando esses dados por meio da técnica de Análise de Componentes Principais.

MATERIAL E MÉTODO

Os dados reais já estavam disponíveis nos quais foram coletados 19 acessos (tratamentos) de *L. origanoides*, sendo 18 encontrados no Estado da Bahia e um no Estado de Pernambuco. Amostras foliares foram coletadas e acondicionadas em sacos plásticos porosos (nylon), para posterior secagem e extração do óleo essencial. A extração foi realizada através da hidrodestilação, para cada acesso foram utilizadas três repetições. A análise da composição química dos óleos essenciais foi realizada por Cromatografia Gasosa, empregando-se cromatógrafos a gás com Detector de Ionização em Chama (CG/DIC) e acoplado a Espectrômetro de Massas (CG/EM).

A técnica Análise de Componentes Principais ACP é utilizada para redução do número de variáveis e para fornecer uma visão mais privilegiada do conjunto de dados, tornando mais fácil sua interpretação e análise sem perdas significativas de informação. Fornece ferramentas adequadas para identificar as variáveis mais importantes e simplificar a análise (LUNA & SANTOS, 2005). Está expressa em:

Considere as variáveis X_1, X_2, \dots, X_p medidas em cada um dos n indivíduos ou unidades experimentais que origina uma matriz de dados \mathbf{X} ($n \times p$) que possui uma matriz de covariância Σ e uma matriz de correlação \mathbf{R} , ambas $p \times p$. Associado a Σ , obtém-se os pares de autovalores e autovetores $(\lambda_1, a_1), (\lambda_2, a_2), \dots, (\lambda_p, a_p)$ de modo que $(\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_p)$. O i -ésimo componente principal é definido por (Johnson & Wichern, 1998):

$$Z_i = a_{i1}X_1 + a_{i2}X_2 + \dots + a_{ip}X_p$$

A variância de Z_i é dada por:

$$Var(Z_i) = Var(a_i' X) = a_i' Var(X) a_i = a_i' \Sigma a_i$$

Por meio de procedimentos algébricos, pode-se mostrar que a variabilidade total contida nas variáveis originais é igual à variabilidade total contida nos componentes principais. A proporção da variância total da matriz \mathbf{X} explicada pelo i -ésimo componente principal é dada por:

$$\frac{Var(Z_i)}{\sum_{i=1}^p Var(Z_i)} = \frac{\lambda_i}{\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p}$$

Pela proporção de explicação da variância total, que o modelo de p componentes principais é responsável, pode-se determinar o número de componentes que se deve reter (Johnson & Wichern, 1998).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com base nos resultados obtidos pela técnica de ACP, os respectivos autovalores e porcentagens da variância explicada por cada um estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1- Coeficientes, porcentagem da variância explicada e acumulada (%) pelos componentes.

Compostos químicos	Coeficientes	
	CP1	CP2
Alfa_pineno	0,198	-0,162

Beta_mirceno	-0,339	0,238
Ro_cimeno	-0,345	0,304
Gama_terpineno	-0,313	-0,250
Terpinen_4_ol	-0,319	0,287
Carvacrol	-0,292	0,289
E_cariofileno	0,240	-0,001
Biclogermacreno	0,334	0,311
Espatulenol	0,297	0,415
Oxido_de_cariofileno	0,293	0,414
Viridiflorol	0,313	0,393
% de variância	55,66	20,36
% acumulada	55,66	76,02

Os dois primeiros componentes principais CPs foram responsáveis por 76,02% da variação total, dos compostos químicos da *Lippia origanoides* Kunth, em que a primeira componente principal CP1 foi responsável por 55,66% e a segunda componente principal CP2 por 20,36% das variações dos dados. Esse valor visualizado pela variação total indica a porcentagem do quanto está correto o agrupamento, pois quanto maior o fator melhor é a resolução e menor será a perda de informações de dados durante o agrupamento das amostras (Neto, 2010). Portanto, os dois primeiros componentes principais resumem efetivamente a variância amostral total e faz-se necessário apenas a utilização destes para o estudo do conjunto de dados.

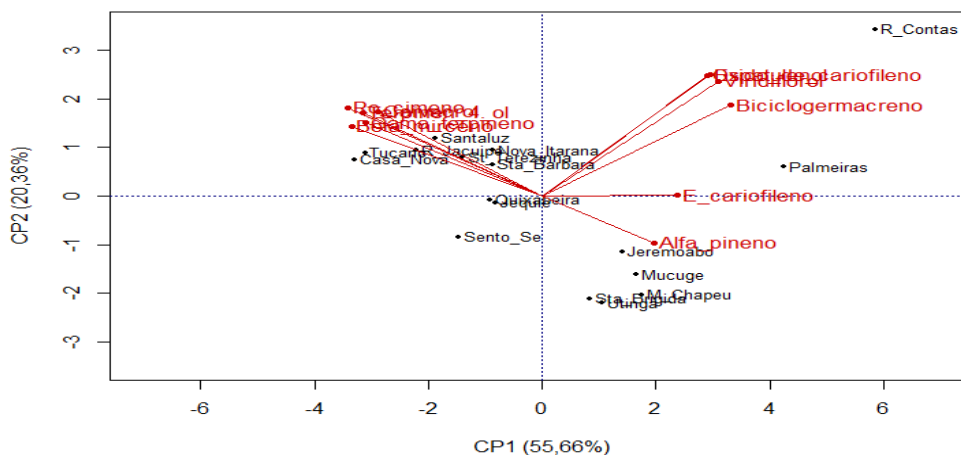


Figura 1: Biplot CP1xCP2 com os acessos (tratamentos) sobre os compostos químicos.

Sendo a CP1 está representada com maior influência positiva pelos compostos Biclogermacreno, Viridiflorol, Espatulenol e Óxido de Cariofileno. Estes compostos foram mais influenciados pelos tratamentos (acessos) coletados em Rio_Contas e Palmeira, sendo que R_Contas está mais dispersos, provavelmente isso é fruto das condições edafoclimáticas que influenciarem na composição química do óleo essencial deste tratamento. Já a CP2 está mais representada por Espatulenol, Gama_terpineno, Viridiflorol, Beta_mirceno e Rô Cimeno, sendo que os acessos que mais contribuíram

foram os acessos Tucano, Casa Nova, seguindo do Rio de Jacuípe e Santa Luz. O biplot, representado na Figura 1 e a tabela 1 expressam esses resultados.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

De acordo com os resultados, observa que a análise de componentes principais permitiu a redução do número de variáveis retirando as que apresentaram baixa variabilidade, sendo estes representados por duas variáveis (compostos CP1 e CP2) sem perda significativa de informação. Dessa forma, é possível verificar que existem variações na composição química do óleo essencial de *Lippia origanoides* produzida por diferentes acessos coletados em locais com características climáticas distintas, sendo os acessos representados pelo CP1 os quais mais se diferem aos demais.

REFERÊNCIAS

- BOLDT, A. S. **Coleções nucleares e associação do teor de óleo de cártamo com variáveis ecogeográficas por inteligência computacional**. 2014. 67 f. Tese (Doutorado em Genética e Melhoramento) – Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2014.
- JOHNSON, R.A.; WICHERN, D.W. **Applied multivariate statistical analysis**. Madison: Prentice Hall International, 1998. 816p.
- LUNA, F. D; SANTOS, A. Aplicação da metodologia de Componentes Principais na análise da estrutura a termo de taxa de juros brasileira e no cálculo de Valor em Risco. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2005.
- MARTINS, E. R. 2014. Domesticação de plantas medicinais e aromáticas: caminhos. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE OLERICULTURA, 53. **Anais...** Palmas: ABH.
- NETO, M. M. J. Estatística multivariada. **Revista de Filosofia e Ensino**. 9 maio 2010.
- OLIVEIRA, D. R.; LEITÃO, G. G.; BIZZO, H.R. Chemical and antimicrobial analyses of essential oil of *Lippia origanoides* H.B.K. **Food Chemistry**, v. 101, n. 1, p. 236–240, 2007.
- SALIMENA, F. R. G., MÚLGURA, M. 2015. *Lippia* in Lista de Espécies da Flora do Brasil. Jardim Botânico do Rio de Janeiro. Disponível em: <http://floradobrasil.jbrj.gov.br/jabot/floradobrasil/FB21449>.
- VINICI, Lorena; SOUZA, Adriano Mendonça. **ANÁLISE MULTIVARIADA DA TEORIA À PRÁTICA**, 2005.