SENA REGIONAL VALLE	Centro Nacional de Asistencia Técnica a la Industria – ASTIN **TALLER "LINEALIZACIÓN"**	Código: 9230-FP-F-322 Versión: 2

1. IDENTIFICACIÓN DEL INSTRUMENTO:

Programa de Formación: Tecnólogo en química aplicada a la industria	*Ficha de caracterización:*
Nombre de la Guía:	*Código de la Guía:*
Nombre del Instructor: MARCELO GUANCHA	
Ciudad y fecha:	

2. PRESENTACIÓN E INSTRUCCIONES PARA EL DILIGENCIAMIENTO:

Señor/a Aprendiz:

- Resuelva los problemas o casos planteados.
- Al responder escriba con letra clara y sea conciso.
- Entregue los productos al Instructor y solicite retroalimentación del taller.

3. CUERPO DEL INSTRUMENTO:

Linealización

La linealización se refiere al proceso de ajustar los datos experimentales a una relación lineal, generalmente una línea recta, para facilitar la interpretación de los resultados y la determinación de parámetros importantes del método analítico. Este proceso es particularmente útil en métodos que implican mediciones de concentración frente a respuesta analítica, como en técnicas espectrofotométricas, cromatográficas u otros métodos de análisis.

Pasos del proceso de linealización.

1. Selección del rango de concentración: Se elige un rango apropiado de concentraciones de analito que abarque desde el límite de detección hasta niveles de concentración superiores.
2. Realización de mediciones experimentales: Se realizan mediciones experimentales de la respuesta analítica (por ejemplo, señal absorbancia en espectrofotometría) para cada nivel de concentración seleccionado en el rango.
3. Construcción de la curva de calibración: Los datos experimentales se grafican, generalmente en un gráfico de dispersión, con la concentración en el eje X y la respuesta analítica en el eje Y. Esta curva se conoce como curva de calibración.
4. Ajuste de la curva a una línea recta: Si la relación entre la concentración y la respuesta analítica no es lineal, se realiza un ajuste matemático para linealizar los datos. Esto puede implicar transformaciones matemáticas de los datos o la aplicación de modelos lineales como el método de mínimos cuadrados.
5. Cálculo de parámetros lineales: Se determinan los parámetros de la línea recta ajustada, como la pendiente, la intersección en el eje Y, el coeficiente de correlación (r) y el coeficiente de determinación (R^2).
6. Evaluación de la linealidad: Se evalúa la linealidad de la relación entre la concentración y la respuesta analítica utilizando criterios predefinidos, como la regresión estadística, para determinar si la relación es lineal dentro del rango de concentración seleccionado.
7. Determinación de límites de detección y cuantificación: Se utilizan los datos linealizados para calcular los límites de detección (LOD) y cuantificación (LOQ) del método analítico.

Anexos

Coeficiente de correlación de Pearson

El coeficiente de correlación de Pearson, también conocido como r, es una medida estadística que cuantifica la relación lineal entre dos variables continuas. Es una medida de la fuerza y la dirección de la asociación entre las dos variables. Se utiliza comúnmente para evaluar la relación entre dos conjuntos de datos numéricos.

El coeficiente de correlación de Pearson, denotado como "r", varía en un rango de -1 a 1, donde:

Si r = 1, indica una correlación positiva perfecta, lo que significa que a medida que una variable aumenta, la otra variable también aumenta en proporción constante.
Si r = -1, indica una correlación negativa perfecta, lo que significa que a medida que una variable aumenta, la otra variable disminuye en proporción constante.
Si r = 0, indica que no hay correlación lineal entre las dos variables.

Coeficiente de determinación
es una medida estadística que proporciona información sobre qué tan bien se ajusta una línea de regresión a los datos observados. Es una medida de la proporción de la variabilidad en los valores de la variable dependiente que es explicada por la regresión lineal en relación con la variabilidad total de los datos.

Tabla1. Ecuaciones de linealización

Nombre	Ecuación	Función en Excel
Coeficiente de correlación de Pearson	$r = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{(\sum_i (x_i - \bar{x})^2 \sum_i (y_i - \bar{y})^2)}}$	COEF.DE.CORREL
Pendiente de la recta por mínimos cuadrados	$b = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}$	1.ESTIMACION.LINEAL 2. PENDIENTE
Error de la pendiente y ordena	$S_{y/x} = \sqrt{\frac{\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2}{(n-2)}}$	ERROR.TIPICO.XY
Desviación estándar de la pendiente	$S_b = \frac{S_{y/x}}{\sqrt{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}}$	
Desviación estándar de la ordenada	$S_a = S_{y/x} \sqrt{\frac{\sum_i {x_i}^2}{n \sum_i (x_i - \bar{x})^2}}$	
Límite de confianza de la pendiente	$b \pm t_{(n-2)} S_b$	
Limite de confianza de la ordenada	$a \pm t_{(n-2)} S_a$	
Error de la medida sin replicas	$S_{xo} = \frac{S_{y/x}}{b} \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(y_o - \bar{y})}{b^2 \sum_i (x_i - \bar{x})^2}}$	
Error de la medida con replicas	$S_{xo} = \frac{S_{y/x}}{b} \sqrt{\frac{1}{m} + \frac{1}{n} + \frac{(y_o - \bar{y})}{b^2 \sum_i (x_i - \bar{x})^2}}$	
Límite de detección	$LOD = y_B + 3S_B$	
Límite de cuantificación	$LOQ = y_B + 10S_B$	

Ejercicios
1. Se obtuvieron los siguientes resultados cuando se analizaron una serie de soluciones estándar de plata por espectrometría de absorción atómica de llama.

Concentración, ng/mL	0	5	10	15	20	25	30
Absorbancia	0,003	0,127	0,251	0,390	0,498	0,625	0,763

a) Determine la pendiente y el intercepto de la gráfica de calibración, junto con sus límites de confianza.
b) Estime los límites de confianza para las concentraciones de plata en una muestra que proporciona una absorbancia de 0,308, 0,314, 0,347 y 0,312 en cuatro análisis separados.
c) Estime el límite de detección de la determinación de plata.

2. La respuesta de un ensayo colorimétrico para glucosa se controla con la ayuda de soluciones estándar de glucosa. Determine el coeficiente de correlación a partir de los siguientes datos, y comente los resultados.

Concentración, mM:	0	2	4	6	8	10
Absorbancia:	0,002	0,150	0,294	0,434	0,570	0,704

3. Los siguientes datos corresponden a intensidades de emisión (unidades arbitrarias) a 403.31 nm en ICP (*inductivelycoupled plasma*) para una serie de soluciones estándar de manganeso:

Concentración, ppm	Intensidad
0.500	376
1.50	916
2.50	1503
3.50	2042
4.50	2533
5.50	3197

Con ayuda de calculadora se obtuvo la siguiente ecuación de regresión lineal para los datos de calibración: $y = 90.0 + 557x$. Calcular el límite de detección (3σ) para este método ICP de determinación de manganeso.

Adición de estandar

4. El contenido de oro de una muestra de agua de mar se determinó por espectrometría de absorción atómica mediante el método de las adiciones estándar. Los resultados obtenidos fueron los siguientes

Oro añadido, ng por mL de*muestra original*	0	10	20	30	40	50	60	70
Absorbancia	0.257	0.314	0.364	0.413	0.468	0.528	0.574	0.635

Estime la concentración de oro en la muestra de agua de mar y determine los límites de confianza para esta concentración.

5. La fluorescencia de una serie de soluciones ácidas de quinina fue determinada 5 veces; los resultados se muestran a continuación:

Concentración, ng/mL:	0	10	20	30	40	50
Intensidad de fluorescencia: (unidades arbitrarias)	4	22	44	60	75	104
	3	20	46	63	81	109

4	21	45	60	79	107
5	22	44	63	78	101
4	21	44	63	77	105

Determine la pendiente y el intercepto de (a) la recta de regresión no ponderada y (b) la recta de regresión ponderada. Calcule, utilizando ambas rectas de regresión, los límites de confianza para la concentración de las disoluciones con intensidades de fluorescencia de 15 y 90 unidades.

1. Numero de ejercicios resueltos
2. _____
3. _____.

Observaciones y/o recomendaciones: