

Índice – Estadística Básica para el Manejo de Datos Experimentales: Aplicación en la
Geoquímica (Geoquimiometría)

Capítulo	Tema / tópico	Página(s)
1.	Conceptos Básicos de Estadística	13-26
1.1.	<i>Definición de estadística</i>	13
1.2.	<i>Datos</i>	14
1.3.	<i>Datos experimentales</i>	16
1.4.	<i>Problemas analíticos y necesidad de involucrar la estadística</i>	16
1.5.	<i>Errores experimentales (los errores aleatorios y sistemáticos: la precisión versus el exactitud)</i>	17
1.6.	<i>Dígitos significativos</i>	19
1.7.	<i>Reglas para el redondeo</i>	21
2.	Tratamiento de Datos Univariados	27-62
2.1.	<i>Medición experimental</i>	27
2.2.	<i>Histogramas</i>	28
2.3.	<i>Distribución Gaussiana</i>	36
2.4.	<i>Métodos robustos versus métodos de valores desviados: estimación de parámetros de medidas de tendencia central y de dispersión</i>	38
2.5.	Medidas de tendencia central o parámetros de localización	39
2.5.1.	<i>Media (“Mean”)</i>	39
2.5.2.	<i>Mediana (“Median”)</i>	42
2.5.3.	<i>Moda (“Mode”)</i>	42
2.5.4.	<i>Cuartil medio o promedio (“Middle quartile”) como la media de los cuartiles inferior y superior</i>	43
2.5.5.	<i>Media recortada (“Trimmed mean”)</i>	44
2.5.6.	<i>Media Winsorizada (“Winsorized mean”)</i>	46
2.5.7.	<i>Otros estimadores robustos tipo L o del estadístico de orden lineal (“L-estimators or lineal order statistics estimators”)</i>	47
2.5.8.	<i>Media geométrica (“Geometric mean”)</i>	48
2.5.9.	<i>Media armónica (“Harmonic mean”)</i>	50
2.6.	Parámetros o medidas de dispersión o escala	50
2.6.1.	<i>Intervalo total (“Range”)</i>	50
2.6.2.	<i>Intervalo intercuartil (“Interquartile range”)</i>	51
2.6.3.	<i>Desviación estándar (“Standard deviation”)</i>	51

Capítulo	Tema / tópico	Página(s)
2.6.3.a.	Error estándar de la desviación estándar (“ <i>Standard error of the standard deviation</i> ”)	52
2.6.4.	<i>Coefficiente de variación</i> (“ <i>Coefficient of variation</i> ”)	53
2.6.5.	<i>Desviación estándar relativa</i> (“ <i>Relative standard deviation</i> ”)	53
2.6.6.	<i>Desviación estándar geométrica</i> (“ <i>Geometric standard deviation</i> ”)	54
2.6.7.	<i>Desviación mediana</i> (“ <i>Median deviation</i> ”)	55
2.6.8.	<i>Error estándar de la media</i> (“ <i>Standard error of the mean</i> ”)	55
2.6.9.	<i>Límites de confianza de la media e intervalo de confianza de la media</i> (“ <i>Confidence limits and Confidence interval of the mean</i> ”)	57
2.6.10.	<i>Momentos de una distribución</i>	59
2.6.10.a.	Primer momento (“ <i>First moment = Mean</i> ”)	59
2.6.10.b.	Segundo momento (“ <i>Second moment = Variance</i> ”)	59
2.6.10.c.	Tercer momento (“ <i>Third moment = Skewness</i> ”)	60
2.6.10.d.	Cuarto momento (“ <i>Fourth moment = kurtosis</i> ”)	61
3.	Propagación de Errores	63-76
3.1.	<i>Propagación de errores aleatorios</i>	63
3.1.1.	<i>Ejemplos de aplicación de las ecuaciones de propagación de errores aleatorios</i>	67
3.1.1.a.	Un experimento sencillo para determinar una propiedad física de un material	67
3.1.1.b.	Error porcentual (%DER) en el experimento anterior	68
3.1.1.c.	Tres tipos de experimentos y sus implicaciones estadísticas	69
3.1.2.	<i>Otras consideraciones para aplicación de las ecuaciones de propagación de errores aleatorios</i>	71
3.2.	<i>Propagación de errores sistemáticos</i>	71
3.3.	<i>Presentación de resultados finales de un experimento: reglas adicionales para el redondeo de datos</i>	72
3.3.1.	<i>Aplicación para el reporte final: Ejemplo de la peridotita JP-1 de Japón</i>	73
3.3.2.	<i>Aplicación para reporte final: Ejemplo de densidad de una roca</i>	74
3.3.3.	<i>Otra regla adicional para el redondeo de datos</i>	74
3.3.4.	<i>Consideraciones finales</i>	75
4.	Pruebas de Significancia	77-108
4.1.	<i>Pruebas de la relación-F y t de Student</i>	77
4.1.1.	<i>Prueba de la relación-F (“F-ratio test”)</i>	78
4.1.2.	<i>Prueba t de Student (“Student’s t test”)</i>	81
4.1.2.a.	Prueba t de Student cuando las varianzas son iguales (“ <i>Student’s t test with equal variances</i> ”)	82
4.1.2.b.	Prueba de t de Student cuando las varianzas son diferentes (“ <i>Student’s t test with unequal variances</i> ”)	85

Capítulo	Tema / tópico	Página(s)
4.2.	Análisis de varianza (ANOVA)	86
4.3.	Prueba χ^2	88
4.4.	Pruebas de discordancia en muestras univariadas y su aplicación en materiales internacionales de referencia geoquímica (MIRG)	88
4.4.1.	Pruebas de discordancia para una distribución normal, previo a la aplicación de "Métodos de valores desviados"	89
4.4.2.	Pruebas de discordancia en muestras univariadas ("Discordancy tests")	90
4.4.3.	Aplicación en materiales internacionales de referencia geoquímica (MIRG; "international geochemical reference materials")	98
4.4.3.a.	Prueba N1 a SiO ₂ en JP-1	98
4.4.3.b.	Prueba N4 (k=1) a SiO ₂ en JP-1	99
4.4.3.c.	Prueba N14 a SiO ₂ en JP-1	100
4.4.3.d.	Prueba N15 a SiO ₂ en JP-1	100
4.4.3.e.	Pruebas N16 (k=2 y k=3) a SiO ₂ en JP-1	101
4.4.3.f.	Resultados de la aplicación de diversas pruebas	102
4.4.3.g.	Aplicación de todas las pruebas seleccionadas	103
4.4.4.	Método de "dos desviaciones estándar"	105
4.5.	Coefficiente de correlación lineal (r)	106
5.	Calibración y Empleo de Sistemas Experimentales	109-130
5.1.	Selección de materiales de referencia para calibración	109
5.2.	Diferentes tipos de regresiones	111
5.2.1.	Regresión lineal ordinaria (RLO)	111
5.2.1.a.	Optimización del resultado del desconocido (en la RLO)	114
5.2.1.b.	Regresión lineal ordinaria (RLO) con errores homoscedásticos	117
5.2.1.c.	Problemas con la regresión lineal ordinaria (RLO)	118
5.2.2.	Regresión lineal ponderada (RLP)	119
5.2.2.a.	Regresión lineal (RL) con errores heteroscedásticos	121
5.2.2.b.	Optimización del resultado para el desconocido (en la RLP)	122
5.2.3.	Regresión curvi-lineal o polinomial	122
5.2.3.a.	ANOVA para la evaluación del ajuste	123
5.2.4.	Regresión lineal robusta (RLR)	124
5.3.	Un ejemplo de calibración	125
5.4.	Pruebas de linealidad	128

Capítulo	Tema / tópico	Página(s)
6.	Diseño y Optimización de Experimentos	131-154
6.1.	<i>Diseño de experimentos</i>	131
6.1.1.	<i>Técnica de aleatoriedad y de bloques (“Randomization and Blocking”)</i>	132
6.1.2.	<i>ANOVA de dos-vías (“Two-way ANOVA”) sin interacciones de factores</i>	133
6.1.3.	<i>ANOVA de dos-vías (“Two-way ANOVA”) con interacciones de factores</i>	137
6.1.4.	<i>Aplicación del ANOVA de dos-vías (“Two-way ANOVA”) para la evaluación de laboratorios</i>	140
6.2.	<i>Diseño factorial versus diseño clásico de “uno-a-la-vez”</i>	140
6.2.1.	<i>Diseño factorial y optimización</i>	140
6.2.1.a.	Efecto de los factores	142
6.2.1.b.	Interacciones entre dos factores	143
6.2.1.c.	Interacciones entre tres factores	145
6.3.	<i>Optimización de experimentos</i>	146
6.3.1.	<i>Optimización de un experimento con un sólo factor</i>	147
6.3.1.a.	Método de intervalos iguales (“Equal interval method”)	147
6.3.1.b.	Método de paso-a-paso (“Stepwise method”)	147
6.3.2.	<i>Optimización de un experimento mediante el método de búsqueda por factores o variables alternantes</i>	149
6.3.3.	<i>Optimización de un experimento mediante el método de ascenso de mayor inclinación</i>	150
6.3.4.	<i>Optimización Simplex (“Simplex optimization”)</i>	152
6.4.	<i>Comentarios finales</i>	154
	<i>Bibliografía</i>	155-158
	<i>Apéndice A</i>	159-178
	<i>Apéndice B</i>	179-186