

Introducción al CoDaPack – prácticas sobre geometría del símpex

Vera Pawlowsky Glahn

Una vez instalado el CoDaPack, al arrancar el programa incluye automáticamente una hoja de datos. Se trata de datos correspondientes a la composición geoquímica de rocas de una mina de bauxita en Hungría. Para empezar, vamos a realizar una serie de ejercicios para familiarizarnos con el programa y con los conceptos de perturbación, potenciación y subcomposición/clausura del menú *Operations*, así como con la construcción de una recta composicional. Para poder visualizar los resultados trabajaremos con subcomposiciones de tres partes. Es importante recordar que el CoDaPack exige que los datos estén en una hoja del propio archivo, considera que la primera fila está reservada para etiquetas, y presupone que los vectores que se utilicen para perturbar están escritos en formato columna. Pasos a seguir:

Ejercicio 1.

1. Formar la subcomposición [Al₂O₃, Fe₂O₃, TiO₂].
2. Representar la subcomposición en un ternario.
3. Perturbar la subcomposición por [4,28; 9,97; 85,75].
4. Representar la subcomposición en un ternario.
5. Representar en un ternario las variables [Al₂O₃, Fe₂O₃, TiO₂] sin clausurar.
6. Describir qué se observa en los diferentes gráficos. ¿Qué conclusión puede extraerse de la última representación?

Ejercicio 2.

1. Representar la subcomposición [Al₂O₃, SiO₂, Fe₂O₃] en un ternario.
2. Perturbar la subcomposición por [3,81; 87,30; 8,89].
3. Representar la subcomposición en un ternario.
4. Potenciar la subcomposición perturbada por un factor 2.
5. Representar la subcomposición en un ternario.
6. Describir qué se observa. Comparar con los resultados del ejercicio 1.

Ejercicio 3. Construcción de una recta composicional

1. Generar con Excel una variable **a** que tome valores entre -3 y 3 a intervalos de 0,2.
2. Escribir una composición fila arbitraria de tres partes (no olvidar poner etiquetas en la primera fila).
3. Potenciarla utilizando operaciones de Excel por los valores de **a**. El resultado será una matriz de datos con tres columnas y tantas filas como tiene el vector **a**.
4. Representar la composición en un ternario.
5. Perturbar la composición por una composición arbitraria y representarla en un ternario.
6. Generar una variable 'código de grupo' = 1 para la matriz inicial, 'código de grupo' = 2 para la matriz perturbada.
7. Copiar la segunda matriz (incluyendo la variable 'código de grupo') debajo de la primera.
8. Representar la nueva matriz en un ternario utilizando la opción grupo.
9. Describir los resultados.

Ejercicio 4.

1. Abrir el archivo de datos 'Hardy-Weinberg.xls'. Copiar y pegar los datos en una hoja del archivo CoDaPack. Representarlos en un ternario.
2. ¿Cómo podría hacerse pasar una recta por la nube de puntos con los elementos disponibles?