

TÜRKİYE'YE ÖZGÜ BİTKİ VE GIDA ÖRNEKLERİNİN TEMEL BİLEŞENLER ANALİZİYLE SINIFLANDIRILMASI

Hakan KAYGUSUZ¹

¹Temel Bilimler Bölümü, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Altınbaş Üniversitesi
hakan.kaygusuz@altinbas.edu.tr

Özet

Temel bileşenler analizi (İng. Principal component analysis, PCA) çok sayıda değişkenin temsil ettiği bir verinin matematiksel bir dönüşüm ile toplam varyansı açıklayabilen temel bileşenlere geçirilmesini konu alan istatistiksel bir yöntemdir. Pek çok alanda olduğu gibi kimyasal verilere de uygulanabilen bu yöntemle, özellikle biyolojik türler için büyük önem taşıyan sınıflandırma kolayca yapılabilmektedir. Bu derleme makalesinde, Türkiye'ye özgü gıda ve bitki örneklerinin konu edildiği temel bileşenler analizi çalışmalarına değinilmiş ve sonuçları incelenmiştir. Bunlara ek olarak, bu tür çalışmaların yararı ve önemi hakkında tartışılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Temel Bileşenler Analizi, Kemometri, Bitki örnekleri, Bal, Polen.

CLASSIFICATION OF TURKISH PLANT AND FOOD SAMPLES BY PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS

Abstract

Principal component analysis (PCA) is a statistical method involving the transformation of the data into orthogonal principal components. Principal component analysis is a helpful tool to convert a dataset with higher number of variables into classifications. This review focuses on recent advances on classification of Turkish plant and nutritional samples. In addition to this, the importance of classification of the biological and chemical samples by principal component analysis is discussed.

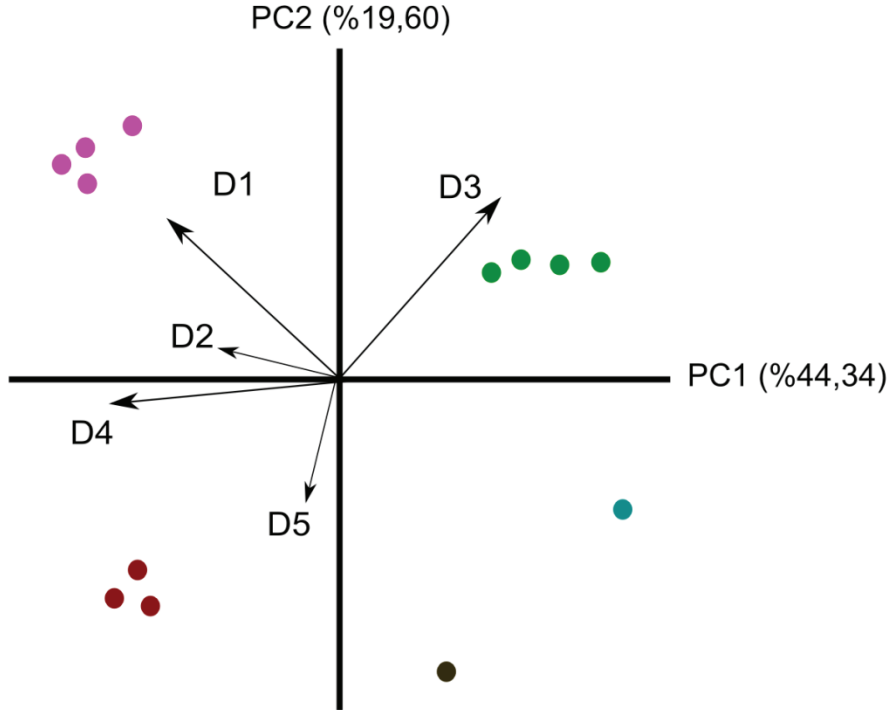
Keywords: Principal component analysis, Chemometrics, Plant samples, Honey, Pollen.

1. GİRİŞ

Kemometri, basit olarak kimyasal verilerden istatistiksel işlemlerle bilgi çıkaran disiplinler arası bir bilimdir. Matematik, istatistik ve hesaplamalı bilim; kimya, biyoloji, tıp ve kimya mühendisliği işe birleştiği noktada yer alır. Kimyasal verilerden istatistiksel olarak bilgi çıkarma işlemi eskiden beri uygulanırsa da, kemometrinin ayrı bir alt-bilim olarak yaygınlaşması 1980'li yıllara rastlar. Hâlihazırda analitik kimyanın bir alt dalı olarak incelenmektedir.

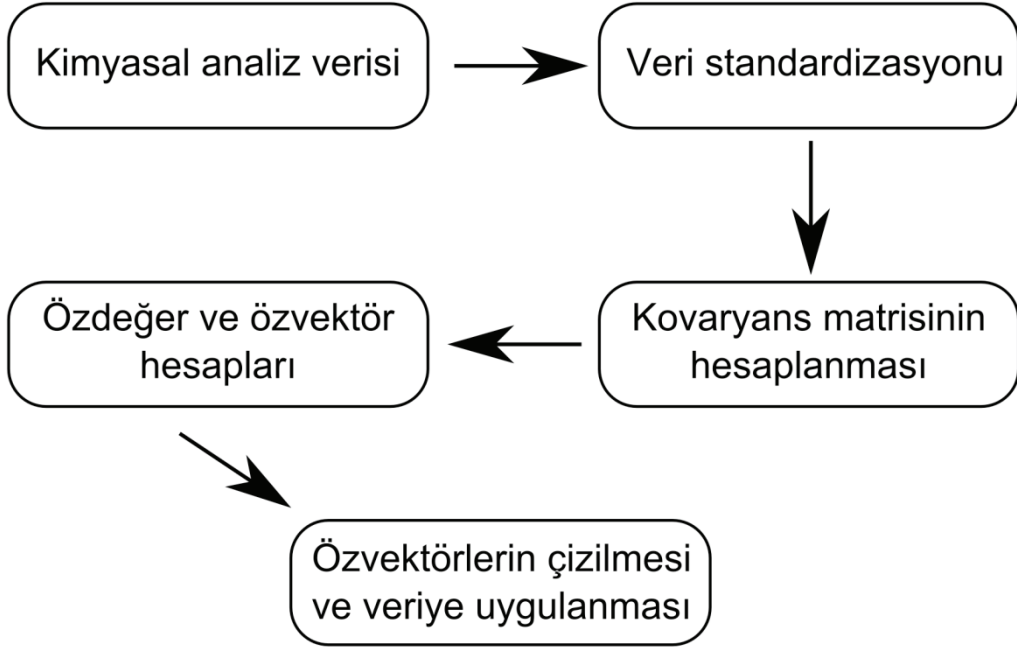
Kemometrik yöntemler, ham verinin işlenerek bilgi çıkarma işlemlerinin bir bütünüdür. Kemometrik yöntemler arasına deneysel tasarım, sınıflandırma ve kümeleme çalışmaları, çok değişkenli kalibrasyon ve çok değişkenli analizler yer alır. Temel bileşenler analizi (İng. *Principal component analysis, PCA*)

esas olarak çok sayıda değişkenin yer aldığı bir veri kümesinin, daha az sayıda ortogonal değişkenle (temel bileşenlerle) temsil edilerek, görsel olarak birbirlerinden daha iyi ayrılmalarını sağlayan bir yöntemdir. Şekil 1'de bunun bir gösterimi bulunmaktadır. 5 ayrı değişken üzerinden yapılan bir temel bileşen analiziyle örnekler ayrılmıştır. Normal şartlarda 5 değişken üzerinden böyle bir gösterimin olmayacağına dikkat edilmelidir.



Şekil 1. 5 değişken üzerinden gerçekleştirilmiş örnek bir temel bileşen analizi grafiği (D1, D2, D3, D4 ve D5 değişken vektörlerini, noktalar örnekleri göstermektedir). Veri bu makale için sanal olarak üretilmiştir.

Temel bileşenler analizi; ekonomi, mühendislik ve diğer dallarda yaygın olarak kullanıldığı gibi, kimyasal ve biyolojik veri setlerinden örnek sınıflandırılmasına geçişte de kullanılmaktadır. Şekil 2, temel bileşenler analizinin işleyişini göstermektedir.



Şekil 2. Temel bileşenler analizinin basit akım şeması

Veri setinin birbirinden farklı skalalarda olması durumunda kovaryans yerine, korelasyon matrisi kullanılır. Bu derleme makalesinde de son yıllarda Türkiye’de yürütülen bitki ve gıda örneklerinin temel bileşenler analizi üzerinde durulacaktır ve temel bileşenler analizinin matematiksel ayrıntıları bu makalenin kapsamı dışındadır. Temel bileşenler analizinin ayrıntıları için kaynaklar mevcuttur (Jolliffe, 2002 ve Jolliffe ile Cadima, 2016).

Burada ele alınan raporlar dışında, temel bileşenler analizi ve diğer kemometrik yöntemlerle Türkiye’ye özgü bitki örneklerinin analiz edildiği başka çalışmalar da mevcuttur. Bu çalışmanın amacı geniş kapsamlı bir literatür taramasından ziyade, Türkiye’nin bitki ve gıda çeşitliliğine temel bileşenler analizinin uygulanması ile sınıflandırmadaki bazı gelişmeleri aktarmaktır.

2. ÇALIŞMALAR

2.1 Türkiye’deki Sarı Kantarongillerin Uçucu Bileşen Analizi

Sarı kantaron (*Hypericum perforatum*) günümüzde gıda katkısı olarak ve geleneksel tıp yöntemlerinde sık kullanılan bir bitkidir. Türkiye’de 46’sı endemik olmak üzere toplam 96 sarı kantarongil türü bulunmasına rağmen (Güner ve ark., 2012), dünya pazarında hak ettiği yeri bulamamıştır. Bunun nedeni ise bitkilerin doğadan geleneksel yöntemlerle toplanmasıdır (Çirak, Ayan ve Kevseroğlu, 2006). Bu konudaki bir çalışmada (Bertoli, Çirak ve Seyis, 2018) üç sarı kantaron bitkisinin (*H. confertum*: Bursa-Uludağ’dan, *H. orientale*: Amasya-Tavşandağı’ndan ve *H. lydium*: Samsun-Havza’dan) uçucu bileşen analizi

gaz kromatografisi-kütle spektroskopisi (GC-MS) ile yürütülmüştür. Hidrokarbon seskiterpen içeriği bakımından diğer ikisine göre anlamlı derecede zengin olan *H. orientale*, monoteren içeriği bakımından ise *H. lydium* ön plana çıkmıştır.

Yazarlar bu çalışmada SPSS yazılımıyla istatistiksel analiz yapmış ve yaklaşık 80 bileşen için yapılan temel bileşen analizinde, ilk iki bileşenin sırasıyla toplam verinin %63,95 ve %26,49'unu açıkladığı görülmektedir. Her bir tür için üç ayrı örnek için (toplam 9 örnek) yapılan temel bileşen analizinde çok iyi bir şekilde ayrılabilirdiği gösterilmiştir. Yazarlar ayrıca kümeleme analizi ile örnekler arasındaki ilişkiyi de göstermişlerdir.

2.2 Türkiye'deki Polenlerin Temel Bileşen Analiziyle Karakterizasyonu

Kalaycıoğlu ve arkadaşları tarafından yapılan bir çalışmada (Kalaycıoğlu ve ark., 2017) Anadolu'ya özgü polenlerin şeker, organik asit, mineral, toplam fenolik içerikleri ile antioksidan aktiviteleri incelenmiştir. Çalışmanın deneysel aşamasında organik asit ve şeker miktarları kapiler elektroforez yöntemiyle, element içeriği (on dört ayrı element) indüklenmiş eşleşmiş plazma-kütle spektrometrisi (ICP-MS) ile, toplam fenolik bileşen içeriği Folin-Ciocalteu yöntemiyle ve antioksidan içerikleri de 1,1-difenil-2-pikril-hidrazil (DPPH) yöntemiyle incelenmiştir.

Temel bileşenler analizinde, mevcut değişkenlerin tümü kullanılabilirdiği gibi; veriyi temsil edecek en az sayıda değişkenin kullanılması yoluna da gidilebilir. Bu çalışmada Kalaycıoğlu ve arkadaşları, tüm verileri kullandıklarında birinci temel bileşen ve üçüncü temel bileşenin sırasıyla %38,68 ve %14,23 temsilde olduklarını görmüşlerdir. İkinci temel bileşenin kullanılması şart değildir; çoğu durumda veriyi en iyi açıklayan/sınıflayan bileşenlerin kullanılması yaygındır. Temel bileşen analizi örneklere geçirildiğinde ise Anzer polenlerinin ve kestane polenlerinin gruplandığını, diğer polen türlerinin de kendi içinde bu iki gruptan ayrıldıklarını göstermişlerdir. Böylece polenler botanik ve coğrafi kökenlerine göre sınıflandırılabilmiştir. Yazarlar çalışmada R programlama dilini kullanarak analiz yapmışlardır.

2.3 Anadolu Ballarının Temel Bileşen Analiziyle Karakterizasyonu

Kaygusuz ve arkadaşları (Kaygusuz ve ark., 2016) tarafından yapılan bu çalışmada Anadolu'ya özgü monofloral ve karışık balların vitamin B2, mineral, toplam fenolik bileşenleri ve antioksidan aktiviteleri incelenmiş ve 20 bal örneği temel bileşen analiziyle sınıflandırılmıştır. Beş temel element (kalsiyum, potasyum, demir, bakır ve mangan) indüklenmiş eşleşmiş plazma-optik emisyon spektrometrisi (ICP-OES) ile, vitamin B2 analizi lazer indüklenmiş floresans dedektörlü bir kapiler elektroforez cihazıyla, toplam fenolik bileşen miktarı Folin-Ciocalteu yöntemiyle ve antioksidan bileşen analizi bakır(II) iyonu indirgeyici antioksidan kapasite (CUPRAC) ve ABTS yöntemleriyle yapılmıştır. Bu çalışmada daha az sayıda değişkenle temel bileşen analizine gidilmiş ve bakır, vitamin B2, ABTS ve CUPRAC değişkenlerinin korelasyon matrisine göre tüm veriyi yeterli düzeyde açıklayarak ayırabildiği görülmüştür. R programlama diliyle gerçekleştirilen istatistiksel analizde; çam, kestane, püren, meşe ve çiçek ballarının bu dört değişken üzerinden uygulanan bir temel bileşen analiziyle hem ilk iki, hem de 1. ve 3. Temel bileşenler üzerinden gruplanabildiği gösterilmiştir.

Bir başka bal çalışmasında (Kıvrak, Kıvrak ve Karababa, 2017) Türkiye'den 18 ayrı kökenden gelen 54 bal örneğinin (monofloral ve karışık) fizikokimyasal analizini gerçekleştirmiş ve ballar birbirinden temel bileşen analiziyle ayrılmıştır. 18 ayrı yöre arasında Hakkari, Muğla, Isparta, Artvin bulunmakta ve bölgeler Türkiye'nin genelini temsil etmektedir. İncelenen fizikokimyasal parametreler diastaz enzim aktivitesi, elektrik iletkenliği, prolin miktarı, pH, nem miktarı ve asitliklerdir. Bunların dışında toplam fenolik miktarı ve flavonoid bileşen miktarı sırasıyla Folin-Ciocalteu ve Dowd yöntemleriyle incelenmiştir. Yazarlar çalışmada temel bileşen analizini STATISTICA yazılımını kullanarak gerçekleştirmişlerdir. Yazarlar bal örneklerinin ayrılmasında birinci ve ikinci temel bileşenleri (%41,72 ve %28,28) kullanmışlar ve sonuçların birbiriyle bağlantısını ayrıca kümeleme analiziyle kurmuşlardır.

2.4 Türkiye'deki Fasulyelerin Fenotip Ve Moleküler Genetik Çeşitliliği

Fasulye (*Phaseolus vulgaris* L.) Türkiye'de 300 yıldan beri yetiştirilmektedir ve bu bitkinin anavatanı olan Latin Amerika'da (Salk ve ark., 2008) iki gen havuzundan geldiği düşünülmektedir. Erdinç ve çalışma arkadaşları tarafından bildirilen bu raporda (Erdinç ve ark., 2017) Türkiye'deki 96 fasulye 72 ayrı morfolojik özellik açısından incelenmiş ve genetik akrabalıkları temel bileşenler analizi ile ortaya konmaya çalışılmıştır. Yazarlar çalışmada SAS kullanmıştır. Korelasyon matrisine göre yapılan temel bileşenler analizinde ilk üç temel bileşen toplam varyansın %58,46'sını açıklamaktadır. Birinci temel bileşene katkı veren değişkenlerin en önemlisinin ikincil tane rengi olduğu görülmüştür. İkincil temel bileşene katkı veren değişkenler ana tane rengi ve bitki boyu olduğu izlenmiştir. Çok sayıda örneğin yapılan analizinde, Türkiye'nin fasulyenin anavatanı olmadığı halde, fasulye bitkisinde çok büyük bir genetik çeşitlilik içerdiği gösterilmiştir. Ek olarak beyaz fasulyelerin diğerlerine göre daha yüksek genetik çeşitlilik içerdiği bildirilmiştir.

2.5 Bitkisel Yağların Temel Bileşen Analizleri

Türkiye fındık üretiminde dünyada lider durumdadır. Fındıkların sınıflandırılmasında çeşitli yöntemler bulunmasına rağmen, triaçilgliserol yapılarına dayanan bir sınıflandırma yapılmamıştır. Kıralan ve arkadaşları (Kıralan ve ark., 2014) fındık yağlarının triaçilgliserol yapılarına göre incelemiş ve temel bileşen analiziyle sınıflandırmıştır. 19 fındık çeşidinden toplam 50 örnek üzerinde çalışılmış ve örneklerin yağ miktarı, yağ asidi bileşenleri ve triaçilgliserol bileşenleri incelenmiştir. Yağ asidi bileşenleri gaz kromatografisi (GC) ve triaçilgliseroller HPLC ile incelenmiştir. Temel bileşen analizi XLSTAT tarafından yapılmıştır. Yazarların sonuçlarında ilk iki temel bileşen toplam varyansın sırasıyla %49,58 ve %25,11'ini açıklamış ve sonuçlar fındık örneklerini iyi bir şekilde sınıflandırmayı başarmıştır.

Bir başka raporda (Dağ ve ark., 2015) Ege Bölgesi'nden altı farklı zeytin türünden elde edilen sızma zeytinyağlarının biyokimyasal analizini gerçekleştirmiş ve yağ asidi ile sterol içeriklerine göre temel bileşen analiziyle sınıflandırmışlardır. Yağ asitleri ve steroller GC ile, tokoller HPLC ile incelenmiştir. Temel bileşen analizi XLSTAT ile gerçekleştirilmiştir. Bu sonuçlarda da yine tüm bal örnekleri orjinlerine göre birbirinden tamamen ayrılarak sınıflandırılabilmiştir.

3. SONUÇ

Temel bileşenler analizi, kimyasal verilere uygulamada açısından kolay ve etkili bir yöntemdir. Bu derlemede Türkiye'ye özgü bitki ve gıda örneklerinin temel bileşenler analiziyle sınıflandırılması konusunda son yıllarda yapılan çalışmalardan bazıları ele alınmıştır. Türkiye'nin endemik ve endemik olmayan bitki türleri ile bal gibi gıda örnekleri bakımından çok zengin ve çeşitli bir coğrafyada yer aldığı bilinmektedir. Mevcut çalışmalar ışığında bu tür raporların daha da ayrıntılandırılması gerekmektedir. İleride temel bileşenler analizi ve diğer kemometrik yöntemlerle örneklerin sınıflandırılması ile; hem bilimsel literatüre katkı olarak, hem de tarım çıktısının kalitesinin artırılması söz konusu olabilecektir.

4. KAYNAKLAR

A. Bertoli, C. Çirak ve F. Seyis, 2018. Hypericum spp. volatile profiling and the potential significance in the quality control of new valuable raw material. *Microchemical Journal* 136, 94-100.

A. Güner, S. Aslan, T. Ekim, M. Vural ve M.T. Babaç. 2012. Türkiye Bitkileri Listesi (Damarlı Bitkiler). Nezahat Gökyiğit Botanik Bahçesi ve Flora Araştırmaları Derneği, s. 1290

A. Salk, L. Arin, M. Deveci ve S. Polat. 2008. Bean Grownig., *Special Vegetable'da*. Namık Kemal Üniversitesi, Agric. Fac., Depart. Horticulture. s. 164.

C. Cirak, A.K. Ayan ve K. Kevseroğlu. 2006. Physical and physiological seed dormancy of some Hypericum species growing in Turkey. *Plant Breeding and Seed Science*, 53, 3-8.

C. Dağ, İ. Demirtaş, İ. Özdemir, S. Bekiroğlu ve E. Ertaş. 2015. Biochemical Characterization of Turkish Extra Virgin Olive Oils from Six Different Olive Varieties of Identical Growing Conditions. *Journal of the American Oil Chemists' Society* 92(2), 1349-1356.

C. Erdinç, O. Türkmen, H.Y. Dasgan ve S. Şensoy. 2017. Phenotypic and molecular genetic diversity among some Turkish bean genotypes. *The Journal of Animal & Plant Sciences* 27(6), 1963-1973.

H. Kaygusuz, F. Tezcan, F.B. Erim, O. Yıldız, H. Şahin, Z. Can, S. Kolaylı. 2016. Characterization of Anatolian honeys based on minerals, bioactive components and principal component analysis. *LWT - Food Science and Technology* 68, 273-279.

S. Kıralan, A. Yorulmaz, A. Şimşek ve A. Tekin. 2015. Classification of Turkish hazelnut oils based on their triacylglycerol structures by chemometric analysis. *European Food Research and Technology* 240(4), 679-688.

Ş. Kıvrak, İ. Kıvrak ve E. Karababa. 2017. Characterization of Turkish honeys regarding of physicochemical properties, and their adulteration analysis. *Food Science & Technology (Campinas)*, basımda. <http://dx.doi.org/10.1590/1678-457x.07916>

Z. Kalaycıoğlu, H. Kaygusuz, S. Döker, S. Kolaylı, F.B. Erim. 2017. Characterization of Turkish honeybee pollens by principal component analysis based on their individual organic acids, sugars, minerals, and antioxidant activities. *LWT - Food Science and Technology* 84, 402-408.