

Redes Neurais não supervisionadas utilizadas no estudo Quimiotaxonômico da tribo *Heliantheae* (Asteraceae).

Mauro Vicentini Correia¹(IC)*, Marcus Tullius Scotti¹(PG), Vicente de Paulo Emerenciano¹(PQ).

¹Instituto de Química – Universidade de São Paulo - * mourov@gmail.com

Palavras Chave: *Heliantheae*, quimiotaxonomia, redes neurais.

Introdução

Asteraceae é uma das maiores famílias de plantas florescentes no mundo, com aproximadamente 23.000 espécies descritas botanicamente. A família tem sido muito estudada quimicamente e uma grande variedade de classes de compostos têm sido isolados (monoterpenos, sesquiterpenos, sesquiterpenos lactonizados, diterpenos, triterpenos, cumarinas, flavonóides, poliacetilenos e benzofuranos). Neste trabalho utilizaram-se 5061 ocorrências destas classes para classificar quimiotaxonomicamente a tribo *Heliantheae* (Asteraceae), utilizando mapas auto-organizáveis Kohonen¹, e os resultados foram comparados com a classificação proposta por Stuessy².

Resultados e Discussão

Realizou-se a divisão entre os três ramos evolutivos A, B e C, descritos por Stuessy², entre si, em seguida foram separadas uma subtribo de cada um dos ramos, e por fim separaram-se as subtribos de um mesmo ramo.

Na tabela I estão os resultados obtidos. As porcentagens de acertos estiveram acima de 80%, excetuando os acertos individuais do ramo B (rede 1), e da subtribo *Ambrosiinae* (rede 3). Em ambos os casos a baixa quantidade de acertos pode estar relacionada ao pequeno tamanho das séries de treinamento em relação aos das outras séries dentro de cada rede. Ainda mais, as subtribos *Ambrosiinae* e *Helianthinae*, segundo Stuessy², possuem número de cromossomos iguais. Assim, é possível inferir que estas subtribos estão próximas evolutivamente, por esse motivo a separação é menos evidente.

Tabela I. Resultados obtidos com o mapa Kohonen¹.

Ramos (rede 1)	Tamanho da série de treinamento	Quantidade de Acertos	% Acertos
A	451	425	94.2
B	159	107	67.3

Total	610	532	87.2
-------	-----	-----	------

Tabela I. continuação

Ramos (rede 2)	Tamanho da série de treinamento	Quantidade de Acertos	% Acertos
B	159	131	82.4
C	153	135	88.2
Total	312	266	85.3

Subtribo (rede 3)	Tamanho da série de treinamento	Quantidade de Acertos	% Acertos
<i>Helianthinae</i>	132	105	79.6
<i>Coreopsidinae</i>	159	151	95.0
<i>Ambrosiinae</i>	94	61	64.9
Total	385	317	82.3

Subtribo (rede 4)	Tamanho da série de treinamento	Quantidade de Acertos	% Acertos
<i>Helianthinae</i>	132	108	81.8
<i>Gaillardinae</i>	82	69	84.2
Total	214	177	82.7

Conclusões

Com a utilização dos dados químicos foi possível separar os três ramos evolutivos, descritos por Stuessy², como distintos, com índices médios de acertos superiores a 80% (ver tabela de I.1.) Também foi possível separar de maneira satisfatória duas subtribos de um mesmo ramo, ramo A.

O conjunto dos resultados mostra que os dados de ocorrência de metabólitos secundários são úteis no auxílio à classificação taxonômica.

Agradecimentos

FAPESP, CNPQ, CAPES.

¹ <http://www.cis.hut.fi/projects/somtoolbox> acessado em 2005.

² Stuessy, T.F. 'Heliantheae-Systematic Review', In: Heywood VH, Harbone JB, Turner BL. eds. 'The biology and Chemistry of the Compositae', Academic Press, London, 1997.