UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE QUÍMICA
Programa de Pós-Graduação em Química

HAROLD HILARION FOKOUE

**EMPREGO DE ESTATÍSTICA MULTIVARIADA NO
ESTUDO QUIMIOSSISTEMÁTICO DA FAMÍLIA
ASTERACEAE E DA SUA TRIBO HELIANTHEAE**

São Paulo

Data do Depósito na SPG: 01/02/2010

HAROLD HILARION FOKOUE

**EMPREGO DE ESTATÍSTICA MULTIVARIADA NO
ESTUDO QUIMIOSSISTEMÁTICO DA FAMÍLIA
ASTERACEAE E DA SUA TRIBO HELIANTHEAE**

*Dissertação apresentada ao Instituto de Química
da Universidade de São Paulo para obtenção do
Título de Mestre em Química (Química Orgânica)*

Orientador: Prof. Dr. Vicente de Paulo Emerenciano

São Paulo

2010

HAROLD HILARION FOKOUE

**Emprego de Estatística Multivariada no Estudo Quimiossistemático da Família
Asteraceae e da sua Tribo Heliantheae.**

*Dissertação apresentada ao Instituto de Química
da Universidade de São Paulo para obtenção do
Título de Mestre em Química (Química Orgânica)*

Aprovado em: _____

Banca Examinadora

Prof. Dr. _____

Instituição: _____

Assinatura: _____

Prof. Dr. _____

Instituição: _____

Assinatura: _____

Prof. Dr. _____

Instituição: _____

Assinatura: _____

Dedicatória

Ao Senhor Jesus Cristo o mestre de toda ciência.

Ao Prof.Dr. Zacharias Tanee Fomum (in memoriam) pelo modelo dado na vida e na ciência.

Ao Engenheiro Leopold Kala Tadonstop (in memoriam) pelos encorajamentos, apoio dado em meus estudos.

Ao meu pai Joseph Fokoue, à minha mãe Marie Noel Ngamani Bouadja e a toda minha família pelo apoio dado em toda a minha vida.

A todos que diretamente e indiretamente me ajudaram e apoiaram em meus estudos.

Agradecimentos

Ao Senhor Jesus Cristo pela vida, inteligência, e tudo o que Ele me deu.

Ao Prof.Dr. Zacharias Tanee Fomum (in memoriam) pela sua orientação para que eu fizesse química orgânica.

A toda minha família por todos os sacrifícios concedidos.

Ao Prof. Dr. Vicente de Paulo Emerenciano, do Instituto de Química da USP, pela acolhida em seu grupo de pesquisa, sua paciência e orientação para realização deste trabalho.

Aos Professores Massuo Jorge Kato, Josef Wilhelm Baader, João Pedro Simon Farah, Marcelo José Pena Ferreira, Marcus Tullius Scotti pela ajuda, apoio e conselho.

Ao Mauro Vicentini Correia e a todos os colegas por suas contribuições nesta dissertação.

À família Ngonge e todos que me ajudaram na realização deste trabalho.

À CAPES pela bolsa de mestrado fornecida.

“O temor do Senhor é o princípio do conhecimento; os loucos desprezam a sabedoria e a instrução.”

Rei Salomão (Proverbios 1.7)

RESUMO

Fokoue, H.H. Emprego de Estatística Multivariada no estudo Quimiossistemático da Família Asteraceae e da sua Tribo Heliantheae. 2010. 263p. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Química. Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo

Este trabalho **análise** as ocorrências de 12 classes de substâncias (monoterpenos, sesquiterpenos, lactonas sesquiterpênicas, diterpenos, triterpenos, cumarinas, flavonóides, poliacetilenos, benzofuranos, benzopiranos, acetofenonas e fenilpropanóides) na família Asteraceae e na sua tribo Heliantheae. Pretende-se demonstrar a existência de correlações na produção de metabólitos secundários em níveis taxonômicos baixos (tribos, subtribos e gêneros). Utilizou-se um banco de dados com cerca de 36.000 ocorrências das principais substâncias isoladas em plantas da família. O estudo do equilíbrio químico na produção de metabólitos secundários foi feito utilizando-se Regressão Linear Múltipla. As afinidades entre os grupos com base na sua Química foram pesquisadas por vários métodos tais como: Análise de componentes principais, Análise de Cluster e Análises cladísticas. Observou-se também o grau de oxidação médio de vários metabólitos e sua utilidade como ferramenta em análises quimiotaxonômicas. Foi possível mostrar a existência de um equilíbrio na produção das 12 classes de metabólitos em níveis das tribos e subtribos. Mas, no nível dos gêneros um equilíbrio moderado foi encontrado. Também foi possível mostrar a existência de um equilíbrio oxidativo em vários níveis (tribos, subtribos). No nível dos gêneros nenhum equilíbrio foi encontrado utilizando-se o parâmetro passo oxidativo. Foi possível agrupar algumas das subfamílias de Asteraceae segundo Bremer e subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy usando Análises de componentes principais e Análise de Cluster.

Palavras-chaves: Quimiotaxonomia, Asteraceae, Heliantheae, Equilíbrio Oxidativo, Regressão Linear Múltipla, Análise de Componentes Principais.

ABSTRACT

Fokoue, H.H. Use of Multivariate Statistics in the Chemosystematics of Asteraceae family and its Heliantheae tribe. 2010. 263p. Master's thesis-Graduate Program in Chemistry. Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo.

This work analyse the occurrence of 12 classes of substances (monoterpenes, sesquiterpenes, sesquiterpene lactones, diterpenes, triterpenes, coumarins, flavonoids, polyacetylenes, Benzofurans, benzopyrans, acetophenones and phenylpropanoids) in the Asteraceae family and its Heliantheae tribe. This study intends to demonstrate the existence of correlations in the production of secondary metabolites in lower taxonomic levels (tribes, subtribes and genera). We used a database of about 36,000 occurrences of the main substances isolated from the plant family. The study of chemical equilibrium in the production of secondary metabolites was done using Multiple Linear Regression. The affinities between the groups based on their chemistry were investigated by various methods such as principal component analysis, Cluster and cladistic analysis. There was also the average degree of oxidation of various metabolites and their usefulness as a tool in chemotaxonomic analysis. It was possible to show the existence of a balance in the production of 12 classes of metabolites in the levels of the tribes and subtribes. But the level of the genus balance was found moderate. It was also possible to show the existence of an oxidative equilibrium in various levels (tribes, subtribes). The level of genus balance was not found using the parameter oxidation step. We could group some of the subfamilies of Asteraceae according to Bremer and the subtribes of Heliantheae according to Stuessy using the principal component analysis and Cluster Analysis.

Keywords: chemosystematic, Asteraceae, Heliantheae, Oxidative Balance, Multiple Linear Regression, Principal Component Analysis.

ÍNDICES DE FIGURAS

1. INTRODUÇÃO

Figura 1.1: Árvore evolutiva universal determinada pela comparação de seqüências do RNA ribossômico.....**23**

Figura 1.2: Classificação taxonômica da tribo Heliantheae da família Asteraceae.....**24**

Figura 1.1.1 Exemplos das 12 classes de metabólitos secundários usados nesse trabalho.....**25**

Figura 1.2.1. Caracteres morfológicos da família Asteraceae.....**27**

Figura 1.2.1.1. Diagrama, segundo Cassini (Cassini 1816), mostrando as inter-relações de 19 tribos de Asteraceae.....**29**

Figura 1.2.1.2. Diagrama, segundo Bentham (Bentham 1873), reduzindo o número de tribos de 19 (Cassini 1816) para 13, e suas inter-relações.....**29**

Figura 1.2.1.3. As classificações de Carlquist (Carlquist 1976) e Wagenitz (Wagenitz 1976) baseados em caracteres morfológicos.....**30**

Figura 1.2.1.4. Diagrama Filogenético de tribos da Asteraceae de acordo com Bremer (Bremer 1996).....**31**

Figura 1.2.1.5. Árvore filogenética gerada por Kin e Jansen para as tribos da família Asteraceae utilizando dados moleculares (Kin & Jansen 1995; Kin & Jansen 1996).....**32**

Figura 1.2.1.6 Cladograma da super-árvore (supertree) de Funk (Funk *et al.* 2005) e colaboradores mostrando as relações das tribos da família Asteraceae.....**33**

Figura 1.2.1.7 Cladograma da metatree de Funk (Funk *et al.* 2009) e colaboradores mostrando as relações das tribos da família Asteraceae.....**34**

Figura 1.2.2.1 Relações hipotéticas entre as subtribos de Heliantheae de acordo com Stuessy (Stuessy 1977). O número entre parêntesis indica o número de cromossomos em cada subtribo.....**35**

3. METODOLOGIA

Figura 3.2.1: Esquema das rotas biossintéticas de produtos naturais em plantas.....**41**

Figura 3.2.1.1. Esquema da rota biossintética dos terpenos a partir do pirofosfato de isopentenila e do pirofosfato de 3,3-dimetila.....**42**

Figura 3.2.1.2 – Biossíntese do IPP: Rota do ácido mevalônico.....**43**

Figura 3.2.1.3 - Biossíntese do IPP: Rota do 1-desoxi-D-xilose-5-fosfato.....	44
Figura 3.2.1.4 Biogênese de sesquiterpenos lactonizados a partir do isopreno.....	45
Figura 3.2.1.1.1 Exemplo de alguns monoterpenos.....	46
Figura 3.2.1.2.1 Exemplos de sesquiterpenos e lactonas sesquiterpênicas.....	47
Figura 3.2.1.3.1 Exemplos de diterpenos.....	47
Figura 3.2.1.4.1 Exemplos de triterpenos.....	48
Figura 3.2.2.1: Esqueleto básico de um flavonóide com o anel A e B apresentados.....	49
Figura 3.2.2.2 Tipos de anéis C encontrados em flavonóides.....	49
Figura 3.2.2.3: Esquema hipotético para a formação de 4, 2', 4', 6-tetraidroxichalcona a partir do malonil-CoA e p-cumaroil-CoA.....	50
Figura 3.2.2.4 : biossíntese de alguns flavonóides a partir do 4-coumaroyl-CoA.....	50
Figura 3.2.3.1 Esquema da rota biogenética de poliacetilenos.....	54
Figura 3.2.4.1 Esquema da rota biossintética de cumarinas simples.....	55
Figura 3.2.5.1 Esquema da rota biossintética de acetofenonas.....	56
Figura 3.2.6.1 Exemplo de um benzofurano e benzopirano.....	56
Figura 3.2.7.1 Exemplo de fenilpropanóides.....	57
Figura 3.3.1 Ficha-modelo usada para o levantamento bibliográfico.....	59
Figura 3.3.2 Figura ilustrativa do programa Gertaxo.....	60
Figura 3.4.1.1 Exemplos do cálculo de NOX.....	62
Figura 3.4.2.1. Exemplos de cálculo de PO.....	63
Figura. 3.5.5.1 Modelo de diagrama filogenética.....	70

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Figura 4.2.1.1: Representação das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos de Asteraceae segundo Bremer.....	80
--	-----------

Figura 4.2.2.1 Representação das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos de Asteraceae segundo a “metatree”	84
Figura 4.2.3.1 Representação das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	87
Figura 4.2.4.1 Representação das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	90
Figura 4.2.5.1 Representação das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.....	93
Figura 4.3.1 Esqueleto básico de um flavonóide com o anel A e B apresentados.....	95
Figura 4.7.1.1 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em tribos da família Asteraceae segundo Bremer.....	146
Figura 4.7.2.1 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”	148
Figura 4.7.2.2 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) nas 10 tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	151
Figura 4.7.2.3 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”	153
Figura 4.7.3.1 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	155
Figura 4.7.3.2 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer	157
Figura 4.7.4.1 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy	159
Figura 4.7.4.2 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy	161
Figura 4.7.5.1 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.....	163

Figura 4.7.5.2 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson.....	165
Figura 4.8.1.1 PCA (PC1/PC2) dos dados normalizados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer.....	168
Figura 4.8.1.2 PCA (PC1/PC2) dos dados normalizados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos (sem a tribo Barnadesieae) da família Asteraceae segundo Bremer	168
Figura 4.8.1.3 PCA (PC1/PC2) das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer	169
Figura 4.8.2.1 PCA (PC1/PC2) dos dados normalizados das ocorrências das 5 classes de terpenóides em tribos da família Asteraceae segundo Bremer.....	170
Figura 4.8.2.2 PCA (PC1/PC2) dos dados normalizados das ocorrências das 5 classes de terpenóides em tribos (sem a tribo Barnadesieae) da família Asteraceae segundo Bremer.....	170
Figura 4.8.3.1 PCA (PC1/PC2) dos dados normalizados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	171
Figura 4.8.3.2 PCA (PC1/PC2) das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	172
Figura 4.8.3.3 PCA (PC1/PC2) das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos (sem as subtribos Fitchiinae (FIT) e Neurolaeninae (NEU)) da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	172
Figura 4.9.1.1 Dendrograma mostrando agrupamento das 17 tribos de família Asteraceae segundo Bremer (ligação completa, distâncias euclidianas) baseado nos números de ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários.....	174
Figura 4.9.1.2 Dendrograma mostrando agrupamento das 17 tribos de família Asteraceae segundo Bremer,(método de ward, distâncias euclidianas) baseado nos números de ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários.....	174
Figura 4.9.1.3 Dendrograma mostrando agrupamento das 17 tribos de família Asteraceae segundo Bremer,(ligação completa, distâncias euclidianas) baseado na médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários.....	175
Figura 4.9.1.4 Dendrograma mostrando agrupamento das 17 tribos de família Asteraceae segundo Bremer,(método de ward, distâncias euclidianas) baseado na médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários.....	176

Figura 4.9.2.1 Dendrograma mostrando agrupamento das 17 tribos de família Asteraceae segundo Bremer,(método de ward, distâncias euclidianas) baseado nos numeros das ocorrências das 5 classes de terpenóides177

Figura 4.9.2.2 Dendrograma mostrando agrupamento das 17 tribos de família Asteraceae segundo Bremer,(método de ward, distâncias euclidianas) baseado na porcentagem das ocorrências das 5 classes de terpenóides.....177

Figura 4.9.3.1 Dendrograma mostrando agrupamento das 15 subtribos de Heliantheae segundo Stuessy ,(ligação completa, distâncias euclidianas) baseado nos números das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários.....178

Figura 4.9.3.2 Dendrograma mostrando agrupamento das 15 subtribos de Heliantheae segundo Stuessy ,(método de ward, distâncias euclidianas) baseado nos números das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários.....179

Figura 4.9.3.3 Dendrograma mostrando agrupamento das 15 subtribos de Heliantheae segundo Stuessy ,(ligação completa, distâncias euclidianas) baseado nas médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários.....180

Figura 4.9.3.4 Dendrograma mostrando agrupamento das 15 subtribos de Heliantheae segundo Stuessy ,(método de ward,distâncias euclidianas) baseado nas médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários.....181

Figura 4.10.1 Diagrama filogenética das subtribos de Heliantheae segundo Stuessy, a partir da presença ou ausência dos esqueletos de metabólitos secundários usando o método de distância.....182

Figura 4.10.2 Diagrama filogenética da árvore de consenso das subtribos de Heliantheae segundo Stuessy, a partir da presença ou ausência dos esqueletos de metabólitos secundários usando o método de parcimônia pela busca heurística tendo como grupo externo a subtribo Alomieae (ALO) da tribo Eupatorieae.....183

INDICES DE TABELAS

3. METODOLOGIAS

Tabela 3.3.1: Tipos de contagem realizada no programa GERTAXO a partir dos dados pesquisados nas tribos da família Asteraceae segundo Bremer e a “metatree” e do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....**59**

Tabela 3.3.2: Tipos de contagem realizada no programa GERTAXO a partir dos dados levantados da tribo Heliantheae segundo a classificação de Stuessy e Robinson.....**60**

Tabela 3.5.1: Alguns parâmetros estatísticos selecionados para avaliar a validade estatística das correlações e modelos gerados.....**64**

Tabela 3.5.4.1: resumo dos métodos aglomerativos.....**69**

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Tabela 4.1.1: Fragmento do Banco de dados de Asteraceae.....**72**

Tabela 4.1.2: Quantidade de espécies presentes na família Asteraceae segundo Bremer, quantidade de espécies presentes no banco de dados de Asteraceae do grupo, e porcentagem de espécies presentes no banco em relação à classificação de Bremer.....**73**

Tabela 4.2.1.1: Matriz de dados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer.....**79**

Tabela 4.2.1.2 : Porcentagem das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer**81**

Tabela 4.2.2.1: Matriz de dados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”**83**

Tabela 4.2.2.2 Porcentagem das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”**85**

Tabela 4.2.3.1 Matriz de dados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....**87**

Tabela 4.2.3.2 Porcentagem das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....**88**

Tabela 4.2.4.1 Matriz de dados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....**89**

Tabela 4.2.4.2 Porcentagem das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	90
Tabela 4.2.5.1 Matriz de dados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.....	92
Tabela 4.2.5.2 Porcentagem das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.....	94
Tabela 4.3.1.1 Médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer.....	96
Tabela 4.3.2.1 Média dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários das tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”.....	97
Tabela 4.3.3.1 Média dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer....	98
Tabela 4.3.4.1 Média dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	99
Tabela 4.3.5.1 Média dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários das subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.....	100
Tabela 4.4.1.1 Fragmento da matriz dos esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários das tribos da família Asteraceae segundo Bremer.....	102
Tabela 4.4.2.1 Fragmento da matriz dos esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários das tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”.....	103
Tabela 4.4.3.1 Fragmento da matriz dos esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários das subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	104
Tabela 4.4.4.1 Fragmento da matriz dos esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	105
Tabela 4.4.5.1 Fragmento da matriz dos esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários das subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.....	106
Tabela 4.5.1.1 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer.....	108
Tabela 4.5.1.2 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em tribos da família Asteraceae segundo Bremer.....	109
Tabela 4.5.2.1 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”...	110
Tabela 4.5.2.2 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”.....	110

Tabela 4.5.2.3 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários nas 10 tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	112
Tabela 4.5.2.4 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras nas 10 tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	112
Tabela 4.5.2.5 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”	114
Tabela 4.5.2.6 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”	114
Tabela 4.5.3.1 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	115
Tabela 4.5.3.2 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras das subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	116
Tabela 4.5.3.3 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	117
Tabela 4.5.3.4 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	117
Tabela 4.5.4.1 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	119
Tabela 4.5.4.2 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	119
Tabela 4.5.4.3 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	120
Tabela 4.5.4.4 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	120
Tabela 4.5.5.1 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson....	122
Tabela 4.5.5.2 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras das subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.....	122
Tabela 4.5.5.3 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson.....	123

Tabela 4.5.5.4 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson.....	124
Tabela 4.6.1.1 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribo da família Asteraceae segundo Bremer.....	127
Tabela 4.6.1.2 Índices estatísticos das regressões da média dos passo oxidativos de uma classe versus as outras em tribos da família Asteraceae segundo Bremer.....	127
Tabela 4.6.2.1 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”	129
Tabela 4.6.2.2 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”	129
Tabela 4.6.2.3 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	131
Tabela 4.6.2.4 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	131
Tabela 4.6.2.5 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”	133
Tabela 4.6.2.6 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em gêneros família Asteraceae segundo a “metatree”	133
Tabela 4.6.3.1 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	135
Tabela 4.6.3.2 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	135
Tabela 4.6.3.3 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	137
Tabela 4.6.3.4 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	137

Tabela 4.6.4.1 Matriz de correlações entre as médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	139
Tabela 4.6.4.2 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	139
Tabela 4.6.4.3 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	140
Tabela 4.6.4.4 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	141
Tabela 4.6.5.1 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.....	142
Tabela 4.6.5.2 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.....	142
Tabela 4.6.5.3 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson	144
Tabela 4.6.5.4 Índices estatísticos das regressões da média das oxidações de uma classe versus as outras em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson.....	144
Tabela 4.7.1.1 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em tribos da família Asteraceae segundo Bremer.....	146
Tabela 4.7.2.1 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”.....	149
Tabela 4.7.2.2 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) nas 10 tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	151
Tabela 4.7.2.3 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”.....	153
Tabela 4.7.3.1 Tabelas de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....	155

Tabela 4.7.3.2 Tabelas dos valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.....**157**

Tabela 4.7.4.1 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....**159**

Tabela 4.7.4.2 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....**161**

Tabela 4.7.5.1 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.....**164**

Tabela 4.7.5.2 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson.....**166**

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

r : coeficiente de correlação

PCA : análise de componentes principais

PLS : método de regressão por mínimos quadrados parciais

MLR : regressão linear múltipla

R : coeficiente de correlação múltiplo.

R^2 : coeficiente de determinação múltipla ou de explicação.

Adj R^2 : R^2 ajustado

p : probabilidade

F : Teste- F ou fator de confiabilidade

R^2 -boot : R^2 da validação pelo método de Bootstrap.

R^2 -PLS-cal: R^2 da calibração pelo PLS

R^2 -PLS-valc: R^2 da validação cruzada pelo PLS.

ES: entropia de Shannon

AC: análise de cluster

NOX: grau de oxidação de uma substância

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	23
1.1. Quimiosistemática.....	24
1.2. Taxonomia da família Asteraceae e da sua tribo Heliantheae.....	26
1.3. Quimiotaxonomia da família Asteraceae.....	37
1.4. Armazenamento dos dados.....	38
2. OBJETIVOS	39
3. METODOLOGIAS	40
3.1. Marcadores químicos.....	40
3.2. Estudo e biossíntese dos diferentes marcadores.....	40
3.3. Coleta e arquivamento dos dados.....	57
3.4. Parâmetros evolutivos.....	61
3.5. Análise dos dados.....	63
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	72
4.1. O banco de dados.....	72
4.2. Ocorrências de metabólitos secundários na família Asteraceae e na sua tribo Heliantheae.....	74
4.3. Média das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários na família Asteraceae e na sua tribo Heliantheae.....	95
4.4 Ocorrências dos esqueletos de metabólitos secundários na família Asteraceae e na sua tribo Heliantheae.....	101
4.5. Estudo do equilíbrio na produção dos metabólitos secundários na família Asteraceae e na sua tribo Heliantheae.....	107
4.6. Estudo do equilíbrio oxidativo dos metabólitos secundários na família Asteraceae e na sua tribo Heliantheae.....	124
4.7. Previsão da produção do esqueleto 1 a partir dos outros esqueletos na família Asteraceae e na sua tribo Heliantheae.....	144

4.8. Análise de componente principal (PCA) das ocorrências e das médias das oxidações das 12 classe de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer e da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	166
4.9. Análise de Cluster (AC) das ocorrências e das médias das oxidações das 12 classe de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer e da tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	173
4.10. Análise cladística a partir da presença ou ausência dos esqueletos das classes de metabólitos secundários na tribo Heliantheae segundo Stuessy.....	181
 5. CONCLUSÕES	184
 6. REFERÊNCIAS.....	186
 APÊNDICES.....	191

1. INTRODUÇÃO

A sistemática é a ciência que estuda a classificação, a identificação e a nomenclatura das plantas.

Uma comparação de seqüências de nucleotídios (RNA ribossômico) dos organismos vivos levou a divisão dos seres vivos em três domínios: Bactéria, Archaea e Eukarya. (figura 1.1). (Raven *et al.*, 2001)

Figura 1..1: Árvore evolutiva universal determinada pela comparação de seqüências do RNA ribossômico.

As plantas encontradas no reino Plantae pertencem ao domínio dos Eukaria. A família Asteraceae, objeto deste estudo, é uma das mais importantes famílias de plantas vasculares florescentes no mundo. Na figura 1.2 são apresentados mais detalhes da sua classificação taxonômica.

Domínio: Eukarya

Reino: Plantae

Sub-reino: Viridaeplantae

Superdivisão: Spermatophyta

Divisão: Tracheophyta

Infradivisão: Angiospermae

Classe: Magnoliopsida

Subclasse: Asteridae

Ordem: Asterales

Família: Asteraceae ou Compositae

Subfamília: Asteroideae

Tribo: Heliantheae

Figura 1.2 : Classificação taxonômica da tribo Heliantheae da família Asteraceae

1.1 Quimiossistemática

A quimiossistemática consiste na classificação dos organismos através de caracteres químicos, geralmente metabólitos secundários, fornecendo algumas respostas e/ou propostas para uma compreensão maior sobre evolução.

As substâncias produzidas pelos vegetais são chamadas de metabólitos primários e secundários. As plantas utilizam a energia do sol para produzir compostos orgânicos a partir do dióxido de carbono, em um processo chamado fotossíntese. Os produtos iniciais da fotossíntese são os carboidratos. Posteriores alterações metabólicas geram uma diversidade de compostos orgânicos de estruturas simples e com baixo peso molecular – entre estes estão açúcares, ácidos carboxílicos e aminoácidos, sendo encontrados em todos os seres vivos. Estes compostos são formados em reações químicas denominadas de processo metabólico primário. Os metabólitos secundários apresentam uma distribuição mais restrita, e se originam de fontes botânicas mais específicas (Geissman & Crout 1969). Os metabólitos secundários são divididos em classes como os mostrados na figura 1.1.1.

Figura 1.1.1 Exemplos das 12 classes de metabólitos secundários usados nesse trabalho.

Os metabólitos secundários são importantes marcadores quimiotaxonômicos (Harborne 1988) na Química de Produtos Naturais. Técnicas como espectroscopia

de ressonância magnética nuclear 2D aliada a programas computacionais específicos (Topcu & Ulubelen, 2007) podem diminuir o tempo de identificação estrutural de substâncias quando as estruturas forem altamente complexas. A cada ano há um aumento da quantidade de dados relativos a diversas estruturas de compostos orgânicos. Estes dados fornecem uma riqueza de informação e, quando arquivados, podem ser usados para estudos quimiotaxonômicos ou para estudos de previsão de possíveis tipos de substâncias de alta probabilidade de aparecer em táxons ainda não estudados. Exemplos da aplicação de bancos de dados quimiotaxonômicos são encontrados na literatura (Emerenciano *et al.* 1998a; Emerenciano *et al.* 1998b) .

Na família Asteraceae, uma das maiores entre as Angiospermas, são isolados compostos pertencentes às classes mostradas na figura 1.1.1.

1.2 Taxonomia de família Asteraceae e da tribo Heliantheae

A família Asteraceae ou Compositae é uma das maiores famílias de plantas florescentes no mundo, dentro do grupo das angiospermas. Cerca de 24000 espécies dessa família já foram descritas botanicamente, e diversas revisões com relação a sua Química e Biologia foram publicadas (Heywood 1977; Bremer 1992; Hind & Beentje 1994). Sua distribuição é vasta e envolve os mais variados ecossistemas, é uma planta cosmopolita. Existem 1600-1700 gêneros distribuídos por todo o mundo, exceto na Antártica (Funk *et al.*, 2009). É chamada mais comumente de “a família do girassol” ou “a família da margarida” (Herman *et al.*, 2000), As plantas da família têm grande importância econômica, incluindo alimentos (alface - *Lactuca sativa* e girassol - *Helianthus annuus*), ornamentais (dália e crisântemo), ervas medicinais (camomila, picão, artemísia) (Brant, 2002).

A família é monofilética, ou seja, todos os representantes da família derivam de um ancestral comum e incluem todos os seus descendentes. Em trabalhos antigos de classificação as espécies da família já foram consideradas como um grupo e em todos os tipos de análises com a família o resultado encontrado é de que a Astereaceae é monofilética (Funk *et al.*, 2009).

Asteraceae é caracterizada por flores arranjadas em uma estrutura chamada capítulo, que consiste de muitas flores individuais pequenas, chamadas flósculos; por anteras fundidas em um anel com o pólen sendo empurrado ou forçado pelo estilo e pela presença de cipselas (frutos secos). Essas estruturas estão mostradas na figura 1.2.1.

Figura 1.2.1. Caracteres morfológicos da família Asteraceae.

A. Inflorescência do capítulo B. Antera fundida C. Tipos de cipselas

A tribo Heliantheae é uma das maiores e mais importante da família Asteraceae. Ela é composta por cerca de 190 gêneros e 2500 espécies. A maior parte de Heliantheae consiste em ervas ou arbustos, mas há algumas plantas que são pequenas árvores. As folhas são normalmente cabeludas e arranjas em pares opostos. As anteras são normalmente enegrecidas. As plantas da tribo têm grande importância econômica, ornamental e medicinal.

1.2.1 Taxonomia da família Asteraceae

A família Asteraceae foi classificada por vários botânicos (Cassini 1816; Bentham 1873; Carlquist 1976; Hoffman 1890; Wagenitz 1976; Cronquist 1988; Bremer 1996). O botânico francês Henry Cassini (Cassini 1816) foi o primeiro classificador da família Asteraceae, e através de seus estudos identificou numerosos gêneros e tribos que atualmente ainda são reconhecidos.

Em 1816, Cassini publicou um diagrama mostrando as inter-relações de 19 tribos (figura 1.2.1.1). Em 1873, Bentham apresentou uma nova classificação (figura 1.2.1.2), onde a família é dividida em 13 tribos com algumas modificações em relação ao esquema apresentado por Cassini. Em 1890, Hoffman (Hoffman 1890) repete a classificação de Cassini, com um número pequeno de alterações.

Figura 1.2.1.1. Diagrama, segundo Cassini (Cassini 1816), mostrando as inter-relações de 19 tribos de Asteraceae.

Figura 1.2.1.2. Diagrama, segundo Bentham (Bentham 1873), reduzindo o número de tribos de 19 (Cassini 1816) para 13, e suas inter-relações.

Em 1976, Carlquist (Carlquist 1976) dividiu a Asteraceae em 2 subfamílias em base de estudos morfológicos, Asteroideae e Cichorioideae (figura 1.2.1.3). No

mesmo ano, Wagenitz (Wagenitz 1976) também propôs uma divisão em 2 subfamílias que diferenciou da Carlquist, colocando a tribo Eupatorieae na subfamília Asteroideae ao invés na Cichorioideae. Essa visão bifilética da família foi o maior passo no entendimento das relações entre as tribos da Asteraceae.

Wagenitz (1976)	Carlquist (1976)
Cichorioideae	Cichorioideae
Lactuceae	Mutisieae
	Vernonieae
Asteroideae	Cardueae
	Arctoteae
Grupo 1	Cichorieae
Vernonieae	Eupatorieae
Liabeae	
Mutisieae	Asteroideae
Cardueae	Heliantheae
Echinopeae	Astereae
Arctotideae	Inuleae
	Anthemideae
Grupo 2	Senecioneae
Eupatorieae	Calenduleae
Heliantheae	
Helenieae	
Senecioneae	
Calenduleae	
Astereae	
Inuleae	
Anthemideae	

Figura 1.2.1.3. As classificações de Carlquist (Carlquist 1976) e Wagenitz (Wagenitz 1976) baseados em caracteres morfológicos.

Em 1987, Bremer apresentou um cladograma da Asteraceae baseado em 81 caracteres, 10 dos quais químicos (Bremer 1987). Os caracteres restantes foram na sua maioria características morfológicas e de DNA. Este estudo é um exemplo de classificação incorporando caracteres químicos combinados com morfológicos e moleculares. Oito anos depois, Bremer apresentou uma nova classificação da Asteraceae baseado principalmente na morfologia, propondo 4 subfamílias: Asteroideae (AST), Cichorioideae (CIC), Carduoideae (CAR) e Barnadesioideae (BAR) (Bremer 1996). Bremer colocou a tribo Mutiseae em um ramo (clado) não bem

posicionado entre Barnadesioideae e Carduoideae. As quatro subfamílias estão divididas em 17 tribos: Barnadesieae (BAR), Mutisieae (MUT), Cardueae (CAR), Arctoteae (ARC), Lactuceae (LAC), Liabeae (LIA), Vernonieae (VER), Anthemideae (ANT), Astereae (AST), Calenduleae (CAL), Eupatorieae (EUP), Gnaphalieae (GNA), Helenieae (HLN), Heliantheae (HLT), Inuleae (INU), Plucheeae (PLU), Senecioneae (SEN) e 82 subtribos. Figura 1.2.1.4 mostra o diagrama de Bremer (Bremer,1996), o qual foi modificado do diagrama original apresentado um ano antes.

Figura 1.2.1.4. Diagrama Filogenético de tribos da Asteraceae de acordo com Bremer (Bremer 1996).

Kin e Jansen (Kin & Jansen 1995; Kin & Jansen 1996) apresentaram uma análise filogenética de 94 seqüências do gene *ndhF* do cloroplasto que representam todos os ramos principais da Asteraceae (Figura 1.2.1.5). O gene *ndhF* do cloroplasto provou ser mais filogeneticamente informativo para Asteraceae que os genes previamente usados, como *rbcL*.

Figura 1.2.1.5. Árvore filogenética gerada por Kin e Jansen para as tribos da família Asteraceae utilizando dados moleculares (Kin & Jansen 1995; Kin & Jansen 1996).

Funk e colaboradores produziram uma “supertree” com 38 tribos (figura 1.2.1.6) mostrando a filogenia da família Asteraceae (Funk *et al.* 2005), utilizando os trabalhos mais recentes publicados e também dados ainda não publicados, mas que foram fornecidos por autores que contribuíram na época. Portanto o trabalho é o resultado de uma compilação de árvores utilizando diversos dados principalmente dados moleculares em conjunto com dados morfológicos. E 4 anos depois produziram uma árvore mais completa a “metatree” com 43 tribos a partir de mais de 600 gêneros. (figura 1.2.1.7). Eles dividiram a família em 12 subfamílias.

Figura 1.2.1.6 Cladograma da super-árvore (supertree) de Funk (Funk *et al.* 2005) e colaboradores mostrando as relações da tribos da família Asteraceae

Diversos autores atribuíram diferentes classificações para grupos onde as classificações não estão muito claras. Entre estas estão as tribos Mutisae e Helenieae. Para alguns autores, certos gêneros de Helenieae, pertencem a subtribos de Heliantheae (Stuessy, 1977) (Robinson, 1981).

Figura 1.2.1.7 Cladograma da metatree de Funk (Funk *et al.* 2009) e colaboradores mostrando as relações das tribos da família Asteraceae

1.2.2 Taxonomia da tribo Heliantheae

A tribo Heliantheae (HLT), que também será objeto de estudo nesse trabalho, foi classificada por alguns botânicos principalmente Stuessy (Stuessy 1977), Robinson (Robinson 1981), Bremer (Bremer 1994) e Panero (2002).

Em 1977 Stuessy (Stuessy 1977) publicou uma provável relação filogenética para as subtribos de Heliantheae utilizando dados de morfologia e número de cromossomos (x). O autor reconhece 15 subtribos para a tribo (Bahiinae, Madiinae, Gaillardiiinae, Galinsoginae, Helianthinae, Ambrosiinae, Melampodiinae, Coreopsidinae, Verbesininae, Ecliptinae, Milleriinae, Neurilaeninae, Zinniinae, Fitchiinae, Engelmanniinae) e as divide em três ramos evolutivos principais, como esquematizado na figura 1.2.2.1: As linhas evolutivas são :

1. A primeira com a subtribo Verbesinae no centro com o número de cromossomos baseados principalmente em $x=15$, $x=16$ e 17 e seus derivados aneuplóides.
2. A segunda contendo como centro a subtribo Coreopsidinae com $x = 12$
3. A terceira tendo a subtribo Galinsoginae no centro com número de cromossomos variando de $x=8$ a $x=18$.

As subtribos Gaillardinae e Bahiinae, classificadas por Hoffmann (Hoffmann 1890) como pertencentes a tribo Heleniae, foram transferidas para Heliantheae por Stuessy (Stuessy 1977).

Considerando $n=8$ e $n=9$ o menor número de cromossomos encontrados em Heliantheae e que a maioria de seus representantes tenha característica morfológicas herbáceas, Stuessy sugeriu que o complexo ancestral da tribo possui atributos das 3 linhas evolutivas, especialmente das duas maiores. As características morfológicas pertencentes à linha evolucionária da Galinsoginae refletem sua condição ancestral.

Figura 1.2.2.1 Relações hipotéticas entre as subtribos de Heliantheae de acordo com Stuessy (Stuessy 1977). O número entre parêntesis indica o número de cromossomos em cada subtribo

Em 1981, Harold Ernest Robinson, usando também o número de cromossomos e morfológico, dividiu a tribo Heliantheae (Robinson, 1981) em 35 subtribos: Ambrosiinae, Espeletiinae, Melampodiinae, Polymniinae, Milleriinae, Desmanthodiinae, Clibadiinae, Pinillosinae, Guardioliinae, Enhydrinae, Montanoinae, Rudbeckiinae, Zaluzaniinae, Heptanthinae, Ecliptinae, Helianthinae, Neurolaeninae, Galinsoginae, Dimeresiinae, Coreopsidinae, Fitchiinae, Coulterellinae, Pectidinae, Flaveriinae, Varillinae, Clappiinae, Jaumeinae, Madiinae, Hymenopappinae, Lycapsinae, Peritylinae, Baeriinae, Chaenactidinae, Gaillardiiinae, Marshalliinae.

Em 1994 Bremer e colaboradores estabeleceram uma relação filogenética da tribo Heliantheae (Bremer, 1994) usando caracteres morfológicos. Segundo este autor, ela é dividida em 10 subtribos: Rudbeckiinae, Zinniinae, Verbesininae, Helianthinae, Galinsoginae, Melampodiinae, Coreopsidinae, Engelmanniinae, Ambrosiinae, Pinillosiinae. Neste estudo, essa classificação será chamada de classificação de Bremer. Também analisaremos a Química da tribo Helenieae porque algumas dos generos de Heliantheae segundo Stuessy e Robinson são encontradas em Helenieae na classificação de Bremer. Será usado o nome de complexo Heliantheae-Helenieae.

Em 2002, Panero e colaboradores (Panero *et al.*, 2002) usando dados moleculares forneceram outra análise filogenética, mas que não será considerado neste trabalho porque foram usados poucos gêneros.

1.3 Quimiotaxonomia da família Asteraceae

Basicamente, nas espécies de Asteraceae, os principais metabólitos secundários isolados são monoterpenos, sesquiterpenos, sesquiterpenos lactonizados (Seaman *et al.* 1982), poliacetilenos (Zdero *et al.* 1990), flavonóides (Harborne *et al.* 1975; Bohm *et al.* 2001), benzofuranos e benzopiranos (Proksch *et al.* 1983), cumarinas (Murray *et al.* 1982), diterpenóides (Seaman *et al.* 1990) e triterpenóides (Macari *et al.* 1994), acetofenonas e fenilpropanóides. Atualmente todas as classes têm números de representantes (no mínimo algumas centenas) que são considerados satisfatórios para o estudo quimiotaxonômico.

A quimiosistemática apresenta limitações como as descritas a seguir:

1. Muitas espécies ainda não foram estudadas.
2. Nos estudos publicados na literatura, algumas vezes não são mencionadas as partes das plantas os quais os compostos são extraídos, ou partes diferentes de espécies diferentes são estudadas.
3. Existe uma grande diferença tanto quantitativa como qualitativa entre as partes das plantas estudadas.
4. O estudo fitoquímico é dirigido muitas vezes para novos compostos ou compostos pouco usuais.
5. Existem resultados com falsos positivos ou negativos, de compostos nas espécies estudadas.

Dados químicos também podem ser aplicados na construção de árvores filogenéticas (Calabria *et al.* 2007).

Em frente desta grande divergência nas classificações botânicas usaremos métodos quimiosistemáticos e estatísticos para avaliar se a química pode contribuir nas classificações feitas somente com os caracteres morfológicos e moleculares.

1.4 Armazenamento dos dados

Um dos objetivos deste estudo foi completar e atualizar o banco de dados do nosso grupo. O banco já tinha cerca de 22000 ocorrências de 9 classes de metabólitos secundários (monoterpenos, sesquiterpenos, sesquiterpenos lactonizados, diterpenos, flavonóides, cumarinas, benzofuranos, benzopiranos e poliacetilenos) que precisavam ser atualizadas. O outro objetivo era completá-lo com os dados de triterpenos, acetofenonas e fenilpropanóides. Assim, a partir de milhares de artigos encontrados nas literaturas especializadas, foi montado um novo banco com cerca de 36000 ocorrências e com as 12 classes químicas antes de 2008. Mais detalhes serão apresentados nas seções posteriores.

A partir dos compostos químicos foram calculados alguns parâmetros evolutivos como o grau de oxidação e depois os passos oxidativos que foram usados. A partir disso foi estudado o balanço na produção dos metabólitos e oxidativo dentro das plantas.

Para nosso estudo serão usados métodos estatísticos: regressões multivariadas (MLR), regressões por mínimos quadrados parciais (PLS), análise dos componentes principais (PCA), análise de cluster e também análise filogenética. Mais detalhes serão dados no item metodologias.

2. OBJETIVOS

Na química dos produtos naturais um dos maiores desafios é o de tentar entender a relação que existe entre micromoléculas (metabólitos secundários) e a) macromoléculas (DNA, RNA); b) os caracteres morfológicos das plantas.

A fim de procurar estas correlações dentro dos objetivos desta dissertação se encontram:

1. Verificar o balanço na produção dos metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a classificação de Bremer (Bremer 1996) e à da “metatree” (Funk *et al.* 2009); em subtribos e gêneros da tribo Heliantheae segundo as classificações de Stuessy, Robinson e Bremer (Stuessy, 1977) (Robinson, 1981) (Bremer, 1994)
2. Verificar o balanço oxidativo dos metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a classificação de Bremer e a da “metatree”, em subtribos e gêneros da tribo Heliantheae segundo as classificações de Stuessy, Robinson e Bremer.
3. Tentar prever o número de ocorrências de um esqueleto a partir do número de ocorrências de outros tipos de esqueletos, usando regressão linear múltipla.
4. Tentar separar as principais subfamílias da família Asteraceae segundo Bremer e os principais ramos de subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.
5. Comparar as classificações de Bremer e da “metatree” no nível das tribos da família Asteraceae.
6. Comparar as classificações de Stuessy, Robinson e Bremer no nível das subtribos e gêneros da tribo Heliantheae.

3. METODOLOGIA

3.1 Marcadores químicos

Para este estudo quimio sistemático foi necessário escolher algumas classes químicas como marcadores. Assim, nosso banco de dados foi montado a partir dos marcadores das seguintes classes de metabólitos secundários: monoterpenos (MONO), sesquiterpenos (SESQ), sesquiterpenos lactonizados (LACT), diterpenos (DITE), triterpenos (TRIT), flavonóides (FLAV), cumarinas (CUMA), poliacetilenos (POLI), benzofuranos (BENZF) e benzopiranos (BENZP), fenilpropanóides (FENI) e acetofenonas (ACET). (figura 1.1.1)

3.2 Estudo e biossíntese dos diferentes marcadores

As substâncias produzidas pelos vegetais são chamadas de metabólitos primários e secundários. As plantas utilizam a energia do sol para produzir compostos orgânicos a partir do dióxido de carbono, em um processo chamado fotossíntese, cujos produtos iniciais são os carboidratos. Posteriores alterações metabólicas geram uma diversidade de compostos orgânicos de estruturas simples e com baixo peso molecular – entre estes estão açúcares, ácidos carboxílicos e aminos ácidos, sendo encontrados em todos os seres vivos. Estes compostos são formados nas transformações denominadas de processo metabólico primário. Os metabólitos secundários apresentam uma distribuição restrita, e de fontes botânicas específicas (Geissman & Crout, 1969).

A figura 3.2.1 (Mann *et. al.*, 1994) apresenta do modo geral as principais rotas biossintéticas de metabólitos secundários em plantas. As demais rotas passam a ser mais específicas para cada tipo de classe estudada.

Figura 3.2.1: Esquema das rotas biossintéticas de produtos naturais em plantas

3.2.1 Terpenóides

Todos os terpenóides (monoterpenos, sesquiterpenos, diterpenos, triterpenos) são formados de unidades chamadas de isoprenos, os quais são compostos por 5 carbonos. A biossíntese dos terpenóides consiste na condensação do precursor básico : o pirofosfato de isopentenila (IPP). Uma reação nucleofílica entre o IPP e o DMPA (cauda-cabeça), mediadas por enzimas denominadas preniltransferases, gera o pirofosfato de geranila, unidade precursora dos terpenos, como ilustra a figura 3.2.1.1.

Figura 3.2.1.1. Esquema da rota biossintética dos terpenos a partir do pirofosfato de isopentenila e do pirofosfato de 3,3-dimetila.

São conhecidas duas rotas para a biossíntese do pirofosfato de isopentenila. A primeira rota é conhecida desde o fim da década de 1950 (Liechtenthaler 1999), esta via envolve a biossíntese do ácido mevalônico (MVA), a qual requer 3 moléculas de acetil-CoA para produzir o composto 3-hidróxi-3-metilglutaril-S-CoA. A condensação de Claisen entre duas unidades de acetil-CoA pode ocorrer de forma linear, porém o segundo ataque ocorre na carbonila cetônica. As próximas etapas são de redução, que são de grande importância nos animais, pois agem como limitadores da biossíntese de colesterol (Goldstein & Brown 1990). O mevalonato

resultante é fosforilado, formando o 5-pirofosfomevalonato. A formação do IPP é catalisada pela pirofosfomevalonato decarboxilase (descarboxilação), e seguida de desidratação. A rota do ácido mevalônico está esquematizada na figuras 3.2.1.2.

Figura 3.2.1.2 – Biossíntese do IPP: Rota do ácido mevalônico.

A segunda rota que não depende da via do ácido mevalônico para a síntese do IPP, é a via do 1-desoxi-D-xilose-5-fosfato (DOXP), que foi descoberta em uma eubactéria (Rohmer 1993)(Lichtentaler 1999). A seguir, verificou-se que esta rota está presente em algas verdes (*Chlorophyta*), plantas superiores e outros grupos de algas (Lichtentaler 1999) . Nesta rota (figura 3.2.1.3), o piruvato, após reagir com pirofosfato de tiamina-enzima (TPP-E), reage com gliceraldeído-3-fosfato (GA-3-P) formando 1-desoxi-D-xilose-5-fosfato, que a seguir produz o pirofosfato de isopentenila (IPP).

Figura 3.2.1.3 - Biossíntese do IPP: Rota do 1-desoxi-D-xilose-5-fosfato.

Após a formação do IPP, este pode ser convertido através da ação de uma isomerase em pirofosfato de 3,3-dimetilalila (DMPA). O isopreno, o mais simples terpenóide, é sintetizado diretamente do DMPA, sendo responsável pela síntese dos hemiterpenos (Lange & Croteau 1999). Uma reação nucleofílica entre o IPP e o DMPA (cauda-cabeça), mediadas por enzimas denominadas preniltransferases, gera o pirofosfato de geranila (figura 3.2.1.1), unidade precursora dos monoterpenos. Por sua vez, a reação do pirofosfato de geranila com uma unidade de pirofosfato de isopentenila gera o pirofosfato de farnesila. Este último é precursor imediato dos sesquiterpenos (C15).

A reação do pirofosfato de farnesila com o fosfato de isopentenila (figura 3.2.1.1) forma o pirofosfato de geranilgeranila, precursor dos diterpenos (C20). Tanto o pirofosfato de farnesila como o pirofosfato de geranilgeranila podem reagir (cabeça-cabeça), formando respectivamente o esqualeno, precursor dos triterpenos (C30), e o fitoeno, precursor dos tetraterpenos (C40).

A teoria biogenética assume que a biossíntese dos sesquiterpenos lactonizados envolve modificação e/ou ciclização dos ésteres pirofosfatos do trans e cis-farnesol ou cis e trans-nerolidol (peruvicol), embora esta evidência em plantas superiores seja escassa. Antes ou depois da lactonização, os precursores do germacrano sofrem variadas ciclizações, quebras de anéis e migrações da metila para outros tipos de esqueletos principais de sesquiterpenos lactonizados. A figura 3.2.1.4 (Seaman 1982). nos apresenta a biogênese de sesquiterpenos lactonizados a partir do isopreno.

Figura 3.2.1.4 Biogênese de sesquiterpenos lactonizados a partir do isopreno.

3.2.1.1 Monoterpenos (C10)

Os monoterpenos são formados de 2 unidades isoprênicas (C5) o que significa que têm 10 átomos de carbono. Na família Asteraceae estão presentes em quase todas as tribos exceto Barnadesieae. E na tribo Heliantheae estão presentes em quase todas as subtribos e em muitos gêneros. Podem ter estruturas acíclicas (por exemplo, mircenol) ou cíclicas de um anel (d-limoneno) ou de duas estruturas de anel (α - e β -pineno, 3-careno). São produzidos em inúmeras famílias de plantas, utilizando a rota biossintética descrita na figura 3.2.1.1. Alguns monoterpenos importantes são apresentados na figura 3.2.1.1.1.

Figura 3.2.1.1.1 Exemplo de alguns monoterpenos

3.2.1.2 Sesquiterpenos e lactonas sesquiterpênicas (C15)

Os sesquiterpenos e sesquiterpenos lactonas são formados de 3 unidades isoprênicas (C5) o que significa que têm um esqueleto de base com 15 átomos de carbono. Podem ser linear, cíclicas de 1,2 ou 3 anéis. Estão também presentes em quase todas as tribos de Asteraceae exceto Barnadesieae e na maioria das subtribos de Heliantheae. Todavia as lactonas sesquiterpênicas é que são, até o presente, de maior importância quimiotaxonômica em espécies e gêneros da família. A maioria das lactonas é de gosto amargo, e várias delas são tóxicas. Estas propriedades sugerem que lactonas sesquiterpênicas estão envolvidas contra herbívoros e parasitas de plantas. São produzidos em inúmeras famílias de plantas utilizando a rota biossintética descrita na figura 3.2.1.1. Alguns sesquiterpenos e lactonas sesquiterpênicas são apresentados na figura 3.2.1.2.1.

Figura 3.2.1.2.1 Exemplos de sesquiterpenos e lactonas sesquiterpênicas.

3.2.1.3 Diterpenos (C₂₀)

Os diterpenos são formados de 4 unidades isoprênicas (C₅) que significa que têm um esqueleto de base com 20 átomos de carbono. Podem ser bicíclicos, pertencentes ao grupo do ácido grindélico. Classificam-se como regulares do tipo labdano-óxido de manool (16), e rearranjados, do tipo clerodano (17); tricíclicos de tipos pimaranos (18) e abietano (19); tetracíclicos de tipos caurano (20) e estacano (21) (figura 3.2.1.3.1). Eles são abundantes dentro da família Asteraceae e especialmente na tribo Heliantheae. São produzidos em outras famílias de plantas utilizando a rota biossintética descrita na figura 3.2.1.1. Alguns diterpenos são apresentados na figura 3.2.1.3.1.

Figura 3.2.1.3.1 Exemplos de diterpenos.

3.2.1.4 Triterpenos (C₃₀)

Os triterpenos são formados de 6 unidades isoprênicas (C₅) que significa que têm um esqueleto de base com 30 átomos de carbono. Os triterpenos não são muito abundantes nas tribos da família Asteraceae nem nas subtribos de Heliantheae. Monóis e dióis do tipo oleanol (1), ursanol (2) e lupeol (3) são os triterpenos mais características da família (figura 3.2.1.4.1). Sua rota biossintética descrita na figura 3.2.1.1. Alguns triterpenos são apresentados na figura 3.2.1.4.1.

Figura 3.2.1.4.1 Exemplos de triterpenos.

3.2.2 Flavonóides

Os flavonóides são compostos polifenólicos que possuem 15 átomos de carbono; os dois anéis benzênicos estão unidos por uma cadeia linear de 3 carbonos, os quais podem ser representados como o sistema C₆-C₃-C₆ (Figura 3.2.2.1).

Figura 3.2.2.1: Esqueleto básico de um flavonóide com o anel A e B apresentados

A estrutura química dos flavonóides é baseada num esqueleto C15 com uma anel cromano (C) suportando um segundo anel aromático B na posição 2,3 ou 4. Em poucos casos, o anel C heterocíclico ocorre numa forma isomérica aberta ou é substituído por um anel de 5 membros (figura 3.2.2.2)

Figura 3.2.2.2 Tipos de anéis C encontrados em flavonóides

Os flavonóides têm sua origem a partir de duas rotas: a do chiquimato e do acetato (mevalonato vem do acetato) para formação do precursor básico 4-Coumaroyl-CoA, conforme apresentado na figura 3.2.2.3 (Dewick,2002). Na figura 3.2.2.4 temos o caso da biossíntese de alguns flavonóides a partir do 4-coumaroyl-CoA.

Os flavonóides são presentes em todas as tribos de Asteraceae exceto Arctoteae e em quase todas as subtribos da tribo Heliantheae.

Figura 3.2.2.3: Esquema hipotético para a formação de 4, 2', 4', 6'-tetraidroxichalcona a partir do malonil-CoA e p-cumaroil-CoA.

Figura 3.2.2.4 : biossíntese de alguns flavonóides a partir do 4-coumaroyl-CoA.

Vários subgrupos de flavonóides são classificados de acordo com os padrões de substituição do anel C. O estado de oxidação do anel heterocíclico e a posição do anel B, ambos são importantes na sua classificação. Exemplos de 7 subgrupos principais:

A- Chalconas: são derivadas de três unidades de acetato e uma unidade de ácido cinâmico como é mostrado abaixo.

Exemplo de uma chalcona

B- Flavonas (Apigenina e Luteolina)

Apigenina

Luteolina

C- Flavonóis (Kaempferol e Quercetina)

Kaempferol

Quercetina

D- Flavanonas (Naringenina)

E- Antocianinas: depois da clorofila, são o grupo mais importante e mais difundido de pigmentos solúveis em água que conferem cor às plantas (responsáveis por quase todas as cores – rosa, escarlate, vermelha, malva, violeta e azul – nas pétalas, folhas e frutos das plantas superiores). Formam uma grande família de diferentes compostos coloridos e ocorrem em incontáveis misturas em praticamente todas as partes da maioria das plantas superiores. (Hahlbrock, 1981). Abaixo 2 exemplos de Antocianinas (Antocianina Antocianidina).

A (R = *O*-Gluc)

Antocianina

B

Antocianidina

F- Isoflavonóides: Diferentes da maioria dos flavonóides (flavonas, flavanonas, flavonóis e antocianinas) que possuem o anel B na posição 2 do anel heterocíclico, o anel B dos isoflavonóides ocupam a posição 3 (exemplo abaixo).

Exemplo de um isoflavonóide

G- Antocianidina: Antocianidina é uma conjugação estendida feita da aglicona de antocianinas glicosídeas. Depois da clorofila, antocianinas são o mais importante grupo de pigmento de plantas, visíveis ao olho humano. As antocianidinas constituem uma família grande de compostos coloridos e ocorrem em inúmeras misturas em praticamente todas as partes da maioria das plantas superiores. São de grande importância como pigmento de frutos e, portanto são usadas como corantes de sucos de frutas, vinhos e algumas bebidas.

Exemplo de antocianidina:

3.2.3 Poliacetilenos

A formação de poli- β -cetoacil-CoA ocorre a partir da biossíntese de ácido graxo por condensação de acetil-coenzima A com malonil-coenzima A. Este, por sua vez, é geralmente derivado da carboxilação de acetil-coenzima A.

A formação de ácidos graxos insaturados, e.g. ácido oléico, que são também metabólitos primários, pode ocorrer através de, no mínimo, duas rotas: uma aeróbica e outra aneróbica. Os poliacetilenos provêm da desidrogenação de um ácido graxo totalmente saturado conforme mostra a figura 3.2.3.1.(Dewick,2002)

Exemplos de alguns poliacetilenos de Asteraceae são apresentados aqui abaixo:

Exemplo de alguns poliacetilenos de Asteraceae.

Figura 3.2.3.1 Esquema da rota biogenética de poliacetilenos

3.2.4 Cumarinas

As Cumarinas são benzo- α -piranos ou α -cromonas, e possuem, portanto, o mesmo esqueleto carbônico que os ácidos cinâmicos. Na realidade, são α -lactonas dos ácidos *o*-hidroxicinâmicos. Algumas cumarinas possuem atividade antitumoral.

As cumarinas têm como precursor o ácido cinâmico, sendo, portanto, biossintetizadas através da rota do chiquimato. O esquema da sua biossíntese é apresentado na figura 3.2.4.1. Exemplo de cumarinas a seguir:

Exemplo de cumarinas

Figura 3.2.4.1 Esquema da rota biossintética de cumarinas simples.

3.2.5 Acetofenonas

A formação da acetofenona é uma condensação de Claisen ou aldólica é utilizada na ciclização das cadeias policetometilênicas, conforme mostra a figura 3.2.5.1

Figura 3.2.5.1 Esquema da rota biossintética de acetofenonas

3.2.6 Benzofuranos e benzopiranos

A rota biossintética dos benzofuranos e benzopiranos ainda não é claramente elucidada, mas como os acetofenonas eles podem vir da combinação de sistema fenólico derivado do acetato via um intermediário policetídeo. Na figura 3.2.6.1 alguns exemplo de um benzopirano e um benzofurano.

Figura 3.2.6.1 Exemplo de um benzofurano e benzopirano

3.2.7 Fenilpropanóides

Fenilpropanóides são formados a partir da redução sucessivas do ácido cinâmico apropriado passando pela formação do álcool cinamil.

Na figura 3.2.7.1 tem alguns exemplos de fenilpropanóides presentes em plantas.

Figura 3.2.7.1 Exemplo de fenilpropanóides

3.3 Coleta e arquivamento dos dados:

O “Número de ocorrência” (NO) é um parâmetro que fornece o grau de relevância de uma determinada categoria metabólica (X) para um táxon escolhido (A). Na prática, se para duas espécies de um táxon foram registradas cinco substâncias diferentes da mesma categoria para uma e sete para a outra, considerando-se para o táxon referente à categoria micromolecular em questão NO : 12, mesmo que haja coincidência de substâncias nas duas espécies. Ao contar n vezes uma mesma substância encontrada em n espécies diferentes, consegue-se caracterizar a tendência de sua produção no táxon” (Gottlieb *et al.*, 1996).

O levantamento das ocorrências naturais dos metabólitos das diferentes classes (marcadores) foi feito a partir da literatura especializada englobando revisões anteriores a 2008 e subseqüentes publicações em Chemical Abstracts,

sendo a busca realizada no Scifinder Scholar TM 2007, através de palavras-chaves tais como nomes de categorias químicas ou táxons. Complementado as informações extraídas do Chemical Abstracts, foram consultados minuciosamente as revistas e periódicos de maior peso em estudo de produtos naturais como por exemplo : Phytochemistry, Planta Medica, Natural Product Report, Jornal of Natural Products, Fitoterapia, etc, até dezembro 2007.

Na primeira etapa, os dados levantados foram os seguintes:

- 1- Ocorrências apenas naturais dos metabólitos em questão em espécies estudadas.
- 2- Parte da planta estudada, que pode ser toda ela ou partes específicas: áreas, folhas, flores, caules, raízes, frutos, etc.
- 3- Local de coleta.
- 4- Registro do gênero e espécie da qual o metabólito de interesse foi extraído.
- 5- Referência, na qual as informações foram obtidas. Dado importante para quaisquer conferências.

Fez-se uma ficha modelo (figura 3.3.1) (Brant, 2003) para o preenchimento dos dados, conforme está exemplificada abaixo e por si só já é bastante explicativo.

Ficha N°. 353 (como exemplo)

Gênero/espécie : *Artemisia incanescens*

Referência : *Phytochemistry*, 1986, 25, 2357.

<p>Nome trivial: Escopoletina</p>	<p>Nº de Esqueleto: 321</p> <p>NOX: +2</p> <p>Parte da planta: ADAP (partes aéreas secas ao ar)</p> <p>Local e data da coleta: Teruel / Espanha</p>
---	---

Obs.: Os dados das fichas foram digitados em forma de tabela no programa Excel (Microsoft Office 2003), capaz de organizar as espécies levantadas em suas tribos e subtribos correspondentes e de acordo com a classificação de Bremer, a “metatree”, Stuessy e Robinson.

Figura 3.3.1 Ficha-modelo usada para o levantamento bibliográfico

Posteriormente, foram calculados os seguintes parâmetros:

- 1- Grau de Oxidação (NOX).
- 2- Passo Oxidativo (PO).

A seguir, os dados das fichas foram inseridos em planilhas no Excel (Microsoft Office 2003) e foi feita a contagem. Após o levantamento e dos dados serem inseridos em uma planilha no Excel, realizaram-se as contagens, descritas nas Tabelas 3.3.1 e 3.3.2., no programa GERTAXO (figura 3.3.2) (Gertaxo, 2005).

Tabela 3.3.1: Tipos de contagem realizada no programa GERTAXO a partir dos dados pesquisados nas tribos da família Asteraceae segundo Bremer e a “metatree” e do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.

TIPO DE CONTAGEM		NÍVEIS DA CONTAGEM	
MÉDIA DOS PO	TRIBO	SUBTRIBO	GÊNERO
CLASSES DE METABÓLITOS	TRIBO	SUBTRIBO	GÊNERO
TIPOS DE ESQUELETOS	TRIBO	SUBTRIBO	GÊNERO

Tabela 3.3.2: Tipos de contagem realizada no programa GERTAXO a partir dos dados levantados da tribo Heliantheae segundo a classificação de Stuessy e Robinson,

TIPO DE CONTAGEM	NÍVEIS DA CONTAGEM	
MÉDIA DOS PO	SUBTRIBO	GÊNERO
CLASSES DE METABÓLITOS	SUBTRIBO	GÊNERO
TIPOS DE ESQUELETOS	SUBTRIBO	GÊNERO

Figura 3.3.2 Figura ilustrativa do programa Gertaxo

Os dados que tinham ocorrências não relevantes (com uma variância insignificativa) foram eliminados.

Os esqueletos carbônicos de cada classe química foram codificados com numerações empíricas descritas abaixo:

1-48, monoterpenos (MONO)

101-263, Sesquiterpenos (SESQ)

301-358, lactonas sesquiterpênicas (LACT)

411-481, diterpenos (DITE)

521-553, triterpenos (TRIT)

561-600, cumarinas (CUMA)

651-670, flavonóides (FLAV)

691-699, poliacetilenos (POLI)

711-735, benzofuranos (BENZF)

751-780, benzopiranos (BENZP)

790-825, acetofenonas (ACET)

831-835, fenilpropanóides (FENI)

3.4 Parâmetros evolutivos

A evolução da família Asteraceae e particularmente da tribo Heliantheae pode ser estudada através da utilização de índices de avanços evolutivos calculados, usando metabólitos secundários (Gottlieb, 1982). Estes índices representam muito bem o estágio evolutivo de alguns táxons. Esses índices são: Grau de oxidação (NOX), Passo oxidativo (PO).

3.4.1. Grau de oxidação (NOX)

O trabalho envolvendo oxidação de micromoléculas baseia-se no cálculo do estado de oxidação de cada átomo de carbono que somados, fornecem o grau de oxidação de cada substância (NOX). Para cada esqueleto o número de oxidação foi calculado através das regras de Hendrickson (Hendrickson *et al.*, 1970). Essas regras podem ser resumidas em uma equação: $NOX : \sum n_i C-B$, onde n_i é o número de ligações entre o átomo C e o átomo B. Nessa equação, B corresponde a H, C ou heteroátomo X, isto é, as ligações resultantes são respectivamente C-H, C-C e C-X.

Os valores de oxidação para cada carbono são obtidos adicionando cada um dos seguintes valores para suas quatro ligações: -1 para C-H, zero para C-C e +1 para C-X (X: heteroátomo). Na figura 3.4.1.1 temos 2 exemplos de cálculos de NOX.

Figura 3.4.1.1 Exemplos do cálculo de NOX.

3.4.2 Cálculo dos índices de evolução em relação a oxidação: Passo Oxidativo (PO)

Embora o método de cálculo de NOX se aplique bem a cada classe, fica difícil a comparação de dois valores de oxidação vindos de diferentes classes. Pretendemos ampliar esta metodologia introduzindo o conceito de passos oxidativos (“oxidative step” – OS) (Emerenciano *et al.*, 1998). Como passo oxidativo entende-se as mudanças oxidativas em relação a um precursor considerado como marco zero na escala. O passo oxidativo de uma substância é calculado através do módulo da diferença entre os valores de NOX do precursor e do composto, e finalmente dividindo o resultado por 2 como demonstrado a seguir.

$$PO = \frac{\left| (NOX_{\text{precursor}} - NOX_{\text{composto}}) \right|}{2}$$

Cada passo oxidativo representa uma insaturação ou uma ligação carbono-heteroátomo presente na dada substância quando comparada ao precursor. Cada

diferença de dois pontos no NOX é considerada um passo oxidativo (PO), veja figura 3.4.2.1.

Figura 3.4.2.1. Exemplos de cálculo de PO.

O estudo de passos oxidativos é muito importante para correlacionar quantitativamente caracteres morfológicos e micromoléculas de plantas e graus de evolução de seus táxons (Gottlieb, 1989).

3.5 Análises dos dados

Para estudar os balanços na produção, nas médias das oxidações dos metabólitos secundários e para prever um esqueleto versus todos os outros escolheu-se vários níveis hierárquicos: a) as tribos da família Asteraceae segundo Bremer; b) a divisão da família denominada “metatree”; c) as subtribos e os gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer; d) as subtribose e os gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy e e) as subtribos e os gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson. Foi necessário usar métodos estatísticos (Regressões lineares múltiplas e mínimos quadrados parciais). Também para agrupar as tribos da família Asteraceae segundo Bremer e as subtribos de Heliantheae segundo Stuessy, utilizou-se a técnica de análises de componentes

principais e a análise de cluster. Foi importante fazer uma análise filogenética das subtribos de Heliantheae segundo Stuessy para achar grupo monofilética e comparar com a classificação de Stuessy.

Os parâmetros a seguir serão usados nas regressões: R, R², AdjR², F, p, R²-boot, R²-PLS-cal, R²-PLS-valc e entropia de Shannon (ES) (Tabela 3.5.1).

Tabela 3.5.1: Alguns parâmetros estatísticos selecionados para avaliar a validade estatística das correlações e modelos gerados.

Expressão Matemática	Explicação, Incógnitas, onde:
$R = \frac{\sum xy - \frac{\sum x \sum y}{n}}{\left[\sum x^2 - \frac{(\sum x)^2}{n} \right] \left[\sum y^2 - \frac{(\sum y)^2}{n} \right]}^{\frac{1}{2}}$	R é o coeficiente de correlação de Pearson entre um par de medidas (X,Y). O valor de R varia de -1 a +1. n é o número de caso.
$R^2 = \frac{\sum (Y_i^h - \bar{Y})^2 \text{ variação explicada}}{\sum (Y_i - \bar{Y})^2 \text{ variação total}}$	R ² chamado de coeficiente de determinação múltipla é a relação entre a variação explicada pela equação de regressão múltipla e a variação total da variável dependente $\bar{Y}$ é o valor médio dos Y_i . Y_i^h é o correspondente valor estimado através da equação
$\text{Adj } R^2 = 1 - \frac{(n - 1)}{(n - k - 1)} * (1 - R^2)$	Adj R ² é coeficiente de determinação ajustado que leva em conta o número de variáveis explicatórias em relação ao número de observações para facilitar a comparação de diversos modelos de regressões. R^2 é o coeficiente de determinação normal K é o número de regressões n é o tamanho da amostra.
$F = \frac{S_1^2}{S_2^2}$	F ou Teste F é a relação de dois S quadrados (S^2) (i.e. estimativas da variância de uma população, baseadas na informação em duas ou mais amostras fortuitas) S_1^2 : variância do grupo 1 ; S_2^2 : variância do grupo 2 A variância é o desvio padrão elevado ao quadrado $S^2 = \frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n - 1}$
p	P é o nível de significância do teste. (probabilidade do erro e o valor deve ser menor do 0,05)
R²-Boot	R ² -Boot é o valor do R ² na validação pelo bootstrap
R²-PLS-cal	R ² -PLS-cal é o valor do R ² da calibração do PLS.
R²-PLS-valc	R ² -PLS-valc é o valor do R ² na validação cruzada (cross-validation) do PLS.

3.5.1 Regressão linear múltipla (MLR)

A regressão linear múltipla (MLR) é um método de análise estatística no qual a relação entre uma ou várias variáveis independentes(x) e outra variável dependente (y) é estabelecida a partir de uma equação (Wold *et al.* 1987).

Quando se quer investigar se uma variável está correlacionada concomitantemente a várias outras, considera-se a primeira como variável dependente e as outras como variáveis independentes, e aplica-se aos dados a seguinte fórmula:

$Y: a + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + \dots + b_nx_n$ em que:

y: é a estimativa da variável dependente;

x : variável independente;

a : constante: intercepto múltiplo ;

b : constante: coeficientes de regressão.

Neste trabalho, utilizou-se regressão linear múltipla, cujo objetivo principal foi encontrar equações empíricas capazes de prever as ocorrências de uma das classes versus todas as 11 outras e o esqueleto 1 versus todos nos níveis da tribos, subtribos e gêneros. Para isso foram utilizados os programas Statistica (Statsoft Inc., Tulsa,OK,USA) para determinação dos seguintes parâmetros: R,R2,R2(Adj.),F e p. O programa Costat (Costat version 6400, copyright (c), 1998-2008. Cohort Software) foi utilizado para determinação do parâmetro R2-Boot (R2-bootstrap). O bootstrap é um método de validação onde as variáveis são escolhidas do arquivo original randomicamente com reposição, e em cada etapa são escolhidos o mesmo numero de variáveis que no modelo original. São recomendadas 100 etapas de validação.

No programa Statistica foram feitas as regressões lineares múltiplas de uma classe versus todas, usando o método passo a passo adiante (começo escolhendo a variável independente que explica a maior variação na variável dependente.

Depois uma segunda variável que explica a variação mais residual, e, em seguida, recalculando os coeficientes de regressão. Continuar até nenhuma variável explicar significativamente a variação residual) e somente a equação final será considerada.

3.5.2 Regressões por Mínimos Quadrados Parciais (PLS)

O PLS, do inglês "*partial least squares*", é o método mais usado em calibração multivariada e difere da regressão dos componentes principais (PCR), por usar a informação de y no cálculo das chamadas variáveis latentes (equivalentes aos componentes principais no PCA) (Geladi e Kowalski, 1986)). As matrizes X e Y são decompostas simultaneamente em uma soma de h variáveis latentes, como nas equações a seguir:

$$X = TP' + E = S t_h p'_h + E \quad \text{e} \quad Y = UQ' + F = S u_h q'_h + F$$

onde T e U são as matrizes de escores das matrizes X e Y , respectivamente; P e Q são as matrizes dos pesos das matrizes X e Y , respectivamente; e E e F são os resíduos. A correlação entre os dois blocos X e Y é simplesmente uma relação linear obtida pelo coeficiente de regressão linear, tal como descrito abaixo,

$$u_h = b_h t_h$$

para h variáveis latentes, sendo que os valores de b_h são agrupados na matriz diagonal B , que contém os coeficientes de regressão entre a matriz de escores U de Y e a matriz de escores T de X . A melhor relação linear possível entre os escores desses dois blocos é obtida através de pequenas rotações das variáveis latentes dos blocos de X e Y .

A matriz Y pode ser calculada de u_h ,

$$Y = TBQ' + F$$

e a concentração de novas amostras prevista a partir dos novos escores, T^* , substituídos na Equação anterior.

$$Y := T^* B Q'$$

Nesse processo, é necessário achar o melhor número de variáveis latentes, o que normalmente é feito usando um procedimento chamado validação cruzada ("*cross validation*"), no qual o erro mínimo de previsão é determinado. Deve ser mencionada ainda, a diferenciação entre PLS1, em que a regressão é feita para uma variável dependente de cada vez (a matriz Y é um vetor coluna), e PLS2, onde todas as variáveis dependentes são calculadas simultaneamente.

Nesse trabalho o PLS1 foi usado para superar o problema de colinearidade encontrado na MLR na previsão de uma classe química versus as 11 outras e o esqueleto 1 versus todos. Assim, a partir das matrizes usadas no MLR foram calculados os parâmetros R^2 -PLS-cal e R^2 -PLS-valc. O programa usado para isso foi o Unscrambler (UnscramblerTM V 6.1).

3.5.3 Análise de Componentes Principais (PCA)

A análise de componentes principais consiste essencialmente em reescrever as coordenadas das amostras em outro sistema de eixo mais conveniente para a análise dos dados.

$$\underline{X = M_1 + M_2 + M_3 + \dots + M_r}$$

Em outras palavras, as n -variáveis originais geram, através de suas combinações lineares, n -componentes principais, cuja principal característica, além da ortogonalidade, é que são obtidos em ordem decrescente de máxima variância, ou seja, o componente principal 1 detém mais informação estatística que o

componente principal 2, que por sua vez tem mais informação estatística que o componente principal 3 e assim por diante (Massart *et al.*, 1988).

Este método permite a redução da dimensionalidade dos pontos representativos das amostras, pois, embora a informação estatística presente nas n -variáveis originais seja a mesma dos n -componentes principais, é comum obter em apenas 2 ou 3 dos primeiros componentes principais mais que 90% desta informação. O gráfico do componente principal 1 *versus* o componente principal 2 fornece uma apresentação privilegiada (estatisticamente) para observação dos pontos no espaço n -dimensional.

A análise de componentes principais também pode ser usada para julgar a importância das próprias variáveis originais escolhidas, ou seja, as variáveis originais com maior peso (*loadings*) na combinação linear dos primeiros componentes principais são as mais importantes do ponto de vista estatístico.

Nesse trabalho o PCA foi usado para tentar, a partir de dados químicos, agrupar as tribos da família Asteraceae segundo a classificação de Bremer e as subtribos da tribo Heliantheae segundo a classificação de Stuessy.

3.5.4 Análise de Cluster (AC)

A Análise Cluster (AC) é uma técnica multivariada que engloba diferentes algoritmos de classificação para organizar informações sobre variáveis e formar grupos homogêneos ("to cluster": agrupar), foi utilizada pela primeira vez por Tryon, em 1939. Uma questão básica é a de como organizar dados observados em estruturas com significados químicos diferentes. A AC trata uma variedade de informações, que podem estar associadas com medidas de "similaridade", "proximidade", "semelhança" ou "associação"; é recomendável o uso de dados

padronizados, já que podem estar sendo analisados dados em diferentes escalas (Massart *et al.*, 1988).

Tabela 3.5.4.1: resumo dos métodos aglomerativos

resumo dos métodos aglomerativos		
MÉTODO	DISTÂNCIA	CARACTERÍSTICAS
Ligação por vizinho mais próximo	$d_{(UV)W} = \min(d_{UW}, d_{VW})$	Sensibilidade à ruídos. Encadeamento.
Ligação por vizinho mais distante	$d_{(UV)W} = \max(d_{UW}, d_{VW})$	Tendência a formar grupos compactos.
Ligação por média	$d_{(UV)W} = \frac{(N_u \cdot d_{UW} + N_v \cdot d_{VW})}{N_u + N_v}$	Tendência a formar grupos com número de elementos similares.
Ligação por centróide	$d_{(UV)W} = \frac{N_U \cdot d_{UW} + N_V \cdot d_{VW}}{N_U + N_V} - \frac{N_U \cdot N_V \cdot d_{UV}}{(N_U + N_V)^2}$	Robustez à ruídos. Reversão.
Ligação por mediana	$d_{(UV)W} = \frac{d_{UW} + d_{VW}}{2} - \frac{d_{UV}}{4}$	Robustez à ruídos.
Ligação de Ward	$d_{(UV)W} = \frac{((N_W + N_U) \cdot d_{UW} + (N_W + N_V) \cdot d_{VW} - N_W \cdot d_{UV})}{N_W + N_U + N_V}$	Sensibilidade à ruídos.

A AC é utilizada mesmo quando não se tem hipóteses a serem testadas *a priori*, mas ainda se está na fase exploratória da pesquisa. Nenhuma suposição é feita com referência ao número de grupos ou estrutura; o agrupamento é feito com base nas similaridades ou nas distâncias, e os “inputs” são medidas de similaridades ou dados a partir dos quais elas podem ser calculadas (Tabela 3.5.4.1). Em suma, o objetivo básico nessa análise é descobrir agrupamentos naturais de variáveis; assim deve-se, primeiro, desenvolver uma escala quantitativa para medir a associação (similaridade) entre objetos e depois o agrupamento. Ela tem sido aplicada a uma grande variedade de problemas, particularmente na área de quimiotaconômia. Em nosso trabalho ela é empregada para agrupamento das tribos de Asteraceae e das subtribos de Heliantheae usando como variáveis o número de ocorrências (NO) e a média das oxidações. Pretende-se agrupar os taxons semelhantes ou os mais distantes da tribo de Asteraceae segundo Bremer e das subtribos Heliantheae segundo Stuessy.

3.5.5 Análises Filogenéticas

Figura. 3.5.5.1 Modelo de diagrama filogenética.

A análise filogenética (Amorim,1994) nos permite construir o diagrama que ilustra a história evolutiva dos vários organismos (figura 3.5.5.1):

- Pode ser reconstruída com base em vários tipos de caracteres (especialmente morfológicos moleculares e químicos)
- Uma série de utilidades: sistemática, evolução, ecologia, biogeografia e conservação.

A partir dos dados das ocorrências dos esqueletos das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy, usando o critério de presença ou ausência de cada esqueleto, foi feita uma árvore filogenética através dos métodos de Parcimônia (tipo de busca: heurística) e método de distância (Algoritmo Neighbour-joining(NJ)). Os programas Paup (Swofford,1998) e Mesquite (Maddison, 2009) foram usados para isso.

3.5.6 Entropia de Shannon

Para uma análise da variabilidade dos dados foi calculada a entropia de Shannon (Godden, 2001) de cada classe em cada tribo, subtribo e gêneros. Ela é necessária na seleção de variáveis, sendo que as variáveis que variam muito (valor alto da entropia perto do valor máximo (3,58)) e que variam pouco (valor baixo da entropia quer dizer perto de zero) devem ser consideradas como ruins numa análise estatística (PCA, AC, MLR, PLS).

Para isso, os dados das colunas foram utilizados para a construção de histogramas com doze intervalos. A partir do histograma foi calculada a entropia de Shannon, que no intervalo escolhido deverá ficar entre 0 e 3,58, mas para uma boa variabilidade os valores das entropias devem estar em torno da média (1,79).

A entropia de Shannon é definida como abaixo:

$$SE = -\sum p_i \log_2 p_i$$

Na fórmula acima, p é a probabilidade de um ponto adotar um valor com um intervalo específico. Assim, p é calculado de acordo com a fórmula abaixo:

$$p_i = c_i / \sum c_i$$

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES:

4.1 O banco de dados:

Nesse trabalho, a base de dados de ocorrência de metabólitos secundários da família Asteraceae segundo Bremer foi concluída e possui 36.496 ocorrências, e 537 diferentes esqueletos das diferentes classes de compostos estudadas (os esqueletos estão no apêndice D). Ao analisar a tabela 4.2.1.1, vemos que existem, no banco de dados do grupo, 4772 espécies pesquisadas, assim, temos uma média de 8 ocorrências de metabólitos por espécie. Estas substâncias estão distribuídas principalmente entre sesquiterpenos lactonizados (5871 ocorrências) e não lactonizados (7022 ocorrências), poliacetilenos (3579 ocorrências), flavonóides (5387 ocorrências), cumarinas (987 ocorrências), monoterpenos (6186 ocorrências), triterpenos (1204 ocorrências), diterpenos (4556 ocorrências), benzofuranos (662 ocorrências), benzopiranos (416 ocorrências), fenilpropanóides (481 ocorrências) e acetofenonas (244 ocorrências). A Tabela 4.1.1 mostra um pequeno fragmento do banco.

Tabela 4.1.1: Fragmento do Banco de dados de Asteraceae.

TRIBO	SUBTRIBO	GENERO	ESPECIE	OXID	OXIDB	S	ESQUEL	CLASSE	REA
ANT	ACH	ACHILLEA	ABROTANOIDES	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	ABROTANOIDES	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	ABROTANOIDES	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	BIEBERSTEINII	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	BIEBERSTEINII	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	BISERRATA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	BISERRATA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	BISERRATA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	CLYPEOLATA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	CLYPEOLATA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	CLYPEOLATA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	CORABENSIS	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	CRITHMIFOLIA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	CRITHMIFOLIA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	CRITHMIFOLIA	0,00	0,00	0,00	1	1	4

Tabela 4.1.1 continuação

ANT	ACH	ACHILLEA	CRITHMIFOLIA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	ERBA-ROTTA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	ERBA-ROTTA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	ERBA-ROTTA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	ERBA-ROTTA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	FILIPENDULINA	0,00	0,00	0,00	1	1	4
ANT	ACH	ACHILLEA	FILIPENDULINA	0,00	0,00	0,00	1	1	4

Na tabela 4.1.1, acima, OXID= Oxidação; PO = Passo Oxidativo (PO) (Hendrickson et al, 1970), OXIDB: oxidação da porção C3-C6 de flavonóides, CLASSE: Classe de metabólitos presentes no banco, REA: reação característica, ESQUEL: Tipo de esqueleto e S: Índice de Especialização do Esqueleto. A tabela 4.1.2, a seguir, mostra a quantidade de espécies presentes na família Asteraceae, segundo Bremer (Bremer *et al*, 1994) por tribo, e a quantidade de espécies presentes no banco de dados do grupo. A porcentagem mostra que nosso banco contém aproximadamente 20% das espécies presentes na classificação de Bremer (Bremer *et al*, 1994), e a porcentagem de espécies em cada tribo é bastante variável.

Tabela 4.1.2: Quantidade de espécies presentes na família Asteraceae segundo Bremer , quantidade de espécies presentes no banco de dados de Asteraceae do grupo, e porcentagem de espécies presentes no banco em relação à classificação de Bremer.

Quantidade de				
Tribo	Código	Espécies	Quantidade de Espécies no Banco	Porcentagem
Barnadesieae	BAR	92	36	39,1
Mutisieae	MUT	318	125	39,3
Cardueae	CAR	2513	357	14,2
Arctoteae	ARC	139	48	34,5
Lactuceae	LAC	2486	184	7,4
Liabeae	LIA	159	15	9,4
Vernonieae	VER	1346	213	15,8
Anthemideae	ANT	1737	600	34,5
Astereae	AST	2846	542	19,0
Calenduleae	CAL	113	60	53,1
Eupatorieae	EUP	2396	467	19,5
Gnaphalieae	GNA	1728	299	17,3
Helenieae	HLN	835	329	39,4

Tabela 4.1.2 continuação

Heliantheae	HLT	2449	982	40,1
Inuleae	INU	480	142	29,6
Plucheeae	PLU	480	47	9,8
Senecioneae	SEN	3247	326	10,0
Total		23364	4772	20,4

4.2 Ocorrências de metabólitos secundários na família Asteraceae e na sua tribo Heliantheae

Após a pesquisa dos dados eles são inseridos em uma planilha no Excel. A partir dessa planilha realizou-se as contagens, descritas nas Tabelas 3.3.1 e 3.3.2, no programa GERTAXO (figura 3.3.2) (Gertaxo, 2005). O número total de ocorrências dos metabólitos secundários na família Asteraceae segundo Bremer foi de 36496. Considerando a classificação segundo a meta-árvore “metatree” (Funk *et al.*, 2009) foram obtidos 24687 ocorrências. Na tribo Heliantheae segundo a classificação de Stuessy (Stuessy, 1977), o número total de ocorrências foi de 7848; segundo a classificação de Robinson (Robinson, 1981), o número total de ocorrências foi de 8748. Neste estudo na classificação de Bremer da tribo Heliantheae consideraremos também a tribo Helenieae porque alguns gêneros de Heliantheae segundo Stuessy e Robinson são encontrados em Helenieae na classificação de Bremer. Assim, no complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer, foram encontradas 9550 ocorrências.

Podemos também ressaltar o fato que nesse banco de dados há algumas classes que têm ocorrências significativas (monoterpenos, sesquiterpenos, sesquiterpenos lactonizados, diterpenos, flavonóides e poliacetilenos), e outras têm poucas ocorrências (cumarinas, triterpenos, benzofuranos, benzopiranos, acetofenonas e fenilpropanóides).

Nota: Abreviações referentes às ocorrências e às médias dos passos oxidativos dos metabólitos secundários; às tribos da família Asteraceae e às subtribos de Heliantheae.

- TRI: Tribo; STRI: Subtribo; Esq: esqueleto, GEN: Gêneros,
- Abreviações referentes às ocorrências MONO: monoterpenos ; SESQ: sesquiterpenos; LACT: sesquiterpenos lactonizadas; DITE: diterpenos; TRIT: triterpenos; CUMA: cumarinas; FLAV: flavonóides ; POLI: poliacetilenos; BENZF: benzofuranos ; BENZP: benzopiranos; ACET: acetofenonas; FENI: fenilpropanoides,
- oxiMONO: média dos passos oxidativos dos monoterpenos ;
- oxiSESQ: media dos passos oxidativos dos sesquiterpenos;
- oxiLACT: média dos passos oxidativos dos sesquiterpenos lactonizadas; oxiDITE: média dos passos oxidativos dos diterpenos;
- oxiTRIT: média dos passos oxidativos dos triterpenos;
- oxiCUMA: média dos passos oxidativos dos cumarinas;
- oxiFLAVA: média dos passos oxidativos dos flavonóides oxidados no anel A;
- oxiFLAVB: média dos passos oxidativos dos flavonóides oxidados no anel B;
- oxiPOLI: média dos passos oxidativos dos poliacetilenos;
- oxiBENZF: média dos passos oxidativos dos benzofuranos ;
- oxiBENZP: média dos passos oxidativos dos benzopiranos;
- oxiACET: média dos passos oxidativos dos acetofenonas;
- oxiFENI: média dos passos oxidativos dos fenilpropanoides,;
- Tribos da família Asteraceae segundo Bremer: BAR: Barnadesieae ,MUT: Mutisieae ,CAR: Cardueae,ARC: Arctoteae,LAC: Lactuceae,LIA: Liabeae,VER: Vernonieae, ANT: Anthemideae,AST: Astereae,CAL: Calenduleae,EUP: Eupatorieae ,GNA: Gnaphalieae,HLN: Helenieae,HLT: Heliantheae,INU: Inuleae, PLU: Plucheeae,SEN: Senecioneae.
- Tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”: ANT: Anthemideae ; ARC: Arctotideae; AST: Astereae; ATH: Athroismeae;BAH: Bahieae; BAR: Barnadesieae; CAL: Calenduleae; CAR: Cardueae; CHA: Chaenactideae; CIC: Cichorieae; COR: Coreopsideae; COY: Corymbieae; DIC: Dicomea; EUP:

Eupatorieae; GNA: Gnaphalieae; GOC: Gochnatieae; HLN: Helenieae; HLT: Heliantheae; HYA: Hyalideae; INU: Inuleae; LIA: Liabeae; MAD: Madieae; MIL: Millerieae; MOQ: Moquinieae; MUT: Mutisieae; NAU: Naussauvieae; NEU: Neurolaeneae; OLD: Oldenburgieae; ONO: Onoserideae; PER: Peritytileae; PET: Pertyeae; PLA: Platycarpheae; POL: Polymnieae; SEN: Senecioneae; STI: Stifftieae; TAG: Tageteae; TAR: Tarchonantheae; VER: Vernonieae; WUN: Wunderlichieae.

- Subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae da família Asteraceae segundo Bremer: AMB: Ambrosiinae, BAE: Baeriinae, CHA: Chaenactidinae, COR: Coreopsidinae, ENG: Engelmanniinae, FLA: Flaveriinae, GAI: Gaillardiiinae, GAL: Galinsoginae, HLT: Helianthinae, HYM: Hymenopappinae, MAD: Madiinae, MEL: Melampodiinae, PEC: Pectidinae, PER: Peritylinae, RUD: Rudbeckiinae, VER: Verbesininae, ZIN: Zinniinae.
- Subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy: AMB: Ambrosiinae, BAH: Bahiinae, COR: Coreopsidinae, ECL: Ecliptinae, ENG: Engelmanniinae, FIT: Fitchiinae, GAI: Gaillardiiinae, GAL: Galinsoginae, HEL: helianthinae, MAD: Madiinae, MEL: Melampodiinae, MIL: Milleriinae, NEU: Neurilaeninae, VER: Verbesininae, ZIN: Zinniinae.
- Subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson: AMB: Ambrosiinae, ESP: Espeletiinae, MEL: Melampodiinae, POL: Polymniinae, MIL: Milleriinae, DES: Desmanthodiinae, CLI: Clibadiinae, PIN: Pinillosinae, GUA: Guardioliinae, ENH: Enhydrinae, MON: Montanoinae, RUD: Rudbeckiinae, ZAL: Zaluzaniinae, HEP: Heptanthinae, ECL: Ecliptinae, HEL: Helianthinae, NEU: Neurolaeninae, GAL: Galinsoginae, DIM: Dimeresiinae, COR: Coreopsidinae, FIT: Fitchiinae, COU: Coulterellinae, PEC: Pectidinae, FLA: Flaveriinae, VAR: Varillinae, CLA: Clappiinae, JAU: Jaumeinae, MAD: Madiinae, HYM: Hymenopappinae, LYC: Lycapsinae, PER: Peritylinae, BAE: Baeriinae, CHA: Chaenactidinae, GAI: Gaillardiiinae, MAR: Marshalliinae.

Os valores percentuais de ocorrências de cada classe de metabólitos secundários estudadas nas diferentes tribos, subtribos e gêneros relacionadas à

família Asteraceae e a sua tribo Heliantheae foram transformados de maneira heurística segundo os padrões a seguir:

0-0,5 (ocorrência insignificante); 0,5-5 (ocorrência muito baixa); 5-10 (ocorrência baixa); 10-20 (ocorrência razoável); 20-40 (ocorrência alta); acima de 40 (ocorrência muito alta).

4.2.1 Ocorrências de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer

Nas tabelas 4.2.1.1 e 4.2.1.2 são apresentados os números e as percentagens de ocorrências de 12 classes químicas por tribos da família Asteraceae segundo Bremer. Na figura 4.2.1.1 observa-se uma representação das ocorrências das classes químicas por tribos de Asteraceae segundo Bremer.

Dentro da família Asteraceae segundo Bremer dividida em 4 subfamílias e 17 tribos podemos fazer as seguintes observações:

- A tribo Anthemideae é uma grande produtora/acumuladora de monoterpeno (ocorrências de 56,92%) seguida por Astereae, Heliantheae, Eupatorieae e Helenieae, que apresentam produção pequena (ocorrências 10,08; 6,67; 6,37; 6,11 % respectivamente). As outras tribos apresentaram ocorrências muito baixas ou insignificantes.
- Os sesquiterpenos têm uma ocorrência razoável nas tribos Anthemideae (20,67%); Senecioneae (18,68%) e Heliantheae (11,78%). As outras tribos têm ocorrências baixas, muito baixas ou insignificantes.
- A tribo Heliantheae tem uma alta produção de sesquiterpenos lactonizados (26,17%) seguida de Anthemideae (20,20%). Eupatorieae e Vernonieae com 10,86% e 10,13% de ocorrências são razoáveis. As outras tribos apresentam ocorrências baixas, muito baixas e insignificantes.

- As tribos Astereae (ocorrência de 33,54%), Heliantheae (28,09%), Eupatorieae (18,09%) e Gnaphalieae (9,15%) são as maiores produtoras de diterpenos. As outras tribos têm ocorrências muito baixas ou insignificantes.
- As tribos Vernonieae, Anthemideae, Lactuceae e Astereae com respectivamente 16,65%; 13,05%; 12,72% e 10,63% lideram as ocorrências de triterpenos. As outras tribos têm ocorrências baixas, muito baixas e insignificantes.
- As cumarinas estão concentradas nas tribos Anthemideae (22,80% de ocorrência), Astereae (19,12%) e Mutisieae (16,36%). As outras tribos têm ocorrências baixas, muito baixas ou insignificantes.
- As tribos Anthemideae, Helenieae e Heliantheae com respectivamente 16,36%; 17,59% e 16,60% de ocorrências são as maiores produtoras de flavonóides. Podemos também falar da tribo Barnadesieae com somente 3,24% de ocorrências mas produz especificamente flavonóides e de maneira insignificante triterpenos.
- As tribos Heliantheae e Cardueae lideraram as ocorrências de poliacetilenos em Asteraceae (com 44,68% e 29,87% respectivamente), seguidas de Astereae (10,67%). Nas demais tribos, as ocorrências registradas foram abaixo de 5%, e deve-se salientar que não se registrou nenhuma ocorrência dessa classe química em Barnadesieae, Lactuceae e Liabeae.
- As tribos Eupatorieae, Heliantheae, Senecioneae e Astereae englobaram cerca de 90% das ocorrências de benzofuranos em Asteraceae (com 31,64%; 30,56%; 17,44% e 10,03% respectivamente). Exceto Gnaphalieae com 5,09% as outras tribos têm ocorrências abaixo de 2%, e deve-se enfatizar que não se registrou neste trabalho nenhuma ocorrência dessa classe química em Barnadesieae, Cardueae, Liabeae, Inuleae, Arctoteae e Plucheeae.

- As tribos Eupatorieae e Heliantheae são os maiores produtores de Benzopiranos (45,54% e 28,71% respectivamente). As outras tribos produziram menos de 10% dessa classe química e com algumas tribos com 0% de ocorrências.
- As tribos Gnaphalieae, Eupatorieae, Anthemideae e Heliantheae produziram cerca de 75% de acetofenonas com 25,97%; 20,35%; 15,58%; 15,15% respectivamente. As outras têm menos de 10% dessa classe química e com muitas tribos tendo 0% de ocorrências.
- As tribos Heliantheae, Astereae, Anthemideae, Senecioneae concentram cerca de 65% das ocorrências de fenilpropanóides com 24,78%; 22,17%; 10,00%; 9,78% respectivamente. As outras tribos têm ocorrências baixas, muito baixas e insignificantes.

Tabela 4.2.1.1: Matriz de dados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer.

TRI	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
ANT	3512	1443	1168	12	156	223	878	141	4	10	36	46
ARC	1	37	23	18	35	1	0	23	0	0	0	0
AST	622	697	13	1521	127	187	520	377	65	16	5	102
BAR	0	0	0	0	1	0	174	0	0	0	0	0
CAL	9	25	3	93	21	3	1	24	7	0	5	3
CAR	24	430	462	5	81	25	327	1055	0	0	1	26
EUP	393	661	628	860	100	41	409	15	205	184	47	12
GNA	155	570	27	415	31	52	367	112	33	29	60	27
HLN	377	203	465	138	30	29	944	132	10	35	0	30
HLT	473	822	1513	1274	103	40	891	1578	198	116	35	114
INU	290	235	374	75	24	8	195	46	0	2	0	7
LAC	15	17	200	1	152	77	433	0	6	0	1	21
LIA	5	17	52	0	9	0	8	0	0	0	0	6
MUT	58	184	119	35	64	160	86	5	6	2	13	2
PLU	80	226	18	0	5	40	33	2	0	0	0	7
SEN	130	1304	131	77	57	28	26	5	113	10	21	45
VER	26	109	586	11	199	64	76	17	1	0	7	12
Total	6170	6980	5782	4535	1195	978	5368	3532	648	404	231	460
Média	363	411	340	267	70	58	316	208	38	24	14	27

Figura 4.2.1.1: Representação das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos de Asteraceae segundo Bremer

Tabela 4.2.1.2 : Porcentagem das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer

TRI	%MONO	%SESQ	%LACT	%DITE	%TRIT	CUMA%	FLAV%	%POLI	%BENZF	%BENZP	%ACET	%FENI
ANT	56,92	20,67	20,20	0,26	13,05	22,80	16,36	3,99	0,62	2,48	15,58	10,00
ARC	0,02	0,53	0,40	0,40	2,93	0,10	0,00	0,65	0,00	0,00	0,00	0,00
AST	10,08	9,99	0,22	33,54	10,63	19,12	9,69	10,67	10,03	3,96	2,16	22,17
BAR	0,00	0,00	0,00	0,00	0,08	0,00	3,24	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CAL	0,15	0,36	0,05	2,05	1,76	0,31	0,02	0,68	1,08	0,00	2,16	0,65
CAR	0,39	6,16	7,99	0,11	6,78	2,56	6,09	29,87	0,00	0,00	0,43	5,65
EUP	6,37	9,47	10,86	18,96	8,37	4,19	7,62	0,42	31,64	45,54	20,35	2,61
GNA	2,51	8,17	0,47	9,15	2,59	5,32	6,84	3,17	5,09	7,18	25,97	5,87
HLN	6,11	2,91	8,04	3,04	2,51	2,97	17,59	3,74	1,54	8,66	0,00	6,52
HLT	7,67	11,78	26,17	28,09	8,62	4,09	16,60	44,68	30,56	28,71	15,15	24,78
INU	4,70	3,37	6,47	1,65	2,01	0,82	3,63	1,30	0,00	0,50	0,00	1,52
LAC	0,24	0,24	3,46	0,02	12,72	7,87	8,07	0,00	0,93	0,00	0,43	4,57
LIA	0,08	0,24	0,90	0,00	0,75	0,00	0,15	0,00	0,00	0,00	0,00	1,30
MUT	0,94	2,64	2,06	0,77	5,36	16,36	1,60	0,14	0,93	0,50	5,63	0,43
PLU	1,30	3,24	0,31	0,00	0,42	4,09	0,61	0,06	0,00	0,00	0,00	1,52
SEN	2,11	18,68	2,27	1,70	4,77	2,86	0,48	0,14	17,44	2,48	9,09	9,78
VER	0,42	1,56	10,13	0,24	16,65	6,54	1,42	0,48	0,15	0,00	3,03	2,61

4.2.2 Ocorrências de metabólitos secundários em tribos e gêneros da família

Asteraceae segundo a “metatree”

As ocorrências das classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” serão muitas vezes parecidas à classificação de Bremer. Isso porque na “metatree” subdivide-se as 17 tribos de Bremer em 43 tribos.

Nas tabelas 4.2.2.1 e 4.2.2.2 são apresentados os números e as percentagens de ocorrências de 12 classes químicas por tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”. E na figura 4.2.2.1 observa-se uma representação das ocorrências das classes químicas por tribos de Asteraceae segundo “metatree”.

A classe química monoterpeno é concentrada na tribo Anthemideae com 53,07% de ocorrências.

As tribos Senecioneae e Anthemideae são as maiores produtoras de sesquiterpenos com 23,47% e 16,90% de ocorrências respectivamente.

Os sesquiterpenos lactonizados se encontram mais nas tribos Anthemideae e Vernonieae com 24,40% e 11,29%). de ocorrências respectivamente.

As tribos Astereae e Eupatorieae com respectivamente 41,17% e 22,10% são as mais importantes produtoras de diterpenos.

As tribos Vernonieae e Anthemideae com respectivamente 16,16% e 14,41% de ocorrências são produtoras razoáveis de triterpenos.

As tribos Anthemideae e Astereae são altas produtoras de cumarinas com respectivamente 21,76% e 22,00% de ocorrências.

A tribo Madieae é a maior produtora de flavonóides com 19,25% de ocorrências, mas muitas outras tribos têm produção razoável ou baixa.

As tribos Cardueae e Coreopsideae são as mais importantes produtoras de poliacetilenos com respectivamente 39,01% e 31,02% de ocorrências.

A classe benzofuranos é majoritariamente produzida pelas tribos Eupatorieae, Senecioneae e Astereae com respectivamente 34,07%, 25,93% e 18,52% de ocorrências.

A tribo Eupatorieae concentra 62,69% das ocorrências de benzopiranos.

A tribo Gnaphalieae é a maior produtora de acetofenonas com 34,12% de ocorrências.

A classe fenilpropanóide é a mais produzida pela tribo Astereae com 25,32% de ocorrências.

Tabela 4.2.2.1: Matriz de dados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”,

Metatree	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
ANT	2214	852	949	7	132	183	307	23	4	10	31	35
ARC	1	33	20	7	35	1	0	22	0	0	0	0
AST	528	597	12	1073	101	185	255	292	50	14	5	79
ATH	2	0	0	12	0	0	0	0	0	5	0	0
BAH	32	8	66	77	5	4	11	14	0	0	0	2
BAR	0	0	0	0	1	0	170	0	0	0	0	0
CAL	7	25	0	93	21	3	1	24	7	0	5	3
CAR	22	422	400	3	72	25	325	1040	0	0	1	26
CHA	0	0	10	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CIC	15	17	187	1	103	69	280	0	6	0	1	20
COR	13	38	10	0	12	4	191	827	2	0	0	41
COY	0	0	0	8	0	0	0	1	0	0	0	0
DIC	0	2	41	0	16	0	5	0	0	0	0	0
EUP	353	526	427	576	68	35	383	13	92	163	31	7
GNA	141	442	21	299	31	46	255	74	19	27	58	22
GOC	0	8	16	14	4	3	29	0	0	0	0	0
HLN	78	18	363	0	0	1	43	40	0	0	0	9
HLT	68	90	334	174	26	11	104	148	0	4	0	0
HYA	0	0	0	8	0	0	0	0	0	0	0	0
INU	216	328	283	67	18	45	159	28	0	1	0	13
LIA	3	16	19	0	9	0	8	0	0	0	0	6
MAD	44	33	19	39	25	9	682	45	6	29	0	3
MIL	11	44	104	53	0	2	32	34	2	1	2	13
MOQ	0	1	3	0	6	0	0	0	0	0	0	0
MUT	29	0	0	1	4	70	15	0	6	2	10	1
NAU	1	138	10	1	19	54	12	0	0	0	2	0
NEU	11	2	9	0	0	0	13	0	0	0	0	0
OLD	0	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ONO	0	0	0	3	8	8	10	0	0	0	1	0
PER	7	0	3	0	0	0	62	0	0	0	0	0
PET	0	0	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0
PLA	0	1	3	11	0	0	0	0	0	0	0	0
POL	0	0	2	18	0	0	2	10	1	0	2	0
SEN	121	1183	88	47	44	5	19	4	70	3	14	11
STI	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
TAG	203	144	0	4	0	15	133	12	4	1	0	14
TAR	28	5	40	0	5	0	2	0	0	0	0	0
VER	24	64	439	10	148	63	34	15	1	0	7	7
WUN	0	1	5	0	2	0	1	0	0	0	0	0

Figura 4.2.2.1 Representação das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos de Asteraceae segundo a “metatree”,

Tabela 4.2.2.2 Porcentagem das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”

Metatree	%MONO	%SESQ	%LACT	%DITE	%TRIT	%CUMA	%FLAV	%POLI	%BENZF	%BENZP	%ACET	%FENI
ANT	53.07	16.90	24.40	0.27	14.41	21.76	8.66	0.86	1.48	3.85	18.24	11.22
ARC	0.02	0.65	0.51	0.27	3.82	0.12	0.00	0.83	0.00	0.00	0.00	0.00
AST	12.66	11.84	0.31	41.17	11.03	22.00	7.20	10.95	18.52	5.38	2.94	25.32
ATH	0.05	0.00	0.00	0.46	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.92	0.00	0.00
BAH	0.77	0.16	1.70	2.95	0.55	0.48	0.31	0.53	0.00	0.00	0.00	0.64
BAR	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	0.00	4.80	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CAL	0.17	0.50	0.00	3.57	2.29	0.36	0.03	0.90	2.59	0.00	2.94	0.96
CAR	0.53	8.37	10.29	0.12	7.86	2.97	9.17	39.01	0.00	0.00	0.59	8.33
CHA	0.00	0.00	0.26	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CIC	0.36	0.34	4.81	0.04	11.24	8.20	7.90	0.00	2.22	0.00	0.59	6.41
COR	0.31	0.75	0.26	0.00	1.31	0.48	5.39	31.02	0.74	0.00	0.00	13.14
COY	0.00	0.00	0.00	0.31	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
DIC	0.00	0.04	1.05	0.00	1.75	0.00	0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
EUP	8.46	10.43	10.98	22.10	7.42	4.16	10.81	0.49	34.07	62.69	18.24	2.24
GNA	3.38	8.77	0.54	11.47	3.38	5.47	7.20	2.78	7.04	10.38	34.12	7.05
GOC	0.00	0.16	0.41	0.54	0.44	0.36	0.82	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
HLN	1.87	0.36	9.33	0.00	0.00	0.12	1.21	1.50	0.00	0.00	0.00	2.88
HLT	1.63	1.79	8.59	6.68	2.84	1.31	2.94	5.55	0.00	1.54	0.00	0.00
HYA	0.00	0.00	0.00	0.31	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
INU	5.18	6.51	7.28	2.57	1.97	5.35	4.49	1.05	0.00	0.38	0.00	4.17
LIA	0.07	0.32	0.49	0.00	0.98	0.00	0.23	0.00	0.00	0.00	0.00	1.92
MAD	1.05	0.65	0.49	1.50	2.73	1.07	19.25	1.69	2.22	11.15	0.00	0.96
MIL	0.26	0.87	2.67	2.03	0.00	0.24	0.90	1.28	0.74	0.38	1.18	4.17
MOQ	0.00	0.02	0.08	0.00	0.66	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MUT	0.70	0.00	0.00	0.04	0.44	8.32	0.42	0.00	2.22	0.77	5.88	0.32
NAU	0.02	2.74	0.26	0.04	2.07	6.42	0.34	0.00	0.00	0.00	1.18	0.00
NEU	0.26	0.04	0.23	0.00	0.00	0.00	0.37	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
OLD	0.00	0.06	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
ONO	0.00	0.00	0.00	0.12	0.87	0.95	0.28	0.00	0.00	0.00	0.59	0.00
PER	0.17	0.00	0.08	0.00	0.00	0.00	1.75	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
PET	0.00	0.00	0.10	0.00	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
PLA	0.00	0.02	0.08	0.42	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
POL	0.00	0.00	0.05	0.69	0.00	0.00	0.06	0.38	0.37	0.00	1.18	0.00
SEN	2.90	23.47	2.26	1.80	4.80	0.59	0.54	0.15	25.93	1.15	8.24	3.53
STI	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
TAG	4.87	2.86	0.00	0.15	0.00	1.78	3.75	0.45	1.48	0.38	0.00	4.49
TAR	0.67	0.10	1.03	0.00	0.55	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
VER	0.58	1.27	11.29	0.38	16.16	7.49	0.96	0.56	0.37	0.00	4.12	2.24
WUN	0.00	0.02	0.13	0.00	0.22	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Observa-se que algumas tribos agrupam as maiores porcentagens em muitas classes de metabólitos secundários.

As tabelas das ocorrências e porcentagens de classes químicas em gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree” não serão apresentados neste trabalho por terem uma grande quantidade de dados. São mais de 300 gêneros.

4.2.3 Ocorrências de metabólitos secundários nas subtribos e nos gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

As tabelas 4.2.3.1 e 4.2.3.2 representam as ocorrências e porcentagens das ocorrências de classes de metabólitos em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer. A figura 4.2.3.1 nos dá uma idéia de como as classes são repartidas dentro das subtribos. E as observações feitas no nível das tribos da família Asteraceae se encontram também no nível das subtribos.

Temos algumas subtribos que apresentam porcentagens altas de classes químicas e outras baixas ou insignificantes. As classes benzofuranos, benzopiranos, acetofenonas e fenilpropanóides não são produzidas por muitas subtribos. As classes sesquiterpenos lactonizadas, flavonóides, poliacetilenos e diterpenos são produzidas por quase todas as subtribos.

Tabela 4.2.3.1 Matriz de dados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

STRI	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
AMB	147	119	418	6	8	0	34	59	0	1	0	3
BAE	7	3	15	0	0	2	40	19	2	0	0	0
CHA	61	35	60	79	28	4	327	26	1	16	0	5
COR	13	38	10	0	12	4	191	827	2	0	0	41
ENG	0	29	4	32	5	0	11	6	0	0	0	1
FLA	0	0	0	4	0	0	16	5	0	0	0	0
GAI	80	18	367	0	0	1	52	42	0	0	0	11
GAL	0	0	0	1	4	0	1	47	0	0	0	0
HLT	37	33	275	356	30	20	287	71	25	20	0	4
HYM	3	2	20	9	2	0	1	3	0	0	0	0
MAD	5	1	0	34	0	7	326	30	3	13	0	0
MEL	99	138	444	191	7	4	70	107	15	23	22	15
PEC	212	144	0	0	0	15	120	7	4	1	0	14
PER	7	0	3	0	0	0	62	0	0	0	0	0
RUD	10	91	42	3	0	1	11	144	1	0	0	4
VER	68	308	175	576	35	6	119	115	151	72	13	46
ZIN	24	34	72	3	1	0	0	95	0	0	0	0
Total	773	993	1905	1294	132	64	1668	1603	204	146	35	144
Média	45	58	112	76	8	4	98	94	12	9	2	8

■ MONO ■ SESQ ■ LACT ■ DITE ■ TRIT ■ CUMA ■ FLAV ■ POLI ■ BENZF ■ BENZP ■ ACET ■ FENI

Figura 4.2.3.1 Representação das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer,

Tabela 4.2.3.2 Porcentagem das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

STRI	%MONO	%SESQ	%LACT	%DITE	%TRIT	%CUMA	%FLAV	%POLI	%BENZF	%BENZP	%ACET	%FENI
AMB	19,02	11,98	21,94	0,46	6,06	0,00	2,04	3,68	0,00	0,68	0,00	2,08
BAE	0,91	0,30	0,79	0,00	0,00	3,13	2,40	1,19	0,98	0,00	0,00	0,00
CHA	7,89	3,52	3,15	6,11	21,21	6,25	19,60	1,62	0,49	10,96	0,00	3,47
COR	1,68	3,83	0,52	0,00	9,09	6,25	11,45	51,59	0,98	0,00	0,00	28,47
ENG	0,00	2,92	0,21	2,47	3,79	0,00	0,66	0,37	0,00	0,00	0,00	0,69
FLA	0,00	0,00	0,00	0,31	0,00	0,00	0,96	0,31	0,00	0,00	0,00	0,00
GAI	10,35	1,81	19,27	0,00	0,00	1,56	3,12	2,62	0,00	0,00	0,00	7,64
GAL	0,00	0,00	0,00	0,08	3,03	0,00	0,06	2,93	0,00	0,00	0,00	0,00
HLT	4,79	3,32	14,44	27,51	22,73	31,25	17,21	4,43	12,25	13,70	0,00	2,78
HYM	0,39	0,20	1,05	0,70	1,52	0,00	0,06	0,19	0,00	0,00	0,00	0,00
MAD	0,65	0,10	0,00	2,63	0,00	10,94	19,54	1,87	1,47	8,90	0,00	0,00
MEL	12,81	13,90	23,31	14,76	5,30	6,25	4,20	6,67	7,35	15,75	62,86	10,42
PEC	27,43	14,50	0,00	0,00	0,00	23,44	7,19	0,44	1,96	0,68	0,00	9,72
PER	0,91	0,00	0,16	0,00	0,00	0,00	3,72	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
RUD	1,29	9,16	2,20	0,23	0,00	1,56	0,66	8,98	0,49	0,00	0,00	2,78
VER	8,80	31,02	9,19	44,51	26,52	9,38	7,13	7,17	74,02	49,32	37,14	31,94
ZIN	3,10	3,42	3,78	0,23	0,76	0,00	0,00	5,93	0,00	0,00	0,00	0,00

As tabelas 4.2.3.3 e 4.2.3.4 representando as ocorrências e porcentagens de ocorrências em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer estão no apêndice A. Observa-se uma maior diversificação das classes dentro dos gêneros. E as diferentes classes não são representadas em muitos gêneros.

4.2.4 Ocorrências de metabólitos secundários nas subtribos e nos gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy

As tabelas 4.2.4.1 e 4.2.4.2 representam as ocorrências e porcentagens das ocorrências de classes de metabólitos em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy. A figura 4.2.4.1 nos dá uma idéia de como as classes são repartidas dentro das subtribos. E as observações feitas nas subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer se encontram nessa classificação.

Temos algumas subtribos que agrupam porcentagens razoáveis, altas e outras baixas, ou insignificantes, de classes químicas. As classes benzofuranos, benzopiranos, acetofenonas, cumarinas, triterpenos e fenilpropanóides não são produzidas por muitas subtribos. As classes sesquiterpenos lactonizadas, flavonóides, poliacetilenos e diterpenos são produzidas por quase todas as subtribos.

Tabela 4.2.4.1 Matriz de dados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.

STRI	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
AMB	147	119	418	6	8	0	34	59	0	1	0	3
BAH	84	61	211	34	11	6	22	52	12	18	18	4
COR	14	32	4	1	12	4	191	838	0	0	0	39
ECL	46	47	72	190	7	8	3	117	0	0	1	4
ENG	0	29	4	32	5	0	11	6	0	0	0	1
FIT	0	7	7	0	0	0	0	3	2	0	0	2
GAI	75	15	358	0	0	1	42	42	0	0	0	2
GAL	29	8	12	1	5	0	1	87	7	5	0	0
HEL	57	231	389	349	47	24	414	232	169	75	10	8
MAD	5	1	0	34	0	7	326	30	3	13	0	0
MEL	26	50	130	183	1	2	36	48	1	0	2	9
MIL	61	21	27	74	1	0	166	34	4	0	0	0
NEU	11	3	56	17	0	0	13	12	0	0	0	0
VER	27	108	138	145	4	0	6	68	4	16	2	42
ZIN	0	7	69	3	0	0	0	40	0	0	0	0
Total	582	739	1895	1069	101	52	1265	1668	202	128	33	114
Média	39	49	126	71	7	3	84	111	13	9	2	8

Figura 4.2.4.1 Representação das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy,

Tabela 4.2.4.2 Porcentagem das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.

STRI	%MONO	%SESQ	%LACT	%DITE	%TRIT	%CUMA	%FLAV	%POLI	%BENZF	%BENZP	%ACET	%FENI
AMB	25,26	16,10	22,06	0,56	7,92	0,00	2,69	3,54	0,00	0,78	0,00	2,63
BAH	14,43	8,25	11,13	3,18	10,89	11,54	1,74	3,12	5,94	14,06	54,55	3,51
COR	2,41	4,33	0,21	0,09	11,88	7,69	15,10	50,24	0,00	0,00	0,00	34,21
ECL	7,90	6,36	3,80	17,77	6,93	15,38	0,24	7,01	0,00	0,00	3,03	3,51
ENG	0,00	3,92	0,21	2,99	4,95	0,00	0,87	0,36	0,00	0,00	0,00	0,88
FIT	0,00	0,95	0,37	0,00	0,00	0,00	0,00	0,18	0,99	0,00	0,00	1,75
GAI	12,89	2,03	18,89	0,00	0,00	1,92	3,32	2,52	0,00	0,00	0,00	1,75
GAL	4,98	1,08	0,63	0,09	4,95	0,00	0,08	5,22	3,47	3,91	0,00	0,00
HEL	9,79	31,26	20,53	32,65	46,53	46,15	32,73	13,91	83,66	58,59	30,30	7,02
MAD	0,86	0,14	0,00	3,18	0,00	13,46	25,77	1,80	1,49	10,16	0,00	0,00
MEL	4,47	6,77	6,86	17,12	0,99	3,85	2,85	2,88	0,50	0,00	6,06	7,89
MIL	10,48	2,84	1,42	6,92	0,99	0,00	13,12	2,04	1,98	0,00	0,00	0,00
NEU	1,89	0,41	2,96	1,59	0,00	0,00	1,03	0,72	0,00	0,00	0,00	0,00
VER	4,64	14,61	7,28	13,56	3,96	0,00	0,47	4,08	1,98	12,50	6,06	36,84
ZIN	0,00	0,95	3,64	0,28	0,00	0,00	0,00	2,40	0,00	0,00	0,00	0,00

As tabelas 4.2.4.3 e 4.2.4.4 representando as ocorrências e porcentagens de ocorrências em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy estão no apêndice A.

Observa-se uma maior diversificação das classes dentro dos gêneros. As diferentes classes não são representadas em muitos gêneros.

4.2.5 Ocorrências de metabólitos secundários nas subtribos e nos gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson

As tabelas 4.2.5.1 e 4.2.5.2 representam as ocorrências e porcentagens das ocorrências de classes de metabólitos em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer. A figura 4.2.5.1 nos dá uma idéia de como as classes são repartidas dentro das subtribos. E as observações feitas no nível das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy se encontram também nessa classificação.

Temos algumas subtribos que agrupam porcentagens razoáveis, altas de classes químicas e outras baixas ou insignificantes. As classes benzofuranos, benzopiranos, acetofenonas, cumarinas, triterpenos e fenilpropanóides não são produzidas por muitas subtribos. As classes sesquiterpenos, sesquiterpenos lactonizadas, flavonóides, poliacetilenos e diterpenos são produzidas por quase todas as subtribos.

Tabela 4.2.5.1 Matriz de dados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.

STRI	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
AMB	66	103	315	12	2	0	15	59	0	1	0	3
BAE	7	3	15	0	0	2	40	19	2	0	0	0
CHA	43	30	43	75	27	4	327	15	1	16	0	3
CLI	1	7	6	1	0	0	158	22	4	0	0	0
COR	13	31	3	0	12	4	191	824	0	0	0	39
DES	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
ECL	78	400	221	321	38	11	130	295	144	63	11	48
ESP	0	50	0	247	4	0	0	1	0	0	0	0
FIT	0	7	7	0	0	0	0	3	2	0	0	2
FLA	0	0	0	0	0	0	16	3	0	0	0	0
GAI	52	14	320	0	0	0	27	39	0	0	0	7
GAL	1	0	62	1	4	0	9	56	0	0	0	0
HEL	37	33	275	356	30	20	287	71	25	20	0	4
HYM	3	2	20	3	2	0	1	1	0	0	0	0
JAU	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
MAD	0	0	0	24	0	7	96	19	1	5	0	0
MAR	5	3	0	0	0	0	1	0	0	0	0	2
MEL	89	87	152	123	0	2	45	36	2	1	2	13
MIL	19	6	57	104	2	0	0	23	0	0	0	2
MON	14	8	59	40	1	0	1	0	0	0	0	0
NEU	68	63	185	8	6	2	23	36	12	22	18	2
PEC	212	163	0	0	2	15	120	7	4	1	0	14
PER	7	0	3	0	0	0	62	0	0	0	0	0
POL	0	0	2	18	0	0	2	10	1	0	2	0
RUD	1	4	32	1	0	1	10	73	0	0	0	1
VAR	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0
ZAL	0	0	16	12	0	0	0	1	0	0	0	0
Total	716	1014	1793	1351	130	68	1561	1615	198	129	33	140
Média	27	38	66	50	5	3	58	60	7	5	1	5

Figura 4.2.5.1 Representação das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.

Tabela 4.2.5.2 Porcentagem das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.

STRI	%MONO	%SESQ	%LACT	%DITE	%TRIT	%CUMA	%FLAV	%POLI	%BENZF	%BENZP	%ACET	%FENI
AMB	9,22	10,16	17,57	0,89	1,54	0,00	0,96	3,65	0,00	0,78	0,00	2,14
BAE	0,98	0,30	0,84	0,00	0,00	2,94	2,56	1,18	1,01	0,00	0,00	0,00
CHA	6,01	2,96	2,40	5,55	20,77	5,88	20,95	0,93	0,51	12,40	0,00	2,14
CLI	0,14	0,69	0,33	0,07	0,00	0,00	10,12	1,36	2,02	0,00	0,00	0,00
COR	1,82	3,06	0,17	0,00	9,23	5,88	12,24	51,02	0,00	0,00	0,00	27,86
DES	0,00	0,00	0,00	0,07	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
ECL	10,89	39,45	12,33	23,76	29,23	16,18	8,33	18,27	72,73	48,84	33,33	34,29
ESP	0,00	4,93	0,00	18,28	3,08	0,00	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
FIT	0,00	0,69	0,39	0,00	0,00	0,00	0,00	0,19	1,01	0,00	0,00	1,43
FLA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,02	0,19	0,00	0,00	0,00	0,00
GAI	7,26	1,38	17,85	0,00	0,00	0,00	1,73	2,41	0,00	0,00	0,00	5,00
GAL	0,14	0,00	3,46	0,07	3,08	0,00	0,58	3,47	0,00	0,00	0,00	0,00
HEL	5,17	3,25	15,34	26,35	23,08	29,41	18,39	4,40	12,63	15,50	0,00	2,86
HYM	0,42	0,20	1,12	0,22	1,54	0,00	0,06	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
JAU	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,12	0,00	0,00	0,00	0,00
MAD	0,00	0,00	0,00	1,78	0,00	10,29	6,15	1,18	0,51	3,88	0,00	0,00
MAR	0,70	0,30	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00	1,43
MEL	12,43	8,58	8,48	9,10	0,00	2,94	2,88	2,23	1,01	0,78	6,06	9,29
MIL	2,65	0,59	3,18	7,70	1,54	0,00	0,00	1,42	0,00	0,00	0,00	1,43
MON	1,96	0,79	3,29	2,96	0,77	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
NEU	9,50	6,21	10,32	0,59	4,62	2,94	1,47	2,23	6,06	17,05	54,55	1,43
PEC	29,61	16,07	0,00	0,00	1,54	22,06	7,69	0,43	2,02	0,78	0,00	10,00
PER	0,98	0,00	0,17	0,00	0,00	0,00	3,97	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
POL	0,00	0,00	0,11	1,33	0,00	0,00	0,13	0,62	0,51	0,00	6,06	0,00
RUD	0,14	0,39	1,78	0,07	0,00	1,47	0,64	4,52	0,00	0,00	0,00	0,71
VAR	0,00	0,00	0,00	0,30	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
ZAL	0,00	0,00	0,89	0,89	0,00	0,00	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00

As tabelas 4.2.5.3 e 4.2.5.4 apresentando as ocorrências e porcentagens de ocorrências em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson estão no apêndice A. Observa-se uma maior diversificação das classes dentro dos gêneros. E as diferentes classes não são representadas em muitos gêneros.

4.3 Média das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários na família Asteraceae e na sua tribo Heliantheae

A partir do grau de oxidação de cada substância (esqueleto) foi calculado o passo oxidativo (PO). Em cada classe foi calculada a média das oxidações em cada tribo da família Asteraceae e em cada subtribos e gêneros da tribo Heliantheae. Cada classe de metabólitos secundários possui uma média de oxidações por tribo, subtribo ou gênero. Mas os flavonóides têm 2 médias de oxidações, uma do anel A (C_6) que vem da rota do acetato-mevalonato e o anel B mais a cadeia de três carbonos (C_6C_3) que vem da rota do shiquimato (Figura 4.3.1).

Figura 4.3.1 Esqueleto básico de um flavonóide com o anel A e B apresentados

4.3.1 Média das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários nas tribos da família Asteraceae segundo Bremer

A tabela 4.3.1.1 apresenta as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer (Bremer, 1994).

Uma tribo não pode apresentar uma média dos passos oxidativos numa classe que não possua ocorrências. Foi possível calcular a média das oxidações por uma tribo somente quando ela possui pelo menos uma ocorrência. Por exemplo, a tribo Barnadesieae que possua somente ocorrências de classes triterpeno e flavonóides não apresentam nenhuma média oxidativa nas outras classes. Há também a tribo Arctoteae que não apresenta uma média das oxidações em muitas

classes. Também algumas classes que são mais oxidadas como poliacetilenos, triterpenos e sesquiterponas lactonas.

Tabela 4.3.1.1 Médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer

TRI	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
ANT	0,52	0,83	6,19	2,33	5,51	2,37	2,36	1,84	12,03	0,5	3,5	3,19	3,61
ARC	0	0,57	6,35	4,39	1,06	2			11,3				
AST	0,34	0,61	6	4,51	6,19	0,73	2,05	2,44	11,37	1,19	1,94	2,8	3,33
BAR					1		1,26	2,32					
CAL	1,44	0,56	5	1,87	4,33	1,33	1	3	11,83	0,71		3,8	4,67
CAR	1,63	0,62	6,67	3,8	4,28	1,68	1,52	1,81	10,38			1	5,52
EUP	1,86	0,87	7,1	3,45	1,44	1,66	2,18	2,23	12,33	1,15	2,07	1,94	3,54
GNA	1,57	0,44	5,41	2,63	2,9	2,63	1,76	2,41	11,46	2,88	2,93	3,1	3,15
HLN	1,45	0,24	6,39	2,93	5,7	1,93	1,95	2,02	11,88	1	1,94		3,37
HLT	0,96	0,59	7,29	3,67	4,07	2,83	1,81	1,77	10,3	1,35	1,78	2,37	3,54
INU	2,07	1,99	5,58	2,92	2,71	2,38	1,4	2,25	11,57		1,5		4,36
LAC	0,53	5,82	6,73	0	5,49	1,84	1,07	1,35		2,83		1	4,95
LIA	1,4	0,82	6,08		1,44		1,5	3					2,5
MUT	1,03	4,76	6,39	3,51	0,84	2,36	1,3	2,15	11,4	0,83	2,5	3,54	1,5
PLU	1,49	1,78	5,56		1	3,08	1,38	2,21	12				3,86
SEN	1,05	3,84	5,55	2,04	3,16	1,29	1,23	2,02	12	1,34	2,9	2,62	3,37
VER	0,5	0,83	7,94	2,82	1,25	2,13	1,16	2,38	11,82	3		0,57	5,13

4.3.2 Média das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários nas tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”

A tabela 4.3.2.1 mostra as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” (Funk *et al.*, 2009).

Como na classificação de Bremer que há muitas tribos que não possuam ocorrências em algumas classes químicas, então não apresentaram média oxidativa nelas.

A tabela das médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros de Asteraceae segundo a “metatree” não são mostrados

nesse trabalho por ter um banco de dados muito grande e sem sentido, já que o parâmetro oxidação não tem se mostrado útil em níveis hierárquicos baixos.

Tabela 4.3.2.1 Média dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários das tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”

TRI	Oxi MONO	Oxi SESQ	Oxi LACT	Oxi DITE	oxi TRIT	Oxi CUMA	Oxi FLAV-A	Oxi FLAV-B	Oxi POLI	Oxi BENZF	Oxi BENZP	Oxi ACET	Oxi FENI
ANT	0,52	1,04	6,06	2,43	5,97	2,22	2,08	1,98	13,83	0,5	3,5	2,77	3,06
ARC-A		0,92	6,88	1,86	0,5				11,2				
ARC-G	0	0,25	5,33		1,09	2			12				
AST	0,3	0,66	6,08	4,32	6,46	0,74	1,61	2,17	11,43	0,89	1,71	2,8	3,24
ATH	1,5			3,67							2		
BAH	2,5	0	6,29	2,16	0,2	2,75	2,45	2,64	11,93				3,5
BAR					1		1,26	2,32					
CAL	1,57	0,56		1,87	4,33	1,33	1	3	11,83	0,71		3,8	4,67
CAR	1,45	0,62	6,78	4,33	3,97	1,68	1,52	1,81	10,38			1	5,52
CHA			6,2										
CIC	0,53	5,82	6,68	0	5,13	1,83	1,08	1,31		2,83		1	5
CORE	1,54	1,66	4,9		6,25	2	1,2	1,36	10,59	1			3,22
CORY				1					11				
DIC		0	6,88		0,88		2,6	3,4					
EUP	1,62	0,95	7,09	3,3	1,79	1,71	2,21	2,23	12,31	1,05	2,05	1,97	4,5
GNA	1,21	0,37	5,43	2,75	2,9	2,63	1,72	2,6	11,57	4,21	3	3,07	2,77
GOC		2,13	6,88	3,21	0,75	4	1,28	2,03					
HLN	2,06	0,44	6,49			2	3,23	1,7	12,14				3
HLT	0,43	0,84	6,51	3,87	6,42	2	2,45	1,69	10,64		1,75		
HET									12				
HYA				5,5									
INU	2,38	1,82	5,42	2,78	0,72	3,02	1,3	2,25	11,5		1		4,04
LIA	1,33	0,75	5,26		1,44		1,5	3					2,5
MAD	2,43	0,45	5,26	4,41	6,8	2	1,84	1,9	11,42	1,33	1,97		5
MIL	2,27	0,39	9,44	2,77		2	1,63	2,42	9,62	0,5	2	1,5	4,35
MOQ		0	3,67		1								
MUT	1,52			3	0,75	2,17	1	1,87		0,83	2,5	2,8	3
NAU	4	5,25	6,55	0	0,63	2,8	1,5	1,83				7,5	
NEU	3,91	0,5	6,67				2,69	1,92					
OLD		1,67	7										
ONO				7	1,13	1,5	1	2,2				3	
PERI	4		5,43		1		2,52	1,71					
PLA		0	4,33	6									
POL			5,5	3,5			1	3	11,9	1		0,5	
SEN	1,12	3,87	5,47	2,06	2,43	2	1,32	2,05	12	0,96	4,33	2,5	3,82
STI			5										
TAG	0,7	0,17		2,5		1,67	1,69	2,83	12,67	0,5	1		3
TAR	0,43	0,8	5,88		0,8		1	5					
VER	0,42	0,33	8,06	3,1	1,33	2,1	1,19	1,93	11,8	3		0,57	4,86
WUN		0	6		1		1	1					

4.3.3 Média das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários nas subtribos e nos gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

A tabela 4.3.3.1 representa as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer (Bremer, 1994).

Tem muitas subtribos que não possuem média das oxidações em muitas classes químicas.

Tabela 4.3.3.1 Média dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

STR	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
AMB	0,24	0,8	6,04	7,67	4,88		2,82	2,06	11,78		2		5
BAE	3,43	0	5,27			2	1,35	1,5	11,89	1,5			
CHA	2,43	0,4	6,28	2,09	6,11	2,75	1,77	1,85	11,35	3	2,06		4,4
COR	1,54	1,66	4,9		6,25	2	1,2	1,36	10,59	1			3,22
ENG		0,24	6	2,66	3,4		1	2,36	8,17				5
FLA				2,5			2,38	2,63	12,2				
GAI	2,14	0,44	6,48			2	3,15	1,65	12,13				3,36
HLT	0,43	0,52	7,36	3,98	6,87	2,45	2,05	1,44	7,98	0,6	1,75		2,5
HYM	5	0	6,05	2,44	0		3	1	11,33				
MAD	0	1		4,79		2	1,99	2,03	11,7	0,67	1,85		
MEL	3,12	0,48	8,69	4,41	0,86	1,5	1,86	2,04	10,03	2	2	2,55	4,17
PEC	0,74	0,17				1,67	1,63	2,85	13	0,5	1		3
PER	4		5,67				2,52	1,71					
RUD	0,1	0,22	5,93	2		2	2,82	2	9,35	0			5,63
VER	0,4	0,65	7,61	3,41	1,16	2,27	2,15	2,17	11,55	1,45	1,71	1,55	3,68
ZIN	0,29	0,09	7,85	0,67	1				8,89				

A tabela 4.3.3.2 no Apêndice B mostra as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.

4.3.4 Média das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários nas subtribos e nos gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy

A tabela 4.3.4.1 representa as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy (Stuessy, 1977).

Tabela 4.3.4.1 Média dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy

STRI	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
AMB	0,24	0,8	6,04	7,67	4,88		2,82	2,06	11,78		2		5
BAH	3,38	0,31	7,76	2,32	0,55	2,17	1,84	1,93	9,95	2,33	2,11	2,89	3,25
COR	1,5	1,94	4,25	4	6,25	2	1,2	1,36	10,59				3,28
ECL	0,41	0,17	7,33	3,92	1,14	5	1	2,67	12,38			3	2,25
ENG		0,24	6	2,66	3,4		1	2,36	8,17				5
FIT		1,14	5,29						12	1			2
GAI	2,03	0,13	6,45			2	3,26	1,67	12,13				4
GAL	0,93	1,88	7,33	10	1		0,5	1,5	7,21	1,43	1,6		
HEL	0,33	0,55	7,54	3,96	5,36	2,46	2,19	1,67	8,86	1,35	1,69	2,3	4,06
MAD	0	1		4,79		2	1,99	2,03	11,7	0,67	1,85		
MEL	1,69	0,2	8,87	4,3	6	2	1,6	2,36	11,29	1		0,5	3,78
MIL	0,67	0,14	8,85	3,54	1		1,46	2,27	10,18	0,5			
NEU	3,91	0,67	6,61	2,59			2,69	1,92	6,13				
VER	0,07	0,89	6,91	2,94	0,75		1,67	2,33	11,35	0,5	1,88	0,5	3,52
ZIN		0	7,86	0,67					10,88				

A tabela 4.3.4.2 no Apêndice B mostra as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy.

4.3.5 Média das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários nas subtribos e nos gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson

A tabela 4.3.5.1 representa as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson (Robinson, 1981).

A tabela 4.3.5.2 no Apêndice B mostra as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson.

Tabela 4.3.5.1 Média dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários das subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson

STRI	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
AMB	0,48	0,9	5,93	4,83	6		3,27	1,53	11,75		2		5
BAE	3,43	0	5,27			2	1,35	1,5	11,89	1,5			
CHA	2,51	0,47	6,42	2,05	6,33	2,75	1,77	1,85	10,8	3	2,06		5
CLI	0	0	8,17	4			1,48	2,24	9,36	0,5			
COR	1,54	1,77	4		6,25	2	1,2	1,36	10,58				3,28
DES				5									
ECL	0,37	0,48	7,24	3,72	2,18	4,36	2,23	2,26	10,69	1,37	1,7	2,36	3,61
ESP		0,4		3	2,25				12				
FIT		1,14	5,29						12	1			2
FLA							2,38	2,63	13				
GAI	2,37	0,07	6,45				2,7	1,37	12,44				2,86
GAL	1		9,61	10	1		2,28	1,72	6,34				
HEL	0,43	0,52	7,36	3,98	6,87	2,45	2,05	1,44	7,98	0,6	1,75		2,5
HYM	5	0	6,05	3,33	0		3	1	12				
JAU									11				
MAD				6,58		2	1,72	2	11,84	1	2,2		
MAR	3,8	2					2	3					4,5
MEL	0,97	0,3	9,13	3,26		2	1,57	2,39	11,17	0,5	2	1,5	4,35
MIL	2,37	0	7,25	5,44	0,5				11,65				3,5
MON	0,07	2	6,97	1,9	0		3	1					
NEU	3,85	0,57	8,17	3,38	0,83	1	1,98	1,63	8,97	2,33	2	2,89	3
PEC	0,74	0,57			3	1,67	1,63	2,85	13	0,5	1		3
PER	4		5,67				2,52	1,71					
POL			5,5	3,5			1	3	11,9	1		0,5	
RUD	1	3	5,75	3		2	3	2	11,42				3
VAR				2,5									
ZAL			5,38	2,83					13				

4.4 Ocorrências dos esqueletos de metabólitos secundários na família Asteraceae e na sua tribo Heliantheae

Nas tabelas abaixo estão mostrados um fragmento da matriz dos 537 esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae e subtribos de Heliantheae disponível em nosso banco. Cada classe sendo representada por um esqueleto, Esqueleto 1 (Monoterpeno); Esqueleto 101 (Sesquiterpeno); Esqueleto 301 (Sesquiterpeno lactonizada); Esqueleto 412 (Diterpeno); Esqueleto 521 (Triterpeno); Esqueleto 561 (Cumarina); Esqueleto 651 (Flavonóide); Esqueleto 691 (Poliacetileno); Esqueleto 712 (Benzofurano); Esqueleto 751 (Benzopirano); Esqueleto 792 (Acetofenona), Esqueleto 831 (Fenilpropanóide)

4.4.1 Ocorrências dos esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários nas tribos da família Asteraceae segundo Bremer

A tabela 4.4.1.1 é um fragmento da matriz dos 537 esqueletos das classes químicas em tribos da família Asteraceae segundo Bremer. São apresentados somente esqueletos com maiores ocorrências dentro de cada classe. Mas, observa-se que há alguns esqueletos com uma ocorrência alta, razoável, baixa e insignificante nas tribos. Por exemplo A tribo Barnadesieae é composta somente dos esqueletos de flavonóides e triterpenos.

Tabela 4.4.1.1 Fragmento da matriz dos esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários das tribos da família Asteraceae segundo Bremer

TRI	Esq 1	Esq 101	Esq 301	Esq 412	Esq 521	Esq 561	Esq 651	Esq 691	Esq 712	Esq 751	Esq 792	Esq 831
ANT	362	180	326	2	52	221	0	68	2	6	12	26
ARC	1	3	7	0	0	1	0	0	0	0	0	0
AST	162	28	0	87	8	179	0	332	36	9	2	77
BAR	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0
CAL	0	0	1	1	4	3	0	0	7	0	5	3
CAR	2	27	125	1	20	23	0	5	0	0	0	27
EUP	75	60	246	46	3	41	0	0	173	108	12	12
GNA	34	25	4	9	3	52	1	0	17	2	4	20
HLN	144	14	24	0	12	26	16	2	8	34	0	30
HLT	70	34	465	65	10	33	87	16	143	98	12	114
INU	33	12	83	35	4	5	0	0	0	1	0	7
LAC	1	0	28	1	35	75	1	0	0	0	0	21
LIA	2	1	15	0	0	0	0	0	0	0	0	6
MUT	29	7	43	0	2	13	0	0	1	0	0	2
PLU	7	4	0	0	0	40	0	0	0	0	0	7
SEN	46	32	4	4	3	22	0	0	87	2	9	41
VER	1	2	320	1	7	3	0	0	0	0	0	12

4.4.2 Ocorrências dos esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários nas tribos e gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”

A tabela 4.4.2.1 é um fragmento da matriz dos esqueletos das classes químicas em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”. São apresentados somente esqueletos com maiores ocorrências dentro de cada classe. Mas observa-se que têm alguns esqueletos com uma ocorrência alta, razoável, baixa e insignificante nas tribos.

A matriz dos esqueletos em gêneros da “metatree” por ter uma grande quantidade de dados não será incluída nesse trabalho.

4.4.3 Ocorrências dos esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários nas subtribos e nos gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

A tabela 4.4.3.1 é um fragmento da matriz dos esqueletos das classes químicas em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer. São apresentados somente esqueletos com maiores ocorrências dentro de cada classe. Mas, observa-se que há alguns esqueletos com uma ocorrência alta, razoável, baixa e insignificante nas subtribos.

A matriz dos esqueletos em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae por ter uma grande quantidade de dados não será incluído nesse trabalho.

Tabela 4.4.3.1 Fragmento da matriz dos esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários das subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

STRI	Esq 1	Esq 101	Esq 301	Esq 412	Esq 521	Esq 561	Esq 651	Esq 691	Esq 712	Esq 751	Esq 792	Esq 831
AMB	26	2	31	0	1	0	0	0	0	1	0	3
BAE	0	0	2	0	0	2	16	0	1	0	0	0
CAI	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
CHA	10	3	13	0	12	1	0	0	0	16	0	5
COR	3	1	5	0	3	4	49	10	2	0	0	41
ENG	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
FLA	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
GAI	23	0	4	0	0	0	0	2	0	0	0	11
GAL	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
HLT	10	1	158	8	5	20	37	0	13	19	0	4
HYM	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0
MAD	4	0	0	0	0	7	0	0	3	13	0	0
MEL	2	7	175	21	0	4	0	0	7	17	5	15
PEC	106	11	0	0	0	15	0	0	4	1	0	14
PER	1	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
RUD	4	15	2	0	0	1	0	0	1	0	0	4
VER	12	5	51	13	1	3	0	4	116	61	7	46
ZIN	5	3	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0

4.4.4 Ocorrências dos esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários nas subtribos e nos gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy

A tabela 4.4.4.1 é um fragmento da matriz dos esqueletos das classes químicas em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy. São apresentados somente esqueletos com maiores ocorrências dentro de cada classe. Mas observa-se que há alguns esqueletos com uma ocorrência alta, razoável, baixa e insignificante nas subtribos .

A matriz dos esqueletos em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy por ter uma grande quantidade de dados não será incluído nesse trabalho.

Tabela 4.4.4.1 Fragmento da matriz dos esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy.

STRI	Esq 1	Esq 101	Esq 301	Esq 412	Esq 521	Esq 561	Esq 651	Esq 691	Esq 712	Esq 751	Esq 792	Esq 831
AMB	26	2	31	0	1	0	0	0	0	1	0	3
BAH	8	4	63	0	0	3	0	0	4	12	3	4
COR	3	1	4	0	3	4	49	10	0	0	0	39
ECL	8	3	34	2	1	1	0	0	0	0	0	4
ENG	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
FIT	0	0	2	0	0	0	0	0	2	0	0	2
GAI	23	0	2	0	0	1	0	2	0	0	0	2
GAL	5	0	3	0	0	0	0	2	7	5	0	0
HEL	16	17	189	10	5	24	37	0	122	65	6	8
MAD	4	0	0	0	0	7	0	0	3	13	0	0
MEL	2	2	38	17	0	2	0	0	1	0	2	9
MIL	4	0	14	8	0	0	1	0	4	0	0	0
NEU	0	0	26	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VER	6	0	57	22	0	0	0	4	4	14	1	42
ZIN	0	0	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0

4.5 Estudo do equilíbrio na produção dos metabólitos secundários na família Asteraceae e na sua tribo Heliantheae

De acordo com a biossíntese geral (figura 3.2.1) (Mann *et al.*, 1994), todos os compostos químicos provêm da fotossíntese com a formação da glicose. Com o intuito de examinar se existe uma correlação entre as micromoléculas e a morfologia da planta, e entre os compostos químicos e as macromoléculas (DNA, RNA) utilizou-se estatística multivariada para observar o balanço na produção das 12 classes de metabólitos secundários (uma classe versus todas) em vários níveis: a) tribos da família Asteraceae segundo Bremer b) tribos da “metatree”; c) 10 tribos da “metatree” (com mesmo gênero do que as subtribos de Heliantheae-Helenieae) d) subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer, e) subtribos de Heliantheae segundo Stuessy f) subtribos de Heliantheae segundo Robinson g) dos gêneros da “metatree” h) dos gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae i) dos gêneros tribo Heliantheae segundo Stuessy j) dos gêneros tribo Heliantheae segundo Robinson.

4.5.1 Estudo do equilíbrio na produção dos metabólitos secundário nas tribos da família Asteraceae segundo Bremer

A partir da tabela 4.2.1.1 com as ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer (Bremer, 1996) foram calculadas as correlações de cada classe versus todas as outras como descrito na tabela 4.5.1.1. Foi observado que existe uma boa correlação entre a maioria das classes, e cada classe correlaciona bem como pelo menos uma outra classe com valor de $r > 0,60$. E também foi feita uma análise de regressões de uma classe versus todas as outras (usando o modelo obtido pelo método passo a passo adiante (“Forward Stepwise”)), e a tabela 4.5.1.2 apresenta alguns índices estatísticos.

Temos valores de R acima de 0,75 por todos os casos e de R^2 acima de 0,70 por 10 dos casos. Também temos valores de $AdjR^2$ bons, acima de 0,6, em quase todos os casos. Os valores de p são todos inferiores a 0,05; e os valores de F são adequados. Os valores da entropia de Shannon estão dentro do intervalo adequado. As equações de regressões (Equação 4.5.1.1 a 4.5.1.12) estão no apêndice C. Nessas equações podemos observar que uma classe depende de 2 à 8 outras. E apesar de ter valores de R^2 -boot (R^2 da validação pelo método de Bootstrap) entre 0,2 e 0,5; valores de R^2 do PLS entre 0,25 e 0,80; valores de R^2 da validação cruzada do PLS ruins em alguns casos, mas razoável em muitos casos. Podemos dizer que existe um balanço na produção das 12 classes de metabólitos secundários, ou seja, se as plantas produzem muito de um metabólito deixam de produzir outros, no nível das tribos da família Asteraceae segundo Bremer. As desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas por falta de dados, ou seja, quando a relação entre espécie estudada/existente for pequena e também para às classes que têm poucas ocorrências.

Como isso podemos dizer que no nível das tribos da família existe uma correlação entre as classes químicas em Asteraceae.

Tabela 4.5.1.1 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
MONO	1,00											
SESQ	0,68	1,00										
LACT	0,57	0,52	1,00									
DITE	0,07	0,36	0,32	1,00								
TRIT	0,41	0,35	0,52	0,27	1,00							
CUMA	0,68	0,50	0,26	0,28	0,60	1,00						
FLAV	0,58	0,46	0,71	0,46	0,37	0,41	1,00					
POLI	0,05	0,28	0,63	0,52	0,20	0,00	0,50	1,00				
BENZF	0,02	0,52	0,49	0,72	0,21	-0,02	0,34	0,44	1,00			
BENZP	0,07	0,32	0,53	0,63	0,17	-0,05	0,43	0,33	0,89	1,00		
ACET	0,37	0,62	0,42	0,40	0,21	0,26	0,36	0,17	0,60	0,63	1,00	
FENI	0,31	0,61	0,53	0,80	0,40	0,41	0,65	0,70	0,56	0,33	0,31	1,00

Tabela 4.5.1.2 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em tribos da família Asteraceae segundo Bremer

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
Total	6170	6980	5782	4535	1195	978	5368	3532	648	404	231	460
Média	363	411	340	267	70	58	316	208	38	24	14	27
R	0,96	0,93	0,94	0,987	0,79	0,87	0,97	0,85	0,99	0,99	0,77	0,99
R2	0,92	0,86	0,89	0,97	0,62	0,757	0,94	0,73	0,98	0,989	0,59	0,989
Adj R2	0,77	0,82	0,83	0,95	0,497	0,676	0,89	0,66	0,97	0,98	0,53	0,98
F	12,4	26,68	13,94	48,85	4,95	9,35	19,63	11,57	128,48	199,25	10,08	125,81
p	9,4E-4	8E-6	2,4E-4	2E-6	0,014	0,0011	9E-5	6E-4	0	0	0,0019	0
R2-Boot	0,404	0,446	0,343	0,294	0,239	0,337	0,345	0,224	0,304	0,285	0,263	0,372
R2-PLS-cal	0,5	0,59	0,56	0,25	0,25	0,77	0,62	0,57	0,89	0,37	0,31	0,83
R2-PLS-valc	-0,14	0,42	0,27	-0,46	0,16	0,59	0,54	0,12	0,24	0,13	0,25	0,59
ES	1,32	2,59	2,13	1,31	2,83	2,48	2,53	1,19	1,44	1,19	2,08	2,35

4.5.2 Estudo do equilíbrio na produção dos metabólitos secundário nas tribos e nos gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”

A partir da tabela 4.2.2.1 das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” (Funk *et al.*2009) foram calculados as correlações entre as classes químicas (tabela 4.5.2.1). observou-se que existe uma boa correlação entre a maioria das classes, e quase cada classe correlaciona bem com pelo menos outra com valor de $r > 0,60$. Também foi feita uma análise de regressões entre as classes (usando o modelo obtido pelo método passo a passo adiante (“Forward Stepwise”)). A tabela 4.5.2.2 apresenta alguns índices estatísticos. Temos valores de R acima de 0,75 por todos os casos e de R2 acima de 0,80 por 10 dos casos. Somente as acetofenonas (ACET) têm $R^2=0,6$ e flavonóides (FLAV) com $R^2=0,58$. Também temos valores de AdjR2 bons acima de 0,6 em quase todos os casos. Os valores de p são quase todos igual a 0, e os valores de F são adequados. Os valores da entropia de Shannon na maioria dos casos estão dentro do intervalo adequado, somente os monoterpenos (MONO), poliacetilenos (POLI) e diterpenos (DITE) que variam pouco com respectivamente 0,56; 0,51 e 0,63 . As equações correspondentes as regressões (Equação 4.5.2.1 a

4.5.2.12) estão no apêndice C. Nessas equações podemos observar que uma classe depende de no mínimo 6 à no máximo 9 outras diferentes classes. Neste caso, apesar de ter valores de R2-boot (R2 da validação pelo método de Bootstrap) entre 0,09 e 0,35; valores de R2 do PLS entre 0,09 e 0,76; valores de R2 da validação cruzada usando PLS ruim em alguns casos, mas razoável em muitos casos. Podemos dizer que existe um balanço na produção das 12 classes de metabólitos secundários no nível das tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”. As desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas pelas razões dadas no item 4.5.1.

Conclui-se que existe uma correlação entre as classes químicas das tribos quando a classificação foi baseada nas macromoléculas (DNA, RNA).

Tabela 4.5.2.1 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
MONO	1,00											
SESQ	0,60	1,00										
LACT	0,75	0,51	1,00									
DITE	0,22	0,43	0,08	1,00								
TRIT	0,56	0,55	0,70	0,39	1,00							
CUMA	0,75	0,56	0,55	0,57	0,76	1,00						
FLAV	0,36	0,38	0,39	0,37	0,48	0,41	1,00					
POLI	0,00	0,19	0,18	0,13	0,22	0,11	0,35	1,00				
BENZF	0,19	0,71	0,18	0,68	0,36	0,30	0,35	0,01	1,00			
BENZP	0,18	0,33	0,29	0,52	0,25	0,14	0,49	-0,03	0,75	1,00		
ACET	0,47	0,59	0,38	0,36	0,40	0,43	0,37	-0,03	0,50	0,52	1,00	
FENI	0,48	0,54	0,30	0,68	0,57	0,75	0,47	0,54	0,36	0,08	0,29	1,00

Tabela 4.5.2.2 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”,

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
Total	4172	5044	3889	2606	917	851	3545	2667	270	260	170	312
Média	104	126	97	65	23	21	89	67	7	7	4	8
R	0,94	0,97	0,9	0,92	0,89	0,94	0,76	0,82	0,98	0,98	0,77	0,96
R2	0,88	0,95	0,81	0,85	0,8	0,89	0,58	0,67	0,97	0,95	0,6	0,92
Adj R2	0,85	0,93	0,78	0,8	0,76	0,86	0,5	0,61	0,96	0,94	0,52	0,89
F	24,9	62,53	23,6	18,45	22,19	36,63	7,56	11,18	90,63	58,77	8,2	37,34
p	0	0	0	0	0	0	4,00E-05	1,00E-06	0	0	2,00E-05	0
R2-Boot	0,35	0,35	0,23	0,29	0,24	0,26	0,24	0,09	0,36	0,32	0,36	0,28
R2-PLS-cal	0,56	0,45	0,57	0,16	0,5	0,64	0,26	0,08	0,82	0,22	0,36	0,76
R2-PLS-Valc	0,04	0,43	0,34	-0,58	0,48	0,49	0,21	-0,09	0,24	-0,15	0,31	0,36
ES	0,56	1,74	1,29	0,63	2,28	2,12	1,65	0,51	1,15	1,42	0,96	2,21

A partir da tabela 4.2.2.1 usando somente as ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários das 10 tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” (Funk et al.2009). Os gêneros presentes nessas 10 tribos estão localizados nas tribos Heliantheae e Helenieae na classificação de Bremer. Foram calculados a correlação de cada classe versus cada outra, representada na tabela 4.5.2.3. Foi observado que existe uma boa correlação entre a maioria das classes, e quase cada classe correlaciona bem com pelo menos uma outra classe com valor de $r > 0,60$, somente a classe dos acetofenonas (ACET) que não correlacionam com nenhuma outra tribo. E também foi feita uma análise de regressões de uma classe versus todas as outras (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante), e a tabela 4.5.2.4 apresenta alguns índices estatísticos. Temos valores de R acima de 0,95 por todos os casos e de R^2 acima de 0,90 por 10 dos casos. Somente os sequiterpenos lactonas (LACT) e os acetofenonas (ACET) têm valores de R e R^2 ruins. Também temos valores de $AdjR^2$ bons, acima de 0,90 nos 10 casos. Os valores de p são inferiores a 0,05 nos 10 casos, e os valores de F são adequados. Os valores da entropia de Shannon na maioria dos casos estão dentro do intervalo adequado, somente os poliacetilenos (POLI), benzopiranos (BENZP) e acetofenonas (ACET) que variam poucos com respectivamente 0,00; 0,44 e 0,65 . As equações de regressões (Equação 4.5.2.13 a 4.5.2.24) estão no apêndice C. Nessas equações podemos observar que uma classe depende de 1 à 10 outras. Somente as classes acetofenonas (ACET) que não foram possíveis prever à partir de outras. Isso por ter muitos valores de ocorrências nulas e não variável. E apesar de ter valores de R^2 -boot (R^2 da validação pelo método de Bootstrap) entre 0,32 e 0,66; valores de R^2 do PLS entre 0,07 e 0,99; valores de R^2 da validação cruzada do PLS ruins em alguns caso mas razoável em muitos casos podemos dizer que

existe uma tendência para um balanço na produção das 12 classes de metabólitos secundários no nível das tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer. As desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas pela razões dadas no item 4.5.1

Tabela 4.5.2.3 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários nas 10 tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
MONO	1,00											
SESQ	0,88	1,00										
LACT	0,44	0,35	1,00									
DITE	0,41	0,64	0,55	1,00								
TRIT	0,32	0,44	0,31	0,67	1,00							
CUMA	0,91	0,93	0,18	0,46	0,52	1,00						
FLAV	0,15	0,12	-0,10	0,08	0,71	0,40	1,00					
POLI	-0,15	-0,02	-0,14	-0,19	0,22	0,03	0,18	1,00				
BENZF	0,29	0,27	-0,29	-0,08	0,42	0,55	0,84	0,16	1,00			
BENZP	-0,03	-0,07	-0,18	0,03	0,57	0,19	0,92	-0,07	0,75	1,00		
ACET	-0,29	-0,17	-0,08	0,04	-0,27	-0,25	-0,22	-0,12	0,06	-0,14	1,00	
FENI	0,07	0,16	-0,05	-0,23	0,04	0,19	0,08	0,91	0,25	-0,19	0,00	1,00

Tabela 4.5.2.4 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras nas 10 tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRITE	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENIL
Total	560	502	920	372	68	44	1273	984	15	36	4	79
Média	47	42	77	31	6	4	106	82	1	3	0	7
R	0,999	0,998	0,55	1	0,998	1	0,992	1	0,996	0,979	0	0,997
R2	0,998	0,997	0,3	1	0,996	1	0,984	1	0,992	0,958	0	0,994
Adj R2	0,994	0,989	0,23	1	0,991	1	0,97	1	0,982	0,934	0	0,983
F	252,54	121,93	4,34	47197,89	201,4	934,78	72,44	36667,23	103,14	40,31	0	89,53
p	4E-05	0,001	0,06	0,004	9E-06	5E-05	3E-05	0,004	5E-05	6E-05	0	3E-04
R2-Boot	0,60	0,66	0,32	0,40	0,42	0,58	0,49	0,35	0,48	0,45	0,60	0,42
R2-PLS-Cal	0,34	0,45	0,12	0,33	0,65	0,998	0,05	0,06	0,79	0,91	0,07	0,9
R2-PLS-Valc	0,11	-0,16	-0,10	-0,19	0,19	0,809	-0,23	-2,15	0,58	-0,08	-0,05	0,42
ES	1,88	2,50	1,28	1,67	1,28	1,87	1,49	0,00	1,92	0,44	0,65	1,58

A partir da tabela de nosso banco de dados global (para toda a família), contendo as ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários, foram selecionados os gêneros das tribos da família Asteraceae segundo a classificação denominada “metatree” (Funk *et al.* 2009). Foram calculadas as correlações entre as classes (tabela 4.5.2.5). Somente para monoterpenos (MONO) foram observados boas correlações com outras classes. E também foi feita uma análise de regressões de uma classe versus todas as outras (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante), ver tabela 4.5.2.6. Temos valores de R acima de 0,70 por 5 casos e de R^2 acima de 0,60 por 4 casos. A maioria das classes não pode ser prevista a partir das outras gerando um bom modelo. Também os valores de Adj R^2 são ruins em quase todos os casos. Os valores da entropia de Shannon na maioria dos casos são muito baixos, isso quer dizer que os dados variam pouco e não são adequados para uma boa análise e para formar bons modelos. As equações de regressões (Equação 4.5.2.25 a 4.5.2.36) estão no apêndice C. Apesar dos valores de R^2 -boot (R^2 da validação pelo método de Bootstrap), R^2 do PLS e R^2 da validação cruzada do PLS baixo, podemos afirmar que existe um balanço moderado na produção das 12 classes de metabólitos secundários no nível dos gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”. A diversidade no nível dos gêneros pode explicar esta observação.

Tabela 4.5.2.5 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”.

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
MONO	1,00											
SESQ	0,52	1,00										
LACT	0,77	0,49	1,00									
DITE	0,08	0,31	0,09	1,00								
TRIT	0,09	0,22	0,30	0,26	1,00							
CUMA	0,72	0,41	0,57	0,18	0,10	1,00						
FLAV	0,47	0,40	0,45	0,17	0,15	0,43	1,00					
POLI	0,00	0,11	0,10	0,01	0,03	0,10	0,25	1,00				
BENZF	0,14	0,53	0,10	0,49	0,22	0,17	0,16	-0,02	1,00			
BENZP	0,15	0,18	0,09	0,18	0,07	0,10	0,26	-0,02	0,32	1,00		
ACET	0,44	0,59	0,30	0,29	0,07	0,42	0,27	0,01	0,38	0,28	1,00	
FENI	0,57	0,54	0,47	0,54	0,25	0,46	0,48	0,24	0,39	0,16	0,37	1,00

Tabela 4.5.2.6 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
Total	4172	5044	3889	2606	917	851	3545	2667	270	260	170	312
Média	13	15	12	8	3	3	11	8	1	1	1	1
R	0,9	0,78	0,83	0,7	0,48	0,74	0,62	0,47	0,69	0,44	0,67	0,82
R ²	0,81	0,61	0,69	0,49	0,23	0,55	0,38	0,22	0,47	0,2	0,45	0,66
Adj R ²	0,8	0,6	0,68	0,48	0,21	0,54	0,36	0,2	0,46	0,18	0,44	0,65
F	148,35	61,5	86,44	38,25	15,61	49,37	24,19	9,95	40,21	11,18	32,48	56,65
p	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
R ² -Boot	0,22	0,4	0,21	0,14	0,03	0,28	0,17	0,1	0,17	0,23	0,19	0,31
R ² -PLS-Cal	0,58	0,3	0,67	0,05	0,06	0,55	0,27	0,04	0,19	0,04	0,28	0,6
R ² -PLS-Valc	-0,06	0,04	0,41	-0,25	-0,38	0,49	0,27	-0,04	-0,18	-0,13	0,22	0,46
ES	0,08	0,48	0,33	0,45	0,43	1,14	0,67	0,46	0,51	0,24	1,12	0,71

4.5.3 Estudo do equilíbrio na produção dos metabólitos secundário nas subtribos e nos gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

A partir da tabela 4.2.3.1 das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae, segundo Bremer (Bremer,1994), foram calculadas as correlações entre as classes, como está descrito na tabela 4.5.3.1. Foi observado que existe uma boa correlação entre a maioria das classes, e geralmente elas estão correlacionadas com valor de $r > 0,60$. Também foi feita uma análise de regressões de uma classe versus todas as outras

(usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante). Os resultados são mostrados na tabela 4.5.3.2. Temos valores de R acima de 0,95 e de R^2 acima de 0,90 por todos os casos. Também temos valores de $AdjR^2$ bons acima de 0,8 em quase todos os casos. Os valores de p são todos menor do 0,05 e os valores de F são adequados. Os valores da entropia de Shannon em todos os casos estão dentro do intervalo adequado. As equações de regressões (Equação 4.5.3.1 a 4.5.3.12) estão no apêndice C. Nessas equações podemos observar que uma classe depende de no mínimo 6 e de no máximo 9 outras classes. Apesar de não ter valores de R^2 -boot (R^2 da validação pelo método de Bootstrap) acima de 0,50 por todos os casos ; valores de R^2 do PLS acima de 0,6 por todos os casos; valores de R^2 da validação cruzada do PLS ruins em alguns casos, mas razoável em muitos casos, podemos dizer que existe um balanço na produção das 12 classes de metabólitos secundários no nível das subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer. As desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas pelas razões dadas no item 4.5.1.

Isso nos mostra que existe uma correlação na produção das classes químicas no nível das subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae.

Tabela 4.5.3.1 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
MONO	1,00											
SESQ	0,57	1,00										
LACT	0,49	0,38	1,00									
DITE	0,12	0,70	0,36	1,00								
TRIT	0,11	0,50	0,27	0,83	1,00							
CUMA	0,41	0,26	0,13	0,48	0,47	1,00						
FLAV	0,08	0,01	0,00	0,32	0,56	0,64	1,00					
POLI	-0,12	0,07	-0,06	-0,01	0,16	0,03	0,19	1,00				
BENZF	0,12	0,81	0,18	0,90	0,68	0,24	0,13	0,03	1,00			
BENZP	0,15	0,78	0,29	0,94	0,77	0,33	0,34	-0,01	0,95	1,00		
ACET	0,25	0,64	0,53	0,59	0,30	0,06	-0,03	0,03	0,53	0,65	1,00	
FENI	0,25	0,69	0,16	0,56	0,52	0,22	0,21	0,66	0,69	0,63	0,46	1,00

Tabela 4.5.3.2 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras das subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer,

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
Total	773	993	1905	1294	132	64	1668	1603	204	146	35	144
Média	45	58	112	76	8	4	98	94	12	9	2	8
R	0,99	0,95	0,64	0,998	0,97	0,989	0,98	0,97	0,999	0,999	0,99	0,98
R2	0,98	0,91	0,42	0,997	0,95	0,979	0,96	0,94	0,998	0,998	0,98	0,97
Adj R2	0,95	0,88	0,33	0,994	0,9	0,966	0,94	0,89	0,996	0,997	0,96	0,95
F	32,42	31,41	4,97	377,5	23,69	76,46	33,93	20,25	625,32	833,28	54,73	53,38
p	2E-04	3E-06	0,02	0	4E-05	0	9E-06	8E-05	0	0	3E-06	1E-06
R2-Boot	0,25	0,56	0,28	0,58	0,45	0,38	0,25	0,26	0,52	0,59	0,88	0,47
R2-PLS-cal	0,5	0,57	0,19	0,9	0,73	0,42	0,14	0,06	0,92	0,99	0,5	0,8
R2-PLS-valc	0,24	0,04	-0,33	0,32	0,58	0,09	-0,1	-0,22	0,34	0,64	0,18	0,1
ES	2,09	2,13	2,01	1,28	1,97	1,92	2,48	1,12	0,83	1,58	0,64	2,01

A partir da tabela 4.2.3.3 das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer (Bremer,1994) foram calculadas as correlações entre todas as classes como descrito na tabela 4.5.3.3. Observou-se que não existe uma boa correlação entre a maioria das classes e que somente algumas se correlacionam bem. Também foi feita uma análise de regressões de uma classe versus as demais (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante), e a tabela 4.5.3.4 apresenta de alguns índices estatísticos. Temos valores de R abaixo de 0,70 e de R2 abaixo 0,60 na maioria dos casos, mas em alguns testes os valores são adequados. Algumas classes podem ser previstas a partir das outras gerando um bom modelo, exemplo dos monoterpenos, sesquiterpenos, benzofuranos e benzopiranos. Também os valores de Adj R2 são adequados em poucos casos. Os valores da entropia de Shannon na maioria dos casos são muito baixos, isso quer dizer que os dados variam pouco e não são adequados para uma boa análise e não formam bons modelos. Por isso não foi necessário validar nossos dados com métodos mais robustos. E apesar de não ter resultados apropriados na maioria dos casos, podemos dizer que existe um balanço moderado na produção das 12 classes de metabólitos secundários no nível dos gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae. A grande diversidade observada

no nível dos gêneros e as deficiências inerentes aos tipos de dados, vindos de trabalhos fitoquímicos são consistentes com os resultados encontrados.

Tabela 4.5.3.3 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
MONO	1											
SESQ	0,79	1										
LACT	0,71	0,62	1									
DITE	-0,03	0,21	0,06	1								
TRIT	0	-0,01	0,04	0	1							
CUMA	0,08	0,11	-0,07	-0,07	-0,04	1						
FLAV	0,2	-0,01	-0,06	0	0,06	0,13	1					
POLI	0,01	-0,01	-0,01	-0,03	0,09	0,33	0,07	1				
BENZF	-0,03	-0,03	0,02	-0,05	0,02	-0,01	0	-0,03	1			
BENZP	0,01	-0,05	0,02	-0,03	0,02	-0,03	0,15	-0,01	0,85	1		
ACET	-0,03	-0,04	-0,04	0,02	-0,03	-0,02	-0,03	0,02	0,05	0,12	1	
FENI	0,19	0,15	0,18	-0,08	0,49	-0,04	-0,02	0,06	-0,03	-0,04	-0,03	1

Tabela 4.5.3.4 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
Total	46	99	365	714	38	5	555	461	147	80	4	30
Média	0,41	0,89	3,29	6,43	0,34	0,05	5,00	4,15	1,32	0,72	0,04	0,27
R	0,89	0,85	0,75	0,42	0,51	0,42	0,52	0,35	0,87	0,89	0,16	0,54
R ²	0,79	0,725	0,56	0,18	0,26	0,17	0,27	0,12	0,75	0,79	0,02	0,29
Adj R ²	0,78	0,71	0,54	0,15	0,24	0,13	0,22	0,1	0,74	0,78	0,006	0,27
F	101,07	69,85	33,67	5,8	12,62	4,39	5,52	7,34	106,89	101,07	1,35	14,5
p	0	0	0	3E-04	0	0,001	2,1E-05	0,001	0,307	0	0,26	0
ES	0,41	0,83	1,88	1,09	0,72	0,81	0,38	0,30	1,10	0,31	0,13	2,52

4.5.4 Estudo do equilíbrio na produção dos metabólitos secundários nas subtribos e nos gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy

A partir da tabela 4.2.4.1 das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy (Stuessy, 1977) foram calculados as correlações entre as classes químicas (ver tabela 4.5.4.1). Foi observado que existe uma boa correlação entre a maioria das classes, e quase cada

classe correlaciona bem com pelo menos uma outra classe com valor de $r > 0,60$. Foi feita uma análise de regressões de uma classe versus todas as outras (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante), e a tabela 4.5.4.2 apresenta alguns índices estatísticos. Temos valores de R acima de 0,80 e de R^2 acima de 0,70 em quase todos os casos. Também temos valores de $\text{Adj}R^2$ bons acima de 0,6 em quase todos os casos. Os valores de p são todos menor ou igual a 0,05 e os valores de F são adequados na maioria dos casos. Os valores da entropia de Shannon em todos os casos estão dentro do intervalo adequado, somente os benzofuranos que não variam, tendo o valor da entropia de Shannon igual a 0. Isso significa que as ocorrências dos benzofuranos não são boas para construir um modelo estatístico. As equações de regressões (Equação 4.5.4.1 a 4.5.4.12) estão no apêndice C. Nessas equações podemos observar como uma classe depende das outras. Apesar de ter os valores de $R^2\text{-boot}$ (R^2 da validação pelo método de Bootstrap) entre 0,30 e 0,50 por todos os casos ; valores de R^2 do PLS abaixo de 0,6 na maioria dos casos; valores de R^2 da validação cruzada do PLS não adequado na maioria dos casos, mas aceitáveis em alguns casos, podemos dizer que existe um balanço na produção das 12 classes de metabólitos secundários no nível das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy. As desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas pela razões dadas no item 4.5.3.

Tabela 4.5.4.1 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
MONO	1,00											
SESQ	0,47	1,00										
LACT	0,80	0,70	1,00									
DITE	0,08	0,76	0,34	1,00								
TRIT	0,25	0,86	0,51	0,71	1,00							
CUMA	0,12	0,72	0,40	0,77	0,90	1,00						
FLAV	0,00	0,46	0,17	0,47	0,65	0,76	1,00					
POLI	-0,09	0,14	-0,09	0,03	0,36	0,25	0,36	1,00				
BENZF	0,14	0,81	0,49	0,75	0,94	0,90	0,69	0,15	1,00			
BENZP	0,14	0,83	0,48	0,74	0,91	0,90	0,70	0,11	0,96	1,00		
ACET	0,33	0,49	0,39	0,36	0,55	0,54	0,20	0,00	0,48	0,60	1,00	
FENI	-0,12	0,28	-0,04	0,17	0,16	0,02	0,08	0,65	0,01	0,10	0,01	1,00

Tabela 4.5.4.2 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy,

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
Total	582	739	1895	1069	101	52	1265	1668	202	128	33	114
Média	39	49	126	71	7	3	84	111	13	9	2	8
R	0,93	0,99	0,89	0,96	0,99	0,97	0,85	0,99	0,99	0,99	0,81	0,65
R ²	0,86	0,97	0,80	0,92	0,99	0,95	0,72	0,98	0,98	0,99	0,65	0,42
Adj R ²	0,75	0,94	0,74	0,82	0,98	0,91	0,61	0,95	0,97	0,99	0,46	0,38
F	8,11	29,53	14,45	9,11	120,92	24,93	6,46	35,09	117,63	155,4	3,4	9,68
p	0,005	0,0003	0,0004	0,007	5E-06	9E-05	0,008	0,0002	0	0	0,05	0,008
R ² -Boot	0,32	0,43	0,35	0,33	0,47	0,36	0,32	0,31	0,42	0,39	0,42	0,34
R ² -PLS-Cal	0,58	0,87	0,38	0,38	0,99	0,92	0,31	0,15	0,72	0,96	0,22	0,43
R ² -PLS-valc	0,39	0,53	-0,48	-0,48	0,86	0,46	-0,08	-0,18	-0,24	0,41	-0,05	0,03
ES	2,35	2,22	2,50	1,92	1,69	2,25	1,87	1,29	0,00	1,05	0,95	1,48

A partir da tabela 4.2.4.3 das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy (Stuessy,1977) foram calculados as correlações entre as classes (tabela 4.5.4.3). Conclui-se que não existe uma boa correlação entre a maioria das classes, exceto benzofuranos e benzopiranos ($r = 0,80$). Também foi feita uma análise de regressões de uma classe versus todas as outras (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante), e a tabela 4.5.3.4 apresenta alguns índices estatísticos. As equações de regressões (Equação 4.5.4.13 a 4.5.4.24) estão no apêndice C. Temos valores de R abaixo de

0,70 e de R² abaixo 0,50 em quase todos os casos, isso indica que os modelos formados são ruins. Também os valores de AdjR² são adequados em poucos casos. Os valores da entropia de Shannon na maioria dos casos são muito baixos, isso quer dizer que os dados variam pouco e não são adequados para uma boa análise, logo não formam bons modelos. Não podemos dizer que existe um balanço na produção das 12 classes de metabólitos secundários no nível dos gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy.

Então não será possível deduzir que no nível dos gêneros existe uma correlação entre a produção de metabólitos secundários na classificação de Stuessy.

Tabela 4.5.4.3 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
MONO	1,00											
SESQ	0,44	1,00										
LACT	0,64	0,33	1,00									
DITE	0,21	0,11	0,23	1,00								
TRIT	0,29	0,29	0,38	0,54	1,00							
CUMA	0,13	0,18	0,23	0,50	0,54	1,00						
FLAV	0,03	0,07	0,09	0,33	0,23	0,22	1,00					
POLI	0,10	0,20	0,03	-0,01	0,04	0,22	0,26	1,00				
BENZF	-0,01	0,08	0,00	-0,06	0,04	-0,01	0,00	-0,04	1,00			
BENZP	0,10	0,26	0,11	0,05	0,18	0,10	0,16	-0,01	0,80	1,00		
ACET	0,33	0,50	0,29	-0,03	0,25	0,15	0,01	0,04	0,17	0,43	1,00	
FENI	0,09	0,43	0,00	0,01	0,10	0,04	0,12	0,34	-0,02	0,09	0,10	1,00

Tabela 4.5.4.4 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
Total	582	739	1895	1069	101	52	1265	1668	202	128	33	114
Média	5	6	16	9	1	0	10	14	2	1	0	1
R	0,68	0,69	0,67	0,68	0,68	0,64	0,48	0,49	0,84	0,87	0,68	0,53
R ²	0,47	0,48	0,46	0,47	0,47	0,41	0,23	0,24	0,71	0,76	0,46	0,28
Adj R ²	0,46	0,46	0,44	0,41	0,44	0,38	0,2	0,2	0,69	0,75	0,41	0,26
F	52,6	26,58	32,89	15,35	20,38	19,97	7,1	7,22	55,94	61,6	8,59	11,42
p	0	0	0	0	0	0	8E-06	6E-06	0	0	0	0
ES	1,11	0,87	1,40	0,86	1,93	2,66	0,72	0,65	0,42	2,07	0,30	0,37

4.5.5 Estudo do equilíbrio na produção dos metabólitos secundários nas subtribos e nos gêneros segundo Robinson

A partir da tabela 4.2.5.1 das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson (Robinson, 1981) foram calculadas as correlações entre as classes químicas estudadas (tabela 4.5.5.1). Foi observado que existe uma boa correlação entre a maioria das classes, e quase cada classe correlaciona bem com pelo menos uma outra classe com valor de $r > 0,60$. E também foi feita uma análise de regressões de uma classe versus todas as outras (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante), e a tabela 4.5.5.2 apresenta alguns índices estatísticos. Temos valores de R acima de 0,85 e de R^2 acima de 0,70 em quase todos os casos. Também temos valores de $AdjR^2$ acima de 0,6 em quase todos os casos. Os valores de p são todos menores do 0,05 e os valores de F são adequados. Os valores da entropia de Shannon em todos os casos estão dentro do intervalo adequado na maioria dos casos. As equações de regressões (Equação 4.5.5.1 a 4.5.5.12) estão no apêndice C. Nessas equações podemos observar que como uma classe depende das outras e os valores de R^2 -boot (R^2 da validação pelo método de Bootstrap) entre 0,15 e 0,60; valores de R^2 usando o método do PLS acima de 0,80 na maioria dos casos; valores de R^2 da validação cruzada do PLS são adequados e razoável na maioria dos casos. Assim podemos dizer que existe um balanço na produção das 12 classes de metabólitos secundários no nível das subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson. As desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas pelas razões dadas no item 4.5.3.

Isso nos mostra que existe uma correlação entre as classes químicas e os dados morfológicos e cromossomos no nível das subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson.

Tabela 4.5.5.1 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
MONO	1,00											
SESQ	0,62	1,00										
LACT	0,39	0,43	1,00									
DITE	0,18	0,55	0,44	1,00								
TRIT	0,25	0,63	0,42	0,75	1,00							
CUMA	0,58	0,51	0,33	0,61	0,67	1,00						
FLAV	0,29	0,25	0,20	0,43	0,74	0,68	1,00					
POLI	0,05	0,29	0,08	0,12	0,39	0,21	0,37	1,00				
BENZF	0,23	0,82	0,35	0,61	0,70	0,45	0,24	0,25	1,00			
BENZP	0,31	0,82	0,46	0,66	0,85	0,54	0,42	0,25	0,89	1,00		
ACET	0,29	0,53	0,37	0,23	0,35	0,15	0,01	0,12	0,52	0,68	1,00	
FENI	0,41	0,77	0,27	0,40	0,61	0,43	0,38	0,80	0,66	0,64	0,35	1,00

Tabela 4.5.5.2 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras das subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson,

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
Total	716	1014	1793	1351	130	68	1561	1615	198	129	33	140
Média	27	38	66	50	5	3	58	60	7	5	1	5
R	0,99	0,91	0,56	0,83	0,99	0,85	0,87	0,95	0,92	0,99	0,98	0,99
R ²	0,98	0,83	0,31	0,69	0,98	0,73	0,76	0,9	0,85	0,98	0,96	0,98
Adj R ²	0,96	0,82	0,23	0,62	0,97	0,7	0,74	0,89	0,84	0,97	0,94	0,97
F	68,54	61,49	3,63	9,95	85,47	21,78	26,09	109,12	47,2	172,7	42,55	109,63
p	0	0	0,03	0	0	0	0	0	0	0	0	0
R ² -Boot	0,4	0,39	0,17	0,26	0,47	0,34	0,24	0,32	0,32	0,54	0,57	0,42
R ² -PLS-Cal	0,3	0,98	0,22	0,35	0,93	0,53	0,81	0,88	0,88	0,99	0,22	0,96
R ² -PLS-valc	0,2	-0,75	-0,03	-0,03	0,57	0,28	0,4	0,42	0,43	0,77	0,04	0,82
ES	1,52	1,05	1,93	1,34	1,97	1,52	1,83	0,61	0,68	0,81	0,81	0,83

A partir da tabela 4.2.5.3 das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson (Robinson,1981) foram calculados a correlação de cada classe versus cada outra representada na tabela 4.5.5.3. Nas equações de regressões (Equação 4.5.5.13 a 4.5.5.24) foi encontrado que não existe uma boa correlação entre a maioria das classes, mas somente poucas classes se correlacionam bem, como os monoterpenos e os sesquiterpenos ($r=0,66$) e os flavonóides e triterpenos ($r=0,61$). Foi feita uma análise de regressões de uma classe versus todas as outras (usando o resumo do modelo obtido pelo método

passo a passo adiante), e a tabela 4.5.5.4 apresenta alguns índices estatísticos. Temos valores de R acima de 0,70 e de R² acima 0,60 por metade dos casos, mas em poucos casos os valores são inadequados. Os valores de AdjR² são altos em muitos casos. Os valores da entropia de Shannon na maioria dos casos são adequados, mas são ruins por alguns casos como, por exemplo, acetofenonas (ES=0,00) e benzofuranos (ES=0,25). Isso quer dizer que os alguns dados das ocorrências variam pouco e não são adequados para uma boa análise e para formar bons modelos. Utilizando métodos de validação como o bootstrap achamos valores baixos, mas aceitáveis na maioria dos casos; o PLS onde os valores R² da calibração e do R² da validação cruzadas são baixos, mas adequados na maioria dos casos. Apesar de não haver resultados apropriados na maioria dos casos, podemos dizer que existe um balanço médio na produção das 12 classes de metabólitos secundários no nível dos gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson.

Tabela 4.5.5.3 Matriz de correlações entre ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
MONO	1,00											
SESQ	0,66	1,00										
LACT	0,79	0,47	1,00									
DITE	0,10	0,12	0,21	1,00								
TRIT	0,42	0,26	0,26	0,41	1,00							
CUMA	0,26	0,13	0,33	0,51	0,48	1,00						
FLAV	0,29	0,18	0,03	0,06	0,61	0,15	1,00					
POLI	0,16	0,20	0,06	-0,02	0,04	0,31	0,27	1,00				
BENZF	0,02	0,01	0,03	-0,05	0,01	-0,01	-0,01	-0,03	1,00			
BENZP	0,29	0,24	0,13	0,00	0,29	0,07	0,25	0,01	0,77	1,00		
ACET	0,52	0,43	0,36	-0,01	0,13	0,13	0,00	0,05	0,12	0,36	1,00	
FENI	0,15	0,56	0,01	-0,03	0,11	0,03	0,15	0,34	-0,01	0,12	0,12	1,00

Tabela 4.5.5.4 Índices estatísticos das regressões de uma classe versus as outras em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson

	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
Total	398	629	1712	1032	113	31	1210	1485	178	108	24	115
Média	3	5	13	8	1	0	9	11	1	1	0	1
R	0,91	0,82	0,84	0,57	0,81	0,71	0,73	0,6	0,84	0,87	0,63	0,68
R2	0,82	0,67	0,71	0,32	0,66	0,51	0,54	0,36	0,71	0,76	0,39	0,46
Adj R2	0,81	0,66	0,69	0,31	0,64	0,48	0,51	0,33	0,69	0,75	0,37	0,44
F	83,47	51,91	51,31	20,52	30,44	21,78	20,84	14,09	43,06	66,13	16,64	27,18
p	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
R2-boot	0,48	0,37	0,35	0,03	0,12	0,07	0,1	0,11	0,12	0,15	0,23	0,08
R2-PLS-cal	0,79	0,67	0,69	0,05	0,57	0,3	0,09	0,08	0,7	0,73	0,17	0,16
R2-PLS-valc	0,7	0,41	0,38	0,09	0,08	0,009	0,01	0,06	0,1	0,1	-0,17	0,09
ES	1,01	2,07	1,23	1,56	0,45	0,50	0,52	0,77	0,24	1,96	0,00	0,40

4.6 Estudo do equilíbrio oxidativo dos metabólitos secundários na família Asteraceae e na sua tribo Heliantheae

Para continuar a examinar a correlação entre os caracteres morfológicos e as micromoléculas, entre os caracteres moleculares e químicos a análise do equilíbrio oxidativo a partir da média dos passos oxidativos é um parâmetro importante. O oxigênio tem um papel importante no equilíbrio da produção dos metabólitos secundários conforme os dizeres do Prof. Dr. Otto Richard Gottlieb, renomado pesquisador de produtos naturais e conhecido internacionalmente na comunidade científica: “Recentemente foram propostos métodos para a correlação quantitativa de características morfológicas e micromoleculares de plantas. Sua aplicação a grupos de plantas de posição hierárquica elevada mostra que evolução morfológica é acompanhada por oxidação progressiva de metabólitos secundários dentro de classes biossintéticas particulares. Em angiospermas, a substituição evolutiva de formas lenhosas para herbáceas é acompanhada pelo abandono gradativo do caminho do chiquimato para a produção de metabólitos secundários e o engrandecimento concomitante dos caminhos do acetato e do mevalonato para a

síntese de policetídeos e terpenóides de alto nível de oxidação. Estes resultados sugerem que evolução micromolecular é dependente da variável teor de oxigênio da atmosfera. Entretanto, o oxigênio não age diretamente na evolução micromolecular, mas propulsiona a evolução de dispositivos enzimáticos protetores, tais como meias-vidas durante a mudança oxidativa e para a orientação de caminhos biossintéticos de micromoleculas. Ambos os fenômenos são essenciais na diversificação de metabólitos secundários e por isso são requisitos para a flexibilidade da adaptação de um organismo ao ambiente” (Gottlieb,1989).

Tentaremos estudar se existe um balanço oxidativo nos níveis das tribos da família Asteraceae; subtribos e gêneros da tribo Heliantheae.

4.6.1 Estudo do equilíbrio oxidativo dos metabólitos secundários nas tribos da família Asteraceae segundo Bremer

A partir da tabela 4.3.1.1 das médias dos passos oxidativos das tribos da família Asteraceae segundo Bremer (Bremer,1996) foram calculadas as correlações da media dos passos oxidativos de cada classe versus as demais representadas na tabela 4.6.1.1. Foi observado que existe uma boa correlação entre as oxidações das classes, e em cada classe a média das oxidações correlaciona bem com pelo menos uma outra classe com valor de r alto. Mas devemos notar que isso pode ser explicado por ter substituído os valores que faltam pela média em cada tribo. E também foi feita uma análise de regressões multivariadas da média das oxidações de uma classe versus todas as outras (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante). A tabela 4.6.1.2 apresenta alguns índices estatísticos. Temos valores de R maior

que 0,80 na maioria dos casos e de R^2 acima de 0,60 para 10 dos casos. Também temos valores de $AdjR^2$ bons acima de 0,5 em quase todas as amostras. Os valores de p são na maioria das vezes inferiores a 0,05, e os valores de F são adequados. As equações de regressões (Equação 4.6.1.1 a 4.6.1.13) estão no apêndice C. Nessas equações, podemos observar a dependência da média dos passos oxidativos de uma classe versus as demais. Apesar de ter valores de R^2 da calibração do PLS baixos e valores de R^2 da validação cruzada do PLS baixo e mesmo ruins em alguns casos, podemos dizer que existe um balanço oxidativo entre as 12 classes de metabólitos secundários, ou seja, as plantas, para produzirem os metabólitos, controlam o teor do oxigênio no nível das tribos da família Asteraceae segundo Bremer. As desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas por falta de dados, ou seja, quando a relação entre espécie estudada/existente for pequena e também para às classes que têm poucas ocorrências. Também pela falta de valores dos passos oxidativos em algumas classes.

Como isso, podemos dizer que no nível das tribos da família Astereaceae segundo Bremer o grau de oxidação (NOX) é bom parâmetro para correlacionar a química e a morfologia das plantas.

Tabela 4.6.1.1 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribo da família Asteraceae segundo Bremer

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
Oxi-MONO	1,00												
Oxi-SESQ	-0,01	1,00											
Oxi-LACT	0,16	-0,20	1,00										
Oxi-DITE	-0,22	-0,24	0,47	1,00									
Oxi-TRIT	-0,78	-0,55	-0,19	0,14	1,00								
Oxi-CUMA	0,27	-0,09	0,27	-0,28	-0,28	1,00							
Oxi-FLAVA	-0,13	-0,82	0,33	0,21	0,51	-0,02	1,00						
Oxi-FLAVB	0,23	-0,10	-0,45	0,36	-0,11	-0,47	-0,01	1,00					
Oxi-POLI	0,27	0,16	-0,31	-0,45	-0,19	-0,43	0,19	0,24	1,00				
Oxi-BENZF	0,50	-0,30	-0,44	-0,14	-0,14	0,21	-0,20	0,50	-0,20	1,00			
Oxi-BENZP	-0,10	0,18	-0,62	-0,84	0,08	0,21	0,00	-0,17	0,51	-0,01	1,00		
Oxi-ACET	-0,42	0,40	-0,53	-0,17	0,03	0,26	-0,28	0,09	-0,08	-0,03	0,56	1,00	
Oxi-FENI	-0,02	-0,74	0,09	-0,17	0,58	-0,18	0,61	-0,20	0,12	0,11	0,00	-0,66	1,00

Tabela 4.6.1.2 Índices estatísticos das regressões da média dos passo oxidativos de uma classe versus as outras em tribos da família Asteraceae segundo Bremer

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
R	0,54	0,94	0,82	0,9	0,91	0,79	0,93	0,92	0,79	0,7	0,54	0,9	0,9
R2	0,29	0,89	0,67	0,82	0,83	0,62	0,86	0,84	0,62	0,5	0,3	0,81	0,82
Adj R2	0,13	0,82	0,56	0,68	0,66	0,39	0,78	0,78	0,45	0,38	0,13	0,77	0,67
F	1,82	13,37	6,21	5,8	4,95	2,71	10,24	12,01	3,63	4,27	1,84	19,19	5,76
P	0,19	0,0003	0,006	0,009	0,02	0,08	0,0009	0,0004	0,03	0,03	0,19	05	0,009
R2-PLS-cal	0,15	0,49	0,42	0,5	0,28	0,18	0,29	0,46	0,71	0,39	0,2	0,38	0,44
R2-PLS-valc	-0,64	-0,47	0,001	-0,41	-0,55	-0,37	-0,28	0,24	-0,21	-0,04	-0,43	0,06	-0,004

4.6.2 Estudo do equilíbrio oxidativo dos metabólitos secundários nas tribos e nos gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”

A partir dos dados apresentados na tabela 4.3.2.1 das médias dos passos oxidativos das tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” (Funk *et al.*, 2009) foram calculadas a correlação da media dos passos oxidativos entre as classes, como mostrado na tabela 4.6.2.1. Foi observado que existe uma correlação entre as oxidações das classes, e em cada classe a média das oxidações correlaciona com pelo menos uma outra classe com valor de r

alto mesmo quando negativo. Mas devemos notar que isso pode ser explicado por ter substituído os valores que faltam pela média em cada tribo. Foram feitas análises de regressões multivariadas da média das oxidações de uma classe versus todas demais (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante). Na tabela 4.6.2.2 estão alguns índices estatísticos. Temos valores de R acima de 0,70 e de R² acima de 0,60 na maioria dos casos. Também temos valores de AdjR² bons acima de 0,5 em quase a metade dos casos. Os valores de p são na maioria dos casos inferiores a 0,05, e os valores de F são adequados mesmo sendo baixos. As equações de regressões (Equação 4.6.2.1 a 4.6.2.13) estão no apêndice C. Nessas equações podemos observar a dependência da média dos passos oxidativos de uma classe versus as demais. Apesar de ter baixos valores de R² da calibração do PLS e baixos valores de R² da validação cruzada do PLS, mesmo ruins em alguns casos, podemos dizer que existe um balanço oxidativo entre as 12 classes de metabólitos secundários. Pode-se postular que grupos de plantas, durante a produção dos metabólitos, controlam o teor do oxigênio no nível das tribos da família Asteraceae segundo a classificação denominada “metatree”. As desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas por falta de dados, ou seja, quando a relação entre espécie estudada/existente for pequena e também para as classes que têm poucas ocorrências.

Como isso, podemos dizer que no nível das tribos da família Astereaceae segundo a classificação denominada “metatree”, o grau de oxidação (NOX) é bom parâmetro para estudar o avanço evolutivo dos grupos da família Asteraceae. Também correlacionar os dados químicos e moleculares.

Tabela 4.6.2.1 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”

	Oxi MONO	Oxi SESQ	Oxi LACT	Oxi DITE	Oxi TRIT	Oxi CUMA	Oxi FLAV-A	Oxi FLAV-B	Oxi POLI	Oxi BENZF	Oxi BENZP	Oxi ACET	Oxi FENI
oxiMONO	1,00												
oxiSESQ	0,16	1,00											
oxiLACT	0,29	-0,34	1,00										
oxiDITE	-0,34	-0,60	0,44	1,00									
oxiTRITE	-0,97	-0,35	-0,11	0,42	1,00								
oxiCUMA	0,46	0,08	-0,39	-0,82	-0,46	1,00							
oxiFLAV-A	0,23	-0,61	0,78	0,14	0,00	0,12	1,00						
oxiFLAV-B	0,41	-0,51	-0,20	0,16	-0,37	0,35	-0,01	1,00					
oxiPOLI	-0,16	0,02	0,24	-0,46	0,25	0,34	0,57	-0,60	1,00				
oxiBENZF	0,35	-0,36	-0,46	-0,10	-0,35	0,56	-0,14	0,95	-0,48	1,00			
oxiBENZP	0,09	0,74	-0,63	-0,94	-0,24	0,64	-0,42	-0,29	0,35	0,00	1,00		
oxiACET	-0,58	-0,28	-0,79	-0,03	0,52	0,24	-0,39	0,35	-0,14	0,52	0,17	1,00	
oxiFENI	0,60	0,37	0,70	0,04	-0,58	-0,27	0,24	-0,31	0,00	-0,48	-0,14	-0,98	1,00

Tabela 4.6.2.2 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”

	Oxi MONO	Oxi SESQ	Oxi LACT	Oxi DITE	Oxi TRIT	Oxi CUMA	Oxi FLAV-A	Oxi FLAV-B	Oxi POLI	Oxi BENZF	Oxi BENZP	Oxi ACET	Oxi FENI
R	0,88	0,90	0,55	0,82	0,75	0,64	0,61	0,79	0,41	0,36	0,38	0,86	0,56
R ²	0,78	0,81	0,30	0,68	0,57	0,41	0,38	0,62	0,17	0,13	0,14	0,73	0,32
Adj R ²	0,71	0,76	0,17	0,62	0,46	0,34	0,22	0,46	0,07	0,04	0,05	0,59	0,19
F	10,56	16,87	2,41	11,97	5,22	6,21	2,41	3,87	1,79	1,39	1,48	5,08	2,61
p	0,0002	0,00001	0,10	0,0002	0,007	0,009	0,09	0,02	0,20	0,30	0,30	0,01	0,09
R ² -PLS-Cal	0,81	0,77	0,15	0,33	0,18	0,55	0,27	0,36	0,38	0,13	0,11	0,15	0,15
R ² -PLS-Valc	0,42	0,21	-0,44	0,04	0,02	0,26	0,15	-0,04	0,11	0,01	-0,43	-0,54	-0,16

Usando a tabela 4.3.2.1, realizou-se uma análise das médias dos passos oxidativos de 10 tribos da família Asteraceae segundo a classificação denominada “metatree” (Funk *et al.* 2009). Os gêneros presentes nessas 10 tribos estão localizados nas tribos Heliantheae e Helenieae na classificação de Bremer. Nesse trabalho foram calculadas as correlações da média dos passos oxidativos de cada uma classe versus as outras restantes (tabela 4.6.2.3). Foi observado que existe uma boa correlação entre as oxidações das classes, e em cada classe a média das oxidações correlaciona bem como pelo menos uma outra classe com valor de *r* alto. Mas devemos notar que isso pode ser

explicado por ter substituídos os valores que faltam pela média em cada tribo. E também foi feita uma análise de regressões multivariada da media das oxidações de uma classe versus todas as outras (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante), e a tabela 4.6.2.4 apresenta de alguns índices estatísticos. Temos valores de R acima de 0,90 e de R^2 acima de 0,80 na maioria dos casos 10. Também temos valores de $AdjR^2$ bons acima de 0,60 em quase a metade dos casos. Os valores de p são na maioria dos casos inferiores a 0,05, e os valores de F são adequados menos sendo baixo em alguns casos. As equações de regressões (Equação 4.6.2.14 a 4.6.2.26) estão no apêndice C. Nessas equações podemos observar a dependência da média das passos oxidativos de uma classe versus as demais. Os valores de R^2 da calibração do PLS são altos e os valores de R^2 da validação cruzada do PLS são adequados e ruins em alguns casos. Podemos dizer que existe um balanço oxidativo entre as 12 classes de metabólitos secundários, ou seja que as plantas para produzir os metabólitos controlam o teor do oxigênio no nível das 10 tribos da família Asteraceae segundo “metatree” que correspondem com as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer. As desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas por falta de dados, ou seja quando a relação entre espécie estudada/existente for pequena e também para às classes que têm poucas ocorrências. Também pela falta de valores dos passos oxidativos em algumas classes.

Como isso podemos dizer que no nível das 10 tribos da família Asteraceae segundo “metatree” que correspondem com as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer o grau de oxidação (NOX)

é bom parâmetro para correlacionar os dados químicos e moleculares das plantas.

Tabela 4.6.2.3 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

	Oxi MONO	Oxi SESQ	Oxi LACT	Oxi DITE	Oxi TRIT	Oxi CUMA	Oxi FLAV-A	Oxi FLAV-B	Oxi POLI	Oxi BENZF	Oxi BENZP	Oxi ACET	Oxi FENI
oxiMONO	1,00												
oxiSESQ	0,35	1,00											
oxiLACT	0,32	-0,12	1,00										
oxiDITE	0,17	0,51	0,08	1,00									
oxiTRIT	-0,57	0,26	-0,14	0,47	1,00								
oxiCUMA	0,89	0,68	0,11	0,29	-0,33	1,00							
oxiFLAV-A	0,05	-0,36	0,13	0,18	-0,23	-0,09	1,00						
oxiFLAV-B	0,23	-0,03	-0,07	-0,53	-0,61	0,25	-0,35	1,00					
oxiPOLI	-0,56	-0,23	-0,33	-0,10	0,09	-0,50	-0,25	0,35	1,00				
oxiBENZF	0,24	-0,01	0,16	0,39	-0,12	0,21	0,85	-0,42	-0,26	1,00			
oxiBENZP	0,42	0,45	0,25	0,66	0,02	0,50	0,27	-0,32	-0,11	0,66	1,00		
oxiACET	-0,29	-0,36	-0,19	0,16	0,20	-0,38	0,70	-0,70	-0,08	0,69	0,18	1,00	
oxiFENI	-0,17	0,05	0,34	-0,06	0,41	-0,10	-0,33	0,08	0,09	-0,22	-0,26	-0,17	1,00

Tabela 4.6.2.4 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.

	Oxi MONO	Oxi SESQ	Oxi LACT	Oxi DITE	Oxi TRIT	Oxi CUMA	Oxi FLAV-A	Oxi FLAV-B	Oxi POLI	Oxi BENZF	Oxi BENZP	Oxi ACET	Oxi FENI
R	0,73	1	0,99	1	1	1	0,68	0,96	1	0,998	0,997	0,999	1
R2	0,53	1	0,98	1	1	1	0,46	0,93	1	0,996	0,993	0,998	1
Adj R2	0,3	1	0,95	1	1	1	0,31	0,79	1	0,965	0,97	0,99	1
F	2,26	2021,31	27,42	3192,82	11329,39	7897,58	3	6,65	16572,88	32,07	42,22	123,17	1413,12
p	0,18	0,02	0,01	0,01	0,007	0,009	0,11	0,07	0,007	0,14	0,02	0,008	0,02
R2-PLS-Cal	0,59	0,3	0,16	0,53	0,32	0,58	0,84	0,82	0,34	0,99	0,41	0,8	0,32
R2-PLS-Valc	0,37	-0,94	-0,32	-0,3	-0,12	0,33	0,47	0,35	-0,24	0,35	-0,57	-0,34	-0,6

A partir da tabela das médias dos passos oxidativos dos gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree” (Funk *et al.*, 2009) foram calculadas as correlações das médias dos passos oxidativos entre as classes, como descrito na tabela 4.6.2.5. Foi observado que não existem boas correlações

entre as diferentes classes. A média das oxidações de uma classe não se correlaciona com nenhuma outra e os valores de r são ruins. Mas devemos notar que isso pode ser explicado por terem substituídos os valores que faltam pela média em cada gênero. Também foi feita uma análise de regressões multivariadas das médias das oxidações de uma classe versus todas as outras (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante), e a tabela 4.6.2.6 apresenta de alguns índices estatísticos. Temos valores de R abaixo de 0,60 e de R^2 abaixo de 0,30 em todos os casos. Também temos valores de $AdjR^2$ ruins abaixo de 0,20 em todos os casos. Os valores de p e F não têm mais significância e as equações de regressões não serão apresentadas. Como as regressões pelo MLR não deram resultados adequados, não foi necessário usar métodos mais robustos com PLS para validação dos dados. Podemos dizer que não foi possível estabelecer a existência de um balanço oxidativo entre as 12 classes de metabólitos secundários no nível dos gêneros da família Asteraceae segundo “metatree”. Mesmo se as desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas por falta de dados, ou seja, quando a relação entre espécie estudada/existente for pequena, também para as classes que têm poucas ocorrências e pela falta de valores dos passos oxidativos em algumas classes.

Com isso, podemos dizer que no nível dos gêneros da família Astereceae segundo “metatree” o grau de oxidação (NOX) não é bom parâmetro para correlacionar os dados químicos e moleculares das plantas. O que foi observado em nível alto (acima da família) não é observado em nível baixo (gênero).

Tabela 4.6.2.5 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
Oxi-MONO	1,00												
Oxi-SESQ	-0,06	1,00											
Oxi-LACT	-0,07	-0,21	1,00										
Oxi-DITE	-0,10	-0,30	-0,05	1,00									
Oxi-TRIT	-0,30	-0,14	-0,10	0,23	1,00								
Oxi-CUMA	0,10	0,09	0,12	0,13	-0,37	1,00							
Oxi-FLAVA	-0,01	-0,13	-0,13	-0,02	-0,16	0,25	1,00						
Oxi-FLAVB	-0,04	-0,23	0,03	0,16	-0,16	0,13	-0,03	1,00					
Oxi-POLI	0,12	-0,19	-0,03	0,27	-0,40	0,18	-0,05	0,43	1,00				
Oxi-BENZF	0,01	-0,22	-0,33	0,07	-0,10	0,54	0,08	0,08	-0,01	1,00			
Oxi-BENZP	-0,14	0,16	-0,51	0,01	0,00	-0,10	0,24	0,20	0,12	0,20	1,00		
Oxi-ACET	-0,30	0,15	-0,43	0,23	0,41	-0,25	0,40	-0,03	0,03	0,13	0,40	1,00	
Oxi-FENI	0,02	0,06	0,15	0,13	0,00	-0,16	-0,20	-0,04	-0,14	-0,11	-0,23	-0,07	1,00

Tabela 4.6.2.6 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em gêneros família Asteraceae segundo a “metatree”

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
R	0,26	0,41	0,36	0,33	0,52	0,35	0,32	0,33	0,42	0,31	0,31	0,36	0,19
R ²	0,07	0,17	0,13	0,11	0,27	0,12	0,11	0,11	0,17	0,09	0,10	0,13	0,03
Adj R ²	0,05	0,09	0,08	0,06	0,20	0,10	0,04	0,08	0,14	0,05	0,06	0,08	0,008
F	5,31	2,27	2,64	2,21	3,66	5,11	1,69	4,43	5,02	2,47	2,61	2,72	1,31
p	0,02	0,05	0,04	0,08	0,002	0,008	0,15	0,01	0,00	0,07	0,06	0,04	0,27

4.6.3 Estudo do equilíbrio oxidativo dos metabólitos secundários nas subtribos e dos gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

A partir da tabela 4.3.3.1 das médias dos passos oxidativos das subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae da família Asteraceae segundo Bremer (Bremer, 1994) foram calculadas a correlação da média dos passos oxidativos de cada classe versus as demais, representado na tabela 4.6.3.1. Foi observado que existe uma correlação razoável entre as oxidações das classes, em cada classe a média das oxidações correlaciona bem com pelo menos uma outra classe com valor de r médio. Foi feita uma análise de

regressões multivariada da média das oxidações de uma classe versus todas as outras (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante), e a tabela 4.6.3.2 apresenta alguns índices estatísticos. Temos valores de R acima de 0,90 e de R^2 acima de 0,80 na maioria dos casos. Também temos valores de $AdjR^2$ bons acima de 0,65 em quase todos os casos. Os valores de p são na maioria dos casos inferiores a 0,05, e os valores de F são adequados. As equações de regressões (Equação 4.6.3.1 a 4.6.3.13) estão no apêndice C. Nessas equações podemos observar a dependência da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras. Apesar de ter valores de R^2 da calibração do PLS médio e valores de R^2 da validação cruzada do PLS baixo, e mesmo ruins em alguns casos, podemos dizer que existe um balanço oxidativo entre as 12 classes de metabólitos secundários, ou seja, que as plantas para produzirem os metabólitos controlam o teor do oxigênio no nível das subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae da família Asteraceae segundo Bremer. As desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas por falta de dados, ou seja, quando a relação entre espécie estudada/existente for pequena, também para às classes que têm poucas ocorrências e pela falta de valores dos passos oxidativos em algumas classes.

Com isso, podemos dizer que no nível das subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae da família Astereceae segundo Bremer o grau de oxidação (NOX) é bom parâmetro para correlacionar a química e a morfologia das plantas.

Tabela 4.6.3.1 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
Oxi-MONO	1,00												
Oxi-SESQ	0,42	1,00											
Oxi-LACT	0,04	-0,22	1,00										
Oxi-DITE	-0,22	0,03	-0,07	1,00									
Oxi-TRIT	-0,12	0,31	-0,21	0,24	1,00								
Oxi-CUMA	0,43	0,55	0,02	0,05	0,13	1,00							
Oxi-FLAVA	-0,10	0,06	0,29	0,00	-0,31	0,30	1,00						
Oxi-FLAVB	-0,28	0,11	-0,07	-0,27	-0,21	0,16	0,04	1,00					
Oxi-POLI	-0,14	-0,24	-0,31	0,15	-0,04	-0,15	-0,05	0,10	1,00				
Oxi-BENZF	0,58	0,40	0,22	0,08	-0,01	0,80	0,37	0,10	-0,04	1,00			
Oxi-BENZP	0,66	0,50	0,04	-0,32	0,04	0,50	0,21	-0,13	-0,15	0,59	1,00		
Oxi-ACET	0,47	0,47	-0,20	0,12	0,48	0,71	0,20	-0,07	0,06	0,71	0,64	1,00	
Oxi-FENI	0,20	0,16	0,14	0,03	0,02	0,43	0,08	0,19	0,03	0,35	0,29	0,36	1,00

Tabela 4.6.3.2 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
R	0,93	0,57	0,95	0,42	0,91	0,94	0,27	0,75	0,92	0,94	0,93	0,90	0,91
R ²	0,86	0,32	0,9	0,17	0,83	0,83	0,07	0,57	0,85	0,88	0,86	0,80	0,84
Adj R ²	0,67	0,23	0,8	0,06	0,69	0,69	0,01	0,37	0,7	0,79	0,78	0,65	0,71
F	4,66	3,34	8,89	1,48	6,21	6,21	1,11	2,88	5,73	9,64	10,35	5,30	6,67
P	0,03	0,06	0,003	0,26	0,007	0,001	0,31	0,07	0,01	0,001	0,0008	0,01	0,006
R ² -PLS-cal	0,41	0,51	0,26	0,19	0,15	0,57	0,38	0,22	0,17	0,59	0,59	0,74	0,28
R ² -PLS-valc	0,06	0,08	-0,44	-0,63	-1,4	0,29	-0,35	-0,5	-0,39	0,33	0,32	0,56	-0,14

A partir da tabela 4.3.3.2 das médias dos passos oxidativos dos gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae da família Asteraceae segundo Bremer (Bremer, 1994) foram calculadas a correlação da média dos passos oxidativos entre as classes representadas nas tabela 4.6.3.3. Foi observado que não existe uma correlação entre as oxidações das classes, e em cada uma, a média das oxidações não correlaciona com nenhuma outra. Os valores de r são ruins. Mas devemos notar que isso pode ser explicado por termos

substituído os valores que faltam pela média em cada gênero. Também foi feita uma análise de regressão multivariada da média das oxidações de uma classe versus todas as demais (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante), e a tabela 4.6.3.4 apresenta alguns índices estatísticos. Temos valores de R abaixo de 0,50 e de R^2 abaixo de 0,20 em todos os casos. Também temos valores de $AdjR^2$ ruins abaixo de 0,15 em todos os casos. Uma vez que os valores de p e F não têm mais significância, as equações de regressões não serão apresentadas. Como as regressões pelo MLR não deram resultados adequados, não foi necessário usar métodos mais robustos com PLS para validação dos dados. Podemos dizer que não foi possível estabelecer a existência de um balanço oxidativo entre as 12 classes de metabólitos secundários no nível dos gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae da família Asteraceae segundo Bremer. Mesmo se as desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas por falta de dados, ou seja, quando a relação entre espécie estudada/existente for pequena, também para as classes que têm poucas ocorrências e pela falta de valores dos passos oxidativos em algumas classes.

Como isso podemos dizer que no nível dos gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae da família Astereaceae segundo Bremer não foi observado o equilíbrio oxidativo.

Tabela 4.6.3.3 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros do complexo *Heliantheae-Helenieae* segundo Bremer

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
OxiMONO	1,00												
Oxi-SESQ	0,01	1,00											
Oxi-LACT	-0,08	-0,08	1,00										
Oxi-DITE	-0,05	0,05	-0,04	1,00									
Oxi-TRIT	-0,11	-0,07	-0,08	0,06	1,00								
Oxi-CUMA	-0,15	-0,03	-0,09	0,03	-0,09	1,00							
Oxi-FLAVA	0,02	0,14	-0,09	-0,16	0,04	-0,01	1,00						
Oxi-FLAVB	-0,08	-0,06	-0,05	0,01	-0,09	0,17	-0,28	1,00					
Oxi-POLI	0,07	0,06	-0,04	0,06	-0,11	0,04	0,03	0,02	1,00				
Oxi-BENZF	0,26	0,01	-0,10	0,00	-0,03	-0,10	-0,05	-0,11	0,02	1,00			
Oxi-BENZP	0,06	0,03	-0,01	0,06	0,02	0,05	-0,04	-0,08	-0,05	0,24	1,00		
Oxi-ACET	0,05	-0,05	-0,08	0,03	-0,06	0,12	0,03	0,01	-0,07	0,20	0,10	1,00	
Oxi-FENI	-0,06	-0,04	-0,03	-0,02	0,08	-0,11	-0,05	0,11	-0,09	0,10	0,10	-0,17	1,00

Tabela 4.6.3.4 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em gêneros do complexo *Heliantheae-Helenieae* segundo Bremer

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
R	0,33	0,14	0,24	0,16	0,22	0,32	0,37	0,37	0,11	0,41	0,26	0,31	0,31
R ²	0,11	0,02	0,06	0,03	0,05	0,10	0,14	0,14	0,01	0,17	0,07	0,1	0,1
Adj R ²	0,08	0,01	0,01	0,02	0,02	0,06	0,11	0,11	0,006	0,14	0,05	0,07	0,06
F	3,73	3,22	1,33	4,39	1,64	2,2	5,04	4,89	2,06	5,24	3,91	4,2	2,35
P	0,003	0,07	0,24	0,04	0,15	0,03	3E-04	3E-04	0,15	6E-05	0,01	0,003	0,03

4.6.4 Estudo do equilíbrio oxidativo dos metabólitos secundários nas subtribos e dos gêneros da tribo *Heliantheae* segundo Stuessy

A partir da tabela 4.3.4.1 das médias dos passos oxidativos das subtribos da tribo *Heliantheae* segundo Stuessy (Stuessy,1977) foram calculadas as correlações das médias dos passos oxidativos entre as classes, como descrito na tabela 4.6.4.1. Foi observado que existe uma correlação razoável entre as oxidações, e em muitos casos a média das oxidações de

uma classe está correlacionada com pelo menos uma outra classe com valor de r médio. Também foi feita uma análise de regressões multivariadas da média das oxidações de uma classe versus todas as outras (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante). A tabela 4.6.4.2 apresenta alguns índices estatísticos. Temos valores de R acima de 0,80 e de R^2 acima de 0,70 na maioria dos casos. Também temos valores de $AdjR^2$ bons acima de 0,60 em quase todos os casos. Os valores de p são na maioria dos casos inferiores a 0,05, e os valores de F são adequados. As equações de regressões (Equação 4.6.4.1 a 4.6.4.13) estão no apêndice C. Nessas equações podemos observar a dependência da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras. Os valores de R^2 da calibração do PLS são adequados na maioria dos casos, os valores de R^2 da validação cruzada do PLS são baixos, mas aceitáveis em alguns casos e ruins em outros. Apesar disso podemos dizer que existe um balanço oxidativo entre as 12 classes de metabólitos secundários, ou seja, que as plantas para produzirem os metabólitos controlam o teor do oxigênio no nível das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy. As desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas por falta de dados, ou seja, quando a relação entre espécie estudada/existente for pequena e também para as classes que têm poucas ocorrências. Também pela falta de valores dos passos oxidativos em algumas classes.

Com isso, podemos dizer que no nível das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy o grau de oxidação (NOX) poderá ser usado em estudos evolutivos.

Tabela 4.6.4.1 Matriz de correlações entre as médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
Oxi-MONO	1,00												
Oxi-SESQ	-0,15	1,00											
Oxi-LACT	-0,03	-0,59	1,00										
Oxi-DITE	-0,34	0,59	-0,11	1,00									
Oxi-TRIT	-0,03	0,15	-0,33	0,04	1,00								
Oxi-CUMA	-0,25	-0,23	0,10	-0,01	-0,37	1,00							
Oxi-FLAVA	0,27	-0,31	-0,09	-0,16	0,25	-0,33	1,00						
Oxi-FLAVB	-0,24	-0,61	0,41	-0,32	-0,30	0,55	-0,17	1,00					
Oxi-POLI	-0,45	-0,20	-0,05	-0,09	0,07	0,16	0,19	0,32	1,00				
Oxi-BENZF	0,55	-0,01	0,02	0,03	-0,07	-0,04	-0,01	-0,34	-0,28	1,00			
Oxi-BENZP	0,33	-0,37	-0,06	-0,41	-0,10	-0,07	0,36	0,32	0,39	0,26	1,00		
Oxi-ACET	0,17	-0,12	-0,08	-0,04	-0,26	0,47	-0,04	-0,11	-0,08	0,58	0,15	1,00	
Oxi-FENI	-0,08	-0,17	0,04	0,16	0,34	-0,42	0,28	-0,09	-0,30	-0,03	0,03	-0,25	1,00

Tabela 4.6.4.2 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
R	0,89	0,95	0,71	0,84	0,47	0,88	0,79	0,95	0,88	0,77	0,81	0,85	0,93
R ²	0,80	0,90	0,50	0,71	0,22	0,77	0,63	0,90	0,77	0,60	0,65	0,72	0,87
Adj R ²	0,60	0,82	0,36	0,50	0,09	0,68	0,35	0,81	0,65	0,50	0,46	0,56	0,69
F	4,07	11,4	3,67	3,32	1,7	8,64	2,28	9,34	6,23	5,49	3,37	4,59	4,91
P	0,04	0,002	0,05	0,06	0,22	0,003	0,14	0,004	0,009	0,01	0,05	0,02	0,03
R ² -PLS-cal	0,62	0,54	0,23	0,34	0,23	0,38	0,55	0,92	0,38	0,39	0,65	0,71	0,33
R ² -PLS-valc	0,37	0,12	-0,55	-1,8	-0,25	-0,12	0,27	0,47	-0,87	0,01	0,48	0,21	-0,34

A partir da tabela 4.3.4.2 das médias dos passos oxidativos dos gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy (Stuessy,1977) foram calculadas as correlações médias dos passos oxidativos entre as classes (tabela 4.6.4.3). Foi observado que existe uma correlação moderada entre as oxidações das classes e cada uma média das oxidações correlaciona com alguma outra, sendo que os valores de r são razoáveis. Mas devemos notar que isso pode ser explicado pela substituição dos valores que faltam pela média em cada tribo. E também foi feita uma análise de regressões multivariada da média das

oxidações de uma classe versus todas as outras (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante), e a tabela 4.6.4.4 apresenta alguns índices estatísticos. Temos valores de R abaixo de 0,60 e de R^2 abaixo de 0,40 em todos os casos. Também temos valores de $AdjR^2$ ruins abaixo de 0,30 em todos os casos. Os valores de p e F não têm mais significância e as equações de regressões não serão apresentadas. E como as regressões pelo MLR não deram resultados adequados não foi necessário usar métodos mais robustos com PLS para validação dos dados. Podemos dizer que não foi possível estabelecer a existência de um balanço oxidativo entre as 12 classes de metabólitos secundários no nível dos gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy. Mesmo se as desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas por falta de dados, ou seja, quando a relação entre espécie estudada/existente for pequena, também para às classes que têm poucas ocorrências e pela falta de valores dos passos oxidativos em algumas classes.

Como isso, podemos dizer que no nível dos gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy o grau de oxidação (NOX) não é bom parâmetro neste nível hierárquico.

Tabela 4.6.4.3 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
Oxi-MONO	1,00												
Oxi-SESQ	0,00	1,00											
Oxi-LACT	0,29	-0,20	1,00										
Oxi-DITE	0,01	0,04	0,13	1,00									
Oxi-TRIT	-0,04	0,03	0,23	0,18	1,00								
Oxi-CUMA	0,12	0,08	0,47	0,23	0,20	1,00							
Oxi-FLAVA	0,18	-0,04	0,42	0,04	0,23	0,31	1,00						
Oxi-FLAVB	0,08	0,26	0,40	0,17	0,17	0,58	0,19	1,00					
Oxi-POLI	0,20	0,01	0,26	0,29	0,08	0,35	0,25	0,22	1,00				
Oxi-BENZF	0,31	0,23	0,52	0,02	0,09	0,36	0,30	0,47	-0,08	1,00			
Oxi-BENZP	0,24	0,06	0,60	0,36	0,33	0,52	0,37	0,48	0,51	0,33	1,00		
Oxi-ACET	0,24	0,10	0,50	0,18	0,18	0,57	0,32	0,52	0,20	0,59	0,56	1,00	
Oxi-FENI	0,10	-0,02	0,40	0,27	0,26	0,34	0,25	0,40	0,40	0,10	0,58	0,30	1,00

Tabela 4.6.4.4 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
R	0,34	0,54	0,56	0,19	0,43	0,4	0,29	0,43	0,2	0,49	0,18	0,35	0,29
R ²	0,12	0,3	0,31	0,03	0,19	0,16	0,08	0,18	0,04	0,24	0,03	0,12	0,09
Adj R ²	0,08	0,28	0,29	0,01	0,14	0,12	0,06	0,14	0,02	0,21	0,02	0,08	0,05
F	3,29	26,87	14,26	1,53	4,07	4	3,84	4,38	1,67	7,41	1,99	3,14	2,28
P	0,008	0	0	0,21	5E-4	0,001	0,01	5E-4	0,18	5E-6	0,14	0,01	0,05

4.6.5 Estudo do equilíbrio oxidativo dos metabólitos secundários nas subtribos e dos gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson

A partir da tabela 4.3.5.1 das médias dos passos oxidativos das subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson (Robinson,1981) foram calculados as correlações das média dos passos oxidativos entre as classes (tabela 4.6.5.1). Foi observado que existe uma correlação moderada entre as oxidações de algumas classes e somente em poucas classes a média das oxidações correlaciona como pelo menos uma outra classe com valor de r médio. Também foi feita uma análise de regressão multivariada da média das oxidações de uma classe versus todas as demais (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante). A tabela 4.6.5.2 apresenta alguns índices estatísticos. Temos valores de R acima de 0,70 e de R^2 acima de 0,60 na maioria dos casos. Também temos valores de Adj R^2 bons acima de 0,40. Os valores de p são na maioria dos casos inferiores a 0,05, e os valores de F são adequados. As equações que representam as regressões (Equação 4.6.5.1 a 4.6.5.13) estão no apêndice C. Nessas equações podemos observar a dependência da média das passos oxidativos de uma classe versus as outras. Os valores de valores de R^2 da calibração do PLS são bons na maioria dos casos, os valores de R^2 da validação cruzada do PLS são razoáveis na

maioria dos casos e ruins em poucos. Podemos dizer que existe um balanço oxidativo entre as 12 classes de metabólitos secundários, ou seja, as plantas para produzirem os metabólitos controlam o teor do oxigênio no nível das subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson. As desarmonias em alguns índices estatísticos podem ser explicadas por falta de dados, ou seja, quando a relação entre espécie estudada/existente for pequena, também para as classes que têm poucas ocorrências e pela falta de valores dos passos oxidativos em algumas classes.

Como isso, podemos dizer que no nível das subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson o grau de oxidação (NOX) é bom parâmetro quimiotaxonômico.

Tabela 4.6.5.1 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
Oxi-MONO	1,00												
Oxi-SESQ	-0,19	1,00											
Oxi-LACT	-0,27	-0,30	1,00										
Oxi-DITE	-0,09	-0,13	0,38	1,00									
Oxi-TRIT	-0,27	0,10	-0,35	-0,13	1,00								
Oxi-CUMA	-0,29	-0,10	0,00	-0,05	0,12	1,00							
Oxi-FLAVA	0,02	0,26	0,03	-0,03	-0,24	0,12	1,00						
Oxi-FLAVB	-0,12	0,07	0,12	0,02	0,04	0,07	-0,46	1,00					
Oxi-POLI	0,20	0,00	-0,60	-0,46	-0,05	-0,02	0,08	0,23	1,00				
Oxi-BENZF	0,42	0,00	-0,10	-0,21	0,04	0,10	0,09	-0,24	-0,08	1,00			
Oxi-BENZP	0,21	0,02	0,06	0,06	0,07	-0,02	0,09	-0,30	-0,17	0,39	1,00		
Oxi-ACET	0,13	-0,04	0,24	0,00	-0,17	-0,02	0,30	-0,35	-0,26	0,40	0,03	1,00	
Oxi-FENI	0,05	-0,04	0,12	-0,06	0,20	0,19	0,04	0,16	0,06	0,34	0,35	-0,13	1,00

Tabela 4.6.5.2 Índices estatísticos das regressões da média dos passos oxidativos de uma classe versus as outras em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
R	0,74	0,83	0,94	0,52	0,76	0,37	0,81	0,87	0,91	0,74	0,53	0,65	0,51
R ²	0,54	0,69	0,88	0,27	0,57	0,14	0,66	0,76	0,84	0,55	0,28	0,42	0,26
Adj R ²	0,44	0,53	0,81	0,21	0,43	0,07	0,49	0,62	0,7	0,4	0,19	0,32	0,17
F	5,23	4,43	12,46	4,67	3,86	2,03	3,84	5,5	6,36	3,56	3,17	4,22	2,89
P	0,003	0,004	6E-6	0,02	0,008	0,15	0,007	0,001	6E-4	0,01	0,04	0,02	0,05
R ² -PLS-cal	0,46	0,46	0,18	0,23	0,2	0,69	0,9	0,82	0,16	0,86	0,77	0,65	0,53
R ² -PLS-valc	0,36	0,24	-0,1	-0,65	-0,02	0,63	0,44	0,32	-0,05	0,55	0,66	0,63	0,49

A partir da tabela 4.3.5.2 das médias dos passos oxidativos dos gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson (Robinson,1981) foram calculadas as correlações das médias dos passos oxidativos entre as classes (tabela 4.6.5.3). Foi observado que não existe uma boa correlação entre as oxidações das classes. Em cada uma, a média das oxidações correlaciona pelo menos com outra e os valores de r são baixos. Mas devemos notar que isso pode ser explicado pela substituição dos valores que faltam pela média em cada tribo. Também foi feita uma análise de regressão multivariada da média das oxidações de uma classe versus todas as outras (usando o resumo do modelo obtido pelo método passo a passo adiante), e a tabela 4.6.5.4 apresenta alguns índices estatísticos. Temos valores de R abaixo de 0,60 e de R^2 abaixo de 0,30 em todos os casos. Também temos valores de $AdjR^2$ ruins (abaixo de 0,30) em todos os casos. Já que os valores de p e F não têm mais significância, as equações de regressões não serão apresentados. Como as regressões usando RLM não deram resultados adequados, não foi necessário usar métodos mais robusto com PLS para validação dos dados. Podemos dizer que não foi possível estabelecer a existência de um balanço oxidativo entre as 12 classes de metabólitos secundários no nível dos gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson, mesmo se as desarmonias em alguns índices estatísticos não possam ser explicadas por falta de dados, ou seja, quando a relação entre espécie estudada/existente for pequena e também para às classes que têm poucas ocorrências, e também pela falta de valores dos passos oxidativos em algumas classes.

Como isso, podemos dizer que no nível dos gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson o grau de oxidação (NOX) não é um bom parâmetro

quimiotaxonômico em níveis baixos (gêneros da família) e podem ser melhores em níveis mais altos (tribos da família), o que foi visto em itens anteriores.

Tabela 4.6.5.3 Matriz de correlações entre as médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
Oxi-MONO	1,00												
Oxi-SESQ	-0,09	1,00											
Oxi-LACT	-0,01	-0,51	1,00										
Oxi-DITE	-0,07	0,03	-0,07	1,00									
Oxi-TRIT	-0,11	-0,01	-0,07	0,07	1,00								
Oxi-CUMA	-0,14	0,00	-0,09	0,03	-0,09	1,00							
Oxi-FLAVA	0,03	-0,14	0,02	-0,18	0,04	-0,02	1,00						
Oxi-FLAVB	0,00	0,09	-0,14	-0,02	-0,11	0,07	-0,16	1,00					
Oxi-POLI	0,07	0,04	-0,06	0,08	-0,14	0,04	0,06	0,04	1,00				
Oxi-BENZF	0,23	0,01	-0,09	-0,03	-0,03	-0,10	-0,05	-0,12	0,03	1,00			
Oxi-BENZP	0,05	0,02	0,00	0,04	0,02	0,06	-0,05	-0,09	-0,04	0,23	1,00		
Oxi-ACET	0,06	-0,01	-0,09	0,04	-0,04	0,10	0,09	-0,06	-0,06	0,23	0,09	1,00	
Oxi-FENI	-0,08	-0,02	-0,03	-0,01	0,08	-0,11	-0,07	0,17	-0,09	0,10	0,10	-0,18	1,00

Tabela 4.6.5.4 Índices estatísticos das regressões da média das oxidações de uma classe versus as outras em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson

	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
R	0,31	0,53	0,55	0,22	0,25	0,23	0,33	0,35	0,19	0,43	0,23	0,35	0,34
R ²	0,1	0,28	0,3	0,05	0,16	0,05	0,11	0,12	0,04	0,19	0,05	0,12	0,13
Adj R ²	0,06	0,27	0,27	0,03	0,03	0,03	0,06	0,08	0,02	0,14	0,04	0,09	0,08
F	2,92	18,14	9,71	2,32	1,77	1,94	2,27	3,05	1,75	3,86	7,76	3,79	2,75
P	0,02	0	0	0,08	0,12	0,11	0,03	0,008	0,16	0,0004	0,006	0,003	0,01

4.7 Previsão da produção do esqueleto 1 a partir dos outros esqueletos na família Asteraceae e na sua tribo Heliantheae

Depois de ter estudado o equilíbrio na produção dos metabólitos secundários, veremos se é possível prever a produção de um esqueleto de uma classe a partir dos outros esqueletos nos níveis das tribos da família Astereaceae, das subtribos e gêneros da tribo Heliantheae. Em nosso caso o esqueleto 1 (Apêndice D) o mais primitivo dos monoterpenos foi escolhido. Todos os outros esqueletos usados estão apresentados no apêndice D.

4.7.1 Previsão da produção do esqueletos 1 a partir dos outros esqueletos nas tribos da família Asteraceae segundo Bremer

A partir da matriz dos esqueletos das tribos da família Asteraceae segundo Bremer, foi realizada a regressão linear múltipla usando o esqueleto 1 (monoterpeno) como variável dependente e outros esqueletos (todas as classes químicas) como variáveis independentes. A equação 4.7.1.1 foi obtida. Os valores de R , R^2 , F , p , R^2 -PLS-cal, R^2 -PLS-valc foram altos. Podemos concluir que foi possível prever o esqueleto 1 a partir dos esqueletos 27, 41, 44 (monoterpenos); 133, 201, 202, 208, 257 (sesquiterpenos); 306 (sesquiterpenos lactonas); 523, 524, 534 (triterpenos), 561 (cumarinas) (ver Apêndice D). O gráfico da figura 4.7.1 mostra a reta dos valores previstos versus observados em tribos da família Asteraceae segundo Bremer do esqueleto 1 (monoterpeno) versus todos os outros esqueletos (esqueletos de todas as outras classes). A tabela 4.7.1.1 mostra os valores previstos versus observados. Os dados mostram concordâncias com a biossíntese no nível das tribos da família Asteraceae, uma vez que o esqueleto 1 é o precursor na biossíntese dos terpenóides e considerado como precursor de todas as outras classes nesse trabalho.

Equação 4.7.1.1: Equação de regressão linear múltipla da variável dependente esqueleto 1 (Monoterpeno) versus todos os outros esqueletos em tribos da família Asteraceae segundo Bremer

$$\begin{aligned} \text{Esq1} = & -0,417(\pm 0,230) + 0,181(\pm 0,025)\text{Esq41} + 0,270(\pm 0,001)\text{Esq306} + 0,142(\pm 0,002)\text{Esq133} \\ & + 0,050(\pm 0,002)\text{Esq208} + 0,267(\pm 0,011)\text{Esq202} + 0,424(\pm 0,017)\text{Esq44} - 0,049(\pm 0,003)\text{Esq524} \\ & + 0,024(\pm 0,005)\text{Esq523} + 0,041(\pm 0,005)\text{Esq561} - 0,028(\pm 0,006)\text{Esq534} + 0,010(\pm 0,002)\text{Esq257} \\ & + 0,033(\pm 0,009)\text{Esq27} + 0,004(\pm 0,001)\text{Esq201} \end{aligned}$$

$$(R=1,00 ; R^2=1,00 ; \text{Adj}R^2= 1,00 ; F= 95302,63 ; p = 0,00 ; R^2\text{-PLS-Cal} = 0,99 ; R^2\text{-PLS-valc} = 0,73)$$

Figura 4.7.1.1 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em tribos da família Asteraceae segundo Bremer

Tabela 4.7.1.1 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em tribos da família Asteraceae segundo Bremer

	Valores observados	Valores Previstos	Resíduo
ANT	362,0000	361,9852	0,014771
ARC	1,0000	1,0037	-0,003694
AST	162,0000	162,0556	-0,055588
BAR	0,0000	-0,4168	0,416789
CAL	0,0000	-0,1030	0,102989
CAR	2,0000	2,0010	-0,000951
EUP	75,0000	74,9273	0,072731
GNA	34,0000	33,9121	0,087898
HLN	144,0000	143,9974	0,002625
HLT	70,0000	70,0422	-0,042183
INU	33,0000	33,0362	-0,036224
LAC	1,0000	0,9956	0,004430
LIA	2,0000	2,1457	-0,145735
MUT	29,0000	29,0009	-0,000933
PLU	7,0000	6,9868	0,013201
SEN	46,0000	46,0085	-0,008457
VER	1,0000	0,9433	0,056698

4.7.2 Previsão da produção do esqueleto 1 a partir dos outros esqueletos em tribos e gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”

Para este tipo de previsão utilizamos a regressão linear múltipla com os dados da matriz contendo as ocorrências dos esqueletos das tribos da família Asteraceae segundo a divisão denominada “metatree”. Utilizou-se o esqueleto 1 (monoterpeno linear simples) como variável dependente e outros esqueletos (todas as classes químicas) como variáveis independentes. A equação 4.7.2.1 foi obtida. Os valores de R, R², F, p, R²-PLS-cal R²-PLS-valc foram altos. Podemos concluir que foi possível prever o esqueleto 1 a partir dos esqueletos 15, 23, 41, 46 (monoterpenos); 128, 149, 235, 243, 247, 249 (sesquiterpenos); 303, 314 (sesquiterpenos lactonas); 451, 476, 480 (diterpenos); 529 (triterpenos); 651 (flavonóide); 790, 796, 797 (acetofenonas); 831 (fenilpropanóide). Os esqueletos mencionados estão presentes no Apêndice D. O gráfico da figura 4.7.2.1 mostra a reta dos valores previstos versus observados em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” do esqueleto 1 (monoterpeno) versus todos os outros esqueletos (são representante de várias classes). Esses valores são apresentados na tabela 4.7.2.1 Os dados mostram concordâncias com a biossíntese no nível das tribos da família Asteraceae, uma vez que o esqueleto 1 é o precursor na biossíntese dos terpenóides; o anel A dos flavonóides e os acetofenonas vêm da mesma via (via acetato-mevalonato) que os terpenóides.

Equação 4.7.2.1: Equação de regressão linear múltipla da variável dependente esqueleto 1(Monoterpeno) versus todos os outros esqueletos em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”

$$\begin{aligned} \text{Esq1} = & 0,071(\pm 0,047) + 1,226 (\pm 0,014)\text{Esq41} + 0,639(\pm 0,003)\text{Esq128} - 0,569(\pm 0,004)\text{Esq235} \\ & + 0,202 (\pm 0,001)\text{Esq796} - 0,472(\pm 0,007)\text{Esq790} + 0,069(\pm 0,011)\text{Esq243} - 0,088(\pm 0,001)\text{Esq480} \\ & + 0,042(\pm 0,001)\text{Esq303} + 0,069(\pm 0,001)\text{Esq314} + 0,044(\pm 0,002)\text{Esq476} + 0,064(\pm 0,018)\text{Esq15} \\ & + 0,026(\pm 0,001)\text{Esq451} + 0,011(\pm 0,002)\text{Esq831} - 0,036(\pm 0,004)\text{Esq797} - 0,036(\pm 0,007)\text{Esq247} \\ & + 0,004(\pm 0,001)\text{Esq249} + 0,004(\pm 0,001)\text{Esq651} + 0,003(\pm 0,002)\text{Esq46} - 0,004(\pm 0,003)\text{Esq529} \\ & - 0,002(\pm 0,001)\text{Esq23} + 0,015(\pm 0,014)\text{Esq149} \end{aligned}$$

$$(R=1,00 ; R^2=1,00 ; R^2(\text{Adj})= 1,00 ; F= 101895,1 ; p = 0,00 ; R^2\text{-PLS-Cal} = 0,91; R^2\text{-PLS-valc} = 0,80)$$

Figura 4.7.2.1 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em tribos da família Asteraceae segundo a "metatree"

Tabela 4.7.2.1 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”

	Valores observados	Valores Previstos	Resíduo
ANT	236.0000	236.0065	-0.006500
ARC	1.0000	0.9893	0.010720
AST	139.0000	138.9815	0.018494
ATH	0.0000	0.1208	-0.120779
BAH	9.0000	9.0012	-0.001228
BAR	0.0000	0.1135	-0.113499
CAL	0.0000	-0.0410	0.041007
CAR	2.0000	1.9924	0.007577
CHA	0.0000	0.0706	-0.070626
CIC	1.0000	0.9880	0.011968
COR	3.0000	3.0332	-0.033161
COY	0.0000	0.0706	-0.070626
DIC	0.0000	0.0448	-0.044751
EUP	74.0000	73.9991	0.000954
GNA	34.0000	34.0229	-0.022861
GOC	0.0000	0.0706	-0.070626
HLN	23.0000	22.9972	0.002838
HLT	8.0000	8.0045	-0.004452
HET	0.0000	0.0706	-0.070626
HYA	0.0000	0.0706	-0.070626
INU	24.0000	24.0525	-0.052542
LIA	0.0000	-0.0112	0.011218
MAD	5.0000	4.8819	0.118093
MIL	0.0000	-0.0414	0.041383
MOQ	0.0000	0.0706	-0.070626
MUT	28.0000	27.9909	0.009123
NAU	0.0000	-0.1223	0.122277
NEU	0.0000	-0.0496	0.049570
OLD	0.0000	0.0706	-0.070626
ONO	0.0000	0.0063	-0.006325
PER	1.0000	0.2211	0.778914
PET	0.0000	0.0706	-0.070626
PLA	0.0000	0.0706	-0.070626
POL	0.0000	0.0706	-0.070626
SEN	39.0000	39.0000	0.000000
STI	0.0000	0.0706	-0.070626
TAG	105.0000	104.9995	0.000504
TAR	1.0000	0.9565	0.043527
VER	1.0000	1.0082	-0.008235
WUN	0.0000	0.0706	-0.070626

A partir da matriz contendo as ocorrências dos esqueletos nas 10 tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer foi realizada a regressão linear múltipla usando a o esqueleto 1 (monoterpeno) com variável dependente e outros esqueletos (oriundos de todas as classes químicas) como variáveis independentes. A equação 4.7.2.2 foi obtida. Os valores de R, R², F, p foram altos, mas os valores de R² da calibração (R²-PLS-cal) e da validação cruzada (R²-PLS-valc) foram ruins (isso quer dizer que os modelos não são robustos, por ter muitos valores de dados nulos (zero)). Mas apesar disso podemos concluir que foi razoavelmente possível prever o esqueleto 1 a partir dos esqueletos 15, 37 (monoterpenos); 101, 128, 133 (sesquiterpenos); 302, 303 (sesquiterpenos lactonas); 471 (diterpenos); 712 (benzofurano); 751 (benzopirano) (ver Apêndice D). O gráfico da figura 4.7.2.2 mostra a reta dos valores previstos versus observados em tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” do esqueleto 1 (monoterpeno) versus todos os outros esqueletos (todas as classes). E esses valores são apresentados na tabela 4.7.2.2. Os dados mostram concordâncias com a biossíntese no nível das 10 tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer, uma vez que o esqueleto 1 é o precursor na biossíntese dos terpenóides; e sendo que os benzopirano e benzofurano vêm provavélmente da mesma via (via acetato) que os terpenóides.

Equação 4.7.2.2: Equação de regressão linear múltipla da variável dependente esqueleto 1(Monoterpeno) versus todos os outros esqueletos nas 10 tribos da família Asteraceae segundo a “metatree” correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.

$$\begin{aligned} \text{Esq1} = & 0,818(\pm 0,039) + 0,881(\pm 0,018)\text{Esq128} - 0,251(\pm 0,003)\text{Esq471} - 0,244(\pm 0,003)\text{Esq37} \\ & + 0,113(\pm 0,005)\text{Esq303} + 0,195(\pm 0,003)\text{Esq712} - 0,148(\pm 0,003)\text{Esq133} - 0,063(\pm 0,002)\text{Esq751} \\ & - 0,056(\pm 0,004)\text{Esq302} + 0,030(\pm 0,004)\text{Esq15} - 0,050(\pm 0,021)\text{Esq101} \end{aligned}$$

$$(R=1,00 ; R^2=1,00 ; R^2(\text{Adj})= 1,00 ; F= 387409,4 ; p = 0,001 ; R^2\text{-PLS-Cal} = 0,09; R^2\text{-PLS-valc} = - 0,19)$$

Figura 4.7.2.2 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) nas 10 tribos da família Asteraceae segundo a "metatree" correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer,

Tabela 4.7.2.2 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) nas 10 tribos da família Asteraceae segundo a "metatree" correspondendo as subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.

	Valores observados	Valores Previstos	Resíduo
ATHROISMEAE	0.0000	0.0078	-0.007824
BAHIEAE	9.0000	9.0031	-0.003125
CHAENACTIDEAE	0.0000	-0.0127	0.012704
HELENIEAE	23.0000	23.0011	-0.001123
MADIEAE	5.0000	4.9991	0.000922
TAGETEAE	105.0000	104.9995	0.000481
PERITYTILEAE	1.0000	1.0351	-0.035112
COREOPSIDEAE	3.0000	2.9964	0.003646
HELIANTHEAE	8.0000	7.9968	0.003164
MILLERIEAE	0.0000	0.0086	-0.008587
POLYMNIEAE	0.0000	-0.0043	0.004261
NEUROLAENEAE	0.0000	-0.0306	0.030593

A partir da matriz dos esqueletos dos gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree” foi realizada a regressão linear múltipla usando o esqueleto 1 (monoterpeno) com variável dependente e outros esqueletos (todas as classes químicas) como variáveis independentes. A equação 4.7.2.3 mostra a equação obtida. Os valores de R, R², F, p, R²-PLS-cal, R²-PLS-valc foram altos. Podemos concluir que foi possível prever o esqueleto 1 a partir dos esqueletos, particularmente dos outros monoterpenos, sesquiterpenos, sesquiterpenos lactonas, diterpenos, triterpenos e das outras classes químicas. O gráfico da figura 4.7.2.3 mostra a reta dos valores previstos versus observados em gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree” do esqueleto 1 (monoterpeno) versus todos os outros esqueletos (todas as classes). E esses valores são apresentados na tabela 4.7.2.3 Os dados mostram concordâncias com a biossíntese no nível dos gêneros da família Asteraceae, uma vez que o esqueleto 1 é o precursor na biossíntese dos terpenóides.

Equação 4.7.2.3: Equação de regressão linear múltipla da variável dependente esqueleto 1(Monoterpeno) versus todos os outros esqueletos em gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”.

$$\begin{aligned} \text{Esq1} = & -0,07(\pm 0,13) - 0,31(\pm 0,12)\text{Esq41} + 0,51(\pm 0,05)\text{Esq128} + 0,07(\pm 0,08)\text{Esq233} + 0,08(\pm 0,06)\text{Esq206} \\ & + 0,16(\pm 0,11)\text{Esq15} + 0,10(\pm 0,01)\text{Esq563} + 0,15(\pm 0,03)\text{Esq149} + 0,15(\pm 0,02)\text{Esq691} - 0,33(\pm 0,06)\text{Esq227} \\ & - 0,27(\pm 0,05)\text{Esq224} + 0,05(\pm 0,01)\text{Esq306} + 1,27(\pm 0,20)\text{Esq44} - 0,06(\pm 0,02)\text{Esq150} - 2,35(\pm 0,77)\text{Esq10} \\ & - 0,12(\pm 0,02)\text{Esq304} + 0,14(\pm 0,05)\text{Esq201} - 0,06(\pm 0,03)\text{Esq751} + 0,03(\pm 0,01)\text{Esq712} - 0,03(\pm 0,01)\text{Esq575} \\ & - 0,13(0,03)\text{Esq790} - 0,09(\pm 0,13)\text{Esq752} + 0,01(\pm 0,02)\text{Esq657} - 0,10(\pm 0,04)\text{Esq211} + 0,02(\pm 0,01)\text{Esq447} \\ & + 0,14(\pm 0,05)\text{Esq134} - 0,02(\pm 0,01)\text{Esq574} - 0,06(\pm 0,06)\text{Esq439} - 0,11(\pm 0,03)\text{Esq235} - 0,05(\pm 0,02)\text{Esq170} \\ & - 0,04(\pm 0,01)\text{Esq247} - 0,07(\pm 0,02)\text{Esq46} - 0,09(\pm 0,02)\text{Esq561} + 0,02(\pm 0,02)\text{Esq301} - 0,08(\pm 0,03)\text{Esq521} \\ & + 0,02(\pm 0,04)\text{Esq199} + 0,04(\pm 0,02)\text{Esq416} + 0,06(\pm 0,02)\text{Esq303} - 0,03(\pm 0,02)\text{Esq6} - 0,10(\pm 0,02)\text{Esq526} \\ & + 0,07(\pm 0,02)\text{Esq314} + 0,12(\pm 0,03)\text{Esq524} + 0,31(\pm 0,06)\text{Esq202} - 0,08(\pm 0,02)\text{Esq480} - 0,03(\pm 0,05)\text{Esq833} \\ & - 0,12(\pm 0,08)\text{Esq696} + 2,06(\pm 0,66)\text{Esq8} + 0,36(\pm 0,12)\text{Esq32} + 0,16(\pm 0,07)\text{Esq178} - 0,01(\pm 0,01)\text{Esq252} \\ & + 0,05(\pm 0,02)\text{Esq831} + 0,04(\pm 0,02)\text{Esq27} - 0,01(\pm 0,01)\text{Esq651} + 0,04(\pm 0,09)\text{Esq114} \\ & - 0,01(\pm 0,01)\text{Esq307} - 0,01(\pm 0,01)\text{Esq797} - 0,10(\pm 0,04)\text{Esq153} + 0,01(\pm 0,02)\text{Esq317} \\ & - 0,03(\pm 0,03)\text{Esq230} - 0,16(\pm 0,07)\text{Esq231} - 0,02(\pm 0,01)\text{Esq430} + 0,02(\pm 0,01)\text{Esq655} \\ & - 0,17(\pm 0,07)\text{Esq419} + 0,14(\pm 0,07)\text{Esq263} - 0,04(\pm 0,03)\text{Esq151} - 0,02(\pm 0,01)\text{Esq694} \\ & + 0,02(\pm 0,02)\text{Esq656} + 0,16(\pm 0,14)\text{Esq753} \end{aligned}$$

$$(R=0,992 ; R^2=0,984 ; R^2(\text{Adj})=0,979 ; F= 231,9041 ; p = 0,00 ; R^2\text{-PLS-Cal} = 0,85; R^2\text{-PLS-valc} = 0,80)$$

Figura 4.7.2.3 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros da família Asteraceae segundo a "metatree"

Tabela 4.7.2.3 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros da família Asteraceae segundo a "metatree"

	Valores observados	Valores Previstos	Resíduo
SANTOLINA	9.0000	8.9621	0.0379
ANTHEMIS	3.0000	4.0024	-1.0024
ARTEMISIA	203.0000	203.0226	-0.0226
CHRYSANTHEMUM	13.0000	12.8843	0.1157
COTULA	2.0000	4.0631	-2.0631
SCHISTOSTEPHIUM	3.0000	3.6916	-0.6916
INEZIA	1.0000	-0.0724	1.0724
ARGYRANTHEMUM	1.0000	-0.0724	1.0724
ERIOCEPHALUS	1.0000	2.3138	-1.3138
INULANTHERA	0.0000	-0.1040	0.1040
ATHANASIA	0.0000	-4.5873	4.5873
URSINIA	0.0000	-0.1802	0.1802
HIPPIA	0.0000	-1.5618	1.5618
BROCCHIA	0.0000	-1.4354	1.4354
OSMITOPSIS	0.0000	0.6959	-0.6959
SCLERORHACHIS	0.0000	0.2141	-0.2141
GONOSPERMUM	0.0000	-0.5497	0.5497
HANDELIA	0.0000	-0.0551	0.0551
LIDBECKIA	0.0000	-0.0724	0.0724
GYMNOPENTZIA	0.0000	0.0738	-0.0738
LEPIDOPHORUM	0.0000	-0.0582	0.0582
ARCTOTIS	0.0000	0.4848	-0.4848
ARCTOTHECA	0.0000	-0.2315	0.2315

4.7.3 Previsão da produção do esqueleto 1 a partir dos outros esqueletos em subtribos e gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

A partir da matriz dos esqueletos das subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae da família Asteraceae segundo Bremer foi realizada a regressão linear múltipla usando a o esqueleto 1 (monoterpeno) com variável dependente e outros esqueletos (todas as classes químicas) como variáveis independentes. A equação 4.7.3.1 foi obtida. Os valores de R, R², F e p foram altos mas os valores de R² da calibração (R²-PLS-cal) e da validação cruzada (R²-PLS-valc) foram ruins (isso quer dizer que os modelos não são robustos, por ter muitos valores de dados nulos (zero)). Podemos concluir que foi possível prever o esqueleto 1 a partir dos esqueletos 15, 37 (monoterpenos); 128, 207, 225, 234 (sesquiterpenos); 315, 317 (sesquiterpenos lactonas); 655, 657 (flavonóides); 695, 696, 698 (poliacetilenos); 792 (acetofenona) (ver Apêndice D). O gráfico da figura 4.7.3.1 mostra a reta dos valores previstos versus observados em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae da família Asteraceae segundo Bremer do esqueleto 1 (monoterpeno) versus todos os outros esqueletos (todas as classes). Esses valores são apresentados na tabela 4.7.3.1. Os dados mostram concordâncias com a biossíntese no nível das tribos da família Asteraceae, uma vez que o esqueleto 1 é o precursor na biossíntese dos terpenóides, que os poliacetilenos e acetofenonas vêm da rota do acetato.

Equação 4.7.3.1: Equação de regressão linear múltipla da variável dependente esqueleto 1(Monoterpeno) versus todos os outros esqueletos em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.

$$\begin{aligned} \text{Esq1} = & -0,207(\pm 0,002) + 0,929(\pm 0,001)\text{Esq128} - 0,167(\pm 0,001)\text{Esq696} - 0,900(\pm 0,001)\text{Esq234} \\ & + 0,214(\pm 0,001)\text{Esq37} + 0,301(\pm 0,001)\text{Esq207} + 0,189(\pm 0,001)\text{Esq225} + 0,020(\pm 0,001)\text{Esq655} \\ & + 0,066(\pm 0,001)\text{Esq698} + 0,030(\pm 0,001)\text{Esq657} + 0,062(\pm 0,001)\text{Esq15} - 0,014(\pm 0,000)\text{Esq695} \\ & - 0,067(\pm 0,001)\text{Esq317} - 0,004(\pm 0,000)\text{Esq315} + 0,022(\pm 0,001)\text{Esq792} \end{aligned}$$

$$(R=1,00 ; R^2=1,00 ; R^2(\text{Adj})= 1,00 ; F=775744E2 ; p = 0,00 ; R^2\text{-PLS-Cal} = 0,13 \text{ } R^2\text{-PLS-valc} = - 0,09)$$

Figura 4.7.3.1 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

Tabela 4.7.3.1 Tabelas de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.

	Valores observados	Valores Previstos	Resíduo
AMB	26,0000	25,9997	0,000271
BAE	0,0000	-0,0001	0,000089
CHA	10,0000	10,0010	-0,000986
COR	3,0000	3,0000	-0,000031
ENG	0,0000	-0,0004	0,000353
FLA	0,0000	0,0002	-0,000192
GAI	23,0000	23,0001	-0,000053
GAL	0,0000	0,0019	-0,001947
HLT	10,0000	9,9985	0,001531
HYM	0,0000	0,0021	-0,002094
MAD	4,0000	4,0001	-0,000106
MEL	2,0000	2,0000	0,000020
PEC	106,0000	106,0002	-0,000168
PER	1,0000	0,9976	0,002399
RUD	4,0000	4,0003	-0,000280
VER	12,0000	12,0000	-0,000014
ZIN	5,0000	4,9988	0,001210

A partir da matriz contendo as ocorrências dos esqueletos dos gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae da família Asteraceae segundo Bremer foi realizada a regressão linear múltipla usando o esqueleto 1 (monoterpeno) como variável dependente e outros esqueletos (todas as classes químicas) como variáveis independentes. A equação 4.7.3.2 mostra a equação obtida. Os valores de R, R², F e p foram altos mas os valores de R² da calibração (R²-PLS-cal) e da validação cruzada (R²-PLS-valc) foram ruins (isso quer dizer que os modelos não são robustos, por ter muitos valores de dados nulos (zero)). Apesar disso, podemos concluir que foi possível prever o esqueleto 1 a partir dos esqueletos, particularmente dos outros monoterpenos, sesquiterpenos, sesquiterpenos lactonas, diterpenos, triterpenos e das outras classes químicas. O gráfico da figura 4.7.3.2 mostra a reta dos valores previstos versus observados em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae da família Asteraceae segundo Bremer do esqueleto 1 (monoterpeno) versus todos os outros esqueletos (todas as classes). E esses valores são apresentados na tabela 4.7.3.2. Os dados mostram concordâncias com a biossíntese no nível dos gêneros da família Asteraceae, uma vez que o esqueleto 1 é o precursor na biossíntese dos terpenóides.

Equação 4.7.3.2: Equação de regressão linear múltipla da variável dependente esqueleto 1 (Monoterpeno) versus todos os outros esqueletos em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

$$\begin{aligned} \text{Esq1} = & -0,16 (\pm 0,20) + 0,39 (\pm 0,10) \text{Esq207} - 0,65 (\pm 0,09) \text{Esq234} + 0,27 (\pm 0,10) \text{Esq39} \\ & - 0,44 (\pm 0,08) \text{Esq133} + 0,16 (\pm 0,02) \text{Esq306} + 0,55 (\pm 0,10) \text{Esq128} - 0,32 (\pm 0,07) \text{Esq212} \\ & - 0,16 (\pm 0,05) \text{Esq304} + 0,07 (\pm 0,06) \text{Esq657} + 0,12 (\pm 0,04) \text{Esq525} + 0,10 (\pm 0,03) \text{Esq322} \\ & - 0,14 (\pm 0,04) \text{Esq6} + 0,24 (\pm 0,07) \text{Esq15} + 0,14 (\pm 0,06) \text{Esq200} + 0,08 (\pm 0,03) \text{Esq432} + 0,04 (\pm 0,03) \text{Esq311} \\ & + 0,02 (\pm 0,02) \text{Esq693} + 0,17 (\pm 0,04) \text{Esq412} - 0,09 (\pm 0,03) \text{Esq319} + 0,02 (\pm 0,03) \text{Esq307} \\ & - 0,04 (\pm 0,03) \text{Esq480} + 0,05 (\pm 0,04) \text{Esq698} + 0,31 (\pm 0,15) \text{Esq153} + 0,17 (\pm 0,08) \text{Esq203} \\ & + 0,06 (\pm 0,03) \text{Esq655} - 0,05 (\pm 0,02) \text{Esq456} - 0,07 (\pm 0,03) \text{Esq691} - 0,07 (\pm 0,04) \text{Esq250} \\ & + 0,07 (\pm 0,05) \text{Esq113} + 0,06 (\pm 0,05) \text{Esq303} + 0,04 (\pm 0,03) \text{Esq699} - 0,09 (\pm 0,04) \text{Esq652} \\ & - 0,07 (\pm 0,05) \text{Esq37} + 0,12 (\pm 0,06) \text{Esq831} - 0,11 (\pm 0,12) \text{Esq44} - 0,23 (\pm 0,08) \text{Esq752} + 0,22 (\pm 0,08) \text{Esq314} \\ & - 0,06 (\pm 0,04) \text{Esq524} - 0,04 (\pm 0,03) \text{Esq528} + 0,08 (\pm 0,06) \text{Esq134} - 0,02 (\pm 0,02) \text{Esq725} \end{aligned}$$

$$(R=0,98 ; R^2=0,95 ; R^2(\text{Adj})= 0,93 ; F=57,09 ; p = 0,00 ; R^2\text{-PLS-Cal} = 0,20; R^2\text{-PLS-valc} = - 0,18)$$

Figura 4.7.3.2 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.

Tabela 4.7.3.2 Tabelas dos valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer.

	Valores observados	Valores Previstos	Resíduo
ACANTHOSPERMUM	2.00000	0.27183	1.72817
ACHYRACHAENA	0.00000	-0.15570	0.15570
ACMELLA	0.00000	4.36521	-4.36521
ADENOTHAMNUS	0.00000	-0.06438	0.06438
AMAURIA	0.00000	-0.24764	0.24764
AMBLYOLEPIS	0.00000	-0.15570	0.15570
AMBROSIA	4.00000	3.74155	0.25845
ARGYROXIPHUM	0.00000	-0.15570	0.15570
ARNICA	1.00000	1.70300	-0.70300
ASPILIA	0.00000	0.77616	-0.77616
ATHROISMA	0.00000	0.39390	-0.39390
BAERIA	0.00000	-0.15570	0.15570
BAHIA	1.00000	2.60528	-1.60528
BAILEYA	0.00000	0.29642	-0.29642
BALDUINA	0.00000	-0.05882	0.05882
BALSAMORHIZA	0.00000	-0.76672	0.76672
BALTIMORA	0.00000	0.20473	-0.20473
BEBBIA	0.00000	0.11500	-0.11500
BERLANDIERA	0.00000	-0.15570	0.15570
BIDENS	2.00000	2.24061	-0.24061
BLAINVILLEA	0.00000	0.92881	-0.92881

4.7.4 Previsão da produção do esqueleto 1 a partir dos outros esqueletos em subtribos e gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy

A partir da matriz dos esqueletos das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy foi realizado a regressão linear múltipla usando a o esqueleto 1 (monoterpeno) com variável dependente e outros esqueletos (todas as classes químicas) como variáveis independentes. A equação 4.7.4.1 foi obtida. Os valores de R, R², F, p, R²-PLS-cal, R²-PLS-valc foram altos. Podemos concluir que foi possível prever o esqueleto 1 a partir dos esqueletos 23, 44 (monoterpenos); 171, 225, 234 (sesquiterpenos); 303 (sesquiterpenos lactonas); 480 (diterpeno) 525, 528 (triterpeno); 665 (flavonóide); 696 (poliacetileno) (Apendice D). O gráfico da figura 4.7.4.1 mostra a reta dos valores previstos versus observados em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy do esqueleto 1 (monoterpeno) versus todos os outros esqueletos (todas as classes). Esses valores são apresentados na tabela 4.7.4.1. Os dados mostram concordâncias com a biossíntese no nível das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy, uma vez que o esqueleto 1 é o precursor na biossíntese dos terpenóides, que os poliacetilenos e o anel A dos flavonóides vêm da rota do acetato.

Equação 4.7.4.1: Equação de regressão linear múltipla da variável dependente esqueleto 1(Monoterpeno) versus todos os outros esqueletos em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy

$$\begin{aligned} \text{Esq1} = & -0,001(\pm 0,001) - 0,048(\pm 0,001)\text{Esq225} + 0,924(\pm 0,001)\text{Esq303} + 0,424(\pm 0,000)\text{Esq525} \\ & - 0,114(\pm 0,000)\text{Esq171} + 0,289(\pm 0,000)\text{Esq44} + 0,137(\pm 0,000)\text{Esq665} + 0,069(\pm 0,000)\text{Esq480} \\ & - 0,177(\pm 0,001)\text{Esq528} + 0,010(\pm 0,000)\text{Esq696} + 0,125(\pm 0,001)\text{Esq234} - 0,010(\pm 0,000)\text{Esq23} \end{aligned}$$

$$(R=1,00 ; R^2=1,00 ; R^2(\text{Adj})= 1,00 ; F=205562E2 ; p = 0,00 ; R^2\text{-PLS-Cal} = 0,95; R^2\text{-PLS-valc} = 0,64)$$

Figura 4.7.4.1 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy

Tabela 4.7.4.1 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy

	Valores observados	Valores Previstos	Resíduo
AMB	26.00000	26.00001	-0.000006
BAH	8.00000	8.00034	-0.000337
COR	3.00000	2.99696	0.003045
ECL	8.00000	7.99979	0.000211
ENG	0.00000	0.00003	-0.000027
FIT	0.00000	0.00084	-0.000841
GAI	23.00000	22.99999	0.000010
GAL	5.00000	5.00047	-0.000467
HEL	16.00000	15.99995	0.000049
MAD	4.00000	4.00089	-0.000889
MEL	2.00000	2.00013	-0.000133
MIL	4.00000	4.00037	-0.000373
NEU	0.00000	-0.00082	0.000821
VER	6.00000	6.00022	-0.000223
ZIN	0.00000	0.00084	-0.000841

A partir da matriz com as ocorrências dos esqueletos dos gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy foi realizada a regressão linear múltipla usando o

esqueleto 1 (monoterpeno) com variável dependente e outros esqueletos (todas as classes químicas) como variáveis independentes. A equação 4.7.4.2 a equação obtida. Os valores de R, R², F e p foram altos mas os valores de R² da calibração (R²-PLS-cal) e da validação cruzada (R²-PLS-valc) foram ruins (isso quer dizer que os modelos não são robustos, por ter muitos valores de dados nulos (zero)). Apesar disso, podemos concluir que foi possível prever o esqueleto 1 a partir dos esqueletos, particularmente dos outros monoterpenos, sesquiterpenos, sesquiterpenos lactonas, diterpenos, triterpenos e das outras classes químicas. O gráfico da figura 4.7.4.2 mostra a reta dos valores previstos versus observados em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy do esqueleto 1 (monoterpeno) versus todos os outros esqueletos (todas as classes). Esses valores são apresentados na tabela 4.7.4.2. Os dados mostram concordâncias com a biossíntese no nível dos gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy, uma vez que o esqueleto 1 é o precursor na biossíntese dos terpenóides.

Equação 4.7.4.2: Equação de regressão linear múltipla da variável dependente esqueleto 1(Monoterpeno) versus todos os outros esqueletos em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy

$$\begin{aligned} \text{Esq1} = & -0,111(\pm 0,196) + 0,453(\pm 0,094)\text{Esq39} + 0,329(\pm 0,057)\text{Esq306} - 0,799(\pm 0,176)\text{Esq304} \\ & + 0,507(\pm 0,129)\text{Esq303} + 0,252(\pm 0,144)\text{Esq697} - 0,759(\pm 0,209)\text{Esq6} + 0,052(\pm 0,062)\text{Esq655} \\ & + 1,061(\pm 0,385)\text{Esq225} - 0,660(\pm 0,185)\text{Esq150} - 0,537(\pm 0,000)\text{Esq234} + 0,150(\pm 0,080)\text{Esq301} \\ & + 0,016(\pm 0,080)\text{Esq699} - 0,013(\pm 0,062)\text{Esq307} + 0,419(\pm 0,153)\text{Esq200} - 0,270(\pm 0,117)\text{Esq524} \\ & + 0,299(\pm 0,114)\text{Esq656} - 0,209(\pm 0,106)\text{Esq485} - 0,245(\pm 0,118)\text{Esq113} + 0,315(\pm 0,144)\text{Esq831} \\ & + 0,149(\pm 0,089)\text{Esq698} - 0,139(\pm 0,094)\text{Esq695} - 0,537(\pm 0,308)\text{Esq234} + 0,263(\pm 0,193)\text{Esq101} \end{aligned}$$

(R=0,84 ; R²=0,71 ; R²(Adj)= 0,64 ; F=10,77 ; p = 0,00 ; R²-PLS-Cal = 0,21; R²-PLS-valc = - 0,03)

Figura 4.7.4.2 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy

Tabela 4.7.4.2 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy

	Valores observados	Valores Previstos	Resíduo
ACANTHOSPERMUM	2.00000	1.88636	0.11364
ACHYRACHAENA	0.00000	-0.19655	0.19655
ADENOTHAMNUS	0.00000	0.32742	-0.32742
AMBLYOLEPIS	0.00000	-0.11056	0.11056
AMBROSIA	4.00000	3.72623	0.27377
ARGYROXIPHUM	0.00000	0.07336	-0.07336
ASPILIA	0.00000	0.07886	-0.07886
BAHIA	1.00000	0.05837	0.94163
BAILEYA	0.00000	1.12655	-1.12655
BALDUINA	0.00000	0.15453	-0.15453
BALSAMORHIZA	0.00000	0.26614	-0.26614
BALTIMORA	0.00000	-0.07208	0.07208
BEBBIA	0.00000	0.19191	-0.19191
BERLANDIERA	0.00000	-0.11056	0.11056
BIDENS	2.00000	1.71573	0.28427
BLAINVILLEA	0.00000	-0.05949	0.05949
BLEPHARIZONIA	0.00000	-0.11056	0.11056
BRASILIA	0.00000	-1.00748	1.00748
CALEA	0.00000	1.03372	-1.03372
CALYCADENIA	0.00000	-0.28253	0.28253
CHRYSANTHELLUM	0.00000	-1.15747	1.15747

4.7.5 Previsão da produção do esqueletos 1 a partir dos outros esqueletos nas subtribos e nos gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson

A partir da matriz contendo as ocorrências dos esqueletos das subtribos do tribo Heliantheae segundo Robinson foi realizada a regressão linear múltipla usando o esqueleto 1 (monoterpeno) com variável dependente e outros esqueletos (representantes de várias classes químicas) como variáveis independentes. A equação 4.7.5.1 foi obtida. Os valores de R, R², F, p, R²-PLS-cal, R²-PLS-valc foram altos. Podemos concluir que foi possível prever o esqueleto 1 a partir dos esqueletos 42 (monoterpeno); 304, 306, 319 (sesquiterpenos lactonas); 412, 456 (diterpenos). O gráfico da figura 4.7.5.1 mostra a reta dos valores previstos versus observados em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson do esqueleto 1 (monoterpeno) versus todos os outros esqueletos (todas as classes). E esses valores são apresentados na tabela 4.7.4.1. Os dados mostram concordâncias com a biossíntese no nível das subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson, uma vez que o esqueleto 1 é o precursor na biossíntese dos terpenóides.

Equação 4.7.5.1: Equação de regressão linear múltipla da variável dependente esqueleto 1(Monoterpeno) versus todos os outros esqueletos em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson

$$\text{Esq1} = 0,293(\pm 0,170) + 1,333(\pm 0,009)\text{Esq42} - 0,657(\pm 0,009)\text{Esq304} - 0,508(\pm 0,011)\text{Esq319} + 0,096(\pm 0,008)\text{Esq456} - 0,100(\pm 0,011)\text{Esq412} + 0,039(\pm 0,007)\text{Esq306}$$

$$(R=0,999 ; R^2=0,999 ; R^2(\text{Adj})= 0,998 ; F=3155,94 ; p = 0,00 ; R^2\text{-PLS-Cal} = 0,95; R^2\text{-PLS-valc} = 0,64)$$

Figura 4.7.5.1 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson

Equação 4.7.5.2: Equação de regressão linear múltipla da variável dependente esqueleto 1 (Monoterpeno) versus todos os outros esqueletos em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson

$$\begin{aligned} \text{Esq1} = & 0,09(\pm 0,11) + 0,51(\pm 0,07)\text{Esq207} - 0,44(\pm 0,09)\text{Esq234} + 0,42(\pm 0,06)\text{Esq39} + 0,19(\pm 0,04)\text{Esq134} \\ & - 0,35(\pm 0,05)\text{Esq133} - 0,45(\pm 0,09)\text{Esq44} + 0,15(\pm 0,10)\text{Esq128} - 0,14(\pm 0,06)\text{Esq212} - 0,28(\pm 0,05)\text{Esq304} \\ & + 0,06(\pm 0,04)\text{Esq521} + 0,18(\pm 0,04)\text{Esq139} - 0,10(\pm 0,01)\text{Esq480} + 0,16(\pm 0,02)\text{Esq412} + 0,003(\pm 0,044)\text{Esq6} \\ & + 0,07(\pm 0,02)\text{Esq322} + 0,05(\pm 0,03)\text{Esq478} - 0,06(\pm 0,02)\text{Esq250} + 0,09(\pm 0,03)\text{Esq432} - 0,04(\pm 0,02)\text{Esq319} \\ & + 0,35(\pm 0,08)\text{Esq153} - 0,12(\pm 0,04)\text{Esq150} + 0,10(\pm 0,05)\text{Esq200} - 0,03(\pm 0,05)\text{Esq524} - 0,05(\pm 0,01)\text{Esq456} \\ & + 0,06(\pm 0,03)\text{Esq525} + 0,09(\pm 0,03)\text{Esq203} + 0,15(\pm 0,04)\text{Esq15} + 0,04(\pm 0,02)\text{Esq311} - 0,16(\pm 0,06)\text{Esq797} \\ & + 0,05(\pm 0,02)\text{Esq37} - 0,06(\pm 0,05)\text{Esq751} - 0,02(\pm 0,01)\text{Esq528} + 0,04(\pm 0,04)\text{Esq719} + 0,07(\pm 0,04)\text{Esq314} \\ & - 0,24(\pm 0,10)\text{Esq225} - 0,07(\pm 0,03)\text{Esq171} + 0,09(\pm 0,05)\text{Esq196} + 0,20(\pm 0,09)\text{Esq42} + 0,19(\pm 0,09)\text{Esq101} \\ & - 0,06(\pm 0,04)\text{Esq656} - 0,07(\pm 0,06)\text{Esq696} - 0,02(\pm 0,02)\text{Esq458}. \end{aligned}$$

($R=0,994$; $R^2=0,989$; $R^2(\text{Adj})=0,984$; $F=213,87$; $p=0,00$; $R^2\text{-PLS-Cal}=0,22$; $R^2\text{-PLS-valc}=-0,38$)

Tabela 4.7.5.1 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson

	Valores observados	Valores Previstos	Resíduo
AMB	8.0000	8.0000	0.000000
BAE	0.0000	0.2928	-0.292793
CHA	3.0000	2.8062	0.193765
CLI	0.0000	0.2928	-0.292793
CLL	0.0000	0.2928	-0.292793
COR	3.0000	0.2928	2.707207
DES	0.0000	0.2928	-0.292793
ECL	16.0000	16.7818	-0.781828
ESP	0.0000	0.2928	-0.292793
FIT	0.0000	0.2928	-0.292793
FLA	0.0000	0.2928	-0.292793
GAI	0.0000	0.0000	0.000000
GAL	0.0000	0.2928	-0.292793
HEL	10.0000	8.7335	1.266541
HYM	0.0000	0.2928	-0.292793
JAU	0.0000	0.2928	-0.292793
MAD	0.0000	0.2928	-0.292793
MAR	0.0000	0.2928	-0.292793
MEL	6.0000	5.9770	0.022995
MIL	7.0000	7.0522	-0.052198
MON	4.0000	4.1084	-0.108450
NEU	0.0000	0.2928	-0.292793
PEC	106.0000	105.9778	0.022240
PER	1.0000	0.2928	0.707207
POL	0.0000	0.2928	-0.292793
RUD	1.0000	0.2928	0.707207
VAR	0.0000	0.2928	-0.292793
ZAL	0.0000	0.2928	-0.292793

A partir da matriz dos esqueletos dos gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson foi realizada a regressão linear múltipla usando a o esqueleto 1 (monoterpeno) com variável dependente e outros esqueletos (todas as classes químicas) como variáveis independentes. A equação 4.7.5.2 mostra a equação obtida. Os valores de R, R², F e p foram altos mas os valores de R² da calibração (R²-PLS-cal) e da validação cruzada (R²-PLS-valc) foram ruins (isso quer dizer que os modelos não são robustos, por ter muitos valores de dados nulos (zero)). Apesar disso podemos concluir que foi possível prever o esqueleto 1 a partir dos esqueletos, particularmente dos outros monoterpenos, sesquiterpenos, sesquiterpenos lactonas, diterpenos, triterpenos e das outras classes químicas. O gráfico da figura 4.7.5.2

mostra a reta dos valores previstos versus observados em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson do esqueleto 1 (monoterpeno) versus todos os outros esqueletos (todas as classes). E esses valores são apresentados na tabela 4.7.5.2. Os dados mostram concordâncias com a biossíntese no nível dos gêneros da tribo Heliantheae, uma vez que o esqueleto 1 é o precursor na biossíntese dos terpenóides.

Figura 4.7.5.2 Gráfico de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson

Tabela 4.7.5.2 Tabela de valores previstos e de valores observados das ocorrências do esqueleto 1 (monoterpeno) versus os outros esqueletos (todas as classes) em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson

	Valores observados	Valores Previstos	Resíduo
VILLANOVA	0.00000	0.09077	-0.09077
AMBROSIA	4.00000	4.08173	-0.08173
XANTHIUM	4.00000	4.17413	-0.17413
DICORIA	0.00000	-3.18260	3.18260
IVA	0.00000	-2.21078	2.21078
HYMENOCLEA	0.00000	-1.81997	1.81997
ERIOPHYLLUM	0.00000	-0.56862	0.56862
LASTHENIA	0.00000	0.09077	-0.09077
BAERIA	0.00000	0.09077	-0.09077
MONOLOPIA	0.00000	0.09077	-0.09077
ARNICA	1.00000	0.88819	0.11181
BAHIA	1.00000	1.16081	-0.16081
PALAFIXIA	1.00000	1.13258	-0.13258
FLORESTINA	0.00000	2.15821	-2.15821
HYMENOTHRIX	0.00000	-0.35262	0.35262
CHAENACTIS	0.00000	0.09077	-0.09077
VENEGASIA	0.00000	0.09077	-0.09077
PEUCEPHYLLUM	0.00000	0.09077	-0.09077
PICRADENIOPSIS	0.00000	0.34784	-0.34784
CLIBADIUM	0.00000	0.55385	-0.55385
RIENCOURTIA	0.00000	0.04843	-0.04843

4.8 Análise de componentes principais (PCA) das ocorrências e das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer e da tribo Heliantheae segundo Stuessy

Para continuar a procurar uma correlação entre os compostos químicos e a morfologia da planta foi feita uma análise de componentes principais (PCA) das tribos da família Asteraceae segundo Bremer (Bremer, 1996), das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy (Stuessy, 1977) a partir das ocorrências das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários.

4.8.1 Análise de componentes principais das ocorrências e das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários das tribos da família Asteraceae segundo Bremer

A partir da tabela 4.2.1.1 foi feita a análise de PCA dos dados normalizados (normalização pela área segundo formula: $\text{novox}_i = X_i / \sum_j X_{ij}$) das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer. Foi possível, a partir dos PC1/PC2, separar a tribo Barnadesieae (BAR) que aparece como uma tribo primitiva na classificação de Bremer. Também foi possível agrupar as tribos da subfamília Asteroideae e Cichorioideae. Somente as tribos Cardueae e Mutisieae não foram bem separadas. Na figura 4.8.1.1 são apresentados os resultados dessa análise.

Depois de retirar a tribo Barnadesieae considerada como “outlier” na família Asteraceae foi observada uma melhor separação das diferentes subfamílias. A figura 4.8.1.2 apresenta os PC1/PC2 das ocorrências das 12 classes em tribos da família Asteraceae sem a tribo Barnadesieae.

Este resultado corroborou com os obtidos precedentemente sobre a existência de uma correlação entre os dados químicos e morfológicos no nível das tribos da família Asteraceae.

Figura 4.8.1.1 PCA (PC1/PC2) dos dados normalizados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer

Figura 4.8.1.2 PCA (PC1/PC2) dos dados normalizados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em tribos (sem a tribo Barnadesieae) da família Asteraceae segundo Bremer

A partir da tabela 4.3.1.1 foi feito o PCA das médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer. Foi possível ,a partir dos PC1/PC2, agrupar 8 das 10 tribos da subfamília Asteroideae e 3 tribos da subfamília Cichorioideae. As tribos Barnadesieae e Mutisieae que são as mais primitivas, segundo a classificação de Bremer, se encontram próximas. Na figura 4.8.1.3 são apresentados os resultados de essa análise.

Com este resultado, podemos dizer que os passos oxidativos são um bom parâmetro para correlacionar a química e a morfologia no nível das tribos.

Figura 4.8.1.3 PCA (PC1/PC2) das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer

4.8.2 Análise de componentes principais das ocorrências 5 classes de terpenóides das tribos da família Asteraceae segundo Bremer

A partir da tabela 4.2.1.1 das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários da família Asteraceae, usando somente as ocorrências das 5 classes de terpenóides foi feita a análise dos componentes principais (PCA) foi também possível separar a tribo Barnadesieae (como "outlier"), as tribos da subfamília

Cichorioideae e Asteroideae.(figura 4.8.2.1). Depois de tirar a tribo Barnadesieae foi possível reagrupar as duas subfamílias (figura 4.8.2.2). As 5 classes de terpenóides são um bom parâmetro para separar as tribos de Asteraceae.

Figura 4.8.2.1 PCA (PC1/PC2) dos dados normalizados das ocorrências das 5 classes de terpenóides em tribos da família Asteraceae segundo Bremer

Figura 4.8.2.2 PCA (PC1/PC2) dos dados normalizados das ocorrências das 5 classes de terpenóides em tribos (sem a tribo Barnadesieae) da família Asteraceae segundo Bremer

4.8.3 Análise de componentes principais das ocorrências e das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy

A partir da tabela 4.2.4.1 foi feita a análise de PCA dos dados normalizados (normalização pela área segundo formula $\text{novox}_i = X_i / \sum_j X_{ij}$) das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy. Foi possível, a partir dos PC1/PC2 agrupar as tribos Ecliptinae (ECL), Verbesininae (VER), Helianthinae (HEL), Melampodiinae (MEL) num bloco e Gaillardinae e Zinniinae num outro bloco do ramo A. Também agrupar 3 tribos do ramo C, seja Bahiinae, Neurolaeninae e Ambrosiinae. E a tribo Coreopsidinae do ramo B, que apresenta somente 2 subtribo, foi observada com um “outlier”.

Figura 4.8.3.1 PCA (PC1/PC2) dos dados normalizados das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy

Usando a tabela 4.3.4.1 das médias dos passos oxidativos das subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy, foi feita uma análise dos componentes principais. Observa-se o agrupamento de 3 subtribos do ramo C (Madiinae (MAD), Ambrosiinae (AMB), Galinsoginae (GAL)), 2 subtribos do ramo A (Gaillardinae (GAI),

Zinniinae (ZIN)) e a subtribo Fitchiinae do ramo B aparece com um “outlier”. (figura 4.8.3.2)

Figura 4.8.3.2 PCA (PC1/PC2) das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy

E depois de retirar as subtribos Fitchiinae (FIT) e Neurolaeninae (NEU) foram agrupados 6 subtribos do ramo C, 5 tribos do ramo A. (figura 4.8.3.3)

Figura 4.8.3.3 PCA (PC1/PC2) das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos (sem as subtribos Fitchiinae (FIT) e Neurolaeninae (NEU)) da tribo Heliantheae segundo Stuessy

4.9 Análise de cluster (AC) das ocorrências e das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae e das subtribos da sua tribo Heliantheae segundo Stuessy

Depois de ter feito as análises de PCA, foi usado um outro método de agrupamento (análise de Cluster) para tentar agrupar as tribos da família Asteraceae segundo Bremer e as subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy usando os dados das ocorrências e das médias dos passos oxidativos.

4.9.1 Análise de cluster (AC) das ocorrências e das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer.

A partir dos dados da tabela 4.2.1.1 das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários foi feita a análise de Cluster usando o método de ligação completa com a distância euclidiana. Sendo os dados pegos da literatura foi calculado a entropia de Shannon para ver se existe uma boa variabilidade. Observamos valores entre 1,19 e 2,90 (tabela 4.5.1.2) que indicam que os dados são adequados para o método usado. Foi possível agrupar 2 tribos da subfamília Cichorioideae e 6 tribos da subfamília Asteroideae (figura 4.9.1.1).

Usando o método de Ward (Ward & Hook, 1961) com a distância Euclidiana foi encontrado um melhor agrupamento das subfamílias, 6 tribos e 2 tribos da subfamília Asteroideae foram agrupadas e as 4 tribos de Cichorioideae foram agrupadas. As tribos Barnadesieae (BAR) e Mutisieae (MUT) que são consideradas primitivas na classificação de Bremer foram encontradas próximas.

O método de Ward nos permite ter um melhor agrupamento. Como concluído antes, os compostos químicos e os dados morfológicos correlacionam.

Figura 4.9.1.1 Dendrograma mostrando agrupamento das 17 tribos de família Asteraceae segundo Bremer, (ligação completa, distâncias euclidianas) baseado nos números de ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários

Figura 4.9.1.2 Dendrograma mostrando agrupamento das 17 tribos de família Asteraceae segundo Bremer, (método de Ward, distâncias euclidianas) baseado nos números de ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários

A partir das médias dos passos oxidativos da tabela 4.3.1.1 foi feita a análise de Cluster das 12 classes de metabólitos secundários em tribos da família Asteraceae segundo Bremer. Usando o método completo com distância euclidiana foi possível agrupar 8 tribos (Anthemideae (ANT), Heliantheae (HLT), Calenduleae (CAL), Astereae (AST), Helenieae (HLN), Plucheeae (PLU), Inuleae (INU), Gnaphalieae (GNA)) da subfamília Asteroideae e 4 subtribos da subfamília Cichorioideae em 2 blocos de 2 tribos (Arctoteae (ARC) e Vernonieae (VER), Liabeae (LIA) e Lactuceae (LAC) (figura 4.9.1.3)

Também usando o método de Ward com distancia euclidiana foi possível encontrar o mesmo agrupamento (figura 4.9.1.4).

Figura 4.9.1.3 Dendrograma mostrando agrupamento das 17 tribos de família Asteraceae segundo Bremer, (ligação completa, distâncias euclidianas) baseado na médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários

Figura 4.9.1.4 Dendrograma mostrando agrupamento das 17 tribos de família Asteraceae segundo Bremer, (método de Ward, distâncias euclidianas) baseado na médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários

4.9.2 Análise de cluster (AC) das ocorrências das 5 classes de terpenóides em tribos da família Asteraceae segundo Bremer

A partir dos dados da tabela 4.2.1.1 usando somente as ocorrências das 5 classes de terpenóides foi feita a análise de Cluster usando o método de ligação de Ward com a distância euclidiana. Sendo os dados pegos da literatura foi calculada a entropia de Shannon para ver se existe uma boa variabilidade. Observamos valores entre 1,30 e 2,83 (tabela 4.5.1.2) que indicam que os dados são adequados para o método usado. Assim, foi possível agrupar as 4 tribos da subfamília Cichorioideae e as 9 tribos da subfamília Asteroideae em 2 blocos de 7 e 2 tribos (figura 4.9.1.1).

Depois de ter normalizado os dados de terpenóides foi possível as 10 tribos da subfamília Asteroideae, as 4 tribos de Cichorioideae. A tribo Barnadesieae (BAR) primitiva na classificação de Bremer foi isolada num clado e as tribos Mutisieae (MUT) e Cardueae (CAR) vizinhas foram agrupadas. (figura 4.9.1.2)

Figura 4.9.2.1 Dendrograma mostrando agrupamento das 17 tribos de família Asteraceae segundo Bremer, (método de Ward, distâncias euclidianas) baseado nos números das ocorrências das 5 classes de terpenóides

Figura 4.9.2.2 Dendrograma mostrando agrupamento das 17 tribos de família Asteraceae segundo Bremer, (método de Ward, distâncias euclidianas) baseado na porcentagem das ocorrências das 5 classes de terpenóides.

4.9.3 Análise de cluster (AC) das ocorrências e das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy

A partir dos dados da tabela 4.2.4.1 das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae foi feita uma análise de Cluster. Como os dados são pegos da literatura foi calculado a entropia de Shannon (ES) para ver se existe uma boa variabilidade, observamos valores entre 0,95 e 2,35 (tabela 4.5.4.2) que indicam que os dados são adequados para o método usado. Somente os dados dos benzofuranos não são apropriados pela análise sendo o valor da entropia de Shannon nula.

Na AC usando o método de ligação completa com a distância euclidiana foi possível agrupar 4 subtribos (Ecliptinae (ECL), Melampodiinae (MEL), Verbesininae (VER), Zinninae (ZIN)) do ramo A e 3 subtribos (Engelmanniinae (ENG), Galinsoginae (GAL), Madiinae (MAD)) do ramo C.(figura 4.9.3.1).

Figura 4.9.3.1 Dendrograma mostrando agrupamento das 15 subtribos de Heliantheae segundo Stuessy ,(ligação completa, distâncias euclidianas) baseado nos números das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários

Na análise de Cluster (AC) usando o método de Ward com a distância euclidiana foi possível agrupar as 5 subtribos (Gaillardinae (GAI), Helianthinae (HEL), Ecliptinae (ECL), Melampodiinae (MEL), Verbesininae (VER)) do ramo A, as 2 subtribos (Fitchiinae (FIT), Coreopsidinae (COR)) do ramo B e 3 subtribos (Madiinae (MAD), Galinsoginae (GAL), Neurolaeninae (NEU)) e 2 subtribos (Bahiainae (BAH), Ambrosiinae (AMB)) do ramo C. (figura 4.9.3.2)

Figura 4.9.3.2 Dendrograma mostrando agrupamento das 15 subtribos de Heliantheae segundo Stuessy, (método de ward, distâncias euclidianas) baseado nos números das ocorrências das 12 classes de metabólitos secundários

A partir da tabela 4.3.4.1 das médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy foi feita uma análise de cluster.

Usando o método de ligação completa com a distância euclidiana foi possível agrupar 4 subtribos (Verbesininae (VER), Ecliptinae (ECL), Helianthinae (HEL), Melampodiinae (MEL)) do ramo A, 2 blocos de 3 subtribos (Ambrosiinae (AMB), Madiinae (MAD), Bahiinae (BAH)), (Galinsoginae (GAL), Engelmanniinae (ENG), Neurolaeninae (NEU)) do ramo C. (figura 4.9.3.3).

Figura 4.9.3.3 Dendrograma mostrando agrupamento das 15 subtribos de Heliantheae segundo Stuessy, (ligação completa, distâncias euclidianas) baseado nas médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários

Usando o método de Ward com a distância euclidiana foi possível agrupar 5 subtribos (Verbesininae (VER), Ecliptinae (ECL), Helianthinae (HEL), Melampodiinae (MEL), Gaillardinae (GAI)) do ramo A, 2 blocos de 4 e 2 subtribos, (Madiinae (MAD), Ambrosiinae (AMB)), (Madiinae (MAD), Bahiinae (BAH)), Galinsoginae (GAL), Engelmanniinae (ENG), Neurolaeninae (NEU)) do ramo C. (figura 4.9.3.4)

Figura 4.9.3.4 Dendrograma mostrando agrupamento das 15 subtribos de Heliantheae segundo Stuessy, (método de ward, distâncias euclidianas) baseado nas médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários

4.10 Análise cladística a partir da presença ou ausência dos esqueletos das classes de metabólitos secundários na tribo Heliantheae segundo Stuessy

A partir dos dados das ocorrências dos esqueletos dos metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy foi feita uma nova matriz de dados, onde foram anotadas a ausência (valor 0) ou presença (valor 1). Com essa nova matriz foi feita uma análise filogenética (Amorim, 1994) segundo o método de distância (figura 4.10.1). Foi possível agrupar 4 subtribos (Verbesininae (VER), Ecliptinae (ECL), Helianthinae (HEL), Melampodiinae (MEL)) do ramo A da classificação de Stuessy como sendo monofilético, quer dizer, derivados de um mesmo ancestral comum. A desarmonia nos outros ramos pode ser explicado pelo fato de que a presença

ou a ausência de um esqueleto não representa a realidade porque a quantidade dos esqueletos variam de uma subtribo para outra.

Mas, usando uma análise filogenética pelo método de parcimônia feita com uma busca heurística, usando a subtribo Alomieae da tribo Eupatorieae vizinha a Heliantheae, nenhuma resolução foi encontrada (figura 4.10.2). Observamos uma politomia total.

Com isso, podemos concluir que a presença ou ausência de compostos químicos não é um bom parâmetro para estudar a história evolutiva das subtribos da tribo Heliantheae.

Figura 4.10.1 Diagrama filogenética das subtribos de Heliantheae segundo Stuessy, a partir da presença ou ausência dos esqueletos de metabólitos secundários usando o método de distância

Figura 4.10.2 Diagrama filogenética da árvore de consenso das subtribos de Heliantheae segundo Stuessy, a partir da presença ou ausência dos esqueletos de metabólitos secundários usando o método de parcimônia pela busca heurística tendo como grupo externo a subtribo Alomieae (ALO) da tribo Eupatorieae.

5 CONCLUSÕES

A abordagem quimiossistemática mostrada aqui nos permite concluir que, para o entendimento das relações evolutivas entre os grupos da Família, é necessário o uso de metabólitos secundários, macromoléculas e dados morfológicos. As ferramentas estatísticas como regressão linear de dados brutos pelo método passo a passo adiante (“stepwise”), regressão por mínimos quadrados parciais (PLS), análise do componente principal (PCA); a análise de cluster e a análise cladística são complementares e devem ser usadas conjuntamente. Parâmetros quimiossistemáticos clássicos como o grau de oxidação (que nós permitiu calcular o passo oxidativo usado aqui) podem ser bons dependendo do nível hierárquico que estamos analisando.

Foi possível, a partir das regressões lineares múltiplas e dos mínimos quadrados parciais, mostrar a existência de um balanço na produção das 12 classes de metabólitos no nível das tribos da família Asteraceae, usando vários agrupamentos diferentes: a) a classificação de Bremer para a família; b) a classificação da família com base em macromoléculas denominada de “metatree”; c) no nível das subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer; d) na tribo Heliantheae segundo Stuessy; e e) na tribo Heliantheae segundo Robinson. Mas no nível dos gêneros apenas um equilíbrio moderado foi encontrado.

Foi possível mostrar a existência de um balanço oxidativo em vários níveis: a) nas tribos da família Asteraceae segundo Bremer; b) na “metatree”; c) nas subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer; d) na tribo Heliantheae segundo Stuessy; e e) na tribo Heliantheae segundo Robinson. Mas no

nível dos gêneros nenhum balanço foi estabelecido porque a média dos parâmetros oxidativos não funciona bem em níveis hierárquicos baixos.

Foi possível prever a produção do esqueleto 1 dos monoterpenos *versus* todos os esqueletos, e pudemos observar que nos diferentes níveis ele depende principalmente dos terpenóides.

Foi possível agrupar algumas famílias das subfamílias de Asteraceae segundo Bremer usando análise do componente principal (PCA), análise de Cluster (AC) a partir dos dados das ocorrências e das médias das oxidações.

Foi possível agrupar algumas subtribos dos ramos da classificação de Stuessy usando análise do componente principal (PCA), análise de Cluster (AC) a partir dos dados das ocorrências e das médias das oxidações.

Nas tribos da família Asteraceae não existem grandes divergências entre o quimismo e as classificações de Bremer e a classificação denominada “metatree”.

Os dados das ocorrências das várias classes químicas também fornecem apoio às classificações de Robinson, depois de Bremer e enfim de Stuessy no nível das subtribos e gêneros de Heliantheae.

A classificação das ocorrências dos dados químicos em duas faixas, presença e ausência, não se mostrou um bom parâmetro para a análise cladística. Tal fato pode ser explicado pela grande diferença entre as ocorrências nos diversos taxa, já que, um táxon que tenha 1 ocorrência de um determinado metabólito e outro que tenha 100 ocorrências serão ambos classificados como presente.

6. REFERÊNCIAS

- Amorim, D.S.. Elementos básicos de sistemática filogenética. Sociedade Brasileira de Entomologia, São Paulo, Brasil.1994
- Bentham G. Notes on the classification, history, and geographical distribution of the Compositae. *Journal of the Linnean Society, Botany*. 1873;13:335-557.
- Bohm B. A, Stuessy TF. Flavonoids of the sunflower family. New York: Springer-Wien; 2001.
- Brant, A; J; C. Flavonóides, Cumarinas e Benzofuranos como marcadores quimiotaxonômicos em Asteraceae. São Paulo, Dissertação de Mestrado – Instituto de Química – Universidade de São Paulo. 2003. 169p.
- Bremer K Major clades and grades of the Asteraceae. In Compositae: Systematics In Hind DJN, Beentje H, editors. Compositae: Systematics. Proceedings of the International Compositae Conference. Vol.1. Kew: Royal Botanic Garden;1996 p.1-7.
- Bremer K. Tribal interrelationships of the Asteraceae. *Cladistics*. 1987;3:210-53.
- Bremer K, Jansen RK, Karis PO, Kallersjo M, Keeley SC, Kim KJ, Michaels HJ, Palmer JD, Wallace RS. A review of the phylogeny and classification of Asteraceae. *Nordical Journal of Botany*. 1992;12:141-8.
- Bremer, K. Asteraceae Cladistics and Classification. Timber Press. 1994
- Calabria M.L., Emerenciano V.P. Ferreira, MJP. Scotti, MT. Mabry, TJ. Phylogenetic analysis of tribes of the Asteraceae based on phytochemical data. *Natural Products Communications, Estados Unidos*. 2007; 2 (3): 277-85.
- Cassini H. Tableau exprimant les affinités des tribus naturelles de famille des Synanthérées. In Cloquet MH, editor. *Dictionnaire des Sciences Naturelles*, vol.3. 2nd. Le Normant (Paris): Ed. G. Cuvier; 1816.
- Cassini, H. *Journal de Physique, de Chimie, d'Histoire Naturelle et des Arts*. 1819. 88,189.
- Carlquist S. Tribal interrelationships and pyhlogeny of the Asteraceae. *Aliso* 1976; 8: 465-492.
- Cronquist A. Phylogeny and taxonomy of the Compositae. *American Midland Naturalist* 1955; 53: p.488–511.
- Cronquist A. The evolution and classification of flowering plants. 2º ed. Portland (Oregon): New York Botanical Garden Press; 1988. p.1-555.
- Cronquist A. The Compositae revisited. *Brittonia* 1997; 29:p137–153.
- Disch A, Schwender J, Muller C, Lichtenthaler HK, Rohmer M. (1998) Distribution of the mevalonate and glyceraldehyde phosphate/pyruvate pathways for isoprenoid

biosynthesis in unicellular algae and the cyanobacterium *Synechocystis* PCC 6714. *Biochemical Journal*. 1998. 333(2), 381-388.

Dewick, PM. *Medicinal natural products: a biosynthetic approach*. 2nd ed. John Wiley & Sons, Ltd. 2002.

Emerenciano VP, Kaplan MAC, Gottlieb OR. The evolution of sesquiterpene lactones in angiosperms. *Biochemical Systematics and Ecology* 1985; 3: 145-166.

Emerenciano VP, Kaplan MAC., Gottlieb OR, Bonfanti MRM, Ferreira ZSE, Comegno LM. *Biochemical Systematics Ecology*.1986.14, 585.

Emerenciano VP, Ferreira ZS, Kaplan MAC, Gottlieb OR. A chemosystematic analysis of tribes of Asteraceae involving sesquiterpene lactones and flavonoids. *Phytochemistry* 1987; 26: 3103-3115.

Emerenciano VP, Ferreira MJP, Branco MD, Dubois JE. The applications of Bayes theorem in natural products as a guide for skeletons identifications. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 1998a; 4: 83-92.

Emerenciano VP, Rodrigues GV, S. Alvarenga SAV, Macari PAT, Kaplan MAC. Um método para união de vários marcadores quimiotaxonômicos. *Química Nova* 1998b; 21: 125-129.

Felsenstein J. - PHILIP - Phylogeny Inference Package version. 1991

Ferreira ZS, Gottlieb OR. Polyacetylenes as systematic markers in dicotyledons. *Biochemical Systematics and Ecology* 1982: 10: 155-160.

Funk VA, Bayer RJ, Keeley S, Chan R, Watson L, Gemeinholzer B, Schilling E, Panero JL, Baldwin BG, Garcia-Jacas N, Susanna A, Jansen RK. Everywhere but Antarctica: using a supertree to understand the diversity and distribution of the Compositae. *Biologische Skrifter*. 2005; 55: 343–74.

Funk VA, Susanna A, Stuessy T, Bayer R. *Systematics Evolution and Biogeography of the Compositae*, Washington: IAPT; 2009.

Geissman TA, Crout D.H.G. *Organic Chemistry of Secondary Plant Metabolism*. San Francisco: Freeman Cooper & Company; 1969

Gelaldi P, Kowalski, BR. Partial Least-squares regression: a tutorial. *Anal. Chim. Acta*. 1986. 185, 1-17.

Gertaxo: Rodrigues GDV, Software não publicado, UFMG. 2005

Godden JW, Bajorath J. Differential Shannon Entropy as a Sensitive Measure of Differences in Database Variability of Molecular Descriptors. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 2001. 1060-1066

Goldstein JL, Brown MS. Regulation of the mevalonate pathway. *Nature*. 1990;343(6257):425-30.

Gottlieb OR. *Micromolecular Evolution Systematics and Ecology*, springer- verlag, Berlim;1982.

Gottlieb OR. The role of oxygen in phytochemical evolution towards diversity. *Phytochemistry*. 1989;28:2545-2558.

Gottlieb OR, Kaplan MAC, Borin, MRMB. *Biodiversidade: um enfoque químicobiológico*. Rio de Janeiro: Editora da UFRJ; 1996.

Harborne JB, Mabry TJ, Mabry H. *The flavonoids*. London: Champman & Hall; 1975.

Hahlbrock, K. *Flavonoids In the Biochemistry of Plants*. Academic Press, Inc. 1981. 7, 425-456

Harborne JB. *Ecological Biochemistry*. 3rd. London: Academic Press; 1988.

Hendrickson JB, Cram DJ, Hammond GS. *Organic Chemistry*. 3º ed. New York: Ed. McGraw-Hill; 1970; 1-1280.

Herman, P.P.J., Retief, E., Koekemoer, M&Welma, W.G. *Asteraceae (Compositae)*. In *seed Plants of Southern Africa*. Ed O.A. Leistner. *Strelitzia*. 2000; 10: 101-170.

Heywood VH, Harborne JB, Turner BL. *The Biology and Chemistry of the Compositae, Vols I and II* New York: Academic Press; 1977.

Hind DJN, Beentje HJ. *Compositae: Systematics*. *Proceedings of the International Compositae Conference*. Vol.1,2, Kew: Royal Botanic Gardens;1994.

Hoffman O. *Compositae*. In : Engler A, Prantl K, editors. *Die Natiirlichen Pflanzenfamilien* . Vol . 4 Leipzig: Engelmann; 1890. p. 87–381.

Jansen, R. Kin e Palmer *Proc. Natl. Acad. Sci USA*. 1987. 84, 5818

Jansen, R. K e Palmer *Amer. J. Bot*. 1988. 74, 753

Jansen RK, Kim K. Implications of chloroplast DNA data for the classification and phylogeny of the Asteraceae. In Hind DJN, Beentje H, editors. *Compositae Systematics. Proceedings of the International Compositae Conference*. Vol. 1. Kew: Royal Botanic Garden; 1996 p.317-339.

Karis, P.O. , Kallersjo, M. e Bremer, K. *Ann. Missouri Bot. Gard*. 1992 79, 416

Lange BM, Croteau R. Isopentenyl diphosphate biosynthesis via a mevalonateindependent pathway: Isopentenyl monophosphate kinase catalyzes the terminal enzymatic step. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. 1999; 96(24):13714-9.

Lichtenthaler, HK. The 1-deoxy-D-xylulose-5-phosphate pathway of isoprenoid biosynthesis in plants. *Annual Review of Plant Physiology and Plant Molecular Biology*. 1999. 50, 47-65.

Macari PAT, Gastmans JP, Rodriguez GV, Emerenciano VP. An expert system for structure elucidation of triterpenes. *Spectroscopy-An International Journal*. 1994;12:139-66.

Maddison, WP. Maddison DR. MacClade 3.0 - Analysis of phylogeny and Character Evolution - Sinauer Associates, Inc. Publishers, Sunderland, MA, USA. 1992.

Maddison W. e Maddison D. Mesquite version 2.6 (build 486), copyright (c) 1997-2009,

Mann J., Davidson S., Hobbs J., Banthorpe D., Harborne J. Natural Products – Their Chemistry and Biological Significance, Prentice Hall: 1994. p.455

Massart D.L., Vandeginste B.G.M, Deming S.N., Michotte Y. and Kaufman L. Chemometrics: a textbook. Elsevier, New York, 1988.

Murray RDH. The natural coumarins. Occurrence, chemistry and biochemistry. New York: John Wiley & Sons, 1982.

Prosch P, Rodriguez E. Chromenes and benzofuranes of the Asteraceae, their chemistry and biological significance. *Phytochemistry*. 1983;22:2335-48.

Raven, Peter H; Evert, Ray F; Eichhorn, Susan E; Costa, Ana Paula Pimentel. *Biologia vegetal*, 6^a Ed. Editora Guanabara Koogan. Rio de Janeiro, Brasil. 2001, p.906

Robinson HA. revision of the tribal and subtribal limits of Heliantheae (Asteraceae). *Smithsonian Contributions to Botany* 1981; 51: 1-102.

Rohmer M, Knani M, Simonin P, Sutter B, Sahm H. 1993. Isoprenoid biosynthesis in bacteria: A novel pathway for the early steps leading to isopentenyl diphosphate. *Biochemical Journal*, 1993, 295, 517-524

Schilling, EE, Panero JL. *Botanical Journal of the Linnean Society*, 2002, 140, 65-76.

Seaman FC. Sesquiterpene lactones as taxonomic characters in the Asteraceae. *Botanical Review*. 1982;48:123–551

Seaman F, Bohlmann F, Zdero C, Mabry TJ. Diterpenes of flowering plants – Compositae (Asteraceae). New York: Springer-Verlag; 1990.

Stuessy TF. Heliantheae – systematic review. In: Harborne JB, Turner BL, editors. *The biology and chemistry of the Compositae*. vol. 2 London: Academic Press; 1977.

Swofford, DL. PAUP*. Phylogenetic Analysis Using Parsimony. Version 4. Sinauer Associates, Sunderland, Massachusetts. 1998.

Topcu, G.; Ulubelen, A. Structure elucidation of organic compounds from natural sources using 1D and 2D NMR techniques. *Journal of Molecular Structure* 2007, 834-836 57-73.

Wagenitz G. Systematics and phylogeny of the Compositae (Asteraceae). *Plant Systematics and Evolution*. 1976;125:29-46.

Wold S., Esbensen K, Geladi P. Principal component analysis. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 1987;2(1-3):37-52

Ward JH, Hook ME. A hierarchical grouping procedure applied to a problem of grouping profiles. Personnel laboratory, Aeronautical Systems Division. Texas. 1961.

Zdero C, Bohlmann F. Systematics and evolution within the Compositae, seen with the eyes of a chemist. *Plant Systematics Evolution*. 1990.171.1-14.

APÊNDICES

Apêndice A: Matrizes das dados das ocorrências e porcentagem das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer, da tribo Heliantheae segundo Stuessy e Robinson.

Tabela 4.2.3.3 Matriz de dados das ocorrências das 12 classes de metabolitos secundários em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer,

GEN	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
ACHYRACHAENA	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0
ADENOTHAMNUS	0	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0
AMAURIA	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0
AMBLYOLEPIS	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
ARGYROXIPHIMUM	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0
ASPILIA	0	6	0	86	0	0	1	8	0	0	0	0
ATHROISMA	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BAERIA	0	0	0	0	0	0	0	17	0	0	0	0
BAILEYA	0	0	17	0	0	0	0	3	0	0	0	0
BALDUINA	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BALSAMORHIZA	0	0	10	3	8	0	37	1	0	0	0	0
BALTIMORA	0	0	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BEBBIA	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0
BERLANDIERA	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BLEPHARISPERMUM	0	0	0	12	0	0	0	0	0	5	0	0
BLEPHARIZONIA	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	0
CALYCADENIA	0	0	0	0	0	0	5	4	0	0	0	0
CHAENACTIS	0	0	10	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CHRYSANTHELLUM	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
COREOCARPUS	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
COSMOS	1	0	3	0	11	0	8	23	0	0	0	10
DAHLIA	0	0	0	0	0	1	17	167	0	0	0	0
DELILIA	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0
DESMANTHODIUM	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
DICORIA	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DUGALDIA	2	0	4	0	0	0	1	2	0	0	0	0
DUGESIA	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DYSSODIA	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ELVIRA	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
ENCELIA	0	0	8	0	1	0	0	2	78	42	0	0
ENCELIOPSIS	0	0	0	0	0	0	0	0	37	0	0	0
ENGELMANNIA	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
ENYDRA	0	0	9	5	0	0	0	0	0	0	0	0
ESPELETIA	0	8	0	53	1	0	0	1	0	0	0	0
ESPELETIOPSIS	0	4	0	60	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabela 4.2.3.3 continuação

FITCHIA	0	7	7	0	0	0	0	3	2	0	0	2
FLAVERIA	0	0	0	0	0	0	16	3	0	0	0	0
GALEANA	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
GALINSOGA	0	0	0	0	0	0	0	9	0	0	0	0
GERAEA	0	1	0	0	0	0	9	0	10	0	0	0
GLOSSOCARDIA	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0
GUIZOTIA	1	1	0	1	0	0	0	12	0	0	0	0
HELIANTHELLA	0	0	0	0	0	0	0	4	8	9	2	0
HELIANTHOPSIS	0	2	0	10	0	0	0	0	4	1	0	0
HELIOPSIS	0	0	15	1	0	0	0	17	0	0	0	0
HEMIZONIA	5	1	0	10	0	0	213	7	2	8	0	0
HETEROSPERMA	0	0	0	0	0	0	0	7	0	0	0	0
HOLOCARPHA	0	0	0	0	0	0	28	0	0	0	0	0
HYMENOPAPPUS	3	0	8	1	2	0	0	1	0	0	0	0
HYMENOTHRIX	1	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0
IOSTEPHANE	0	0	0	13	0	0	16	0	0	1	0	0
ISOSTIGMA	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
JAEGERIA	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
JAUMEA	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
KINGIANTHUS	0	5	3	1	4	0	0	0	0	0	0	0
LAGASCEA	0	0	0	3	0	0	0	4	0	8	0	0
LASIANTHAEA	0	0	0	14	0	0	0	0	0	0	0	0
LASTHENIA	0	0	0	0	0	2	40	1	2	0	0	0
LECOCARPUS	0	0	18	0	0	0	2	0	0	0	0	0
LIBANOTHAMNUS	0	2	0	28	0	0	0	0	0	0	0	0
LINDHEIMERA	0	0	0	5	2	0	0	2	0	0	0	0
LOXOTHYSANUS	0	2	12	2	0	0	0	0	0	0	0	0
MADIA	0	0	0	18	0	0	45	6	1	5	0	0
MELANTHERA	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
MILLERIA	0	0	18	8	1	0	0	3	0	0	0	0
MONACTIS	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
MONOLOPIA	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
NARVALINA	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	7
OYEDAEA	0	3	6	40	0	0	0	2	1	0	0	0
PALAFOXIA	1	1	0	49	0	0	0	0	0	0	0	0
PARTHENICE	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PERICOME	0	0	0	0	0	0	14	0	0	0	0	0
PERYMENIOPSIS	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0
PERYMENIUM	0	3	5	22	1	0	0	2	0	0	0	0
PEUCEPHYLLUM	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PHOEBANTHUS	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0
PLUMMERA	0	0	0	0	0	0	8	0	0	0	0	2
PODACHAENIUM	0	4	10	1	0	0	0	5	1	0	0	0
PODANTHUS	0	0	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0
POLYMNIA	0	0	2	18	0	0	2	10	1	0	2	0

Tabela 4.2.3.4 continuação

BAERIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3,69	0,00	0,00	0,00	0,00
BAILEYA	0,00	0,00	4,66	0,00	0,00	0,00	0,00	0,65	0,00	0,00	0,00	0,00
BALDUINA	0,00	0,00	1,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
BALSAMORHIZA	0,00	0,00	2,74	0,42	21,05	0,00	6,67	0,22	0,00	0,00	0,00	0,00
BALTIMORA	0,00	0,00	1,37	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
BEBBIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,65	0,00	0,00	0,00	0,00
BERLANDIERA	0,00	0,00	0,55	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
BLEPHARISPERMUM	0,00	0,00	0,00	1,68	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	6,25	0,00	0,00
BLEPHARIZONIA	0,00	0,00	0,00	0,84	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CALYCADENIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,90	0,87	0,00	0,00	0,00	0,00
CHAENACTIS	0,00	0,00	2,74	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CHRYSANTHELLUM	0,00	0,00	0,00	0,00	2,63	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
COREOCARPUS	0,00	2,02	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
COSMOS	2,17	0,00	0,82	0,00	28,95	0,00	1,44	4,99	0,00	0,00	0,00	33,33
DAHLIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	20,00	3,06	36,23	0,00	0,00	0,00	0,00
DELILIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,65	0,00	0,00	0,00	0,00
DESMANTHODIUM	0,00	0,00	0,00	0,14	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
DICORIA	4,35	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
DUGALDIA	4,35	0,00	1,10	0,00	0,00	0,00	0,18	0,43	0,00	0,00	0,00	0,00
DUGESIA	0,00	0,00	0,27	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
DYSSODIA	2,17	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
ELVIRA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,43	0,00	0,00	0,00	0,00
ENCELIA	0,00	0,00	2,19	0,00	2,63	0,00	0,00	0,43	53,06	52,50	0,00	0,00
ENCELIOPSIS	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	25,17	0,00	0,00	0,00
ENGELMANNIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,22	0,00	0,00	0,00	0,00
ENYDRA	0,00	0,00	2,47	0,70	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
ESPELETIA	0,00	8,08	0,00	7,42	2,63	0,00	0,00	0,22	0,00	0,00	0,00	0,00
ESPELETIOPSIS	0,00	4,04	0,00	8,40	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
FITCHIA	0,00	7,07	1,92	0,00	0,00	0,00	0,00	0,65	1,36	0,00	0,00	6,67
FLAVERIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2,88	0,65	0,00	0,00	0,00	0,00
GALEANA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,18	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
GALINSOGA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,95	0,00	0,00	0,00	0,00
GERAEA	0,00	1,01	0,00	0,00	0,00	0,00	1,62	0,00	6,80	0,00	0,00	0,00
GLOSSOCARDIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,65	0,00	0,00	0,00	0,00
GUIZOTIA	2,17	1,01	0,00	0,14	0,00	0,00	0,00	2,60	0,00	0,00	0,00	0,00
HELIANTHELLA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,87	5,44	11,25	50,00	0,00
HELIANTHOPSIS	0,00	2,02	0,00	1,40	0,00	0,00	0,00	0,00	2,72	1,25	0,00	0,00
HELIOPSIS	0,00	0,00	4,11	0,14	0,00	0,00	0,00	3,69	0,00	0,00	0,00	0,00
HEMIZONIA	10,87	1,01	0,00	1,40	0,00	0,00	38,38	1,52	1,36	10,00	0,00	0,00
HETEROSPERMA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,52	0,00	0,00	0,00	0,00
HOLOCARPHA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	5,05	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
HYMENOPAPPUS	6,52	0,00	2,19	0,14	5,26	0,00	0,00	0,22	0,00	0,00	0,00	0,00
HYMENOTHRIX	2,17	0,00	0,00	0,56	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
IOSTEPHANE	0,00	0,00	0,00	1,82	0,00	0,00	2,88	0,00	0,00	1,25	0,00	0,00
ISOSTIGMA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,43	0,00	0,00	0,00	0,00

Tabela 4.2.3.4 continuação

TETRANEURIS	0,00	0,00	2,47	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	16,67
THELESERMA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	6,29	0,00	0,00	0,00	0,00
TRIDAX	0,00	0,00	0,00	0,14	10,53	0,00	0,18	5,86	0,00	0,00	0,00	0,00
TRIGONOSPERMUM	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,22	0,00	0,00	0,00	0,00
VARILLA	0,00	0,00	0,00	0,56	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
VENEGASIA	0,00	0,00	0,27	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
VILLANOVA	0,00	0,00	0,00	0,84	0,00	0,00	0,00	0,43	0,00	0,00	0,00	0,00
WILKESIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2,88	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
WOLLASTONIA	0,00	0,00	0,00	0,70	0,00	0,00	0,54	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
WULFFIA	0,00	0,00	0,00	0,28	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
WYETHIA	0,00	3,03	0,00	0,14	0,00	0,00	5,23	0,43	0,00	0,00	0,00	0,00
XANTHIUM	39,13	24,24	19,73	0,70	0,00	0,00	0,18	1,74	0,00	0,00	0,00	10,00
ZALUZANIA	0,00	0,00	4,38	1,68	0,00	0,00	0,00	0,22	0,00	0,00	0,00	0,00
ZEXMENIA	0,00	0,00	4,11	2,38	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,25	0,00	0,00

Tabela 4.2.4.3 Matriz de dados das ocorrências das 12 classes de metabolitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy.

GEN	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
ACANTHOSPERMUM	18	29	27	6	0	0	3	5	0	0	0	0
ACHYRACHAENA	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0
ADENOTHAMNUS	0	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0
AMBLYOLEPIS	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
AMBROSIA	46	70	183	1	2	0	5	40	0	1	0	0
ARGYROXIPHIMUM	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0
ASPILIA	0	6	0	86	0	0	1	8	0	0	0	0
BAHIA	4	0	23	16	0	4	11	0	0	0	0	0
BAILEYA	0	0	17	0	0	0	0	3	0	0	0	0
BALDUINA	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BALSAMORHIZA	0	0	10	3	8	0	37	1	0	0	0	0
BALTIMORA	0	0	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BEBBIA	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0
BERLANDIERA	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BIDENS	12	19	0	0	0	3	40	347	0	0	0	7
BLAINVILLEA	0	2	47	1	4	0	0	6	0	0	0	0
BLEPHARIZONIA	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	0
BRASILIA	5	6	2	0	0	0	0	1	0	4	0	0
CALEA	52	54	143	0	6	2	10	34	12	18	18	2
CALYCADENIA	0	0	0	0	0	0	5	4	0	0	0	0
CHRYSANTHELLUM	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
CLIBADIUM	1	7	6	0	0	0	158	22	4	0	0	0
COREOCARPUS	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
COREOPSIS	0	10	0	0	0	0	126	246	0	0	0	15
COSMOS	1	0	3	0	11	0	8	23	0	0	0	10
DAHLIA	0	0	0	0	0	1	17	167	0	0	0	0

Tabela 4.2.4.3 continuação

NEUROLAENA	11	2	9	0	0	0	13	0	0	0	0	0
OYEDAEA	0	3	6	40	0	0	0	2	1	0	0	0
PAPPOBOLUS	0	0	32	0	0	0	0	0	20	0	0	0
PARTHENICE	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PARTHENIUM	81	16	102	0	6	0	19	2	0	0	0	0
PERYMENIUM	0	3	5	22	1	0	0	2	0	0	0	0
PHOEBANTHUS	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0
PICRADENIOPSIS	1	0	3	0	0	0	0	2	0	0	0	0
PODACHAENIUM	0	4	10	1	0	0	0	5	1	0	0	0
PODANTHUS	0	0	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0
POLYMNIA	0	0	2	18	0	0	2	10	1	0	2	0
PSILOSTROPHE	2	1	24	0	0	0	4	0	0	0	0	0
RATIBIDA	1	2	12	0	0	0	3	5	0	0	0	1
RIENCOURTIA	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
RUDBECKIA	0	2	20	1	0	1	7	68	0	0	0	0
SALMEA	0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0
SANVITALIA	0	0	0	0	0	0	0	7	0	0	0	0
SCALESIA	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0
SCHISTOCARPHA	0	0	0	0	0	0	0	7	0	0	0	0
SCHKUHRIA	19	5	20	4	1	0	0	13	0	0	0	2
SIGESBECKIA	0	1	19	92	0	0	0	6	0	0	0	0
SILPHIUM	0	29	1	27	3	0	11	3	0	0	0	1
SIMSI	0	0	2	9	0	6	0	2	0	0	0	2
SPILANTHES	24	2	0	0	1	0	0	49	0	0	0	0
STEIRACTINIA	0	1	2	13	0	0	1	1	0	0	0	0
SYNCRETOCARPUS	0	1	4	0	0	0	0	2	0	0	0	0
SYNEDRELLA	0	0	0	0	0	0	0	8	0	0	0	0
SYNEDRELLOPSIS	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
TETRAGONOTHECA	1	0	62	0	0	0	8	9	0	0	0	0
THELESERMA	0	0	0	0	0	0	0	29	0	0	0	0
TITHONIA	15	3	52	6	0	0	10	13	0	0	0	0
TRIDAX	0	0	0	1	4	0	1	27	0	0	0	0
TRIGONOSPERMUM	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
VARILLA	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0
VENEGASIA	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VERBESINA	13	81	3	5	2	0	2	43	2	7	2	40
VIGUIERA	0	12	54	144	6	4	196	12	1	7	0	2
VILLANOVA	0	0	0	6	0	0	0	2	0	0	0	0
WEDELIA	43	36	20	101	3	3	2	19	0	0	1	4
WILKESIA	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0
WULFFIA	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0
WYETHIA	0	3	0	1	0	0	29	2	0	0	0	0
XANTHIUM	18	24	72	5	0	0	1	8	0	0	0	3
ZALUZANIA	0	0	16	12	0	0	0	1	0	0	0	0
ZEXMENIA	0	0	15	17	0	0	0	0	0	1	0	0
ZINNIA	0	7	54	2	0	0	0	16	0	0	0	0
Total	582	739	1895	1069	101	52	1265	1668	202	128	33	114
Média	5	6	16	9	1	0	10	14	2	1	0	1

Tabela 4.2.4.4 Porcentagem das ocorrências das 12 classes de metabolitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy.

GEN	%MONO	%SESQ	%LACT	%DITE	%TRIT	%CUMA	%FLAV	%POLI	%BENZF	%BENZP	%ACET	%FENI
ACANTHOSPERMUM	3,09	3,92	1,42	0,56	0,00	0,00	0,24	0,30	0,00	0,00	0,00	0,00
ACHYRACHAENA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,18	0,00	0,00	0,00	0,00
ADENOTHAMNUS	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,95	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
AMBLYOLEPIS	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,92	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
AMBROSIA	7,90	9,47	9,66	0,09	1,98	0,00	0,40	2,40	0,00	0,78	0,00	0,00
ARGYROXIPHUM	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,16	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
ASPILIA	0,00	0,81	0,00	8,04	0,00	0,00	0,08	0,48	0,00	0,00	0,00	0,00
BAHIA	0,69	0,00	1,21	1,50	0,00	7,69	0,87	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
BAILEYA	0,00	0,00	0,90	0,00	0,00	0,00	0,00	0,18	0,00	0,00	0,00	0,00
BALDUINA	0,00	0,00	0,21	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
BALSAMORHIZA	0,00	0,00	0,53	0,28	7,92	0,00	2,92	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
BALTIMORA	0,00	0,00	0,26	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
BEBBIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,18	0,00	0,00	0,00	0,00
BERLANDIERA	0,00	0,00	0,11	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
BIDENS	2,06	2,57	0,00	0,00	0,00	5,77	3,16	20,80	0,00	0,00	0,00	6,14
BLAINVILLEA	0,00	0,27	2,48	0,09	3,96	0,00	0,00	0,36	0,00	0,00	0,00	0,00
BLEPHARIZONIA	0,00	0,00	0,00	0,56	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
BRASILIA	0,86	0,81	0,11	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,00	3,13	0,00	0,00
CALEA	8,93	7,31	7,55	0,00	5,94	3,85	0,79	2,04	5,94	14,06	54,55	1,75
CALYCADENIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,40	0,24	0,00	0,00	0,00	0,00
CHRYSANTHELLUM	0,00	0,00	0,00	0,00	0,99	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CLIBADIUM	0,17	0,95	0,32	0,00	0,00	0,00	12,49	1,32	1,98	0,00	0,00	0,00
COREOCARPUS	0,00	0,27	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
COREOPSIS	0,00	1,35	0,00	0,00	0,00	0,00	9,96	14,75	0,00	0,00	0,00	13,16
COSMOS	0,17	0,00	0,16	0,00	10,89	0,00	0,63	1,38	0,00	0,00	0,00	8,77
DAHLIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,92	1,34	10,01	0,00	0,00	0,00	0,00
DELILIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,18	0,00	0,00	0,00	0,00
DESMANTHODIUM	0,00	0,00	0,00	0,09	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
DICORIA	0,34	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
DIMEROSTEMMA	0,00	1,08	1,53	0,37	0,00	0,00	0,00	0,30	0,00	0,00	0,00	1,75
DUGALDIA	0,34	0,00	0,21	0,00	0,00	0,00	0,08	0,12	0,00	0,00	0,00	0,00
DUGESIA	0,00	0,00	0,05	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
ECHINACEA	1,55	11,23	0,00	0,09	0,00	0,00	0,08	3,96	0,00	0,00	0,00	2,63
ECLIPTA	0,00	0,41	0,00	0,00	0,00	9,62	0,00	4,44	0,00	0,00	0,00	0,00
ENCELIA	0,00	0,00	0,42	0,00	0,99	0,00	0,00	0,12	38,61	32,81	0,00	0,00
ENCELIOPSIS	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	18,32	0,00	0,00	0,00
ENGELMANNIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
ESPELETIA	0,00	1,08	0,00	4,96	0,99	0,00	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
FITCHIA	0,00	0,95	0,37	0,00	0,00	0,00	0,00	0,18	0,99	0,00	0,00	1,75
FLORESTINA	0,69	0,00	0,11	0,09	1,98	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
FLOURENSIA	1,55	14,75	0,11	0,00	7,92	5,77	2,29	0,48	7,43	10,16	24,24	0,00

Tabela 4.2.4.4 continuação

POLYMNIA	0,00	0,00	0,11	1,68	0,00	0,00	0,16	0,60	0,50	0,00	6,06	0,00
PSILOSTROPHE	0,34	0,14	1,27	0,00	0,00	0,00	0,32	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
RATIBIDA	0,17	0,27	0,63	0,00	0,00	0,00	0,24	0,30	0,00	0,00	0,00	0,88
RIENCOURTIA	0,00	0,00	0,00	0,09	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
RUDBECKIA	0,00	0,27	1,06	0,09	0,00	1,92	0,55	4,08	0,00	0,00	0,00	0,00
SALMEA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,36	0,00	0,00	0,00	0,00
SANVITALIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,42	0,00	0,00	0,00	0,00
SCALESIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,16	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
SCHISTOCARPHA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,42	0,00	0,00	0,00	0,00
SCHKUHRIA	3,26	0,68	1,06	0,37	0,99	0,00	0,00	0,78	0,00	0,00	0,00	1,75
SIGESBECKIA	0,00	0,14	1,00	8,61	0,00	0,00	0,00	0,36	0,00	0,00	0,00	0,00
SILPHIUM	0,00	3,92	0,05	2,53	2,97	0,00	0,87	0,18	0,00	0,00	0,00	0,88
SIMSIA	0,00	0,00	0,11	0,84	0,00	11,54	0,00	0,12	0,00	0,00	0,00	1,75
SPILANTHES	4,12	0,27	0,00	0,00	0,99	0,00	0,00	2,94	0,00	0,00	0,00	0,00
STEIRACTINIA	0,00	0,14	0,11	1,22	0,00	0,00	0,08	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
SYNCRETOCARPUS	0,00	0,14	0,21	0,00	0,00	0,00	0,00	0,12	0,00	0,00	0,00	0,00
SYNEDRELLA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,48	0,00	0,00	0,00	0,00
SYNEDRELLOPSIS	0,52	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
TETRAGONOTHECA	0,17	0,00	3,27	0,00	0,00	0,00	0,63	0,54	0,00	0,00	0,00	0,00
THELESPERMA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,74	0,00	0,00	0,00	0,00
TITHONIA	2,58	0,41	2,74	0,56	0,00	0,00	0,79	0,78	0,00	0,00	0,00	0,00
TRIDAX	0,00	0,00	0,00	0,09	3,96	0,00	0,08	1,62	0,00	0,00	0,00	0,00
TRIGONOSPERMUM	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
VARILLA	0,00	0,00	0,00	0,37	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
VENEGASIA	0,00	0,00	0,05	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
VERBESINA	2,23	10,96	0,16	0,47	1,98	0,00	0,16	2,58	0,99	5,47	6,06	35,09
VIGUIERA	0,00	1,62	2,85	13,47	5,94	7,69	15,49	0,72	0,50	5,47	0,00	1,75
VILLANOVA	0,00	0,00	0,00	0,56	0,00	0,00	0,00	0,12	0,00	0,00	0,00	0,00
WEDELIA	7,39	4,87	1,06	9,45	2,97	5,77	0,16	1,14	0,00	0,00	3,03	3,51
WILKESIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,26	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
WULFFIA	0,00	0,00	0,00	0,19	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
WYETHIA	0,00	0,41	0,00	0,09	0,00	0,00	2,29	0,12	0,00	0,00	0,00	0,00
XANTHIUM	3,09	3,25	3,80	0,47	0,00	0,00	0,08	0,48	0,00	0,00	0,00	2,63
ZALUZANIA	0,00	0,00	0,84	1,12	0,00	0,00	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
ZEXMENIA	0,00	0,00	0,79	1,59	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,78	0,00	0,00
ZINNIA	0,00	0,95	2,85	0,19	0,00	0,00	0,00	0,96	0,00	0,00	0,00	0,00

Tabela 4.2.5.3 Matriz de dados das ocorrências das 12 classes de metabolitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson.

GEN	MONO	SESQ	LACT	DITE	TRIT	CUMA	FLAV	POLI	BENZF	BENZP	ACET	FENI
ACANTHOSPERMUM	18	29	27	6	0	0	3	5	0	0	0	0
ACHYRACHAENA	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0
ACMELLA	0	24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
AMAURIA	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0
AMBROSIA	46	70	183	1	2	0	5	40	0	1	0	0
ARGYROXIPHUM	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0
ARNICA	32	29	3	5	25	0	316	13	1	16	0	3
ASPILIA	0	6	0	86	0	0	1	8	0	0	0	0
BAERIA	0	0	0	0	0	0	0	17	0	0	0	0
BAHIA	4	0	23	16	0	4	11	0	0	0	0	0
BAILEYA	0	0	17	0	0	0	0	3	0	0	0	0
BALDUINA	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BALSAMORHIZA	0	0	10	3	8	0	37	1	0	0	0	0
BALTIMORA	0	0	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BEBBIA	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0
BERLANDIERA	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BIDENS	12	19	0	0	0	3	40	347	0	0	0	7
BLAINVILLEA	0	2	47	1	4	0	0	6	0	0	0	0
BLEPHARIZONIA	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	0
BRASILIA	5	6	2	0	0	0	0	1	0	4	0	0
CALEA	52	54	143	0	6	2	10	34	12	18	18	2
CHAENACTIS	0	0	10	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CHRYSACTINIA	8	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0
CHRYSANTHELLUM	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
CLIBADIUM	1	7	6	0	0	0	158	22	4	0	0	0
COESPELETIA	0	36	0	35	1	0	0	0	0	0	0	0
COREOCARPUS	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
COREOPSIS	0	10	0	0	0	0	126	246	0	0	0	15
COSMOS	1	0	3	0	11	0	8	23	0	0	0	10
DAHLIA	0	0	0	0	0	1	17	167	0	0	0	0
DELILIA	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0
DESMANTHODIUM	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
DICORIA	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DUGALDIA	2	0	4	0	0	0	1	2	0	0	0	0
DUGESIA	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DYSSODIA	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ECLIPTA	0	3	0	0	0	5	0	74	0	0	0	0
ENCELIA	0	0	8	0	1	0	0	2	78	42	0	0
ENCELIOPSIS	0	0	0	0	0	0	0	0	37	0	0	0
ERIOPHYLLUM	7	3	15	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ESPELETIA	0	8	0	53	1	0	0	1	0	0	0	0
ESPELETIOPSIS	0	4	0	60	0	0	0	0	0	0	0	0
FITCHIA	0	7	7	0	0	0	0	3	2	0	0	2
FLAVERIA	0	0	0	0	0	0	16	3	0	0	0	0
FLORESTINA	4	0	2	1	2	0	0	0	0	0	0	0

Tabela 4.2.5.3 continuação

GAILLARDIA	10	0	82	0	0	0	8	20	0	0	0	0
GALEANA	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
GALINSOGA	0	0	0	0	0	0	0	9	0	0	0	0
GERAEA	0	1	0	0	0	0	9	0	10	0	0	0
GLOSSOCARDIA	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0
GREENMANIELLA	0	1	31	1	0	0	0	1	0	0	0	0
HELENIUM	38	13	180	0	0	0	5	14	0	0	0	0
HELIANTHOPSIS	0	2	0	10	0	0	0	0	4	1	0	0
HELIANTHUS	22	15	131	171	24	10	63	38	0	3	0	0
HELIOPSIS	0	0	15	1	0	0	0	17	0	0	0	0
HETEROSPERMA	0	0	0	0	0	0	0	7	0	0	0	0
HOLOCARPHA	0	0	0	0	0	0	28	0	0	0	0	0
HYMENOCLEA	0	2	25	0	0	0	0	0	0	0	0	0
HYMENOPAPPUS	3	0	8	1	2	0	0	1	0	0	0	0
HYMENOTHRIX	1	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0
IOSTEPHANE	0	0	0	13	0	0	16	0	0	1	0	0
ISOSTIGMA	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
IVA	0	7	35	0	0	0	9	9	0	0	0	0
JAEGERIA	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
JAUMEA	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
KINGIANTHUS	0	5	3	1	4	0	0	0	0	0	0	0
KLEINIA	0	19	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0
LAGASCEA	0	0	0	3	0	0	0	4	0	8	0	0
LASTHENIA	0	0	0	0	0	2	40	1	2	0	0	0
LECOCARPUS	0	0	18	0	0	0	2	0	0	0	0	0
LIBANOTHAMNUS	0	2	0	28	0	0	0	0	0	0	0	0
LINDHEIMERA	0	0	0	5	2	0	0	2	0	0	0	0
LOXOTHYSANUS	0	2	12	2	0	0	0	0	0	0	0	0
MADIA	0	0	0	18	0	0	45	6	1	5	0	0
MARSHALLIA	5	3	0	0	0	0	1	0	0	0	0	2
MELAMPODIUM	8	12	82	14	0	2	31	25	0	0	0	9
MELANTHERA	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
MILLERIA	0	0	18	8	1	0	0	3	0	0	0	0
MONACTIS	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
MONOLOPIA	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
MONTANOA	14	8	59	40	1	0	1	0	0	0	0	0
NARVALINA	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	7
NEUROLAENA	11	2	9	0	0	0	13	0	0	0	0	0
OYEDAEA	0	3	6	40	0	0	0	2	1	0	0	0
PALAFOXIA	1	1	0	49	0	0	0	0	0	0	0	0
PAPPOBOLUS	0	0	32	0	0	0	0	0	20	0	0	0
PERICOME	0	0	0	0	0	0	14	0	0	0	0	0
PERITYLE	7	0	3	0	0	0	44	0	0	0	0	0
PERYMENIOPSIS	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0
PERYMENIUM	0	3	5	22	1	0	0	2	0	0	0	0
PEUCEPHYLLUM	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PHOEBANTHUS	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0
PICRADENIOPSIS	1	0	3	0	0	0	0	2	0	0	0	0

Tabela 4.2.5.3 continuação

PLUMMERA	0	0	0	0	0	0	8	0	0	0	0	2
PODACHAENIUM	0	4	10	1	0	0	0	5	1	0	0	0
PODANTHUS	0	0	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0
POLYMNIA	0	0	2	18	0	0	2	10	1	0	2	0
POROPHYLLUM	6	13	0	0	0	1	7	0	0	0	0	0
PSATHYROTES	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
PSILOSTROPHE	2	1	24	0	0	0	4	0	0	0	0	0
PYRETHRUM	4	1	5	0	2	0	0	0	0	0	0	0
RATIBIDA	1	2	12	0	0	0	3	5	0	0	0	1
RIENCOURTIA	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
RUDBECKIA	0	2	20	1	0	1	7	68	0	0	0	0
RUILOPEZIA	0	0	0	65	2	0	0	0	0	0	0	0
SALMEA	0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0
SCALESIA	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0
SCHISTOCARPHA	0	0	0	0	0	0	0	7	0	0	0	0
SCHKUHRIA	19	5	20	4	1	0	0	13	0	0	0	2
SIGESBECKIA	0	1	19	92	0	0	0	6	0	0	0	0
SILPHIUM	0	29	1	27	3	0	11	3	0	0	0	1
SMALLANTHUS	3	32	22	39	0	0	1	0	2	1	2	4
SYNCRETOCARPUS	0	1	4	0	0	0	0	2	0	0	0	0
SYNEDRELLA	0	0	0	0	0	0	0	8	0	0	0	0
TAMANIA	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	0
TETRACHYRON	0	0	0	7	0	0	0	0	0	0	0	0
TETRAGONOTHECA	1	0	62	0	0	0	8	9	0	0	0	0
TETRANEURIS	0	0	9	0	0	0	0	0	0	0	0	5
THELESERMA	0	0	0	0	0	0	0	29	0	0	0	0
TITHONIA	15	3	52	6	0	0	10	13	0	0	0	0
TRIDAX	0	0	0	1	4	0	1	27	0	0	0	0
TRIGONOSPERMUM	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
VARILLA	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0
VENEGASIA	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
VERBESINA	13	81	3	5	2	0	2	43	2	7	2	40
VILLANOVA	0	0	0	6	0	0	0	2	0	0	0	0
WILKESIA	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0
WOLLASTONIA	0	0	0	5	0	0	3	0	0	0	0	0
WYETHIA	0	3	0	1	0	0	29	2	0	0	0	0
XANTHIUM	18	24	72	5	0	0	1	8	0	0	0	3
ZALUZANIA	0	0	16	12	0	0	0	1	0	0	0	0
ZEXMENIA	0	0	15	17	0	0	0	0	0	1	0	0
ZINNIA	0	7	54	2	0	0	0	16	0	0	0	0
Total	398	629	1712	1032	113	31	1210	1485	178	108	24	115
Média	3	5	13	8	1	0	9	11	1	1	0	1

Tabela 4.2.5.4 Porcentagem das ocorrências das 12 classes de metabolitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson.

GEN	%MONO	%SESQ	%LACT	%DITE	%TRIT	%CUMA	%FLAV	%POLI	%BENZF	%BENZP	%ACET	%FENI
ACANTHOSPERMUM	4,52	4,61	1,58	0,58	0,00	0,00	0,25	0,34	0,00	0,00	0,00	0,00
ACHYRACHAENA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,20	0,00	0,00	0,00	0,00
ACMELLA	0,00	3,82	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
AMAURIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,33	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
AMBROSIA	11,56	11,13	10,69	0,10	1,77	0,00	0,41	2,69	0,00	0,93	0,00	0,00
ARGYROXIPHIMUM	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,17	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
ARNICA	8,04	4,61	0,18	0,48	22,12	0,00	26,12	0,88	0,56	14,81	0,00	2,61
ASPILIA	0,00	0,95	0,00	8,33	0,00	0,00	0,08	0,54	0,00	0,00	0,00	0,00
BAERIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,14	0,00	0,00	0,00	0,00
BAHIA	1,01	0,00	1,34	1,55	0,00	12,90	0,91	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
BAILEYA	0,00	0,00	0,99	0,00	0,00	0,00	0,00	0,20	0,00	0,00	0,00	0,00
BALDUINA	0,00	0,00	0,23	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
BALSAMORHIZA	0,00	0,00	0,58	0,29	7,08	0,00	3,06	0,07	0,00	0,00	0,00	0,00
BALTIMORA	0,00	0,00	0,29	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
BEBBIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,20	0,00	0,00	0,00	0,00
BERLANDIERA	0,00	0,00	0,12	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
BIDENS	3,02	3,02	0,00	0,00	0,00	9,68	3,31	23,37	0,00	0,00	0,00	6,09
BLAINVILLEA	0,00	0,32	2,75	0,10	3,54	0,00	0,00	0,40	0,00	0,00	0,00	0,00
BLEPHARIZONIA	0,00	0,00	0,00	0,58	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
BRASILIA	1,26	0,95	0,12	0,00	0,00	0,00	0,00	0,07	0,00	3,70	0,00	0,00
CALEA	13,07	8,59	8,35	0,00	5,31	6,45	0,83	2,29	6,74	16,67	75,00	1,74
CHAENACTIS	0,00	0,00	0,58	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CHRYSACTINIA	2,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,25	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CHRYSANTHELLUM	0,00	0,00	0,00	0,00	0,88	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CLIBADIUM	0,25	1,11	0,35	0,00	0,00	0,00	13,06	1,48	2,25	0,00	0,00	0,00
COESPELETIA	0,00	5,72	0,00	3,39	0,88	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
COREOCARPUS	0,00	0,32	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
COREOPSIS	0,00	1,59	0,00	0,00	0,00	0,00	10,41	16,57	0,00	0,00	0,00	13,04
COSMOS	0,25	0,00	0,18	0,00	9,73	0,00	0,66	1,55	0,00	0,00	0,00	8,70
DAHLIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3,23	1,40	11,25	0,00	0,00	0,00	0,00
DELILIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,20	0,00	0,00	0,00	0,00
DESMANTHODIUM	0,00	0,00	0,00	0,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
DICORIA	0,50	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
DUGALDIA	0,50	0,00	0,23	0,00	0,00	0,00	0,08	0,13	0,00	0,00	0,00	0,00
DUGESIA	0,00	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
DYSSODIA	0,25	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
ECLIPTA	0,00	0,48	0,00	0,00	0,00	16,13	0,00	4,98	0,00	0,00	0,00	0,00
ENCELIA	0,00	0,00	0,47	0,00	0,88	0,00	0,00	0,13	43,82	38,89	0,00	0,00
ENCELIOPSIS	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	20,79	0,00	0,00	0,00
ERIOPHYLLUM	1,76	0,48	0,88	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
ESPELETIA	0,00	1,27	0,00	5,14	0,88	0,00	0,00	0,07	0,00	0,00	0,00	0,00
ESPELETIOPSIS	0,00	0,64	0,00	5,81	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
FITCHIA	0,00	1,11	0,41	0,00	0,00	0,00	0,00	0,20	1,12	0,00	0,00	1,74
FLAVERIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,32	0,20	0,00	0,00	0,00	0,00
FLORESTINA	1,01	0,00	0,12	0,10	1,77	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
GAILLARDIA	2,51	0,00	4,79	0,00	0,00	0,00	0,66	1,35	0,00	0,00	0,00	0,00
GALEANA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,08	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
GALINSOGA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,61	0,00	0,00	0,00	0,00
GERAEA	0,00	0,16	0,00	0,00	0,00	0,00	0,74	0,00	5,62	0,00	0,00	0,00

Tabela 4.2.5.4 continuação

RATIBIDA	0,25	0,32	0,70	0,00	0,00	0,00	0,25	0,34	0,00	0,00	0,00	0,87
RIENCOURTIA	0,00	0,00	0,00	0,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
RUDBECKIA	0,00	0,32	1,17	0,10	0,00	3,23	0,58	4,58	0,00	0,00	0,00	0,00
RUILOPEZIA	0,00	0,00	0,00	6,30	1,77	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
SALMEA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,40	0,00	0,00	0,00	0,00
SCALESIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,17	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
SCHISTOCARPHA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,47	0,00	0,00	0,00	0,00
SCHKUHRIA	4,77	0,79	1,17	0,39	0,88	0,00	0,00	0,88	0,00	0,00	0,00	1,74
SIGESBECKIA	0,00	0,16	1,11	8,91	0,00	0,00	0,00	0,40	0,00	0,00	0,00	0,00
SILPHIUM	0,00	4,61	0,06	2,62	2,65	0,00	0,91	0,20	0,00	0,00	0,00	0,87
SMALLANTHUS	0,75	5,09	1,29	3,78	0,00	0,00	0,08	0,00	1,12	0,93	8,33	3,48
SYNCRETOCARPUS	0,00	0,16	0,23	0,00	0,00	0,00	0,00	0,13	0,00	0,00	0,00	0,00
SYNEDRELLA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,54	0,00	0,00	0,00	0,00
TAMANIA	0,00	0,00	0,00	0,58	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
TETRACHYRON	0,00	0,00	0,00	0,68	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
TETRAGONOTHECA	0,25	0,00	3,62	0,00	0,00	0,00	0,66	0,61	0,00	0,00	0,00	0,00
TETRANEURIS	0,00	0,00	0,53	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	4,35
THELESPERMA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,95	0,00	0,00	0,00	0,00
TITHONIA	3,77	0,48	3,04	0,58	0,00	0,00	0,83	0,88	0,00	0,00	0,00	0,00
TRIDAX	0,00	0,00	0,00	0,10	3,54	0,00	0,08	1,82	0,00	0,00	0,00	0,00
TRIGONOSPERMUM	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,07	0,00	0,00	0,00	0,00
VARILLA	0,00	0,00	0,00	0,39	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
VENEGASIA	0,00	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
VERBESINA	3,27	12,88	0,18	0,48	1,77	0,00	0,17	2,90	1,12	6,48	8,33	34,78
VILLANOVA	0,00	0,00	0,00	0,58	0,00	0,00	0,00	0,13	0,00	0,00	0,00	0,00
WILKESIA	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,32	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
WOLLASTONIA	0,00	0,00	0,00	0,48	0,00	0,00	0,25	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
WYETHIA	0,00	0,48	0,00	0,10	0,00	0,00	2,40	0,13	0,00	0,00	0,00	0,00
XANTHIUM	4,52	3,82	4,21	0,48	0,00	0,00	0,08	0,54	0,00	0,00	0,00	2,61
ZALUZANIA	0,00	0,00	0,93	1,16	0,00	0,00	0,00	0,07	0,00	0,00	0,00	0,00
ZEXMENIA	0,00	0,00	0,88	1,65	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,93	0,00	0,00
ZINNIA	0,00	1,11	3,15	0,19	0,00	0,00	0,00	1,08	0,00	0,00	0,00	0,00

Apêndice B: Matrizes dos dados das médias das oxidações das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer e da tribo Heliantheae segundo Stuessy e Robinson.

Tabela 4.3.3.2 Média dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer

GENERO	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
BAERIA									11.94				
ERIOPHYLLUM	3.43	0	5.27										
LASTHENIA						2	1.35	1.5	11	1.5			
MONOLOPIA									12				
ARNICA	2.59	0.48	5.33	1.8	6.8		1.75		10.77	3	2.06		5
BAHIA	2.25		6.83	2.13		2.75	2.45	1.82					
CHAENACTIS			6.2					2.64					
FLORESTINA	2.25		4.5	2	0.5								
HYMENOTHRIX	2			2.5									
PALAFIXIA	0	0		2.02									
PEUCEPHYLLUM			8										
SCHKUHRIA	2.37	0	6	2.75	0				11.92				3.5
VENEGASIA			5										
FLAVERIA							2.38		13				
JAUMEA								2.63	11				
VARILLA				2.5									
AMBLYOLEPIS						2							
BAILEYA			6.94						11.5				
BALDUINA			7										
DUGALDIA	5		5.25				3	1	12				
GAILLARDIA	3.8		6.61				2.5	1	12.82				
HELENIUM	1.97	0	6.31				2.6	1.4	12.14				
HYMENOXYS	1.26	1	6.68				3.71	1.92	8.17				4
MARSHALLIA	3.8	2					2	3					4.5
PLUMMERA							2.75	1.5					5
PSATHYROTES							3	1					
PSILOSTROPHE	0	1	6.29				3	2					
TETRANEURIS			7.44										2
GALEANA							3	1					
HYMENOPAPPUS	5		6.25	3	0				12				
LOXOTHYSANUS		0	5.92	3.5									
VILLANOVA				2					11				
ACHYRACHAENA									11				
ADENOTHAMNUS							2.08	1.67					
ARGYROXIPHUM							3	1					
BLEPHARIZONIA				1.67									
CALYCADENIA							4.6	2.6	10.5				
HEMIZONIA	0	1		0.5			2.05	2.05	12	0.5	1.63		
HOLOCARPHA							1.5	2.07					
LAYIA						2	2.6	1	12				
MADIA				8.22			0.84	2.38	12	1	2.2		
WILKESIA							4.13	1.25					
CHRYSACTINIA	1.5						3	2.33					
DYSSODIA	2												
PECTIS	0.57	0.33											
POROPHYLLUM	4.83	0.23				2	1.29	3					
TAGETES	0.58	0.15				1.64	1.62	2.85	13	0.5	1		3
AMAURIA							2.5	1.5					

Tabela 4.3.3.2 continuação

PERICOME							2.14	2.14					
PERITYLE	4		5.67				2.64	1.59					
ATHROISMA	1.5												
BLEPHARISPERMUM				3.67							2		
AMBROSIA	0.37	0.76	6.13	6	6		3	1	11.98		2		
DICORIA	1												
HYMENOCLEA		3	5.64										
IVA		0.86	5.69				3.44	1.67	11.11				
PARTHENICE			6										
PARTHENIUM	0.05	0.13	6.38		4.5		2.47	2.47	12				
XANTHIUM	0.72	1.17	5.63	8			3	3	11.5			5	
BIDENS	1.58	0.32				1.33	1.05	1.11	10.82			3.57	
CHRYSANTHELLUM					6								
COREOCARPUS		1											
COREOPSIS		4.7					1.27	1.37	10.67			3.53	
COSMOS	1		4		6.27		1	1.25	10.48			3.6	
DAHLIA						4	1.12	1.94	9.83				
FITCHIA		1.14	5.29						12	1		2	
GLOSSOCARDIA									9.5				
HETEROSPERMA									10.71				
ISOSTIGMA									5				
NARVALINA												2	
THELESPERMA									11.9				
BERLANDIERA			8										
DUGESIA			4										
ENGELMANNIA									13				
LINDHEIMERA				2	3.5				12				
SILPHIUM		0.24	4	2.78	3.33		1	2.36	4			5	
BEBBIA									5.33				
GALINSOGA									5.89				
JAEGERIA									6				
SCHISTOCARPHA									5.71				
TRIDAX				10	1		0.5	1.5	6.83				
HELIANTHOPSIS		0		2.7						0.75	1		
HELIANTHUS	0.55	0.73	7.31	3.88	6.46	2	2.65	1.54	7.84		1.67		
IOSTEPHANE				3.23			1	2			2		
LAGASCEA				3.67					10.5		1.88		
PAPPOBOLUS			8.22							0.6			
SCALESIA							2	3					
SIMSI			6	2.67		3.5			5.5			2	
SYNCRETOCARPUS		0	5.5						5				
TITHONIA	0.27	1.67	7	3.67			2.9	1.7	10.31				
VIGUIERA		0.08	7.48	4.35	8.5	2	1.9	1.33	5.96	0	1.71	3	
ACANTHOSPERMUM	1.11	0.21	8.19	5.17			1.5	1.33	12				
BRASILIA	4	2.5	8						12		1.5		
CALEA	3.83	0.35	8.47		0.83	1	1.05	1.25	9.01	2.33	2.11	2.89	3
ENYDRA			9.89	3									
GREENMANIELLA		1	7.23	0					4.5				
GUIZOTIA	1	7		4					10.75				
LECOCARPUS			8.61				3	2					
MELAMPODIUM	3	0.25	9.61	1.5		2	1.65	2.42	10.96			3.78	
MILLERIA			8.89	3.75	1				12				
NEUROLAENA	3.91	0.5	6.67				2.69	1.92					
POLYMNIA			5.5	3.5			1	3	11.9	1		0.5	
SIGESBECKIA		0	7.03	5.71					10.83				
SMALLANTHUS	0.33	0.44	8.82	3.23			1	2.5		0.5	2	1.5	5.63

Tabela 4.3.3.2 continuação

TETRACHYRON				3.86									
TETRAGONOTHECA	1		9.61				2.5	1.75	6.17				
TRIGONOSPERMUM									12				
ECHINACEA	0	0.1		2			1	2	6.89			6.5	
PODACHAENIUM		0	6.5	1					11.6	0			
RATIBIDA	1	2	7.5				3	1	12			3	
RUDBECKIA		4	4.7	3		2	3	2.43	11.38				
BALTIMORA			6										
CLIBADIUM	0	0	8.17				1.48	2.24	9.36	0.5			
DELILIA									12				
DESMANTHODIUM				5									
ECLIPTA		0.33				5			12.99				
ELVIRA									12				
ICHTHYOTHERE	0.68	0.21	10	3.48			1	2.75	11.33				
MONTANO	0.07	2	6.97	1.9	0		3	1					
RIENCOURTIA				4									
ASPILIA		0		3.31			1	2	11.88				
BALSAMORHIZA			7.8	0	3.13		2.51	2.24	1				
BLAINVILLEA		0	7.81	0	1				11				
COESPELETIA		0.25		3.09	2								
DIMEROSTEMMA		0.88	7	0					11.2			4	
ENCELIA			5.88		0				12	1.88	1.62		
ENCELIOPSIS										1.18			
ESPELETIA		0.13		2.75	6				12				
ESPELETIOPSIS		1.5		3.13									
FLOURENSIA	0.11	0.76	3.5		2.63	2.67	2.83	2.78	11.06	0.67	1.85	2.75	
GERAEA		4					2.33	2.33		0.7			
HELIANTHELLA									12	1	1.78	0.5	
KINGIANTHUS		0	6.33	0	1.25								
LASIANTHAEA				3.21									
LIBANOTHAMNUS		2		2.57									
MELANTHERA									12				
MONACTIS			5										
OYEDAEA		0.33	7.67	4.95					12	1			
PERYMENIOPSIS				3.5									
PERYMENIUM		3.33	6.2	2.45	1				12				
PHOEBANTHUS							3.67	1					
PODANTHUS			7										
RUILOPEZIA				3.23	0.5								
STEIRACTINIA		0	5	2.62			1	3	12				
SYNEDRELLA									10.81				
SYNEDRELLOPSIS	1												
TAMANIA				2.83									
VERBESINA	0.08	0.77	8.67	2.8	1		1	2	11.87	0.5	1.71	0.5	3.5
WEDELIA	0.37	0.19	6.55	4.48	1.33	5	1	3	11.34			3	2.25
WOLLASTONIA				11			1	2					
WULFFIA				4									
WYETHIA		1.33		0			1.79	1.97	12				
ZALUZANIA			5.38	2.83					13				
ZEXMENIA			6.73	2.29							3		
ACMELLA		0.13											
HELIOPSIS			7.93	2					10.94				
SALMEA									7.58				
SANVITALIA									8.14				
SPILANTHES	0.29	0			1				7.44				
SQUAMOPAPPUS		0	7.67										
ZINNIA		0	7.83	0					12				

Tabela 4.3.4.2 Média dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy.

GENERO	Oxi-MONO	Oxi-SESQ	Oxi-LACT	Oxi-DITE	Oxi-TRIT	Oxi-CUMA	Oxi-FLAVA	Oxi-FLAVB	Oxi-POLI	Oxi-BENZF	Oxi-BENZP	Oxi-ACET	Oxi-FENI
ACANTHOSPERMUM	1.11	0.21	8.19	5.17			1.5	1.33	12				
ACHYRACHAENA									11				
ADENOTHAMNUS							2.08	1.67					
AMBLIOLEPIS						2							
AMBROSIA	0.37	0.76	6.13	6	6		3	1	11.98		2		
ARGYROXIPHUM							3	1					
ASPILIA		0		3.31			1	2	11.88				
BAHIA	2.25		6.83	2.13		2.75	2.45	2.64					
BAILEYA			6.94						11.5				
BALDUINA			7										
BALSAMORHIZA			7.8	0	3.13		2.51	2.24	1				
BALTIMORA			6										
BEBBIA									5.33				
BERLANDIERA			8										
BIDENS	1.58	0.32				1.33	1.05	1.11	10.82				3.57
BLAINVILLEA		0	7.81	0	1				11				
BLEPHARIZONIA				1.67									
BRASILIA	4	2.5	8						12		1.5		
CALEA	3.83	0.35	8.47		0.83	1	1.05	1.25	9.01	2.33	2.11	2.89	3
CALYCADENIA							4.6	2.6	10.5				
CHRYSANTHELLUM					6								
CLIBADIUM	0	0	8.17				1.48	2.24	9.36	0.5			
COREOCARPUS		1											
COREOPSIS		4.7					1.27	1.37	10.67				3.53
COSMOS	1		4		6.27		1	1.25	10.48				3.6
DAHLIA						4	1.12	1.94	9.83				
DELILIA									12				
DESMANTHODIUM				5									
DICORIA	1												
DIMEROSTEMMA		0.88	7	0					11.2				4
DUGALDIA	5		5.25				3	1	12				
DUGESIA			4										
ECHINACEA	0	0.1		2			1	2	6.89				6.5
ECLIPTA		0.33				5			12.99				
ENCELIA			5.88		0				12	1.88	1.62		
ENCELIOPSIS										1.18			
ENGELMANNIA									13				
ESPELETIA		0.13		2.75	6				12				
FITCHIA		1.14	5.29						12	1			2
FLORESTINA	2.25		4.5	2	0.5								
FLOURENSIA	0.11	0.76	3.5		2.63	2.67	2.83	2.78	11.06	0.67	1.85	2.75	
GAILLARDIA	3.8		6.61				2.5	1	12.82				
GALEANA							3	1					
GALINSOGA									5.89				
GERAEA		4					2.33	2.33		0.7			
GLOSSOCARDIA									9.5				
GREENMANIELLA		1	7.23	0					4.5				
GUIZOTIA	1	7		4					10.75				
HELENIIUM	1.97	0	6.31				2.6	1.4	12.14				
HELIANTHELLA									12	1	1.78	0.5	
HELIANTHUS	0.55	0.73	7.31	3.88	6.46	2	2.65	1.54	7.84		1.67		
HELIOPSIS			7.93	2					10.94				

Tabela 4.3.4.2. Continuação

HEMIZONIA	0	1		0.5			2.05	2.05	12	0.5	1.63	
HETEROSPERMA									10.71			
HOLOCARPHA							1.5	2.07				
HYMENOCLEA		3	5.64									
HYMENOPAPPUS	5		6.25	3	0				12			
HYMENOTHRIX	2			2.5								
HYMENOXYS	1.26	1	6.68				3.71	1.92	8.17			4
ICHTHYOTHERE	0.68	0.21	0	3.48			1	2.75	11.33			
IOSTEPHANE				3.23			1	2			2	
ISOCARPHA			7.2						13	1.43	2	
ISOSTIGMA									5			
IVA		0.86	5.69				3.44	1.67	11.11			
JAUMEA									11			
LAGASCEA				3.67					10.5		1.88	
LAYIA						2	2.6	1	12			
LINDHEIMERA				2	3.5				12			
LOXOTHYSANUS		0	5.92	3.5								
MADIA				8.22			0.84	2.38	12	1	2.2	
MELAMPODIUM	3	0.25	9.61	1.5		2	1.65	2.42	10.96			3.78
MELANTHERA									12			
MILLERIA			8.89	3.75	1				12			
MONACTIS			5									
MONTANOA	0.07	2	6.97	1.9	0		3	1				
NARVALINA												2
NEUROLAENA	3.91	0.5	6.67				2.69	1.92				
OYEDAEA		0.33	7.67	4.95					12	1		
PAPPOBOLUS			8.22							0.6		
PARTHENICE			6									
PARTHENIUM	0.05	0.13	6.38		4.5		2.47	2.47	12			
PERYMENIUM		3.33	6.2	2.45	1				12			
PHOEBANTHUS							3.67	1				
PICRADENIOPSIS	5		6.33						11			
PODACHAENIUM		0	6.5	1					11.6	0		
PODANTHUS			7									
POLYMNIA			5.5	3.5			1	3	11.9	1	0.5	
PSILOSTROPHE	0	1	6.29				3	2				
RATIBIDA	1	2	7.5				3	1	12			3
RIENCOURTIA				4								
RUDBECKIA		4	4.7	3		2	3	2.43	11.38			
SALMEA									7.58			
SANVITALIA									8.14			
SCALESIA							2	3				
SCHISTOCARPHA									5.71			
SCHKUHRIA	2.37	0	6	2.75	0				11.92			3.5
SIGESBECKIA		0	7.03	5.71					10.83			
SILPHIUM		0.24	4	2.78	3.33		1	2.36	4			5
SIMSIA			6	2.67		3.5			5.5			2
SPILANTHES	0.29	0			1				7.44			
STEIRACTINIA		0	5	2.62			1	3	12			
SYNCRETOCARPUS		0	5.5						5			
SYNEDRELLA									10.81			
SYNEDRELLOPSIS	1											
TETRAGONOTHECA	1		9.61				2.5	1.75	6.17			
THELESPERMA									11.9			

Tabela 4.3.5.2 Continuação

DICORIA	1							1.67					
DUGALDIA	5		5.25				3		12				
DUGESIA			4										
DYSSODIA	2												
ECHINACEA	0	0.1		2			1	2.78	6.89				6.5
ECLIPTA		0.33				5			12.99				
ENCELIA			5.88		0			1.97	12	1.88	1.62		
ENCELIOPSIS										1.18			
ERIOPHYLLUM	3.43	0	5.27										
ESPELETIA		0.13		2.75	6				12				
ESPELETIOPSIS		1.5		3.13									
FITCHIA		1.14	5.29						12	1			2
FLAVERIA							2.38	2.63	13				
FLORESTINA	2.25		4.5	2	0.5								
FLOURENSIA	0.11	0.76	3.5		2.63	2.67	2.83	3	11.06	0.67	1.85	2.75	
GAILLARDIA	3.8		6.61				2.5	1	12.82				
GALEANA							3	1					
GALINSOGA									5.89				
GERAEA		4					2.33			0.7			
GLOSSOCARDIA									9.5				
GREENMANIELLA		1	7.23	0					4.5				
HELENium	1.97	0	6.31				2.6	1.4	12.14				
HELIANTHOPSIS		0		2.7						0.75	1		
HELIANTHUS	0.55	0.73	7.31	3.88	6.46	2	2.65	1.54	7.84		1.67		
HELIOPSIS			7.93	2					10.94				
HETEROSPERMA									10.71				
HOLOCARPHA							1.5	2.38					
HYMENOCLEA		3	5.64										
HYMENOPAPPUS	5		6.25	3	0				12				
HYMENOTHRIX	2			2.5									
		0.21											
ICHTHYOTHERE	0.68	1	0	3.48			1	2.42	11.33				
IOSTEPHANE				3.23			1				2		
ISOSTIGMA									5				
IVA		0.86	5.69				3.44		11.11				
JAEGERIA									6				
JAUMEA									11				
KINGIANTHUS		0	6.33	0	1.25								
KLEINIA		3.58			3								
LAGASCEA				3.67					3	10.5		1.88	
LASTHENIA						2	1.35	1.5	11	1.5			
LAYIA						2	2.6	1	12				
LECOCARPUS			8.61				3	2					
LIBANOTHAMNUS		2		2.57									
LINDHEIMERA				2	3.5				12				
LOXOTHYSANUS		0	5.92	3.5									
MADIA				8.22			0.84		12	1	2.2		
MARSHALLIA	3.8	2					2	3					4.5
MELAMPodium	3	0.25	9.61	1.5		2	1.65	2.75	10.96				3.78
MELANTHERA									12				
MILLERIA			8.89	3.75	1				12				
MONACTIS			5					2					
MONOLOPIA									12				
MONTANOA	0.07	2	6.97	1.9	0		3	1					
NARVALINA								1.94					2
NEUROLAENA	3.91	0.5	6.67				2.69	1.92					

Tabela 4.3.5.2 Continuação

OYEDAEA		0.33	7.67	4.95					12	1				
PALAFIXIA	0	0		2.02										
PAPPOBOLUS			8.22							0.6				
PECTIS	0.57	0.33												
PERICOME							2.14	2.14						
PERITYLE	4		5.67				2.64	1.59						
PERYMENIOPSIS				3.5				2.24						
PERYMENIUM		3.33	6.2	2.45	1				12					
PEUCEPHYLLUM			8											
PHOEBANTHUS							3.67							
PICRADENIOPSIS	5		6.33						11					
PLUMMERA							2.75	1					5	
PODACHAENIUM		0	6.5	1				2	11.6	0				
PODANTHUS			7					1						
POLYMNIA			5.5	3.5			1	3	11.9	1		0.5		
POROPHYLLUM	4.83	0.23				2	1.29	3						
PSATHYROTES							3							
PSILOSTROPHE	0	1	6.29				3	2						
PYRETHRUM	2.75	3	5.2		2									
RATIBIDA	1	2	7.5				3	1	12				3	
RIENCOURTIA				4										
RUDBECKIA		4	4.7	3		2	3	2.43	11.38					
RUILOPEZIA				3.23	0.5									
SALMEA									7.58					
SCALESIA							2							
SCHISTOCARPHA									5.71					
SCHKUHRIA	2.37	0	6	2.75	0				11.92				3.5	
SIGESBECKIA		0	7.03	5.71					10.83					
SILPHIUM		0.24	4	2.78	3.33		1	2	4				5	
SIMSIA			6	2.67		3.5		2	5.5				2	
SMALLANTHUS	0.33	0.44	8.82	3.23			1	2.5		0.5	2	1.5	5.63	
SYNCRETOCARPUS		0	5.5						5					
SYNEDRELLA									10.81					
TAGETES	0.58	0.15				1.64	1.62	2.85	13	0.5	1		3	
TAMANIA				2.83										
TETRACHYRON				3.86										
TETRAGONOTHECA	1		9.61				2.5	1.5	6.17					
TETRANEURIS			7.44										2	
THELESERMA									11.9					
TITHONIA	0.27	1.67	7	3.67			2.9	1.7	10.31					
TRIDAX				10	1		0.5	1.75	6.83					
TRIGONOSPERMUM									12					
VARILLA				2.5										
VENEGASIA			5											
VERBESINA	0.08	0.77	8.67	2.8	1		1		11.87	0.5	1.71	0.5	3.5	
VIGUIERA		0.08	7.48	4.35	8.5	2	1.9	1.33	5.96	0	1.71		3	
VILLANOVA				2					11					
WEDELIA	0.37	0.19	6.55	4.48	1.33	5	1	2.36	11.34			3	2.25	
WILKESIA							4.13	2.07						
WOLLASTONIA				11			1							
WYETHIA		1.33		0			1.79		12					
XANTHIUM	0.72	1.17	5.63	8			3	3	11.5				5	
ZALUZANIA			5.38	2.83					13					
ZEXMENIA			6.73	2.29							3			
ZINNIA		0	7.83	0				2.33	12					

Apêndice C: Equações das regressões ocorrências e médias dos passos Oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribos nos níveis das tribos da família Asteraceae segundo Bremer e a “metatree”; das subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae segundo Bremer, das tribos da “metatree” (com mesmo gêneros do que as subtribos de Heliantheae-Helenieae) e da tribo Heliantheae segundo Stuessy e Robinson; dos gêneros da “metatree”, do complexo Heliantheae-Helenieae e da tribo Heliantheae segundo Stuessy e Robinson.

Equações das regressões ocorrências de uma classe versus todas outras em tribos da família Asteraceae segundo Bremer, usando o resumo do método passo à passo adiante do MLR.

Equação 4.5.1.1: $\text{MONO} = -239,32 + 0,20 \text{ CUMA} + 0,71 \text{ LACT} - 0,38 \text{ POLI} - 0,17 \text{ TRIT} + 0,68 \text{ SESQ} - 0,97 \text{ BENZF} + 0,28 \text{ DITE} + 0,34 \text{ BENZP}$

Equação 4.5.1.2: $\text{SESQ} = 109,31 + 0,62 \text{ MONO} + 1,17 \text{ BENZF} - 0,94 \text{ BENZP} + 0,27 \text{ ACET}$

Equação 4.5.1.3: $\text{LACT} = -19,81 + 0,11 \text{ FLAV} + 0,56 \text{ POLI} + 0,37 \text{ MONO} + 0,48 \text{ BENZP} - 0,41 \text{ DITE} + 0,25 \text{ TRIT}$

Equação 4.5.1.4: $\text{DITE} = 43,02 + 1,34 \text{ FENI} + 1,27 \text{ BENZP} - 0,36 \text{ LACT} - 0,23 \text{ SESQ} + 0,08 \text{ CUMA} - 0,47 \text{ FLAV} - 0,70 \text{ BENZF} + 0,16 \text{ MONO}$

Equação 4.5.1.5: $\text{TRIT} = 14,08 + 0,80 \text{ CUMA} + 0,88 \text{ LACT} - 0,62 \text{ MONO} - 0,32 \text{ POLI}$

Equação 4.5.1.6: $\text{CUMA} = 13,24 + 0,76 \text{ MONO} + 0,49 \text{ TRIT} - 0,52 \text{ LACT} + 0,27 \text{ DITE}$

Equação 4.5.1.7: $\text{FLAV} = 70,90 - 0,38 \text{ LACT} + 2,03 \text{ FENI} + 0,24 \text{ MONO} - 0,17 \text{ SESQ} + 2,18 \text{ BENFP} - 1,6 \text{ BENZF} - 1,2 \text{ DITE}$

Equação 4.5.1.8: $\text{POLI} = -21,86 + 0,68 \text{ FENI} + 0,86 \text{ LACT} - 0,54 \text{ MONO} - 0,30 \text{ BENZF} - 0,24 \text{ TRIT}$

Equação 4.5.1.9: $\text{BENZF} = 3,31 + 1,21 \text{ BENZP} + 1,07 \text{ FENI} - 0,46 \text{ FLAV} - 0,59 \text{ DITE} - 0,14 \text{ LACT} - 0,08 \text{ POLI}$

Equação 4.5.1.10: $\text{BENZP} = -1,81 + 0,79 \text{ BENZF} - 0,89 \text{ FENI} + 0,37 \text{ FLAV} + 0,52 \text{ DITE} + 0,14 \text{ LACT} + 0,07 \text{ POLI}$

Equação 4.5.1.11: $\text{ACET} = 0,98 + 0,48 \text{ BENFP} + 0,47 \text{ SESQ}$

Equação 4.5.1.12: $\text{FENI} = -1,31 + 0,59 \text{ DITE} + 0,05 \text{ SESQ} + 0,10 \text{ POLI} - 1,0 \text{ BENZP} + 0,38 \text{ FLAV} + 0,76 \text{ BENZF} + \text{LACT}$

Equações das regressões ocorrências de uma classe versus todas outras em tribos, gêneros da família Asteraceae segundo a “metatree”, usando o resumo do método passo a passo adiante da MLR.

Equação 4.5.2.1: $\text{MONO} = -44,6 + 0,45 \text{ CUMA} + 0,36 \text{ LACT} - 0,31 \text{ TRIT} + 0,55 \text{ SESQ} - 0,28 \text{ DITE} - 0,34 \text{ POLI} + 0,46 \text{ FENI} + 0,45 \text{ BENZP} - 0,59 \text{ BENZF}$

Equação 4.5.2.2: $\text{SESQ} = -2,49 + 1,2 \text{ BENZF} + 0,35 \text{ MONO} - 0,86 \text{ BENZP} + 0,24 \text{ LACT} + 0,23 \text{ ACET} + 0,21 \text{ POLI} - 0,25 \text{ FENI} + 0,17 \text{ FLAV} - 0,11 \text{ TRIT}$

Equação 4.5.2.3: $\text{LACT} = 24,16 + 0,74 \text{ MONO} + 0,57 \text{ TRIT} - 0,16 \text{ CUMA} + 0,31 \text{ POLI} - 0,43 \text{ FENI} + 0,08 \text{ BENZP}$

Equação 4.5.2.4: $\text{DITE} = -6,71 + 0,17 \text{ BENZF} + 0,74 \text{ FENI} - 0,05 \text{ SESQ} + 0,46 \text{ CUMA} - 0,2 \text{ TRIT} - 0,4 \text{ MONO} + 0,45 \text{ BENZP} - 0,21 \text{ POLI} - 0,11 \text{ FLAV}$

Equação 4.5.2.5: $\text{TRIT} = -0,36 + 0,82 \text{ CUMA} + 0,61 \text{ LACT} - 0,56 \text{ MONO} + 0,25 \text{ BENZF} - 0,27 \text{ DITE} + 0,14 \text{ FENI}$

Equação 4.5.2.6: $\text{CUMA} = 1,98 + 0,44 \text{ TRIT} + 0,44 \text{ MONO} + 0,29 \text{ FENI} - 0,15 \text{ POLI} - 0,22 \text{ BENZF} + 0,28 \text{ DITE} - 0,14 \text{ LACT}$

Equação 4.5.2.7: $\text{FLAV} = 27,27 + 1,14 \text{ BENZP} + 0,68 \text{ FENI} - 0,21 \text{ DITE} - 0,98 \text{ BENZF} + 0,61 \text{ SESQ} - 0,29 \text{ MONO}$

Equação 4.5.2.8: $\text{POLI} = -17,14 + 1,20 \text{ FENI} - 0,51 \text{ CUMA} + 0,43 \text{ LACT} - 0,48 \text{ MONO} - 0,37 \text{ DITE} + 0,14 \text{ FLAV}$

Equação 4.5.2.9: $\text{BENZF} = 0,3 + 0,74 \text{ BENZP} + 0,74 \text{ SESQ} - 0,20 \text{ LACT} - 0,16 \text{ ACET} + 0,11 \text{ TRIT} - 0,15 \text{ FLAV} - 0,28 \text{ MONO} - 0,02 \text{ DITE} - 0,18 \text{ POLI} + 0,25 \text{ FENI}$

Equação 4.5.2.10: $\text{BENZP} = -0,72 + 1,12 \text{ BENZF} - 0,82 \text{ SESQ} + 0,28 \text{ LACT} + 0,23 \text{ ACET} + 0,24 \text{ FLAV} - 0,14 \text{ TRIT} - 0,44 \text{ FENI} + 0,31 \text{ MONO} + 0,23 \text{ POLI} + 0,18 \text{ DITE}$

Equação 4.5.2.11: $\text{ACET} = +1,04 + 1,09 \text{ SESQ} + 1,00 \text{ BENZP} - 1,00 \text{ BENZF} - 0,36 \text{ LACT} + 0,20 \text{ CUMA} - 0,15 \text{ POLI}$

Equação 4.5.2.12: $\text{FENI} = 0,34 + 0,18 \text{ CUMA} + 0,46 \text{ POLI} + 0,42 \text{ DITE} - 0,77 \text{ BENZP} + 0,41 \text{ MONO} + 0,73 \text{ BENZF} + 0,19 \text{ FLAV} - 0,49 \text{ SESQ} + 0,13 \text{ ACET}$

Equação 4.5.2.13: $\text{MONO} = 4,65 + 1,79 \text{ CUMA} + 0,38 \text{ LACT} - 0,38 \text{ TRIT} - 0,14 \text{ FENI} + 0,07 \text{ POLI} - 0,68 \text{ SESQ} - 0,25 \text{ BENZF}$

Equação 4.5.2.14: $\text{SESQ} = -1,15 + 0,83 \text{ CUMA} - 0,07 \text{ BENZF} - 0,10 \text{ ACET} + 0,77 \text{ DITE} + 0,42 \text{ FLAV} - 0,16 \text{ BENZP} - 0,76 \text{ TRIT} + 0,18 \text{ POLI}$

Equação 4.5.2.15: $\text{LACT} = 32,82 + 0,55 \text{ DITE}$

Equação 4.5.2.16: $DITE = 0,69 + 0,90 TRIT + 0,05 FLAV - 0,88 POLI + 0,75 FENI - 0,23 MONO + 0,72 SESQ + 0,35 ACET - 1,00 BENZF + 0,38 BENZP - 0,15 LACT$

Equação 4.5.2.17: $TRIT = - 0,97 + 0,71 FLAV + 0,77 DITE + 0,26 POLI - 0,45 BENZF + 0,98 CUMA - 0,93 SESQ$

Equação 4.5.2.18: $CUMA = - 0,10 + 0,39 SESQ + 0,28 BENZF + 0,50 MONO - 0,05 ACET - 0,17 LACT + 0,20 TRIT + 0,02 FENI - 0,13 FLAV$

Equação 4.5.2.19: $FLAV = + 16,74 + 0,36 BENZP - 0,02 FENI + 0,58 TRIT + 0,31 BENZF - 0,30 DITE$

Equação 4.5.2.20: $POLI = 3,62 + 0,85 FENI - 0,26 MONO + 1,02 TRIT + 0,40 ACET + 0,43 BENZP - 1,1 DITE - 0,17 LACT - 1,2 BENZF + 0,81 SESQ + 0,05 FLAV$

Equação 4.5.2.21: $BENZF = - 0,12 + 0,89 FLAV - 0,34 TRIT + 0,78 CUMA + 0,29 ACET - 0,29 MONO - 0,18 DITE$

Equação 4.5.2.22: $BENZP = 0,45 + 1,01 FLAV + 0,03 FENI - 0,23 MONO - 0,32 POLI$

Equação 4.5.2.23: $ACET = ?$ (nenhum modelo foi obtido)

Equação 4.5.2.24: $FENI = -0,99 + 1,11 POLI + 0,05 MONO - 0,80 TRIT - 0,10 ACET + 0,50 BENZF + 0,23 LACT + 0,42 DITE$

Equação 4.5.2.25: $MONO = -6,78 + 0,47 LACT + 0,30 CUMA + 0,34 FENI - 0,13 TRIT - 0,17 POLI - 0,20 DITE + 0,10 ACET + 0,03 BENZP + 0,04 FLAV$

Equação 4.5.2.26: $SESQ = 1,77 + 0,35 ACET + 0,19 FENI + 0,37 BENZF + 0,26 LACT - 0,10 BENZP + 0,10 FLAV - 0,09 DITE - 0,05 CUMA$

Equação 4.5.2.27: $LACT = 3,66 + 0,75 MONO + 0,24 TRIT + 0,09 POLI - 0,09 FENI + 0,17 SESQ - 0,09 ACET - 0,08 BENZF + 0,05 FLAV$

Equação 4.5.2.28: $DITE = 1,87 + 0,65 FENI + 0,25 BENZF - 0,45 MONO - 0,15 POLI + 0,14 CUMA + 0,15 ACET + 0,09 TRIT - 0,09 SESQ$

Equação 4.5.2.29: $TRIT = 0,93 + 0,59 LACT + 0,11 DITE - 0,50 MONO + 0,11 BENZF + 0,18 FENI - 0,07 POLI$

Equação 4.5.2.30: $CUMA = 0,89 + 0,70 MONO + 0,14 DITE + 0,10 POLI + 0,13 ACET - 0,09 FENI + 0,10 FLAV - 0,06 BENZP - 0,06 SESQ$

Equação 4.5.2.31: $FLAV = 3,92 + 0,21 FENI + 0,13 LACT + 0,20 BENZP + 0,17 POLI + 0,12 CUMA + 0,09 MONO + 0,12 SESQ - 0,09 BENZF$

Equação 4.5.2.32: $POLI = 3,69 + 0,20 FLAV - 0,70 MONO + 0,50 FENI - 0,24 DITE + 0,23 LACT + 0,19 CUMA - 0,08 TRIT - 0,11 BENZF + 0,09 SESQ$

Equação 4.5.2.33: $BENZF = 0,17 + 0,51 SESQ + 0,30 DITE + 0,20 BENZP - 0,19 LACT + 0,08 TRIT - 0,06 FLAV - 0,04 POLI$

Equação 4.5.2.34 $BENZP = 0,21 + 0,33 BENZF + 0,26 FLAV + 0,25 ACET - 0,22 SESQ - 0,13 CUMA - 0,13 MONO - 0,08 FENI$

Equação 4.5.2.35 $ACET = -0,09 + 0,49 SESQ + 0,16 CUMA + 0,16 BENZP - 0,17 LACT + 0,25 MONO + 0,16 DITE - 0,14 FENI - 0,05 TRIT$

Equação 4.5.2.36 $FENI = 0,008 + 0,59 MONO + 0,43 DITE + 0,21 POLI + 0,13 SESQ + 0,12 FLAV - 0,07 ACET - 0,13 LACT + 0,07 TRIT - 0,07 CUMA + 0,06 BENZF - 0,05 BENZP$

Equações das regressões ocorrências de uma classe versus todas outras em subtribos e gêneros do complexo *Heliantheae-Helenieae* segundo Bremer, usando o resumo do método passo a passo adiante do MLR.

Equação 4.5.3.1: $MONO = -2,94 + 0,48 SESQ + 1,54 BENZF + 0,91 CUMA - 0,48 POLI + 0,16 FENI + 0,52 LACT + 0,50 ACET - 2,6 DITE + 0,82 TRIT - 0,72 BENZP$

Equação 4.5.3.2: $SESQ = 12,83 + 0,89 BENZF + 0,44 MONO + 0,22 ACET - 0,28 DITE$

Equação 4.5.3.3: $LACT = 42,13 + 0,43 ACET + 0,39 MONO$

Equação 4.5.3.4: $DITE = 5,43 + 0,73 BENZP + 0,39 CUMA - 0,29 FLAV + 0,24 TRIT - 0,02 SESQ + 0,15 LACT - 0,22 MONO$

Equação 4.5.3.5: $TRIT = -1,12 + 3,52 DITE + 1,04 FLAV - 0,01 ACET - 1,4 CUMA + 0,78 MONO - 2,4 BENZP - 0,51 LACT$

Equação 4.5.3.6: $CUMA = -0,44 + 0,71 FLAV + 0,57 MONO + 2,44 DITE - 1,8 BENZP - 0,38 LACT - 0,56 TRIT$

Equação 4.5.3.7: $FLAV = 19,74 + 1,24 CUMA + 0,77 TRIT - 3,1 DITE + 2,34 BENZP - 0,17 SESQ + 0,44 LACT - 0,62 MONO$

Equação 4.5.3.8: $POLI = 16,35 + 1,36 FENI - 1,6 BENZF - 0,57 MONO - 0,01 TRIT + 0,55 SESQ - 0,25 ACET + 0,46 DITE$

Equação 4.5.3.9: $BENZF = 1,68 + 1,08 BENZP - 0,28 FLAV - 0,31 ACET + 0,20 FENI + 0,04 CUMA - 0,13 TRIT + 0,14 DITE$

Equação 4.5.3.10: $BENZP = -1,01 + 0,82 BENZF + 0,28 FLAV + 0,25 ACET - 0,16 FENI - 0,07 CUMA + 0,08 TRIT + 0,04 SESQ$

Equação 4.5.3.11: $ACET = 0,94 + 3,18 BENZP - 0,09 LACT - 0,49 TRIT - 3,2 BENZF - 0,81 FLAV + 0,62 FENI + 0,77 DITE + 0,08 MONO$

Equação 4.5.3.12: $FENI = -0,55 + 1,11 BENZF + 0,69 POLI + 0,39 MONO - 0,32 DITE + 0,17 ACET - 0,36 SESQ$

Equação 4.5.3.13: $MONO = -0,18 + 0,62 SESQ + 0,35 LACT + 0,23 FLAV - 0,23 DITE$

Equação 4.5.3.14: $SESQ = 0,17 + 0,83 MONO + 0,24 DITE - 0,19 FLAV + 0,09 CUMA$

Equação 4.5.3.15: $LACT = 2,20 + 0,76 MONO - 0,20 FLAV - 0,10 CUMA + 0,07 DITE$

Equação 4.5.3.16: $DITE = 4,82 + 0,72 \text{ SESQ} - 0,62 \text{ MONO} + 0,15 \text{ FLAV} - 0,12 \text{ CUMA}$

Equação 4.5.3.17: $TRIT = 0,19 + 0,52 \text{ FENI} - 0,12 \text{ MONO} + 0,09 \text{ FLAV}$

Equação 4.5.3.18: $CUMA = 0,03 + 0,32 \text{ POLI} + 0,27 \text{ SESQ} - 0,22 \text{ LACT} - 0,11 \text{ DITE} + 0,10 \text{ FLAV}$

Equação 4.5.3.19: $FLAV = 5,15 + 0,79 \text{ MONO} - 0,33 \text{ LACT} - 0,46 \text{ SESQ} + 0,14 \text{ DITE} + 0,46 \text{ BENZP} - 0,37 \text{ BENZF} + 0,12 \text{ CUMA}$

Equação 4.5.3.20: $POLI = 2,75 + 0,34 \text{ CUMA} + 0,10 \text{ TRIT}$

Equação 4.5.3.21: $BENZF = 0,42 + 0,88 \text{ BENZP} - 0,14 \text{ FLAV} - 0,06 \text{ ACET}$

Equação 4.5.3.22: $BENZP = -0,06 + 0,85 \text{ BENZF} + 0,16 \text{ FLAV} + 0,08 \text{ ACET}$

Equação 4.5.3.23: $ACET = 0,03 + 0,28 \text{ BENZP} - 0,19 \text{ BENZF}$

Equação 4.5.3.24: $FENI = 0,08 + 0,50 \text{ TRIT} + 0,21 \text{ MONO} - 0,09 \text{ FLAV}$

Equações das regressões ocorrências de uma classe versus todas outras em subtribos e gêneros da tribo Heliantheae segundo Stuessy, usando o resumo do método passo a passo adiante do MLR.

Equação 4.5.4.1: $MONO = 0,004 + 0,71 \text{ LACT} - 1,6 \text{ BENZF} + 0,84 \text{ TRIT} - 0,39 \text{ FENI} + 0,55 \text{ SESQ} + 0,24 \text{ FLAV}$

Equação 4.5.4.2: $SESQ = -1,13 + 0,89 \text{ TRIT} + 0,09 \text{ LACT} + 0,15 \text{ DITE} - 0,11 \text{ CUMA} + 0,41 \text{ FENI} - 0,39 \text{ POLI} + 0,23 \text{ MONO} - 0,11 \text{ ACET}$

Equação 4.5.4.3: $LACT = 18,11 + 0,73 \text{ MONO} + 0,53 \text{ BENZF} - 0,19 \text{ FLAV}$

Equação 4.5.4.4: $DITE = 38,31 + 1,35 \text{ CUMA} + 1,25 \text{ SESQ} - 1,7 \text{ TRIT} - 0,40 \text{ LACT} - 0,32 \text{ FLAV} + 1,57 \text{ BENZF} - 1,0 \text{ BENZP} + 0,17 \text{ FENI}$

Equação 4.5.4.5: $TRIT = 0,39 + 0,18 \text{ BENZF} + 0,48 \text{ POLI} + 0,48 \text{ SESQ} - 0,33 \text{ FENI} + 0,02 \text{ ACET} - 0,10 \text{ LACT} - 0,17 \text{ FLAV} + 0,48 \text{ BENZP}$

Equação 4.5.4.6: $CUMA = -0,78 + 0,71 \text{ TRIT} + 0,29 \text{ FLAV} + 0,45 \text{ DITE} - 0,55 \text{ SESQ} + 0,14 \text{ ACET} + 0,17 \text{ LACT}$

Equação 4.5.4.7: $FLAV = 54,53 + 0,93 \text{ CUMA} - 0,40 \text{ ACET} - 0,40 \text{ DITE} + 0,41 \text{ BENZP}$

Equação 4.5.4.8: $POLI = -2,52 + 0,73 \text{ FENI} + 0,34 \text{ FLAV} - 0,13 \text{ DITE} + 0,17 \text{ CUMA} - 1,20 \text{ BENZP} + 1,66 \text{ TRIT} - 0,77 \text{ SESQ} + 0,14 \text{ LACT}$

Equação 4.5.4.9: $BENZF = -3,92 + 0,66 \text{ BENZP} + 0,45 \text{ TRIT} - 0,13 \text{ FENI} - 0,16 \text{ ACET}$

Equação 4.5.4.10: $BENZP = 1,03 + 0,75 \text{ BENZF} + 0,11 \text{ ACET} + 0,34 \text{ FENI} - 0,34 \text{ POLI} + 0,10 \text{ FLAV} - 0,22 \text{ DITE} + 0,33 \text{ CUMA}$

Equação 4.5.4.11: $ACET = 1,24 + 1,71 \text{ BENZP} - 1,30 \text{ BENZF} - 0,65 \text{ FLAV} + 0,93 \text{ CUMA} - 0,35 \text{ DITE}$

Equação 4.5.4.12: $FENI = 2,85 + 0,65 \text{ POLI}$

Equação 4.5.4.13: $MONO = + 0,32 + 0,55 \text{ LACT} + 0,26 \text{ SESQ}$

Equação 4.5.4.14: $SESQ = 1,64 + 0,36 \text{ ACET} + 0,36 \text{ FENI} + 0,27 \text{ MONO} + 0,09 \text{ TRIT}$

Equação 4.5.4.15: $LACT = 6,62 + 0,58 \text{ MONO} + 0,22 \text{ TRIT} - 0,07 \text{ FENI}$

Equação 4.5.4.16: $DITE = 2,72 + 0,33 \text{ TRIT} + 0,32 \text{ CUMA} + 0,22 \text{ FLAV} - 0,20 \text{ ACET} - 0,16 \text{ POLI} + 0,14 \text{ MONO}$

Equação 4.5.4.17: $TRIT = - 0,09 + 0,30 \text{ CUMA} + 0,35 \text{ DITE} + 0,19 \text{ LACT} + 0,15 \text{ ACET} + 0,07 \text{ FENI}$

Equação 4.5.4.18: $CUMA = 0,03 + 0,38 \text{ TRIT} + 0,30 \text{ DITE} + 0,24 \text{ POLI} - 0,08 \text{ FENI}$

Equação 4.5.4.19: $FLAV = 3,77 + 0,29 \text{ DITE} + 0,26 \text{ POLI} + 0,46 \text{ BENZP} - 0,32 \text{ BENZF} - 0,14 \text{ ACET}$

Equação 4.5.4.20: $POLI = 8,05 + 0,31 \text{ FENI} + 0,26 \text{ FLAV} + 0,28 \text{ CUMA} - 0,23 \text{ DITE} - 0,10 \text{ BENZP}$

Equação 4.5.4.21: $BENZF = 0,80 + 0,92 \text{ BENZP} - 0,22 \text{ ACET} - 0,11 \text{ FLAV} - 0,07 \text{ FENI} - 0,07 \text{ DITE}$

Equação 4.5.4.22: $BENZP = - 0,13 + 0,75 \text{ BENZF} + 0,30 \text{ ACET} + 0,14 \text{ FLAV} + 0,08 \text{ FENI} - 0,05 \text{ POLI} + 0,05 \text{ DITE}$

Equação 4.5.4.23: $ACET = - 0,05 + 0,36 \text{ SESQ} + 0,62 \text{ BENZP} - 0,38 \text{ BENZF} - 0,14 \text{ FENI} - 0,22 \text{ DITE} + 0,15 \text{ TRIT} + 0,12 \text{ MONO}$

Equação 4.5.4.24: $FENI = 0,21 + 0,48 \text{ SESQ} + 0,26 \text{ POLI} - 0,13 \text{ LACT} - 0,11 \text{ ACET}$

Equações das regressões ocorrências de uma classe versus todas outras em subtribos e gêneros da tribo Heliantheae segundo Robinson, usando o resumo do método passo à passo adiante do MLR.

Equação 4.5.5.1: $MONO = 2,08 + 0,94 \text{ SESQ} - 1,30 \text{ BENZF} + 0,49 \text{ CUMA} - 0,21 \text{ DITE} - 0,78 \text{ POLI} + 1,03 \text{ FENI} + 0,18 \text{ ACET} + 0,13 \text{ LACT}$

Equação 4.5.5.2: $SESQ = - 1,78 + 0,69 \text{ BENZF} + 0,87 \text{ MONO} - 0,42 \text{ CUMA} + 0,68 \text{ POLI} + 0,28 \text{ DITE} - 0,40 \text{ ACET} - 0,70 \text{ FENI} - 0,11 \text{ LACT} - 0,51 \text{ TRIT} + 0,99 \text{ BENZP}$

Equação 4.5.5.3: $LACT = 29,47 + 0,21 \text{ BENZP} + 0,28 \text{ MONO} + 0,24 \text{ DITE}$

Equação 4.5.5.4: $DITE = 27,71 + 1,01 TRIT - 0,49 FLAV + 0,32 CUMA - 0,16 ACET - 0,14 POLI$

Equação 4.5.5.5: $TRIT = - 0,17 + 1,68 BENZP + 0,10 FLAV + 0,19 DITE - 0,43 ACET - 0,80 BENZF + 0,20 POLI$

Equação 4.5.5.6: $CUMA = - 0,91 + 0,41 FLAV + 0,40 MONO + 0,37 DITE$

Equação 4.5.5.7: $FLAV = 22,34 + 1,14 TRIT - 0,48 BENZF + 0,35 CUMA - 0,31 DITE - 0,11 ACET$

Equação 4.5.5.8: $POLI = 17,50 + 1,42 FENI - 0,81 SESQ$

Equação 4.5.5.9: $BENZF = 0,67 + 0,75 BENZF + 0,33 SESQ - 0,29 MONO + 0,12 CUMA - 0,17 TRIT - 0,13 ACET + 0,41 FENI - 0,22 POLI - 0,09 FLAV$

Equação 4.5.5.10: $BENZP = - 0,16 + 0,57 BENZF + 0,37 TRIT + 0,28 ACET - 0,11 POLI - 0,05 DITE + 0,07 FLAV - 0,02 MONO$

Equação 4.5.5.11: $ACET = 0,02 + 2,71 BENZP - 1,10 TRIT + 0,02 BENZF + 1,20 POLI - 0,16 FLAV + 1,16 MONO - 1,20 FENI - 0,57 CUMA + 0,41 DITE - 1,00 SESQ - 0,17 LACT$

Equação 4.5.5.12: $FENI = - 0,30 + 0,70 MONO - 0,50 SESQ - 0,10 LACT + 0,21 DITE - 0,41 TRIT - 0,33 CUMA - 0,02 FLAV + 0,82 POLI + 0,54 BENZF + 0,83 BENZP - 0,37 ACET$

Equação 4.5.5.13: $MONO = - 0,25 + 0,56 LACT + 0,34 SESQ + 0,17 FLAV + 0,17 ACET - 0,10 FENI - 0,12 DITE + 0,12 TRIT$

Equação 4.5.5.14: $SESQ = 0,58 + 0,56 MONO + 0,47 FENI + 0,14 DITE - 0,11 CUMA + 0,09 ACET$

Equação 4.5.5.15: $LACT = 4,26 + 0,89 MONO - 0,24 FLAV + 0,12 CUMA - 0,11 ACET - 0,08 FENI + 0,07 DITE$

Equação 4.5.5.16: $DITE = 4,91 + 0,39 CUMA + 0,36 TRIT - 0,13 FLAV - 0,09 ACET - 0,09 POLI + 0,27 SESQ - 0,38 MONO + 0,19 LACT - 0,12 FENI$

Equação 4.5.5.17: $TRIT = - 0,10 + 0,52 FLAV + 0,33 CUMA - 0,24 POLI + 0,13 MONO + 0,19 DITE + 0,22 BENZP - 0,15 BENZF + 0,06 FENI$

Equação 4.5.5.18: $CUMA = - 0,09 + 0,31 DITE + 0,38 POLI + 0,46 TRIT - 0,23 FLAV + 0,20 LACT - 0,16 SESQ$

Equação 4.5.5.19: $FLAV = 3,46 + 0,70 TRIT + 0,30 POLI - 0,21 CUMA - 0,13 DITE - 0,16 ACET + 0,27 BENZP - 0,21 BENZF$

Equação 4.5.5.20: $POLI = 5,66 + 0,31 FENI + 0,51 CUMA - 0,11 DITE + 0,43 FLAV - 0,45 TRIT$

Equação 4.5.5.21: $BENZF = 0,72 + 0,93 BENZP - 0,14 TRIT - 0,13 ACET - 0,09 FLAV - 0,06 SESQ + 0,18 LACT - 0,20 MONO$

Equação 4.5.5.22: $BENZP = -0,27 + 0,75 BENZF + 0,19 TRIT + 0,22 ACET + 0,14 FLAV + 0,07 SESQ - 0,07 CUMA$

Equação 4.5.5.23: $ACET = -0,004 + 0,60 MONO + 0,48 BENZP - 0,30 FLAV - 0,26 BENZF - 0,16 LACT$

Equação 4.5.5.24: $FENI = 0,07 + 0,76 SESQ - 0,27 MONO + 0,24 POLI - 0,15 LACT$

Equações das regressões das médias dos passos Oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribos nas tribos da família Asteraceae segundo Bremer, usando o resumo do método passo a passo adiante do MLR.

Equação 4.6.1.1: $Oxi-MONO = 3,76 - 0,42 Oxi-LACT - 0,39 Oxi-BENZP + 0,27 Oxi-CUMA$

Equação 4.6.1.2: $Oxi-SESQ = 18,91 - 0,38 Oxi-DITE - 0,71 Oxi-FLAVB - 0,53 Oxi-FLAVA - 0,56 Oxi-FENI - 0,32 Oxi-CUMA - 0,21 Oxi-TRIT$

Equação 4.6.1.3: $Oxi-LACT = 8,70 - 0,91 Oxi-ACET - 0,31 Oxi-FENI - 0,23 Oxi-MONO + 0,22 Oxi-FLAVA$

Equação 4.6.1.4: $Oxi-DITE = 15,69 - 0,30 Oxi-SESQ - 0,18 Oxi-FENI - 0,46 Oxi-POLI - 0,59 Oxi-TRIT - 0,35 Oxi-CUMA + 0,48 Oxi-FLAVA - 0,18 Oxi-BENZP$

Equação 4.6.1.5: $Oxi-TRIT = 29,71 - 0,56 Oxi-CUMA - 0,50 Oxi-FLAVB - 0,46 Oxi-SESQ - 0,81 Oxi-DITE + 0,38 Oxi-ACET - 0,37 Oxi-POLI + 0,37 Oxi-FLAVA - 0,20 Oxi-BENZP$

Equação 4.6.1.6: $Oxi-CUMA = 10,11 - 0,98 Oxi-TRIT - 0,84 Oxi-FLAVB - 0,74 Oxi-SESQ + 0,48 Oxi-ACET - 0,65 Oxi-DITE - 0,30 Oxi-POLI$

Equação 4.6.1.7: $Oxi-FLAVA = 0,29 - 0,76 Oxi-SESQ - 0,66 Oxi-FLAVB - 0,51 Oxi-FENI + 0,38 Oxi-POLI + 0,32 Oxi-TRIT + 0,24 Oxi-DITE$

Equação 4.6.1.8: $Oxi-FLAVB = 2,49 - 0,99 Oxi-SESQ - 0,83 Oxi-FLAVA - 0,60 Oxi-FENI + 0,31 Oxi-POLI - 0,24 Oxi-CUMA$

Equação 4.6.1.9: $Oxi-POLI = 11,95 - 0,95 Oxi-DITE + 0,27 Oxi-FLAVB + 0,76 Oxi-FLAVA - 0,72 Oxi-TRIT - 0,40 Oxi-CUMA$

Equação 4.6.1.10: $Oxi-BENZF = 2,92 - 0,57 Oxi-ACET - 0,27 Oxi-FLAVA + 0,20 Oxi-CUMA$

Equação 4.6.1.11: $Oxi-BENZP = 2,70 - 0,37 Oxi-DITE - 0,33 Oxi-MONO + 0,33 Oxi-ACET$

Equação 4.6.1.12: $Oxi-ACET = 8,08 - 0,52 Oxi-LACT - 0,41 Oxi-FENI - 0,31 Oxi-BENZF$

Equação 4.6.1.13: $Oxi-FENI = 7,65 - 0,54 Oxi-ACET - 0,19 Oxi-LACT + 0,34 Oxi-TRIT - 0,81 Oxi-SESQ - 0,78 Oxi-FLAVA - 0,52 Oxi-FLAVB + 0,24 Oxi-POLI$

Equações das regressões das médias dos passos Oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em tribos nas tribos da família Asteraceae segundo a “metatree”, usando o resumo do método passo a passo adiante do MLR.

Equação 4.6.2.1 : $\text{OxiMONO} = +2,82 + 0,71 \text{ OxiACET} - 0,47 \text{ OxiTRIT} - 0,32 \text{ OxiPOLI} + 0,39 \text{ OxiFENI} + 0,28 \text{ OxiFLAVA}$

Equação 4.6.2.2 : $\text{OxiSESQ} = 7,92 - 0,60 \text{ OxiDITE} - 0,48 \text{ OxiFLAV-B} - 0,27 \text{ OxiFLAVA} + 0,14 \text{ OxiACET}$

Equação 4.6.2.3 : $\text{OxiLACT} = +4,47 + 0,37 \text{ OxiFENI} - 0,28 \text{ OxiTRIT} - 0,27 \text{ OxiACET}$

Equação 4.6.2.4 : $\text{OxiDITE} = +6,58 - 1,00 \text{ OxiSESQ} - 0,45 \text{ OxiFLAVB} - 0,17 \text{ OxiFLAVA}$

Equação 4.6.2.5 : $\text{OxiTRIT} = 15,90 - 0,57 \text{ OxiCUMA} - 0,47 \text{ OxiFLAV-B} - 0,25 \text{ OxiLACT} - 0,23 \text{ OxiSESQ}$

Equação 4.6.2.6 : $\text{OxiCUMA} = 3,57 - 0,68 \text{ OxiTRIT} - 0,27 \text{ OxiFLAVB}$

Equação 4.6.2.7 : $\text{OxiFLAVA} = -0,12 - 0,66 \text{ OxiSESQ} - 0,43 \text{ OxiFLAVB} + 0,38 \text{ OxiPOLI} + 0,33 \text{ OxiMONO}$

Equação 4.6.2.8 : $\text{OxiFLAVB} = 3,58 - 1,00 \text{ OxiSESQ} - 0,50 \text{ OxiDITE} - 0,26 \text{ OxiFLAVA} - 0,34 \text{ OxiTRIT} + 0,37 \text{ OxiACET} - 0,25 \text{ OxiMONO}$

Equação 4.6.2.9 : $\text{OxiPOLI} = +12,15 - 0,31 \text{ OxiFENI} + 0,24 \text{ OxiBENZP}$

Equação 4.6.2.10 : $\text{OxiBENZF} = 0,78 + 0,37 \text{ OxiCUMA} - 0,30 \text{ OxiMONO}$

Equação 4.6.2.11 : $\text{OxiBENZP} = -0,49 + 0,27 \text{ OxiPOLI} + 0,26 \text{ OxiSESQ}$

Equação 4.6.2.12 : $\text{OxiACET} = -3,18 + 0,81 \text{ OxiMONO} - 0,04 \text{ OxiLACT} - 0,32 \text{ OxiFENI} + 0,36 \text{ OxiSESQ} + 0,42 \text{ OxiTRIT} + 0,25 \text{ OxiFLAV-B} + 0,19 \text{ OxiPOLI}$

Equação 4.6.2.13 : $\text{OxiFENI} = 3,35 + 0,42 \text{ OxiLACT} - 0,28 \text{ OxiFLAVB} - 0,27 \text{ OxiFLAVA}$

Equação 4.6.2.14 : $\text{OxiMONO} = 0,49 + 0,48 \text{ OxiCUMA} - 0,59 \text{ OxiSESQ} - 0,42 \text{ OxiFLAVB}$

Equação 4.6.2.15 : $\text{OxiSESQ} = -8,23 + 2,37 \text{ OxiTRIT} + 1,98 \text{ OxiCUMA} + 0,10 \text{ OxiFENI} - 1,1 \text{ OxiBENZF} - 0,20 \text{ OxiBENZP} - 0,20 \text{ OxiMONO} - 0,48 \text{ OxiLACT} + 0,11 \text{ OxiFLAVA}$

Equação 4.6.2.16: $\text{OxiLACT} = -10,40 + 1,27 \text{ OxiACET} + 0,34 \text{ OxiFLAVB} + 0,96 \text{ OxiDITE} - 0,27 \text{ OxiFENI} - 0,42 \text{ OxiSESQ} - 0,42 \text{ OxiBENZF}$

Equação 4.6.2.17 : $\text{OxiDITE} = 13,18 + 0,14 \text{ OxiBENZF} - 2,1 \text{ OxiACET} - 2,3 \text{ OxiPOLI} + 0,72 \text{ OxiFLAVA} - 0,67 \text{ OxiMONO} - 1,0 \text{ OxiSESQ} - 0,35 \text{ OxiFLAVB} - 0,56 \text{ OxiLACT}$

Equação 4.6.2.18 : $\text{OxiTRIT} = 11,10 - 0,83 \text{ OxiCUMA} + 0,42 \text{ OxiSESQ} + 0,44 \text{ OxiBENZF} + 0,08 \text{ OxiBENZP} + 0,09 \text{ OxiMONO} + 0,20 \text{ OxiLACT} - 0,05 \text{ OxiFLAVA} - 0,04 \text{ OxiFENI}$

Equação 4.6.2.19 : $\text{OxiCUMA} = 1,96 - 1,2 \text{ OxiTRIT} + 0,1 \text{ OxiBENZP} + 0,24 \text{ OxiLACT} + 0,51 \text{ OxiSESQ} + 0,53 \text{ OxiBENZF} + 0,1 \text{ OxiMONO} - 0,06 \text{ OxiFLAVA} - 0,05 \text{ OxiFENI}$

Equação 4.6.2.20 : $\text{OxiFLAVA} = 5,04 - 0,83 \text{ OxiFLAVB} - 0,75 \text{ OxiSESQ}$

Equação 4.6.2.21 : $\text{OxiFLAVB} = 3,91 - 0,51 \text{ OxiSESQ} - 0,38 \text{ OxiFLAVA} - 0,65 \text{ OxiACET} + 0,56 \text{ OxiLACT} - 0,37 \text{ OxiMONO} - 0,35 \text{ OxiTRIT}$

Equação 4.6.2.22 : $\text{OxiPOLI} = 23,03 - 0,92 \text{ OxiACET} - 0,44 \text{ OxiDITE} + 0,32 \text{ OxiFLAVA} + 0,06 \text{ OxiBENZF} - 0,29 \text{ OxiMONO} - 0,45 \text{ OxiSESQ} - 0,15 \text{ OxiFLAVB} - 0,25 \text{ OxiLACT}$

Equação 4.6.2.23 : $\text{OxiBENZF} = - 5,86 - 0,25 \text{ OxiDITE} + 0,75 \text{ OxiFENI} + 0,14 \text{ OxiLACT} - 0,28 \text{ OxiFLAVA} + 0,74 \text{ OxiBENZP} + 1,41 \text{ OxiPOLI} - 0,42 \text{ OxiFLAVB} + 0,35 \text{ OxiSESQ}$

Equação 4.6.2.24 : $\text{OxiBENZP} = 6,15 - 0,67 \text{ OxiFENI} - 1,4 \text{ OxiPOLI} + 1,55 \text{ OxiBENZF} - 0,97 \text{ OxiCUMA} + 0,38 \text{ OxiLACT} + 0,55 \text{ OxiDITE} - 1,4 \text{ OxiTRIT}$

Equação 4.6.2.25 : $\text{OxiACET} = 1,85 + 0,46 \text{ OxiLACT} - 0,36 \text{ OxiFLAVB} - 0,74 \text{ OxiDITE} + 0,30 \text{ OxiFENI} + 0,12 \text{ OxiSESQ} + 0,22 \text{ OxiBENZP} - 0,11 \text{ OxiMONO}$

Equação 4.6.2.26 : $\text{OxiFENI} = 14,14 - 0,26 \text{ OxiBENZP} + 1,01 \text{ OxiBENZF} - 0,75 \text{ OxiLACT} + 0,62 \text{ OxiFLAVA} - 1,8 \text{ OxiPOLI} + 0,94 \text{ OxiFLAVB} - 0,29 \text{ OxiCUMA} - 0,38 \text{ OxiSESQ}$

Equações das regressões das médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos do complexo Heliantheae-Helenieae da família Asteraceae segundo Bremer usando o resumo do método passo a passo adiante do MLR.

Equação 4.6.3.1 : $\text{OxiMONO} = 13,07 - 0,50 \text{ Oxi-FLAVB} + 0,61 \text{ Oxi-BENZF} - 0,49 \text{ Oxi-CUMA} - 0,38 \text{ Oxi-SESQ} - 0,36 \text{ Oxi-LACT}$

Equação 4.6.3.2 : $\text{Oxi-SESQ} = - 0,12 + 0,39 \text{ Oxi-TRIT} + 0,34 \text{ Oxi-DITE}$

Equação 4.6.3.3 : $\text{Oxi-LACT} = 5,14 - 0,81 \text{ Oxi-TRIT} - 0,55 \text{ Oxi-MONO} + 0,50 \text{ Oxi-BENZF} - 0,61 \text{ Oxi-FENI} + 0,40 \text{ Oxi-ACET} + 0,24 \text{ Oxi-CUMA} - 0,49 \text{ Oxi-POLI} + 0,30 \text{ Oxi-FLAVA} + 0,34 \text{ Oxi-FLAVB} + 0,20 \text{ Oxi-DITE}$

Equação 4.6.3.4 : $\text{Oxi-DITE} = - 0,04 + 0,43 \text{ Oxi-SESQ} + 0,24 \text{ Oxi-POLI}$

Equação 4.6.3.5 : $\text{Oxi-TRIT} = -16,58 + 0,99 \text{ Oxi-CUMA} + 0,32 \text{ Oxi-SESQ} + 0,76 \text{ Oxi-ACET} - 0,47 \text{ Oxi-BENZP} - 0,40 \text{ Oxi-LACT} - 0,32 \text{ Oxi-MONO} + 0,23 \text{ Oxi-DITE}$

Equação 4.6.3.6 : $\text{Oxi-CUMA} = 2,84 - 0,63 \text{ Oxi-ACET} + 0,69 \text{ Oxi-BENZP} + 0,62 \text{ Oxi-TRIT} - 0,41 \text{ Oxi-SESQ} - 0,22 \text{ Oxi-DITE} - 0,22 \text{ Oxi-FENI}$

Equação 4.6.3.7 : $\text{Oxi-FLAVA} = 2,41 - 0,27 \text{ Oxi-TRIT}$

Equação 4.6.3.8 : $\text{Oxi-FLAVB} = 4,32 - 0,66 \text{ Oxi-MONO} - 0,72 \text{ Oxi-BENZP} + 0,43 \text{ Oxi-FENI} + 0,64 \text{ Oxi-BENZF} - 0,29 \text{ Oxi-CUMA}$

Equação 4.6.3.9 : $\text{Oxi-POLI} = 17,84 + 0,40 \text{ Oxi-DITE} - 0,80 \text{ Oxi-BENZP} + 0,76 \text{ Oxi-BENZF} + 0,49 \text{ Oxi-FLAVA} - 0,37 \text{ Oxi-LACT}$

Equação 4.6.3.10 : $\text{Oxi-BENZF} = -7,92 + 0,41 \text{ Oxi-BENZP} + 0,53 \text{ Oxi-MONO} + 0,08 \text{ Oxi-FLAVB} + 0,46 \text{ Oxi-CUMA} + 0,15 \text{ Oxi-FENI} - 0,50 \text{ Oxi-FLAVA} + 0,51 \text{ Oxi-POLI} + 0,53 \text{ Oxi-LACT}$

Equação 4.6.3.11 : $\text{Oxi-BENZP} = 0,44 + 0,35 \text{ Oxi-BENZF} + 0,72 \text{ Oxi-FENI} - 0,57 \text{ Oxi-FLAVB} + 0,32 \text{ Oxi-SESQ} + 0,46 \text{ Oxi-LACT} + 0,24 \text{ Oxi-TRIT}$

Equação 4.6.3.12 : $\text{Oxi-ACET} = 2,70 - 1,20 \text{ Oxi-CUMA} + 0,91 \text{ Oxi-BENZP} + 0,77 \text{ Oxi-TRIT} - 0,56 \text{ Oxi-SESQ} - 0,29 \text{ Oxi-FENI} - 0,24 \text{ Oxi-DITE}$

Equação 4.6.3.13 : $\text{Oxi-FENI} = 2,79 + 0,81 \text{ Oxi-BENZP} + 0,58 \text{ Oxi-FLAVB} - 0,89 \text{ Oxi-LACT} - 0,56 \text{ Oxi-TRIT} - 0,25 \text{ Oxi-POLI} + 0,12 \text{ Oxi-FLAVA} - 0,31 \text{ Oxi-SESQ} - 0,37 \text{ Oxi-MONO} + 0,18 \text{ Oxi-ACET}$

Equações das regressões das médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Stuessy usando o resumo do método passo a passo adiante do MLR.

Equação 4.6.4.1 : $\text{OxiMONO} = 0,14 + 0,43 \text{ Oxi-BENZF} - 0,16 \text{ Oxi-DITE} - 0,70 \text{ Oxi-POLI} + 0,36 \text{ Oxi-FLAVA} - 0,43 \text{ Oxi-FENI} + 0,35 \text{ Oxi-BENZP} - 0,28 \text{ Oxi-ACET}$

Equação 4.6.4.2 : $\text{Oxi-SESQ} = 4,61 - 0,42 \text{ Oxi-FLAVB} - 0,30 \text{ Oxi-FLAVA} - 0,41 \text{ Oxi-LACT} + 0,39 \text{ Oxi-DITE} - 0,25 \text{ Oxi-ACET} - 0,23 \text{ Oxi-FENI}$

Equação 4.6.4.3 : $\text{Oxi-LACT} = 15,13 - 0,67 \text{ Oxi-SESQ} - 0,33 \text{ Oxi-BENZP} - 0,26 \text{ Oxi-TRIT}$

Equação 4.6.4.4 : $\text{Oxi-DITE} = -20,21 + 1,28 \text{ Oxi-SESQ} + 0,61 \text{ Oxi-LACT} + 0,56 \text{ Oxi-FENI} + 0,50 \text{ Oxi-CUMA} + 0,24 \text{ Oxi-POLI} + 0,26 \text{ Oxi-FLAVA}$

Equação 4.6.4.5 : $\text{Oxi-TRIT} = 8,43 - 0,34 \text{ Oxi-CUMA} - 0,29 \text{ Oxi-LACT}$

Equação 4.6.4.6 : $\text{Oxi-CUMA} = 1,46 + 0,92 \text{ Oxi-FLAVB} + 0,66 \text{ Oxi-ACET} - 0,35 \text{ Oxi-BENZP} + 0,28 \text{ Oxi-SESQ}$

Equação 4.6.4.7 : $\text{Oxi-FLAVA} = -0,57 + 0,66 \text{ Oxi-BENZP} + 0,09 \text{ Oxi-CUMA} - 0,92 \text{ Oxi-SESQ} - 1,10 \text{ Oxi-FLAVB} - 0,57 \text{ Oxi-BENZF} + 0,34 \text{ Oxi-DITE}$

Equação 4.6.4.8 : $\text{Oxi-FLAVB} = -0,21 - 0,58 \text{ Oxi-SESQ} + 0,49 \text{ Oxi-CUMA} - 0,33 \text{ Oxi-ACET} + 0,44 \text{ Oxi-BENZP} - 0,34 \text{ Oxi-FLAVA} - 0,26 \text{ Oxi-BENZF} + 0,16 \text{ Oxi-DITE}$

Equação 4.6.4.9 : $\text{Oxi-POLI} = -3,39 - 0,75 \text{ Oxi-MONO} + 0,57 \text{ Oxi-BENZP} - 0,52 \text{ Oxi-FENI} + 0,28 \text{ Oxi-FLAVA} + 0,20 \text{ Oxi-TRIT}$

Equação 4.6.4.10 : $\text{Oxi-BENZF} = 0,05 + 0,50 \text{ Oxi-ACET} + 0,55 \text{ Oxi-MONO} + 0,24 \text{ Oxi-DITE}$

Equação 4.6.4.11 : $\text{Oxi-BENZP} = 1,12 - 0,17 \text{ Oxi-DITE} + 0,83 \text{ Oxi-POLI} + 0,67 \text{ Oxi-MONO} + 0,44 \text{ Oxi-FENI} - 0,27 \text{ Oxi-TRIT}$

Equação 4.6.4.12 : $\text{Oxi-ACET} = -0,54 + 0,29 \text{ Oxi-BENZF} + \text{Oxi-CUMA} - 0,73 \text{ Oxi-FLAVB} + 0,26 \text{ Oxi-BENZP} - 0,28 \text{ Oxi-SESQ}$

Equação 4.6.4.13 : $\text{Oxi-FENI} = 5,63 - 0,53 \text{ Oxi-CUMA} - 1,00 \text{ Oxi-SESQ} + 0,55 \text{ Oxi-DITE} - 0,89 \text{ Oxi-POLI} - 0,41 \text{ Oxi-LACT} - 0,72 \text{ Oxi-MONO} + 0,43 \text{ Oxi-BENZP} + 0,21 \text{ Oxi-TRIT}$

Equações das regressões das médias dos passos oxidativos das 12 classes de metabólitos secundários em subtribos da tribo Heliantheae segundo Robinson, usando o resumo do método passo a passo adiante do MLR.

Equação 4.6.5.1 : $\text{Oxi-MONO} = 6,61 + 0,42 \text{ Oxi-BENZF} - 0,29 \text{ Oxi-CUMA} - 0,38 \text{ Oxi-TRIT} - 0,45 \text{ Oxi-LACT} - 0,32 \text{ Oxi-SESQ}$

Equação 4.6.5.2 : $\text{Oxi-SESQ} = 6,93 - 1,10 \text{ Oxi-LACT} - 0,49 \text{ Oxi-MONO} + 0,65 \text{ Oxi-FLAVA} - 0,89 \text{ Oxi-POLI} + 0,77 \text{ Oxi-FLAVB} - 0,35 \text{ Oxi-CUMA} - 0,35 \text{ Oxi-TRIT} + 0,25 \text{ Oxi-BENZP} - 0,24 \text{ Oxi-DITE}$

Equação 4.6.5.3 : $\text{Oxi-LACT} = 8,67 - 0,63 \text{ Oxi-POLI} - 0,38 \text{ Oxi-TRIT} + 0,47 \text{ Oxi-FLAVB} - 0,46 \text{ Oxi-SESQ} + 0,29 \text{ Oxi-FLAVA} - 0,39 \text{ Oxi-MONO} - 0,22 \text{ Oxi-CUMA} + 0,17 \text{ Oxi-FENI} + 0,15 \text{ Oxi-ACET} + 0,12 \text{ Oxi-BENZP}$

Equação 4.6.5.4 : $\text{Oxi-DITE} = 10,43 - 0,48 \text{ Oxi-POLI} - 0,24 \text{ Oxi-BENZF}$

Equação 4.6.5.5 : $\text{Oxi-TRIT} = 18,01 - 1,00 \text{ Oxi-LACT} - 0,45 \text{ Oxi-MONO} - 0,63 \text{ Oxi-POLI} + 0,34 \text{ Oxi-FENI} - 0,29 \text{ Oxi-SESQ} + 0,22 \text{ Oxi-FLAVB}$

Equação 4.6.5.6 : $\text{Oxi-CUMA} = 1,86 - 0,30 \text{ Oxi-MONO} + 0,21 \text{ Oxi-FENI}$

Equação 4.6.5.7 : $\text{Oxi-FLAVA} = -3,64 - 0,87 \text{ Oxi-FLAVB} + 0,71 \text{ Oxi-SESQ} + 0,18 \text{ Oxi-TRIT} + 0,36 \text{ Oxi-CUMA} + 0,86 \text{ Oxi-POLI} + 0,95 \text{ Oxi-LACT} + 0,33 \text{ Oxi-MONO} + 0,20 \text{ Oxi-DITE} - 0,19 \text{ Oxi-BENZP}$

Equação 4.6.5.8 : $\text{Oxi-FLAVB} = -3,06 - 0,60 \text{ Oxi-FLAVA} + 0,82 \text{ Oxi-POLI} + 1,01 \text{ Oxi-LACT} + 0,62 \text{ Oxi-SESQ} + 0,29 \text{ Oxi-CUMA} - 0,28 \text{ Oxi-BENZP} + 0,19 \text{ Oxi-DITE} + 0,37 \text{ Oxi-MONO} + 0,31 \text{ Oxi-TRIT} - 0,16 \text{ Oxi-ACET}$

Equação 4.6.5.9 : $\text{Oxi-POLI} = 17,32 - 0,97 \text{ Oxi-LACT} + 0,54 \text{ Oxi-FLAVB} - 0,38 \text{ Oxi-TRIT} - 0,24 \text{ Oxi-DITE} - 0,50 \text{ Oxi-SESQ} + 0,41 \text{ Oxi-FLAVA} - 0,24 \text{ Oxi-CUMA} - 0,29 \text{ Oxi-MONO} + 0,18 \text{ Oxi-FENI}$

Equação 4.6.5.10 : $\text{Oxi-BENZF} = 0,28 + 0,29 \text{ Oxi-MONO} + 0,38 \text{ Oxi-ACET} + 0,34 \text{ Oxi-FENI} + 0,18 \text{ Oxi-BENZP} - 0,27 \text{ Oxi-LACT} - 0,29 \text{ Oxi-POLI} - 0,20 \text{ Oxi-DITE}$

Equação 4.6.5.11 : $\text{Oxi-BENZP} = 1,61 + 0,22 \text{ Oxi-BENZF} + 0,32 \text{ Oxi-FENI} - 0,30 \text{ Oxi-FLAVB}$

Equação 4.6.5.12 : $\text{Oxi-ACET} = 1,04 + 0,52 \text{ Oxi-BENZF} + 0,34 \text{ Oxi-LACT} - 0,36 \text{ Oxi-FENI} + 0,27 \text{ Oxi-FLAVA}$

Equação 4.6.5.13 : $\text{Oxi-FENI} = 0,28 + 0,33 \text{ Oxi-BENZP} + 0,33 \text{ Oxi-FLAVB} + 0,28 \text{ Oxi-BENZF}$

APÊNCIDE D: Esqueletos das 12 classes de metabólitos secundários da família Asteraceae.

MONOTERPENOS

MONOTERPENOS

37

38

39

40

41

42

43

44

45

46

47

48

SESQUITERPENOS

SESQUITERPENOS

SESQUITERPENOS

138

139

140

141

142

143

144

145

146

147

148

149

150

151

152

153

154

155

156

157

SESQUITERPENOS

SESQUITERPENOS

177

178

179

180

181

182

183

184

185

186

187

188

189

190

191

192

193

194

195

196

SESQUITERPENOS

SESQUITERPENOS

SESQUITERPENOS

SESQUITERPENOS

SESQUITERPENOS LACTONIZADOS

301

302

303

304

305

306

307

308

309

310

311

312

313

314

315

316

317

318

319

320

321

322

323

324

SESQUITERPENOS LACTONIZADOS

325

326

327

328

329

330

331

332

333

334

335

336

337

338

339

340

341

342

343

344

345

SESQUITERPENOS LACTONIZADOS

SESQUITERPENOS LACTONIZADOS

DITERPENOS

DITERPENOS

425

426

427

428

429

430

431

432

433

434

435

436

437

438

439

440

441

442

443

DITERPENOS

444

445

446

447

448

449

450

451

452

453

454

455

456

457

458

459

460

461

462

DITERPENOS

463

464

465

466

467

468

469

470

471

472

473

474

475

476

477

478

479

480

481

TRITERPENOS

TRITERPENOS

TRITERPENOS

CUMARINAS

561

562

563

564

565

566

567

568

569

570

571

572

573

574

575

576

CUMARINAS

577

578

579

580

581

582

583

584

585

586

587

588

589

590

591

CUMARINAS

592

593

594

595

596

597

598

599

600

FLAVONÓIDES

651

652

653

654

655

656

657

658

659

660

661

FLAVONÓIDES

662

663

664

665

666

667

668

669

670

POLIACETILENOS

BENZOFURANOS

711

712

713

714

715

716

717

718

719

720

721

722

BENZOFURANOS

723

724

725

726

727

728

729

730

731

732

733

734

735

BENZOPIRANOS

751

752

753

754

755

756

757

758

759

760

761

762

763

764

765

766

767

768

BENZOPIRANOS

ACETOFENONAS

790

791

792

793

794

795

796

797

798

799

800

801

802

803

804

805

806

807

ACETOFENONAS

808

809

810

811

812

813

814

815

816

FENILPROPANÓIDES

831

832

833

834

835

SÚMULA CURRICULAR

DADOS PESSOAIS

Nome: Harold Hilarion Fokoue

Local e data de nascimento: Bafang-Camarões, 15/02/1980.

EDUCAÇÃO

Lycée Bilingue d'Application, Yaoundé - Camarões, 1997.

University of Yaounde 1 - Camarões, 2002.

Licence en Chimie.

Université de Bamako - Mali, 2003.

Maîtrise en Chimie Appliquée.

OCUPAÇÃO

Bolsista de Mestrado, Agência CAPES, 2007-2009

PUBLICAÇÕES

Resumos em Congressos

1. Correia MV, Fokoue HH, Scotti MT, Ferreira MJP, Emerenciano VP. Molecular Descriptors to Predict Inhibitor Activity of Human Neutrophil Elastase (HNE) From Plants's Phenolics Compounds. In: 2nd Brazilian Conference on Natural Products (2nd BCNP), 2009, São Pedro.
2. Correia MV, Fokoue HH, Scotti MT, Emerenciano VP. Self-Organizing Maps to Predict Inhibitor Human Neutrophil Elastase Activity of Phenolics Compounds. In: 2nd Brazilian Conference on Natural Products (2nd BCNP), 2009, São Pedro.
3. Fokoue HH, Correia MV, Ferreira MJP, Alvarenga SAV, Rodrigues GV, Emerenciano VP. A New Parameter for Chemosystematic Analysis of Asteraceae Tribes. In: 2nd Brazilian Conference on Natural Products (2nd BCNP), 2009, São Pedro.
4. Fokoue HH, Correia MV, Ferreira MJP, Alvarenga SAV, Rodrigues GV, Emerenciano VP. Chemosystematics of Heliantheae (Asteraceae) Subtribes Using Cluster Analysis. In: 2nd Brazilian Conference on Natural Products (2nd BCNP), 2009, São Pedro.
5. Yamaguchi LF, Salazar KM, Freitas GC, Yoshida NC, Santos EL, Marques JV, Oliveira A, Navarro LB, Silva RA, Ferreira EA, Gaia AM, Rodrigues CA, Benedetti AM, Valero YG, Scotti MT, Correia MV, Fokoue HH, Emerenciano VP, Kato MJ. Metabolomic analysis of Piperaceae species using ESI/¹H NMR and PCA. In: 2nd Brazilian Conference on Natural Products (2nd BCNP), 2009, São Pedro.
6. Ferreira JPM, Romoff P, Fokoue HH, Scotti MT, Speck-Planche A, Scotti L, Correia MV, Lago JHG, Emerenciano VP. Molecular Descriptors to Predict the Cytotoxic Activity of Caffeic Ester Analogues. In: 4^o Simpósio Brasileiro em Química Medicinal, 2008, Porto de Galinhas.