

APLICACION DE LA TEORIA DE INFORMACION A LA EVALUACION DE METODOS ANALITICOS (I). REPORTE PRELIMINAR

E. Reguera, I. Berdan y A. Tagle

Departamento de Química Inorgánica. Centro Nacional de Investigaciones Científicas, Ciudad de La Habana, Cuba

Recibido: 24 de febrero de 1984

ABSTRACT. This paper presents fundamentals of Information Theory as it may be applied to analytical chemistry according to the recent advances in this field.

RESUMEN. En el presente trabajo se exponen los fundamentos de la Teoría de Información en función de su utilidad en la química analítica, respondiendo a la creciente aplicación de esta teoría en este campo.

INTRODUCCION

El origen de la Teoría de Información data de 1948, cuando Shannon publicó un trabajo sobre este tema¹. A partir de entonces y hasta 1960 aproximadamente, esta teoría recibió un fuerte desarrollo, centrándose los esfuerzos de los años siguientes, básicamente en sus aplicaciones. En la química en particular, su principal aplicación, de acuerdo al número de trabajos publicados, se encuentra en la valoración de los procesos analíticos de laboratorio y en la selección de códigos adecuados para la información suministrada por estos procesos²⁻⁷⁵.

El propósito de todo proceso analítico es obtener determinada información sobre la muestra estudiada, y la Teoría de Información brinda la posibilidad de valorar en qué se ha logrado que los resultados del análisis ofrezcan respuesta a las interrogantes planteadas. Pero no sólo desde este punto de vista la Teoría de Información amplía el campo de los procesos analíticos de laboratorio, además, permite estudiar estos procesos como un todo teóricamente fundamentado. El propósito del contenido de este trabajo es poner de manifiesto esta última posibilidad.

Entropía e Información. Si se obvia el estudio de las interrelaciones específicas que tienen lugar entre la muestra objeto de análisis y lo que pudiera denominarse el sistema analizador, todo método analítico de laboratorio puede ser considerado en principio como un sistema a la entrada E del cual se ofrece un conjunto de eventos X que especifican el problema analítico en cuestión a través de su distribución de probabilidades a priori P(X), la cual permite obtener, como se verá más adelante, la entropía asociada a dicho problema, que es una medida del grado de incertidumbre respecto a lo que se desea conocer de la muestra. En términos de Teoría de Información, la distribución de probabilidades P(X) contiene lo que se conoce como la pre-información. La

salida de dicho sistema es especificada por la distribución de probabilidades P(Y) del conjunto de eventos Y que tienen lugar a la salida S. La relación entrada-salida E/S es posible expresarla entonces por la relación probabilística de los eventos de los conjuntos E e Y. Formular la relación E/S de un proceso analítico de laboratorio en términos de probabilidades basadas en frecuencias relativas es por lo general imposible, resultando más adecuado a tales propósitos, una formulación probabilística en forma Bayesiana.⁷⁶ Desde este último punto de vista, la relación E/S se puede expresar mediante la distribución de probabilidades condicionadas P(X/Y), que para el caso específico de un conjunto de eventos discretos, sus valores de probabilidad son expresados por:

$$p(x_1/y_1), p(x_2/y_1), \dots, p(x_n/y_1); p(x_1/y_2), \dots, p(x_n/y_2); \dots; p(x_1/y_m), \dots, p(x_n/y_m);$$

donde:

$p(x_i/y_k)$ es la probabilidad de ocurrencia del evento x_i a la entrada, cuando a la salida se detecta el evento y_k , que según el teorema de Bayer,⁷⁷ se expresa como:

$$p(x_i/y_k) = p(x_i) p(y_k/x_i) / p(y_k) \quad (1)$$

donde

$$p(y_k) = \sum_{i=1}^n p(x_i) p(y_k/x_i) \quad (2)$$

Es importante observar que las expresiones (1 y 2) indican el procedimiento a seguir en cualquier método analítico de laboratorio. De acuerdo a éstas, para obte-