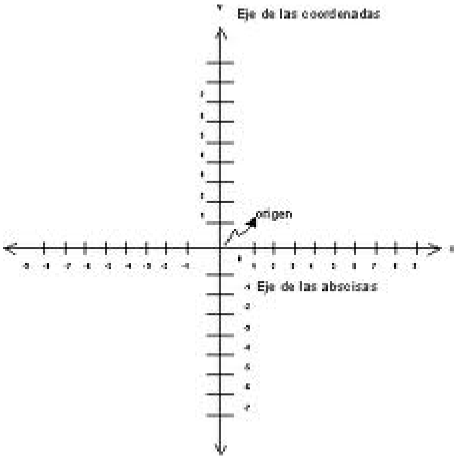
Recta de calibrado

Química, 23/10/2012



Este curso he trabajado en Química Analítica, una disciplina en la que es muy importante medir y cuantificar lo que se esté estudiando. ¿Y eso cómo se hace? ¡Con matemáticas! Se elige una propiedad que varíe de forma lineal con la cantidad (o concentración) de aquello que queremos medir, y así podremos fabricar una recta de calibrado.

¿Qué es una recta de calibrado? Tomemos los ejes cartesianos, el horizontal es el de abscisas o el X, y el vertical el de ordenadas o Y: en las X representamos la concentración creciente y en la de Y la propiedad que depende de la cantidad. Por ejemplo, a los químicos nos gusta mucho la ley de Lambert-Beer que establece que a concentraciones pequeñas se puede correlacionar de forma lineal con la absorbancia o cantidad de luz que absorbe la disolución, y que dependiendo de los casos nos permitirá medirla con espectrometría fluorescente, ultravioleta, etc.

La manera de conseguir esta recta es preparar disoluciones de analito con patrones que nos permitan saber exactamente que concentración tienen, y "hacer una recta de calibrado", luego mediremos nuestra muestra problema, y pondremos el resultado en nuestra recta para estimar con exactitud que cantidad de analito tenemos.

Hasta ahora el mejor ajuste de datos experimentales a modelos matemáticos es el lineal: y= a + bx (que nos permite el cálculo de la ordenada "a" y de la pendiente "b"). Establece el ajuste a través de dos pasos:

1) el centroide (x?, y?) que es la media de todos los valores de abscisas y de ordenadas, respectivamente.

2) evaluación de la desviación del punto experimental con el hipotético valor de ajustes, de manera que minimiza la suma de todas las desviaciones, considerando el cuadrado de la suma porque las desviaciones pueden ser positivas y negativas.

Una vez establecida la recta que pasa por el centroide y mejor ajusta todos los puntos, el modelo matemático calcula la pendiente y la ordenada en el origen ("s" representa la desviación estándar):

Sxx=?(xi - x?)2 = ? xi2- (?xi)2/n

Syy=?(yi - y?)2 = ? yi2- (?yi)2/n

Sxy=?(x? - xi , y? -yi) = ? xi yi- (?xi yi)2/n (se refiere a la desviación estándar de la interacción x e y)

b= sxy/sxx y la ordenada en el origen: y?= a + bx?; a= y?- bx? ¡Ya tenemos nuestra recta de calibrado!

Para estimar la linealidad, tenemos el parámetro estadístico r o coeficiente de correlación momento-producto, que adopata valores desde -1 (si la pendiente es negativa) hasta +1 (si la pendiente es positiva). Cuando adopta el valor cero significa que no existe correlación lineal. Se suele aportar el cuadrado de r tal que así: r2 = sxy/ (sxx syy)1/2

(Fuente)(Fuente)

Nos saltamos el calcular la desviación de a, b, y r, así como de la concentración de analito de nuestra muestra, para no cansar demasiado al personal

La concentración de analito es, por tanto, linealmente dependiente de la señal del detector, pero a partir de determinada concentración se pierde la linealidad y la recta de calibrado se parece más a una curva. El cálculo de la concentración de nuestro problema por medio de la recta de calibrado o regresión se hace con la siguiente expresión: $c = (y - a)/ b$

Esto es lo que realiza un ordenador a nuestra calculadora cuando introducimos los valores de una recta, ¿fácil no?

Próxima entrega: Método de adiciones estándar y un ejercicio de recuperación.

Esta entrada participa en la edición 3.1415926 del Carnaval de Matemáticas, alojado en el blog Series divergentes