

Caractérisation Chimique Et Structuration Multivariée Des Extraits De Desmodium Uncinatum D'arivonimamo (Région Itasy, Madagascar)

RANAIVOSON Miharimbola Fiononamalala¹, TOVONIRINA Jackie¹, RAKOTOSON Tolontsoa¹,
RAVAOARINORO Rondro Nirina¹

¹Université Antananarivo

Auteur Correspondant: RANAIVOSON Miharimbola Fiononamalala, harymimi@gmail.com



Résumé: La présente étude porte sur la caractérisation chimique et la structuration multivariée des extraits de *Desmodium uncinatum* collecté à Arivonimamo (région Itasy, Madagascar). Les profils chromatographiques obtenus par chromatographie sur couche mince (CCM) ont révélé une variabilité qualitative et quantitative marquée entre les fractions. L'extrait méthanolique (EM) présente la plus grande richesse métabolique avec 11 bandes au total (3 sous UV 254 nm, 2 sous UV 366 nm et 6 après révélation au vanilline sulfurique), suivi de l'extrait aqueux à froid (EAF) avec 8 bandes et de la phase aqueuse (Aqx) avec 6 bandes. L'extrait hexanique (EHe) montre 4 bandes, tandis que l'extrait aqueux à chaud (EAC) n'en présente que 2. L'analyse en composantes principales indique que les deux premiers axes expliquent 84,18 % de la variance totale (PC1 = 61,88 % ; PC2 = 22,30 %). La classification hiérarchique basée sur la distance de Jaccard met en évidence une forte similarité entre EAF et Aqx (distance $\approx 0,25$) et une dissimilarité marquée de EAC ($\approx 0,70$). Ces résultats confirment l'influence déterminante du solvant d'extraction sur la structuration chimique des extraits.

Mots-clés : *Desmodium uncinatum* ; Arivonimamo ; analyse en composantes principales ; distance de Jaccard ; chimiométrie

Abstract: This study focuses on the chemical characterization and multivariate structuring of extracts from *Desmodium uncinatum* collected in Arivonimamo (Itasy region, Madagascar). The chromatographic profiles obtained by thin-layer chromatography revealed marked qualitative and quantitative variability among the fractions. The methanolic extract (ME) exhibited the highest metabolic richness with a total of 11 bands (3 under UV 254 nm, 2 under UV 366 nm, and 6 after vanillin-sulfuric acid derivatization), followed by the cold aqueous extract (CAE) with 8 bands and the aqueous phase (Aqx) with 6 bands. The hexane extract (HE) showed 4 bands, whereas the hot aqueous extract (HAE) displayed only 2 bands. Principal Component Analysis indicated that the first two axes explained 84.18% of the total variance (PC1 = 61.88%; PC2 = 22.30%). Hierarchical clustering based on Jaccard distance highlighted a strong similarity between CAE and Aqx (distance ≈ 0.25) and a marked dissimilarity of HAE (≈ 0.70). These results confirm the decisive influence of the extraction solvent on the chemical structuring of the extracts.

Keywords: *Desmodium uncinatum*; Arivonimamo; Principal Component Analysis; Jaccard distance; chemometrics.

INTRODUCTION

Les plantes médicinales et aromatiques constituent une source majeure de métabolites secondaires présentant des propriétés biologiques variées, notamment insecticides, antifongiques et antimicrobiennes. L'exploration phytochimique des espèces végétales tropicales représente ainsi un enjeu important dans la valorisation des ressources naturelles locales et le développement de bioproduits durables [1]. Les métabolites secondaires tels que les terpènes, flavonoïdes, alcaloïdes et composés

phénoliques jouent un rôle clé dans les mécanismes de défense des plantes contre les agressions biotiques, notamment les insectes phytophages [2]. Le genre *Desmodium* (Fabaceae) est largement distribué dans les régions tropicales et subtropicales et est reconnu pour ses propriétés agronomiques et médicinales. Plusieurs espèces du genre ont démontré une activité répulsive et insecticide attribuée principalement à des composés volatils tels que le β -ocimène, le nonatriène et l' α -cédrene [3]. *Desmodium uncinatum*, en particulier, est utilisé dans les systèmes agroécologiques pour ses effets répulsifs vis-à-vis de certains ravageurs, contribuant ainsi à des stratégies de lutte intégrée [4]. La caractérisation chimique des extraits végétaux repose fréquemment sur la chromatographie sur couche mince (CCM), technique simple et efficace permettant d'obtenir une empreinte chimique (fingerprinting) des métabolites présents [5]. Toutefois, l'interprétation des profils chromatographiques nécessite souvent des approches statistiques multivariées afin de mieux structurer l'information et discriminer les échantillons selon leur composition. L'analyse en composantes principales (ACP) et les méthodes de classification hiérarchique constituent des outils chimiométriques performants pour explorer les similarités et différences entre extraits végétaux [6]. Dans ce contexte, l'étude de la variabilité chimique de *Desmodium uncinatum* collecté à Arivonimamo, dans la région d'Itasy (Madagascar), apparaît pertinente, tant pour la valorisation des ressources locales que pour la compréhension des mécanismes associés à son potentiel biologique. Madagascar, reconnu comme un hotspot mondial de biodiversité, offre un environnement écologique particulier susceptible d'influencer la production et la diversité des métabolites secondaires [7]. Ainsi, le présent travail vise à caractériser les profils chromatographiques des extraits de *Desmodium uncinatum* d'Arivonimamo et à analyser leur structuration multivariée à l'aide d'approches chimiométriques, afin de mettre en évidence la diversité métabolique associée aux différentes fractions d'extraction.

MATÉRIELS ET MÉTHODES

L'étude a porté sur des échantillons de *Desmodium uncinatum* collectés dans le district d'Arivonimamo, région Itasy (Madagascar). Un total de 250 échantillons a été prélevé afin d'assurer une représentativité suffisante de la variabilité intra-spécifique et de limiter les biais liés à l'hétérogénéité environnementale. Les prélèvements ont été répartis dans quatre localités distinctes du district, sélectionnées sur la base de critères écologiques incluant l'altitude, le type de sol et les conditions climatiques locales. Cette stratégie d'échantillonnage spatial vise à réduire les biais d'algorithme et de surapprentissage lors des analyses multivariées, en assurant une distribution équilibrée des profils chimiques dans l'ensemble des groupes étudiés [8]. Les parties aériennes des plantes ont été récoltées au stade végétatif mature, séchées à température ambiante à l'abri de la lumière pendant une période de quinze jours, puis finement pulvérisées à l'aide d'un broyeur mécanique. Les poudres obtenues ont été soumises à des extractions successives par solvants de polarité croissante, notamment l'hexane, le méthanol et l'eau (extraction à froid et à chaud), afin d'obtenir des fractions différenciées en fonction de leur composition chimique. Les extraits ont été concentrés sous pression réduite à l'aide d'un évaporateur rotatif et conservés à 4 °C jusqu'aux analyses.

La caractérisation phytochimique a été réalisée par chromatographie sur couche mince (CCM) sur plaques de silice préenduites (silice gel 60 F254). Les dépôts ont été effectués à l'aide de micropipettes calibrées, et la migration a été conduite dans des cuves saturées avec un système d'élution adapté à la séparation des métabolites secondaires. Les plaques ont été visualisées sous UV à 254 nm et 366 nm, puis révélées à l'aide d'un réactif vanilline sulfurique afin de détecter les terpènes et triterpènes [9]. Le nombre de bandes, leur intensité relative et leur facteur de rétention (R_f) ont été consignés pour l'ensemble des extraits. Les données chromatographiques ont été structurées sous forme de matrices qualitatives (présence/absence) et quantitatives (nombre de bandes par mode de détection). Les analyses multivariées ont été réalisées au sein du Laboratoire de Biochimie Appliquée aux Sciences Médicales (LABASM) à la Mention de Biochimie Fondamentale et Appliquée de l'Université d'Antananarivo. Le traitement des données a été effectué à l'aide du langage Python (version 3.x) dans l'environnement Jupyter Notebook, permettant une reproductibilité complète des analyses [10]. Les bibliothèques NumPy et Pandas ont été utilisées pour la manipulation et la structuration des matrices de données [11], tandis que Matplotlib a permis la visualisation graphique des profils chromatographiques et des représentations thermiques [12]. L'analyse en composantes principales a été réalisée à l'aide de la bibliothèque scikit-learn, et la classification hiérarchique (méthode UPGMA) basée sur la distance de Jaccard a été conduite à l'aide des modules SciPy dédiés à l'analyse de similarité [13]. L'ensemble des analyses a été conduit avec un contrôle

systématique des valeurs aberrantes et une standardisation préalable des variables lorsque cela était requis. Cette approche intégrée combinant échantillonnage spatial contrôlé, chromatographie analytique et analyse chimiométrique assistée par programmation permet d'assurer la robustesse méthodologique et la fiabilité statistique des résultats obtenus.

RESULTATS ET DISCUSSIONS

1-Profiles chromatographiques comparatifs des extraits de *Desmodium uncinatum*

La figure ci-dessous illustre les profils chromatographiques obtenus par chromatographie sur couche mince des différents extraits de *Desmodium uncinatum*, à savoir l'extrait aqueux à froid (EAF), l'extrait aqueux à chaud (EAC), l'extrait méthanolique (EM), l'extrait hexanique (EHe), la phase organique (EBut) et la phase aqueuse (Aqx), visualisés respectivement sous UV à 254 nm (a2), sous UV à 366 nm (b2) et après révélation au vanilline sulfurique (c2). Ces profils permettent d'apprécier qualitativement la diversité et la nature chimique des métabolites secondaires présents dans chaque fraction.

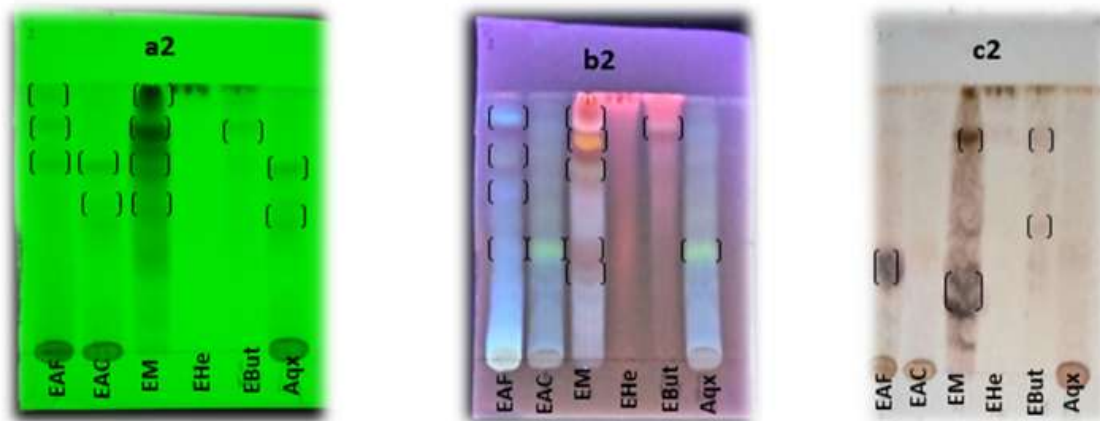


Figure 1: Profils chromatographiques comparatifs des extraits de *Desmodium uncinatum*

Interprétation

L'observation des plaques sous UV à 254 nm met en évidence plusieurs taches sombres sur fond fluorescent vert, traduisant la présence de composés capables d'absorber fortement dans l'ultraviolet court. Les extraits méthanolique et aqueux présentent un nombre relativement élevé de bandes distinctes, suggérant une richesse en composés aromatiques et conjugués, notamment des flavonoïdes, des phénols et d'autres métabolites polaires. À l'inverse, l'extrait hexanique révèle un nombre plus limité de taches sous cette longueur d'onde, ce qui est cohérent avec la prédominance attendue de composés lipophiles moins fortement absorbants à 254 nm. Cette distribution indique que les fractions polaires concentrent davantage de composés aromatiques susceptibles d'intervenir dans les mécanismes de défense chimique de la plante. Sous UV à 366 nm, plusieurs bandes deviennent fluorescentes et présentent des colorations variant du bleu au vert et à l'orange. La fluorescence bleutée observée dans certaines fractions est compatible avec la présence de coumarines ou de flavonoïdes, tandis que les émissions vertes peuvent être attribuées à des composés phénoliques. L'apparition de taches orangées dans l'extrait méthanolique suggère la présence de flavonoïdes méthoxylés ou de dérivés terpéniques oxygénés. Les extraits aqueux montrent également des bandes fluorescentes marquées, confirmant la richesse en métabolites secondaires polaires. En revanche, l'extrait hexanique présente une fluorescence plus modérée, traduisant une composition dominée par des terpènes non fluorescents ou faiblement conjugués. L'ensemble de ces

observations indique une distribution différentielle des classes chimiques selon la polarité du solvant d'extraction. Après révélation au vanilline sulfurique, les plaques révèlent des colorations brunes, violettes et bleuâtres caractéristiques de la présence de terpènes, triterpènes, stéroïdes ou saponines. Les bandes brun foncé observées dans les extraits aqueux à chaud et méthanolique témoignent d'une teneur notable en composés terpéniques ou triterpéniques. L'extrait hexanique, bien que présentant moins de diversité en nombre de bandes, montre des taches colorées intenses, suggérant une concentration élevée de terpènes lipophiles. Cette révélation confirme que les fractions organiques et polaires contiennent des métabolites secondaires susceptibles de jouer un rôle biologique actif. La diversité qualitative mise en évidence par la CCM, caractérisée par la multiplicité des bandes sous UV et la variété des colorations après révélation chimique, suggère une richesse métabolique importante chez *Desmodium uncinatum*. La présence conjointe de composés aromatiques absorbant à 254 nm, de molécules fluorescentes à 366 nm et de terpènes révélés par la vanilline sulfurique renforce l'hypothèse selon laquelle l'activité bioinsecticide observée pour cette plante pourrait résulter d'un effet synergique entre composés phénoliques et terpènes volatils. Ces résultats confirment ainsi que la composition chimique des extraits varie significativement selon la polarité du solvant, ce qui influence potentiellement leur efficacité biologique.

2-Analyse comparative quantitative des bandes chromatographiques des extraits de *Desmodium uncinatum*

La figure ci-dessous présente une analyse quantitative des profils chromatographiques des différents extraits de *Desmodium uncinatum* à travers une représentation thermique (heatmap) du nombre de bandes observées sous UV 254 nm, UV 366 nm et après révélation au vanilline sulfurique, ainsi qu'un diagramme en barres empilées illustrant la contribution relative de chaque mode de détection au nombre total de bandes par extrait.

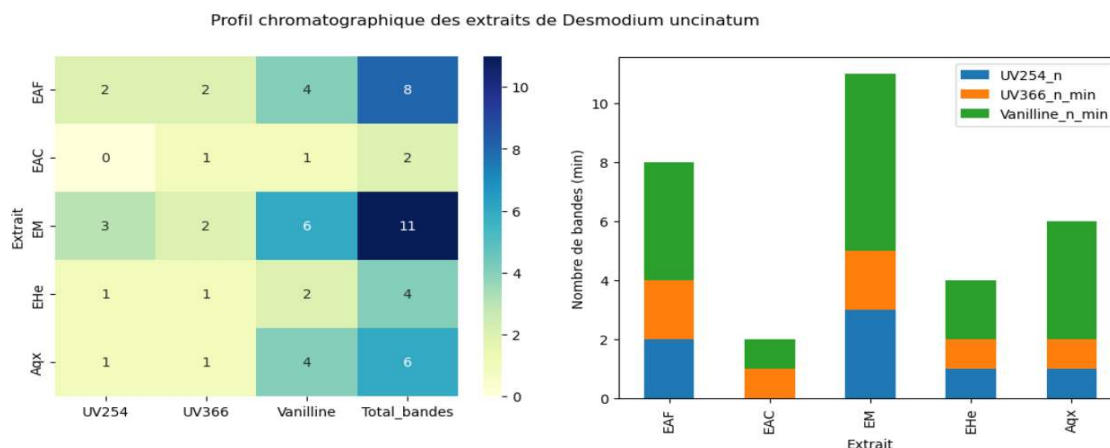


Figure 2: Analyse comparative quantitative des bandes chromatographiques des extraits de *Desmodium uncinatum*

Interprétation

L'analyse quantitative met en évidence des différences marquées dans la richesse métabolique des extraits selon la polarité du solvant d'extraction. L'extrait méthanolique (EM) présente le profil le plus diversifié, avec 3 bandes détectées sous UV 254 nm, 2 bandes sous UV 366 nm et 6 bandes révélées après traitement au vanilline sulfurique, soit un total de 11 bandes distinctes. Cette richesse élevée suggère une forte concentration en métabolites secondaires variés, incluant des composés aromatiques absorbant à 254 nm et des terpènes ou triterpènes révélés par la vanilline. L'extrait aqueux à froid (EAF) montre également une diversité importante, avec 2 bandes sous UV 254 nm, 2 sous UV 366 nm et 4 révélées par vanilline, totalisant 8

bandes. Cette distribution indique la présence simultanée de composés polaires et de métabolites terpéniques, traduisant une composition chimique complexe susceptible de contribuer à l'activité biologique observée. À l'inverse, l'extrait aqueux à chaud (EAC) présente une richesse nettement plus faible, avec 0 bande sous UV 254 nm, 1 sous UV 366 nm et 1 révélée par vanilline, soit un total de 2 bandes. Cette faible diversité peut refléter une extraction sélective ou une dégradation thermique de certains composés sensibles, conduisant à une réduction de la complexité chimique. L'extrait hexanique (EHe) affiche un profil intermédiaire caractérisé par 1 bande sous UV 254 nm, 1 sous UV 366 nm et 2 révélées par vanilline, pour un total de 4 bandes. Ce profil est cohérent avec une extraction majoritaire de composés lipophiles, principalement terpéniques, moins abondants en composés aromatiques polaires. La phase aqueuse (Aqx) présente 1 bande sous UV 254 nm, 1 sous UV 366 nm et 4 bandes révélées par vanilline, totalisant 6 bandes. La prédominance des bandes révélées par vanilline suggère une proportion notable de composés terpéniques ou triterpéniques solubles dans cette fraction. L'analyse comparative montre que la révélation au vanilline sulfurique contribue majoritairement au nombre total de bandes pour la plupart des extraits, notamment EM (6 bandes sur 11) et Aqx (4 bandes sur 6), confirmant l'importance des composés terpéniques dans la composition chimique de *Desmodium uncinatum*. Les observations sous UV 254 nm, bien que quantitativement plus modestes, indiquent la présence de structures aromatiques conjuguées, potentiellement associées à des flavonoïdes ou composés phénoliques. Globalement, ces résultats démontrent que l'extrait méthanolique est le plus riche en diversité chimique, suivi de l'extrait aqueux à froid et de la phase aqueuse, tandis que l'extrait aqueux à chaud apparaît comme le moins diversifié. Cette hiérarchisation quantitative corrobore l'hypothèse selon laquelle la polarité du solvant influence significativement l'extraction des métabolites secondaires, ce qui peut expliquer les variations observées dans l'activité bioinsecticide des différentes fractions. La forte contribution des bandes révélées par vanilline suggère une implication prépondérante des terpènes et triterpènes dans le potentiel bioactif de la plante, en cohérence avec la présence rapportée de β -ocimène, α -cédrene et nonatriène dans le genre *Desmodium*.

3- Analyse en composantes principales (ACP) des profils chromatographiques des extraits de *Desmodium uncinatum*

La figure ci-après illustre les résultats de l'analyse en composantes principales réalisée à partir des données chromatographiques des extraits de *Desmodium uncinatum*. Le graphique des individus illustre la distribution des extraits selon les deux premières composantes principales, tandis que le cercle de corrélation met en évidence la contribution relative des différentes bandes chromatographiques à la structuration de la variabilité observée.

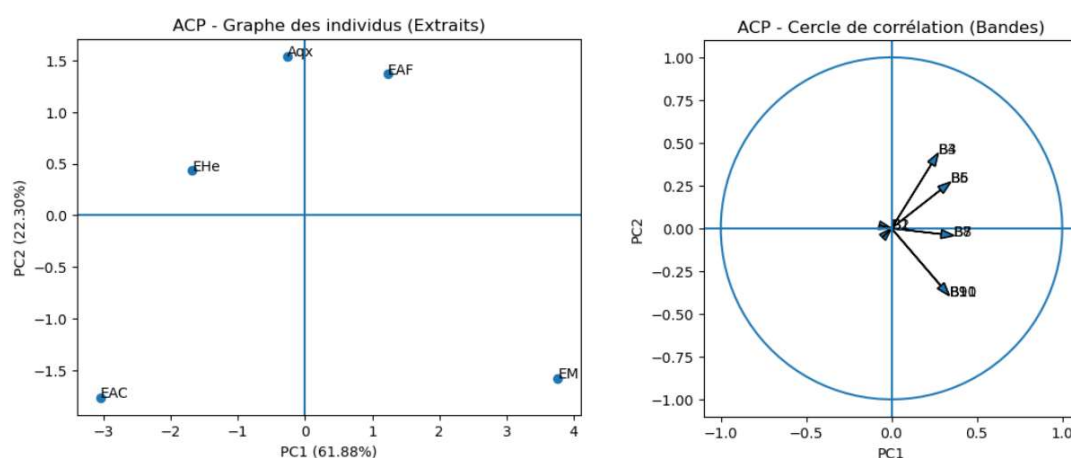


Figure 3: Analyse en composantes principales (ACP) des profils chromatographiques des extraits de *Desmodium uncinatum*

Interprétation

L'analyse en composantes principales révèle que les deux premiers axes expliquent une proportion substantielle de la variance totale, avec 61,88 % pour la première composante principale (PC1) et 22,30 % pour la deuxième composante (PC2), soit un cumul de 84,18 % de la variabilité totale. Cette forte inertie cumulée indique que la structure des données chromatographiques peut être interprétée de manière fiable à partir de ces deux dimensions principales. La projection des individus montre une séparation nette des extraits selon leurs profils chimiques. L'extrait méthanolique (EM) se positionne fortement du côté positif de PC1, traduisant une association marquée avec les variables ayant une forte contribution sur cet axe. À l'opposé, l'extrait aqueux à chaud (EAC) se situe dans la zone négative de PC1, indiquant un profil chimique distinct et moins corrélé aux bandes dominantes de la première composante. L'extrait hexanique (EHe) occupe une position intermédiaire légèrement négative sur PC1 mais positive sur PC2, suggérant une composition spécifique différenciée des extraits fortement polaires. Les extraits aqueux à froid (EAF) et la phase aqueuse (Aqx) se projettent dans la partie positive de PC2, témoignant d'une similarité partielle entre ces fractions et d'une richesse relative en bandes corrélées à la deuxième composante. Le cercle de corrélation indique que certaines bandes chromatographiques contribuent fortement à la structuration de PC1, comme les variables situées dans le quadrant droit du graphique, traduisant une corrélation positive avec les extraits EM et EAF. Les vecteurs relativement longs, notamment ceux correspondant aux bandes positionnées dans la partie supérieure droite du cercle, témoignent d'une forte corrélation avec les composantes principales et donc d'un rôle déterminant dans la différenciation chimique des extraits. À l'inverse, les bandes proches de l'origine du cercle présentent une contribution plus faible à la variance globale. La distribution directionnelle des vecteurs suggère que les bandes associées à PC1 sont probablement liées aux composés majoritaires détectés sous UV ou après révélation chimique, possiblement des terpènes ou des composés phénoliques abondants dans l'extrait méthanolique. Les variables orientées principalement selon PC2 semblent caractériser davantage les extraits aqueux, suggérant la présence de composés spécifiques à ces fractions. Globalement, l'ACP met en évidence une structuration chimique nette des extraits de *Desmodium uncinatum*, reflétant l'influence déterminante du solvant d'extraction sur la composition métabolique. La séparation marquée entre l'extrait méthanolique et l'extrait aqueux à chaud confirme des profils chimiques contrastés, tandis que la proximité relative entre certains extraits suggère une similarité partielle dans la composition en métabolites secondaires. Cette différenciation chimique observée par ACP fournit un cadre interprétatif cohérent pour expliquer les variations d'activité biologique rapportées entre les fractions.

4-Classification hiérarchique (UPGMA, distance de Jaccard) et matrice de présence/absence des bandes chromatographiques

La figure suivante présente l'analyse de similarité des profils chromatographiques des extraits de *Desmodium uncinatum* à partir d'une matrice binaire de présence/absence des bandes détectées. Le dendrogramme obtenu par classification hiérarchique selon la méthode UPGMA basée sur la distance de Jaccard permet de visualiser les relations de proximité chimique entre extraits, tandis que la heatmap met en évidence la distribution des bandes individuelles (B1–B11) au sein des différentes fractions.

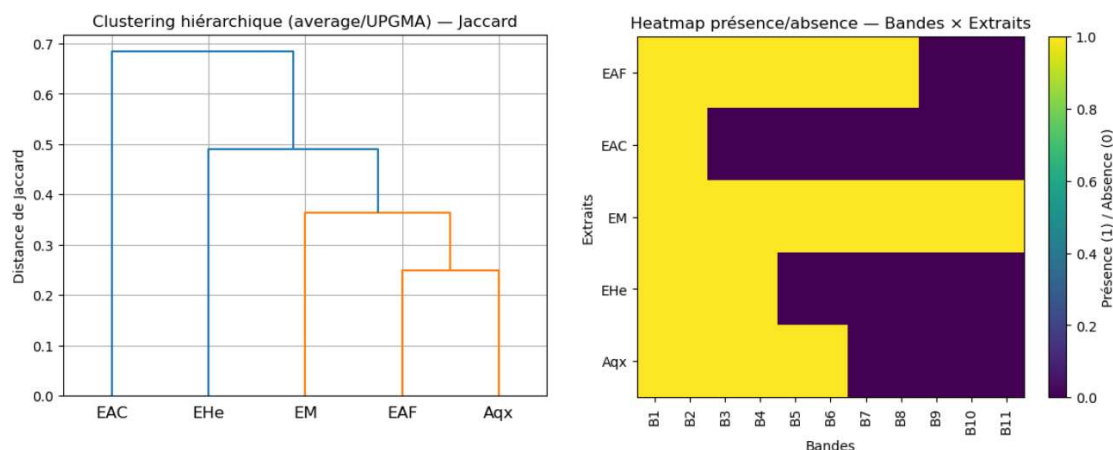


Figure 4: Classification hiérarchique (UPGMA, distance de Jaccard) et matrice de présence/absence des bandes chromatographiques

Interprétation

L'analyse de classification hiérarchique basée sur la distance de Jaccard met en évidence une structuration nette des extraits en fonction de la similarité de leurs profils chimiques. La distance de Jaccard, adaptée aux données binaires, reflète la proportion de bandes partagées entre extraits par rapport au nombre total de bandes distinctes. Les valeurs de distance observées indiquent des niveaux de similarité variables, avec une proximité plus marquée entre certains extraits polaires. Le dendrogramme montre que les extraits aqueux EAF et Aqx se regroupent en premier, à une distance de Jaccard relativement faible d'environ 0,25, traduisant une forte similarité dans la composition en bandes chromatographiques. Ce regroupement suggère que ces deux fractions partagent un nombre important de métabolites communs, probablement des composés polaires ou semi-polaires extraits efficacement par les solvants aqueux. L'extrait méthanolique (EM) se rattache à ce cluster à une distance intermédiaire avoisinant 0,35 à 0,40, indiquant une similarité partielle avec les extraits aqueux, tout en conservant une spécificité chimique propre. Cette position intermédiaire reflète la capacité du méthanol à extraire à la fois des composés polaires et certains composés légèrement lipophiles, conférant à EM une richesse métabolique plus diversifiée. L'extrait hexanique (EHe) apparaît plus éloigné du groupe précédent, avec une distance d'environ 0,50, ce qui traduit une composition distincte dominée par des composés lipophiles absents des fractions plus polaires. Enfin, l'extrait aqueux à chaud (EAC) constitue l'extrait le plus dissemblable, se positionnant à une distance proche de 0,70 par rapport aux autres fractions. Cette forte dissimilarité suggère une perte ou une modification de certains métabolites sensibles à la chaleur ou une extraction sélective réduite. La heatmap de présence/absence confirme visuellement ces observations. Les bandes B1 et B2 apparaissent largement distribuées dans la majorité des extraits, traduisant des métabolites communs à plusieurs fractions. À l'inverse, certaines bandes comme B5, B6 ou B8 montrent une distribution plus sélective, contribuant à la différenciation des extraits. L'extrait EM présente la plus grande continuité de présence de bandes, cohérente avec sa richesse chromatographique précédemment observée. L'extrait EAC montre une absence relative de plusieurs bandes, corroborant sa position isolée dans le dendrogramme. L'ensemble de ces résultats démontre que la polarité du solvant d'extraction constitue un facteur déterminant dans la structuration chimique des extraits de *Desmodium uncinatum*. Les fractions polaires présentent une forte similarité entre elles, tandis que les fractions plus spécifiques, notamment l'extrait aqueux à chaud, se distinguent nettement. Cette organisation chimique hiérarchisée fournit un cadre interprétatif pertinent pour expliquer les variations observées dans l'activité bioinsecticide, les extraits les plus riches et chimiquement complexes étant susceptibles d'exprimer une activité biologique plus marquée en raison d'effets synergiques entre métabolites.

DISCUSSION

Les résultats obtenus mettent en évidence une variabilité chimique significative des extraits de *Desmodium uncinatum* collectés dans le district d'Arivonimamo, confirmant l'influence déterminante du solvant d'extraction sur la composition métabolique. L'extrait méthanolique, qui présente 11 bandes chromatographiques au total, apparaît comme la fraction la plus riche en métabolites secondaires, tandis que l'extrait aqueux à chaud, limité à 2 bandes, montre une diversité nettement plus restreinte. Cette différence peut être attribuée à la capacité du méthanol à solubiliser à la fois des composés polaires et semi-polaires, incluant flavonoïdes, composés phénoliques et certains terpènes oxygénés, alors que l'extraction aqueuse à chaud peut entraîner la dégradation thermique ou la perte de métabolites thermolabiles. Des observations similaires ont été rapportées pour d'autres espèces végétales tropicales, où la polarité du solvant conditionne fortement la diversité chimique extraite [14]. L'analyse en composantes principales, expliquant 84,18 % de la variance totale sur les deux premiers axes, confirme une structuration nette des extraits en fonction de leur profil chimique. La séparation marquée de l'extrait méthanolique sur l'axe principal suggère une composition dominée par des composés fortement contributifs à la variabilité globale. À l'inverse, l'extrait aqueux à chaud se positionne à distance des autres fractions, traduisant une signature chimique spécifique. L'utilisation de l'ACP dans le cadre du fingerprinting chromatographique est largement reconnue pour sa capacité à discriminer des profils chimiques complexes et à identifier les variables les plus contributives à la différenciation des échantillons [15]. La classification hiérarchique basée sur la distance de Jaccard confirme ces tendances en révélant une forte similarité entre les extraits aqueux à froid et la phase aqueuse, avec une distance d'environ 0,25, indiquant le partage d'un nombre important de bandes communes. En revanche, l'extrait aqueux à chaud présente une distance avoisinant 0,70 par rapport aux autres fractions, témoignant d'une dissimilarité chimique marquée. L'application de distances binaires telles que celle de Jaccard est particulièrement adaptée aux matrices de présence/absence issues de données chromatographiques, car elle met l'accent sur les métabolites partagés plutôt que sur leur abondance relative [16]. La diversité des bandes révélées après traitement au vanilline sulfurique suggère une contribution importante des terpènes et triterpènes dans la composition globale de *Desmodium uncinatum*. Les terpènes sont largement documentés pour leurs propriétés écologiques, notamment leur rôle dans les interactions plante-insecte et leurs effets répulsifs ou toxiques [17]. Ainsi, la richesse terpénique observée, particulièrement dans l'extrait méthanolique et certaines fractions aqueuses, pourrait constituer un facteur déterminant dans l'expression du potentiel bioactif de l'espèce étudiée. Globalement, l'approche combinée associant chromatographie analytique et analyses multivariées démontre que la variabilité chimique de *Desmodium uncinatum* d'Arivonimamo est fortement structurée par le mode d'extraction. Cette structuration pourrait refléter non seulement l'effet du solvant mais également l'influence des conditions écologiques locales sur la biosynthèse des métabolites secondaires. Ces résultats contribuent ainsi à la valorisation scientifique des ressources végétales de la région d'Itasy et ouvrent des perspectives pour des investigations plus approfondies portant sur l'isolement et l'identification structurale des composés responsables des activités biologiques observées.

CONCLUSION

La présente étude a permis de caractériser la diversité chimique des extraits de *Desmodium uncinatum* collecté dans le district d'Arivonimamo, région Itasy (Madagascar), à travers une approche intégrée combinant chromatographie sur couche mince et analyses multivariées. Les profils chromatographiques ont révélé une variabilité qualitative et quantitative marquée entre les fractions, l'extrait méthanolique se distinguant par la plus grande richesse métabolique avec 11 bandes détectées, suivi de l'extrait aqueux à froid avec 8 bandes et de la phase aqueuse avec 6 bandes, tandis que l'extrait aqueux à chaud n'en présentait que 2. L'analyse en composantes principales, expliquant 84,18 % de la variance totale sur les deux premiers axes, a mis en évidence une structuration nette des extraits selon leur composition chimique, confirmée par la classification hiérarchique basée sur la distance de Jaccard. La forte similarité observée entre certaines fractions polaires et la dissimilarité marquée de l'extrait aqueux à chaud illustrent l'influence déterminante du solvant d'extraction sur la distribution des métabolites secondaires. Ces résultats démontrent que la combinaison du fingerprinting chromatographique et des outils chimiométriques constitue une approche robuste pour explorer la diversité métabolique des espèces végétales locales. Ils ouvrent des perspectives pour

l'identification structurale des composés majoritaires et pour l'évaluation approfondie de leur potentiel bioactif, contribuant ainsi à la valorisation scientifique et durable des ressources phytogénétiques de la région d'Itasy.

Référence

- [1] Cowan, M.M. (1999) 'Plant products as antimicrobial agents', *Clinical Microbiology Reviews*, 12(4), pp. 564–582.
- [2] Wink, M. (2010) 'Functions and biotechnology of plant secondary metabolites', *Annual Plant Reviews*, 39, pp. 1–19.
- [3] Turlings, T.C.J., Tumlinson, J.H. and Lewis, W.J. (1990) 'Exploitation of herbivore-induced plant odors by host-seeking parasitic wasps', *Science*, 250, pp. 1251–1253.
- [4] Khan, Z.R. et al. (2000) 'Exploiting chemical ecology and species diversity: stem borer and striga control for maize and sorghum in Africa', *Pest Management Science*, 56, pp. 957–962.
- [5] Wagner, H. and Bladt, S. (1996) *Plant Drug Analysis: A Thin Layer Chromatography Atlas*. 2nd edn. Berlin: Springer.
- [6] Jolliffe, I.T. (2002) *Principal Component Analysis*. 2nd edn. New York: Springer.
- [7] Ganzhorn, J.U. et al. (2001) 'The biodiversity of Madagascar: one of the world's hottest hotspots on its way out', *Oryx*, 35(4), pp. 346–348.
- [8] Thompson, S.K. (2012) *Sampling*. 3rd edn. New York: Wiley.
- [9] Wagner, H. and Bladt, S. (1996) *Plant Drug Analysis: A Thin Layer Chromatography Atlas*. 2nd edn. Berlin: Springer.
- [10] Kluyver, T. et al. (2016) 'Jupyter Notebooks – a publishing format for reproducible computational workflows', *Positioning and Power in Academic Publishing*, pp. 87–90.
- [11] McKinney, W. (2010) 'Data structures for statistical computing in Python', *Proceedings of the 9th Python in Science Conference*, pp. 51–56.
- [12] Hunter, J.D. (2007) 'Matplotlib: A 2D graphics environment', *Computing in Science & Engineering*, 9(3), pp. 90–95.
- [13] Pedregosa, F. et al. (2011) 'Scikit-learn: Machine learning in Python', *Journal of Machine Learning Research*, 12, pp. 2825–2830.
- [14] Do, Q.D. et al. (2014) 'Effect of extraction solvent on total phenol content and antioxidant activity of *Limnophila aromatica*', *Journal of Food and Drug Analysis*, 22(3), pp. 296–302.
- [15] Brereton, R.G. (2003) *Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant*. Chichester: Wiley.
- [16] Legendre, P. and Legendre, L. (2012) *Numerical Ecology*. 3rd edn. Amsterdam: Elsevier.
- [17] Gershenzon, J. and Dudareva, N. (2007) 'The function of terpene natural products in the natural world', *Nature Chemical Biology*, 3, pp. 408–414.