

Detecção de alterações glico-lipêmicas em trabalhadores rurais e da agroindústria por FT-IR associada à quimiometria: SIMCA x PLS

Nêmora F. Backes¹(IC)*, Alana O. Marques¹(IC), Alice P. Freitas¹(IC), Angélica Behling¹(IC), Marina Gassen¹(IC), Éboni M. Reuter¹(PG), Míriam B. Reckziegel¹(PG), Hildegard H. Pohl¹(PQ), Valeriano A. Corbellini¹(PQ). e-mail:nemorafrancinebackes@yahoo.com.br

¹Mestrado em Promoção da Saúde-UNISC, Av. Independência, 2293, CEP96815-900, Santa Cruz do Sul, RS;

Palavras Chave: FT-IR, metabólica, reflectância especular, sangue, quimiometria

Introdução

A espectroscopia no infravermelho com Transformada de Fourier (FT-IR) vem despontando como tecnologia rápida e limpa para diagnóstico clínico^{1,2}, particularmente em morbidades relacionadas à obesidade em diferentes populações. Neste trabalho buscamos investigar a aplicação a FT-IR associada à quimiometria para detecção de alterações glico-lipêmicas em trabalhadores rurais e da agroindústria.

Resultados e Discussão

Amostras de sangue de jejum coletados da fossa cubital de 65 trabalhadores rurais e da agroindústria de 8 municípios do Vale do Rio Pardo-RS foram submetidas à análises de colesterol total (CT), colesterol HDL, triacilgliceróis (TG) e glicose (GLI) por espectroscopia de absorção molecular no visível em analisador automático (Labtest®). Colesterol LDL foi calculado pela fórmula de Friedwald. Casos foram definidos como valores situados fora dos limites aceitáveis (Classe I). Quintuplicatas de 5 µL de sangue foram depositadas em probes de inox, secos a 37°C por 3h e analisadas por espectroscopia de reflectância especular no infravermelho com Transformada de Fourier (SRIFTS) na faixa de 4000 a 450 cm⁻¹, com 8 scans e 4 cm⁻¹ de resolução. Os dados espectrais foram normalizados e os espectros médios, transformados por correção de espalhamento de luz (MSC) e normalização, pré-processados e analisados por Modelagem Independente Flexível por Analogia de Classes (SIMCA), priorizando a maximização da acurácia dos casos, e por correlação via mínimos quadrados parciais (PLS), buscando minimizar o erro quadrático médio de validação cruzada (RMSECV).

O desempenho dos modelos SIMCA variou conforme o pré-processamento (Tabela 1). Em geral, a acurácia dos casos foi maior que dos controles. Acurácia de 100% foram alcançadas para CT, HDL e TG. Modelos PLS-SRIFTS com R² ≥ 0,99 foram obtidos para todos os parâmetros com

maior erro relativo para CT (16,2% em relação ao limite inferior quantificado, Tabela 2).

Tabela 1. Acurácia na determinação de parâmetros glico-lipêmicos por modelos SIMCA-SRIFTS em trabalhadores rurais e da agroindústria.

	LA (mg. dL ⁻¹)	Casos (%)	Controles (%)	PP
GLI	< 100	92,5	84,0	CM
		97,5	84,0	AE
CT	< 200	100	52,0	CM
		90,0	88,0	AE
HDL	≥ 60	98,0	73,3	CM
		100	73,3	AE
TG	< 150	100	82,8	CM
		57,1	96,6	AE
LDL	< 130	97,7	85,7	CM
		97,7	66,7	AE

LA = Limite aceitável; PP = pré-processamento; AE = autoescalamento; CM = centrado na média.

Tabela 2. Figuras de mérito de modelos PLS-SRIFTS de parâmetros glico-lipêmicos em trabalhadores rurais e da agroindústria.

	Faixa (mg. dL ⁻¹)	RMSECV (mg. dL ⁻¹)	R ²	VL*
GLI	62,12-242,54	2,86	0,9946	9 ^{AE}
CT	74,76-377,15	6,69	0,9945	8 ^{AE}
HDL	28,43-91,92	1,27	0,9952	3 ^{CM}
TG	35,61-238,13	5,78	0,9920	4 ^{CM}
LDL	17,38-297,32	6,23	0,9938	6 ^{AE}

RMSECV = erro quadrático médio de validação cruzada; R² = coeficiente de correlação de validação cruzada; *VL = n^o mínimo de variáveis latentes para alcançar R² ≥ 0,99; ^{AE} = autoescalamento; ^{CM} = centrado na média.

Conclusões

A técnica de SRIFTS supervisionada pela espectroscopia de absorção molecular no visível e associada aos algoritmos SIMCA ou PLS permite detectar alterações glico-lipêmicas para fins de diagnóstico clínico em trabalhadores rurais e da agroindústria.

Agradecimentos

À FAPERGS, ao CNPq e ao PPGPS-UNISC.

¹ Ellis, R.; Godacre, D.L. *Anal.* **2006**, *131*, 875.

² Wang, L.; Mizaikoff, B. *Anal. Bioanal. Chem.* **2008**, *391*, 1641.