

Análises quimiométricas pelos métodos de PCA e PLS-DA para diagnóstico de tumores

Caroline W. P. da S. Grandizoli^{1*} (PG), Caroline Paola Uber² (IC), Luize Z. B. Carrenho² (PG), Maria Regina O. Kreuger³ (PQ), Francinete Ramos Campos² (PQ), Andersson Barison¹ (PQ).

¹Laboratório de RMN, Departamento de Química - Universidade Federal do Paraná, Curitiba/PR. *carolwps@ufpr.br

²Centro de Bioequivalência, Departamento de Farmácia - Universidade Federal do Paraná, Curitiba/PR.

³Centro de Ciências de Saúde, Universidade do Vale do Itajaí, Itajaí/SC.

Palavras Chave: quimiometria, PCA, PLS-DA, RMN de ¹H, tumores, diagnóstico.

Introdução

Espectros de RMN de alta resolução de amostras biológicas tais como biofluidos e tecidos, podem ser muito complexos. Em muitos casos, a mera inspeção visual de tais espectros revela apenas uma pequena quantidade de informação. Por isso, tem-se usado métodos estatísticos computadorizados, conhecidos como análises quimiométricas ou quimiometria, para extrair o máximo de informações destes espectros^{1,2}. Um método utilizado é o reconhecimento de padrões, o qual se destina a agrupar as amostras com características semelhantes e distingui-las das demais, que por sua vez, poderão vir a formar outro grupo, destacando-se aqui a análise por componentes principais (PCA) e análise discriminante com calibração multivariada por mínimos quadrados parciais (PLS-DA).

Resultados e Discussão

Foram adquiridos espectros de RMN de ¹H de amostras de soro sanguíneo providas de camundongos inoculados com tumor de Ehrlich (TE) ou com tumor Sarcoma 180 (S180), além de grupos sadios (controle). Os espectros obtidos foram submetidos a análises quimiométricas para distinguir entre grupo doente e sadio, a fim de obter um diagnóstico no menor tempo possível de desenvolvimento do tumor.

O método PLS-DA mostrou melhores resultados do que o método de PCA (Figura 1). Esta superioridade já era esperada visto que o método de PCA é um método não supervisionado em que cada uma das componentes principais (PC) detecta as direções de maior variância na matriz de dados X, enquanto que o PLS-DA é um método supervisionado, no qual se fornece dados identificando as amostras, o que otimiza a separação entre os grupos por rotacionar os componentes do PCA de forma a obter o máximo de separação entre as classes¹.

Os resultados obtidos estão resumidos na Tabela 1. Pelo método PLS-DA foi possível diminuir o tempo de diagnóstico de sete para cinco dias após a inoculação com TE em camundongos Swiss e Balb-

C, tornando o diagnóstico mais precoce. Em relação ao S180, o tempo de diagnóstico foi o mesmo para os dois métodos, porém no método de PLS-DA é possível conseguir um diagnóstico suspeito no período de sete dias após a inoculação.

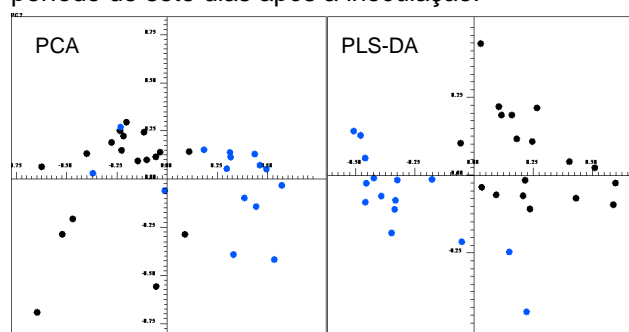


Figura 1. Gráfico de escores à esquerda e de T-escores à direita de PC1 (49,6%) versus PC2 (23,8%) utilizando as amostras de controle (azul) e de cinco dias de inoculação de TE (preto) em camundongos Swiss.

Tabela 1. Resultados das análises quimiométricas obtidos a partir das duas linhagens de camundongos com os tumores TE e S180.

Tumor		TE	TE	S180
Camundongo		Swiss	Balb-C	Swiss
Diagnóstico da presença do tumor (dias)	PCA	7	7	10
	PLS-DA	5	5	10

Conclusões

A análise quimiométrica de espectros de RMN de ¹H adquiridos diretamente de soro sanguíneo de camundongos inoculados com TE pelo método de PLS-DA permitiu diagnosticar o tumor após cinco dias com boa precisão, e com dez dias para inoculação com S180. Comprovou-se que o método de PLS-DA permite otimizar os resultados obtidos pelo PCA, diminuindo o tempo de diagnóstico.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e FINEP.

¹Whishart, D. S. *Trends Food Sci. Tech.*, **2008**, *19*, 482.

²Nicholson, J. K.; Lindon J. C.. *Nature*, **2008**, *455*, 1054.