

# APLICACION DE LA TEORIA DE INFORMACION A LA EVALUACION DE METODOS ANALITICOS (II)

I. Berdan, E. Reguera y A. Tagle

Departamento de Química Inorgánica, Dirección de Recursos Minerales y Medio Ambiente, Centro Nacional de Investigaciones Científicas, Ciudad de La Habana, Cuba

Recibido: 28 de diciembre de 1985  
 Recibido: 27 de enero de 1987

**ABSTRACT.** The article shows the way to employ information theory in evaluating and comparing analytical chemical methods on an objective basis. The proposed methods are simple and easy to apply and they open new possibilities to this theory in practical scientific work.

**RESUMEN.** Este artículo presenta cómo pueden ser empleados los criterios de la teoría de información para la evaluación y comparación de métodos analíticos con una base objetiva. Los métodos de cálculos propuestos son simples y de fácil aplicación y su empleo abre un nuevo campo al futuro de esta teoría en el análisis químico.

## INTRODUCCION

La más inmediata aplicación de la Teoría de la Información a los procesos analíticos de laboratorio se efectúa a través del estudio comparativo de reproducibilidad<sup>1,2</sup> por los valores de la entropía, se aplica además al estudio comparativo de procedimientos analíticos<sup>3</sup>, al análisis cualitativo<sup>4</sup>, a la valoración del comportamiento de los métodos de codificación en Espectroscopia Molecular<sup>5,6</sup>, a la valoración de los procedimientos de control analítico de la calidad<sup>7</sup>, etcétera.

### Contenido de información suministrado por los resultados del análisis cuantitativo

En el análisis cuantitativo generalmente se presentan dos tipos de problemas. El primero y más común es aquél en que es posible caracterizar la información preliminar del rango de concentración del compuesto estudiado por una distribución continua rectangular cuya función de densidad de probabilidad es:

$$p_0(c) = \begin{cases} 1/(c_1 - c_0) & \text{para } (c_0, c_1) \\ 0 & \text{para el resto} \end{cases} \quad (1)$$

La entropía de las distribuciones de probabilidad que se analizan (eventos discretos), se expresan como:

$$H(X) = - \sum_{i=1}^n p(X_i) \log_2(p(X_i)) \quad (2)$$

Aplicando la expresión (2) para la función dada por la ecuación (1) se obtiene:

$$H(p_0) = \log_2(c_1 - c_0) \quad (3)$$

Para el segundo tipo de problemas que usualmente se conoce como "análisis de aumento de precisión", la información es el resultado de una análisis cuantitativo previo.

En la mayoría de los casos es posible suponer que estos valores se distribuyeron normalmente. Esto es, su función de densidad de probabilidad se expresa como:

$$p_0(c) = \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{c - \mu_0}{\sigma_0}\right)^2\right) \quad (4)$$

la cual de acuerdo a la (3) tienen un valor de entropía:

$$H(p_0) = \log_2 \sigma_0 \sqrt{2\pi e} \quad (5)$$

Para obtener la información deseada en el análisis cuantitativo generalmente es necesario efectuar un proceso de calibración, el cual permite establecer una relación  $f(y)$  entre la variable "y" medida a la salida y la concentración "c" del componente que se determina. En el establecimiento de esta relación de calibración está implícito cierto grado de entropía debido a la dispersión de los resultados en mediciones repetidas del componente en la muestra patrón, la cual se refleja en la entropía de los resultados del análisis. Es típico el caso en que los resultados del análisis cuantitativo se distribuyen según:

$$p[c/f(y)] = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{c - \mu}{\sigma}\right)^2\right) \quad (6)$$

donde  $p[c/f(y)]$  indica que los valores de concentración medidos están condicionados por la calibración y que por tanto reflejan la entropía de ésta como ya se dijo. La fórmula para la entropía que corresponde a la distribución de probabilidad (6) es idéntica a la dada por la expresión (5) sustituyendo  $\sigma_0$  por  $\sigma$ .

Con ayuda de la entropía de las distribuciones (1), (4) y (6) y haciendo uso de la definición de contenido de información suministrada por el análisis se tienen para el primer y segundo tipo de análisis cuantitativo que,

$$I(p_0) = \log_2 \frac{(c_1 - c_0)}{\sqrt{2\pi e}} \quad (7)$$

o

$$I(p_0, p) = \log_2(\sigma_0 / \sigma) \quad (8)$$

respectivamente.

### Expresiones para el contenido de información suministrado por el análisis de trazas

El análisis de trazas es en definitiva un caso específico de análisis cuantitativo, pero con sus peculiaridades que justifican tratarlo independientemente de este último. Al igual que en el caso más frecuente de análisis cuantitativo, lo más común es que la preinformación esté limitada a suponer que la concentración en la muestra