

Cómo evaluar 'a priori' la calidad informativa de señales analíticas

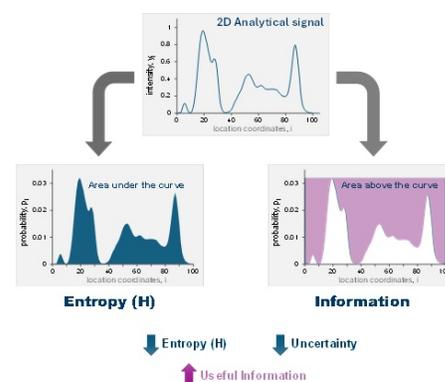
07/03/2025

Publicaciones

Investigadores del grupo de investigación AnAMA (FQM-232) de la Universidad de Granada ha publicado un tutorial en la revista *Analytica Chimica Acta* que describe un enfoque pionero basado en la teoría de la información, propuesta por Claude Shannon a mediados del siglo XX, para llevar a cabo una evaluación a priori de la calidad informativa presente en una señal analítica 2D tomada directamente del instrumento.

Esta publicación sienta las bases para la resolución de un reto no resuelto de la Química Analítica moderna. Se trata de tener a disposición una herramienta para conocer o estimar la calidad y diversidad, en términos de cantidad de información química, de una señal analítica antes de desarrollar el método analítico completo.

Habitualmente, para el desarrollo de un nuevo método analítico, es necesario ejecutar el proceso analítico completo, incluido el tratamiento y análisis matemático, para conocer cómo de aptas son las señales analíticas adquiridas para el objetivo perseguido. Si los resultados satisfacen los requisitos críticos de validación previamente establecidos, finaliza el desarrollo del método. Sin embargo, si por lo contrario los resultados no alcanzan el nivel de calidad requerido, es necesario repetir todo el proceso, probablemente desde el inicio, realizando modificaciones en alguna/s de las etapas (preparación de muestras, instrumentales, tratamiento matemático de los datos y desarrollo del modelo matemático) y eso en el mejor de los casos cuando no sea indispensable modificar completamente el método analítico.



Esta es una ardua tarea que requiere tiempo y conlleva un mayor gasto de recursos. Sin embargo, la existencia de una herramienta con la que sea posible conocer a priori qué señal analítica proporcionará mejores resultados, sería ventajoso en este ámbito. Esto podría aplicarse en la toma de decisión en cuanto a parámetros instrumentales y operativos, o incluso de la técnica analítica a utilizar.

Haciendo uso de la teoría de la información, se propone en esta publicación el cálculo de la entropía de la información como medida de la cantidad de información presente en una señal analítica. Tomando como hipótesis de partida que cuanto mayor sea la cantidad de información en una señal, mayor será la probabilidad de que la información de interés esté presente en ella, se describe este enfoque pionero con el que se conecta la teoría de la información a una disciplina que indudablemente se encuentra relacionada: la química analítica, la disciplina fundamentada en el flujo de la información química.

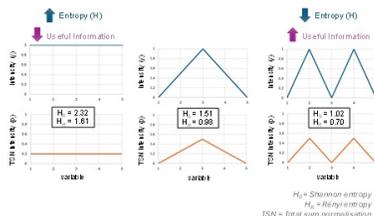


Imagen 1. Ejemplo del cálculo de dos entropías de la información (Shannon y Rényi) sobre 3 señales sencillas simuladas.

Como primera aproximación a la resolución de este reto –conocer a priori la calidad informativa de una señal analítica– se describen y discuten la aplicabilidad de tres modalidades pertenecientes a la familia de las entropías de información (Shannon, Rényi y Tsallis) y su adaptación a señales analíticas. La medida de la entropía de la información es una estimación de la incertidumbre, que es sinónimo de pérdida de información en este contexto; por lo tanto, a mayor entropía, mayor incertidumbre y menor cantidad de información, y viceversa (Imagen 1). Además, se propone el cálculo de índices de información, normalizados entre 0 y 1 y por tanto fáciles de interpretar, y se aplican sobre ejemplos de diversas modificaciones simuladas que pueden afectar a una señal analítica.

Asimismo, se aplica este mismo enfoque sobre señales analíticas reales (Raman, NMR, LC-DAD) sirviendo como guía sobre su uso, y se acompaña de un código programado en lenguaje MATLAB para el cálculo de los índices de información propuestos.

El cálculo de la entropía de la información como primera aproximación para determinar qué señal analítica ofrece mayor calidad informativa ya ha sido aplicada recientemente aplicada por los autores de esta misma publicación para la optimización de parámetros instrumentales en la adquisición de señales analíticas de la mejor calidad informativa, demostrando el potencial de esta estrategia (ref: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2024.343350>). Esta propuesta supone un primer paso para la resolución de un reto aun no resuelto en la Química Analítica actual, que además es consistente con los principios de la Química Analítica Verde (GAC), gracias al ahorro de recursos en el desarrollo de nuevos métodos analíticos.

Referencia: L. Cuadros-Rodríguez, A. Arroyo-Cerezo & A.M. Jiménez-Carvelo (2025). Revamping information entropy: A tailored metric for pre-evaluating quality of 2D analytical signal – A tutorial. *Analytica Chimica Acta*, 1344, 343696.

DOI: [10.1016/j.aca.2025.343693](https://doi.org/10.1016/j.aca.2025.343693)