
BERLINER GEOWISSENSCHAFTLICHE ABHANDLUNGEN

Reihe A/Band 15

Beiträge zur Geomathematik

redigiert von
R. Prissang und W. Skala



Berlin 1979

Verlag von Dietrich Reimer in Berlin

BERLINER GEOWISSENSCHAFTLICHE ABHANDLUNGEN

Reihe A: Geologie und Paläontologie · Reihe B: Geophysik · Reihe C: Kartographie

Herausgegeben von geowissenschaftlichen Instituten
der Freien und der Technischen Universität Berlin
und der Technischen Fachhochschule Berlin

Schriftleitung:

Dr. G. Pöhlmann (TFH), Dr. J. Pohlmann (FU)
Dr. H. Seyfried (TU)

Für den Inhalt der Beiträge sind die Autoren allein verantwortlich

ISBN 3-49 600 200-X

© 1979 by DIETRICH REIMER VERLAG IN BERLIN

Berliner geowiss. Abh.	(A)	15	–	126 Seiten	Berlin 1979
------------------------	-----	----	---	------------	-------------

Beiträge zur Geomathematik

redigiert von

R. Prissang und W. Skala



1979

Verlag von Dietrich Reimer in Berlin

VORWORT

Zur Lösung erdwissenschaftlicher Fragestellungen werden seit etwa einem Jahrzehnt in zunehmendem Umfang mathematische Methoden herangezogen. Eine der Ursachen für diese Entwicklung besteht darin, daß moderne technische Geräte, wie sie auch in den Erdwissenschaften eingesetzt werden, immer größere Datenmengen produzieren, die nach einer rationellen Verarbeitung verlangen. Es ist daher nicht verwunderlich, daß die Mathematische Geologie in Zusammenhang mit der Entwicklung von Groß-Rechenanlagen stark an Bedeutung gewonnen hat.

Multivariate statistische Verfahren sind heute zum unentbehrlichen Hilfsmittel von Paläontologen und Sedimentologen geworden. "Geostatistische" Methoden zur Schätzung der Vorräte von Erzlagerstätten werden aus Gründen der Wirtschaftlichkeit immer häufiger eingesetzt. In der Hydrogeologie und deren Nachbardisziplinen können z.B. zuverlässige Aussagen über Grundwasserbilanzen aus mathematischen Modellen erwartet werden, der Ingenieurgeologe berechnet gemeinsam mit dem Boden- oder Felsmechaniker die Standfestigkeit von Gesteinen. Auch die automatische Bildverarbeitung setzt zur Klassifizierung geologischer Einheiten statistische Methoden ein. In der quantitativen Tektonik wird versucht, Beziehungen zwischen Spannungen und Deformationen von Gesteinen durch Systeme von Differentialgleichungen herzustellen. Auch dem Feldgeologen erleichtert die EDV seine Arbeit in zunehmendem Maße, sei es über die Existenz von Datenbanken oder über Möglichkeiten der automatischen Kartierung.

Auf internationaler Ebene gibt es bereits seit mehr als einem Jahrzehnt Arbeitsgruppen -- beispielsweise in den USA, der UdSSR, Kanada, Großbritannien und Frankreich -- die sich an Hochschulen und in der Industrie eingehend mit der mathematischen Behandlung geologischer Probleme auseinandersetzen. Die Publikationen von D.F. MERRIAM, F. AGTERBERG, A.B. VISTELIUS, W. SCHWARZACHER, G. MATHERON, D. MARSAL u.a. haben internationale Anerkennung gefunden. Seit 1971 haben sich die Mathematischen Geologen auch in einer internationalen Gesellschaft, der "International Association for Mathematical Geology" organisiert, die eigene Zeitschriften (Mathematical Geology und Computers and Geology) herausbringt.

In Deutschland hat eine entsprechende Entwicklung zunächst nur zögernd eingesetzt. 1971 wurde an der Freien Universität ein Lehrstuhl für Mathematische Geologie geschaffen, der bis heute noch der einzige in Deutschland geblieben ist. Jedoch auch die großen geologischen Gesellschaften in Deutschland haben dem zunehmenden Interesse für quantitative Methoden in der Geologie Rechnung getragen und Jahrestagungen mit entsprechenden Rahmenthemen durchgeführt (1974 Bonn, 1978 Münster). Die Deutsche Forschungsgemeinschaft hat seit 1973 Projekte der Mathematischen Geologie besonders gefördert und unter anderem drei vierzehntägige Ferienkurse finanziert, von denen die letzten beiden (1976 und 1979) in Berlin abgehalten worden sind.

Was die studentische Ausbildung betrifft, so umfaßt das Lehrangebot der Mathematischen Geologie an der FU Berlin jetzt insgesamt 20 Wochenstunden, die über vier Semester verteilt angeboten werden. Zur Zeit laufen mehrere Diplomarbeiten und Dissertationen mit thematischem Schwerpunkt in der Mathematischen Geologie.

Um mathematisch arbeitenden Geowissenschaftlern in Berlin Gelegenheit zu geben, aus ihren Forschungsgebieten zu berichten, wurde am 7. Dezember 1978 erstmals unter dem Namen "Rudolf-G.V.-Eigen-Colloquium" eine eintägige Vortragsveranstaltung durchgeführt. Neben den innerhalb der Arbeitsgruppe für Mathematische Geologie der FU erarbeiteten Ergebnissen und solchen aus benachbarten Instituten (Anthropogeographie) wurde auch über Arbeiten berichtet, die außerhalb der FU entstanden sind (Hahn-Meitner Institut für Kernforschung, Ruhr-Universität Bochum).

Der vorliegende Band der "Berliner geowissenschaftlichen Abhandlungen" basiert auf den Beiträgen zu dieser Veranstaltung und vermittelt damit auch erstmalig eine Übersicht über die laufenden Forschungsaktivitäten der Arbeitsgruppe für Mathematische Geologie der Freien Universität Berlin.

An dieser Stelle soll den Mitarbeitern des "Großrechenzentrums für die Wissenschaft Berlin" besonderer Dank ausgesprochen werden, die die Arbeitsgruppe für Mathematische Geologie stets beratend unterstützen und ihren Sonderwünschen gegenüber sehr aufgeschlossen sind. Ferner ist Herrn H. Graetsch zu danken, der die Photoarbeiten durchgeführt hat und Frau R. Cousiño, die die mühevollen Reinschriften der Manuskripte auf sich nahm. Frau G. Wolf (Osteuropa-Institut an der FU Berlin) erstellte freundlicherweise die Übersetzungen in die russische Sprache.

FOREWORD

The use of mathematics in solving geoscientific problems has increased steadily within the last decade. The modernisation of the technical equipment available to geoscientists has resulted in ever-growing amounts of data which then must be analysed. Therefore, it is no wonder that the development of mathematical geology and computers are closely related.

Multivariate statistics has become an aid to paleontologists and sedimentologists. The economic advantages of geostatistical methods of estimating ore reserves has led to their increasingly widespread use. Mathematical models yield much valuable information for hydrologists, engineering geologists and specialists in soil or rock mechanics among others. Even the automatic analysis of aerial photographs requires statistical calculations for the classification of geologic units. On the branch of quantitative tectonics attempts are being made at representing the relationship of tension to deformation in rocks by systems of differential equations. With its vast data banks and its mapping skills data processing has become an important aid to the field geologist.

Study groups for mathematical geology have been active at universities and in industry in the US, USSR, Canada, Great Britain, and France, to name only a few, for over ten years. The publications of D.F. MERRIAM, F. AGTERBERG, A.B. VISTELIUS, W. SCHWARZACHER, G. MATHERON, D. MARSAL and others have received international recognition. The International Association for Mathematical Geology, founded in 1971, also publishes two periodicals, "Mathematical Geology" and "Computers and Geoscience".

The early evolution of mathematical geology in Germany was not so rapid. In 1971, a professor's chair for mathematical geology was created at the Free University in Berlin, yet it remains the only one of its kind in Germany. The larger geological concerns, however, have become increasingly aware of the advantages of quantitative analysis to geology. In fact, interest has grown so much that two conferences on the subject have been held (in Bonn, 1974, and Münster, 1978) and the "Deutsche Forschungsgemeinschaft" (DFG) has strongly supported projects involving mathematical geology. Up to now, the DFG has also sponsored three two-week long courses of which the last two were held in Berlin (1976 and 1979).

At the FU Berlin a total of 20 credit hours of mathematical geology are offered over a period of four semesters. In addition, various aspects of mathematical geology are the themes of several current master's theses and doctoral dissertations.

In order to give mathematical geoscientists the opportunity to present and discuss their work, the first day-long "Rudolf-G.V.-Eigen-Colloquium" was held on Dec. 7, 1978. Research reports from the Free University's Mathematical Geology study group and related institutes (Anthropogeography) were presented along with papers from the Hahn-Meitner Institute for Atomic Research and the Ruhr University in Bochum.

This volume is a collection of the aforementioned papers and thus provides a fairly comprehensive look at the current research activities of the Mathematical Geology study group.

At this point, I would like to express my thanks to the staff of the "Großrechenzentrum für die Wissenschaft Berlin" (GRZ) for their support of our work and their willingness to tackle any problem. In addition I would like to thank Mr. H. Graetsch for the photography and Ms. R. Cousiño for typing the manuscript. Special thanks to Ms. G. Wolf (Osteuropa-Institut of the FU Berlin) for the Russian translation.

WOLFDIETRICH SKALA

ПРЕДИСЛОВИЕ

К решению геонаучных проблем вот уже около 10 лет все в больших масштабах привлекаются математические методы. Одна из причин для подобного развития состоит в том, что современные технические аппараты, применяемые в геологии, оперируют все большим количеством данных, требующих рациональной обработки. Поэтому не удивительно, что значение математической геологии возросло в соответствии с развитием больших вычислительных центров.

Многомерные статистические методы стали незаменимым вспомогательным средством для палеонтологов и седиментологов. Геостатистические методы для оценки запаса рудных месторождений все чаще употребляются по причине рентабельности. В гидрогеологии и их смежных предметах, например, можно получать достоверные высказывания о балансе грунтовых вод. Инженер-геолог вместе с механиком вычисляют устойчивость горных пород. В автоматической обработке диаграмм, пленки и т.д. тоже используются статистические методы, с целью классификации геологических единиц. В тектонике сделана попытка установить корреляцию между напряжениями и деформациями горных пород при помощи систем дифференциальных уравнений. Электронная обработка данных все в большей мере облегчает также работу геолога, работающего практически.

Уже давно существуют исследовательские группы в таких странах, как в США, СССР, Канаде, Англии, Франции, систематически работающие над математической обработкой геологических проблем в вузах и в промышленности. Публикации Д.Ф. МЕРРИАМА, Ф. АГТЕРБЕРГА, А.Б. ВИСТЕЛИУСА, В. ШВАРЦАХЕРА, Г. МАТЕРОНА, Д. МАРСАЛА и.д. нашли международное признание. С 1971г. геоматематики организовались в "International Association for Mathematical Geology". Эта ассоциация выпускает собственные журналы "Mathematical Geology" и "Computers and Geology".

Соответствующее развитие началось как-то "нерешительно" в ФРГ справа. В 1971г. в Зап. Берлинском университете (FU Berlin) было организована кафедра по математической геологии, оказавшаяся единственной в ФРГ, учитывая возрастающий интерес к количественным методам в геологии. Они проводили заседания по соответствующим темам (в 1974 - в Бонне, в 1978 - в Мюнстере). С 1973 г. "Deutsche Forschungsgemeinschaft" (DFG) поддерживал особенно проекты математической геологии и финансировало между прочим три двухнедельных курса, проведенных в Берлине (в 1976 и в 1979).

Что касается образование студентов в Берлинском университете (FU Berlin), то обучение математической геологии охватывает всего 20 часов в неделю, распределяющихся на 4 семестра. В настоящее время проводятся несколько дипломных работ акцентом в области математической геологии.

7. 12. 1978 была проведена в первый раз однодневная лекция под заглавием "Рудольф - Г.В. Эйген - коллоквиум", с тем чтобы дать возможность геологам, работающим в области математической геологии, докладывать об их исследуемых областях. Кроме итогов выработанных исследовательской группой по математической геологии в Берлинском университете и в соседних институтах (антропогеография) проводились доклады и о работах других институтов, работающих вне университета FU (Институт по исследованию в области ядерной физики им. Ган-Мейтнера, университет в Бохум).

В основу данного тома "Berliner geowissenschaftliche Abhandlungen" положены статьи этой лекции. Он дает обзор о бегущей исследовательской деятельности научной группой в Берлинском университете.

Мы благодарим сотрудников Берлинского Научно-вычислительного центра, которые всегда поддерживали труды исследовательской группы и интересовались ее специфическими потребностями. Мы благодарим сердечно также г. Г. Греча за изготовление фотографий и г-жу Р. Кузину за делопроизводство рукописей.

INHALTSVERZEICHNIS	Seite
BURGER, H. : Digitale Bildverarbeitung - Ein wichtiges Hilfsmittel in der geologischen Fernerkundung.....	5
BORSTENBINDER, J. : Einige Ergebnisse eines Methodenvergleichs bei der Berechnung von Erzkörpern.....	21
LINDENBERG, H.G. & MENSINK, H. : Multivariate Gruppierungsmethoden in phylogenetisch orientierter Paläontologie (am Beispiel von Gastropoden aus dem Steinheimer Becken).....	30
PENA, J.L. : SURFACE II, ein graphisches Computer-System.....	52
PRISSANG, R. : Die Anwendung einer Methode gleitender gewichteter Mittelwerte auf die Vorratsberechnung einer Gangerzlagerstätte.....	59
SCHOELE, R. : Geostatistik - Ein System von Rechenprogrammen zur Theorie der ortsabhängigen Variablen.....	67
SCHUMANN, Th. : Methoden der Sozialraumanalyse.....	80
SCHWIETZER, C.-A. : Klassifizierung von Ostracodenschalen mit Hilfe von Fourier-Koeffizienten.....	88
SHULMAN, M. : The geologic applicability of some constitutive equations.....	94
SKALA, W. : Einige Eigenschaften geschlossener Prozentsysteme.....	101
WALLBRECHER, E. : Vektorstatistische Methoden zur Ermittlung von Regelungsgraden und zur Beschreibung von Verteilungsformen tektonischer Daten.....	110

DIGITALE BILDVERARBEITUNG - EIN WICHTIGES HILFSMITTEL
IN DER GEOLOGISCHEN FERNERKUNDUNG

von

HEINZ BURGER⁺

ZUSAMMENFASSUNG

Die digitale Bildverarbeitung liefert einen wichtigen Beitrag zur geologischen Interpretation von Luft- und Satellitenbildern. Bei der Entwicklung von Klassifizierungsalgorithmen ist die besondere Struktur der Remissionswerte von Gesteinsoberflächen in den verschiedenen Spektralkanälen zu berücksichtigen (hohe Korrelation in den Landsat-Kanälen, gute Trenneigenschaften in den IR-Kanälen 8-14 μm).

Zusätzliche Merkmalswerte, die die textuellen Eigenschaften von Gesteinsoberflächen erfassen, können zu einer Klassifizierung herangezogen werden.

Voraussetzung für eine effektive digitale Bildverarbeitung ist ein interaktives Bildauswertegerät, das es erlaubt einfache Bildverbesserungen und Klassifizierungen in Real-Zeit vorzunehmen und auf dem Bildschirm darzustellen.

Schnelle Großrechner müssen eingesetzt werden, um kompliziertere Bildverarbeitung vorzunehmen, die für eine ganze Landsatzszenen durchgeführt werden muß (3200 x 2340 Bildpunkte statt 512 x 512).

Fernziel der digitalen Bildverarbeitung in der Geologie ist die automatische Erkennung von geochemischen Anomalien, die sich in unterschiedlichem Remissionsverhalten der Gesteine selbst oder der sie bedeckenden Vegetation bemerkbar machen. Hierzu gibt es ermutigende Ansätze (LYON 1970, SMITH 1977). Die quantitative Analyse der Signaturen und Texturen von Gesteinen, die automatische Kartierung von Lineationen und Entwässerungsnetzen sind notwendige Schritte auf dem Weg zu diesem Ziel.

SUMMARY

Remote sensing has become an important tool in geological research and in exploration of new mineral deposits. The analysis of multispectral data can best be done by digital image processing using an interactive computer system.

This paper gives a short review of features on satellite photographs which are important for geological interpretation. Some techniques are described how to extract signature- and texture-parameters automatically and to use them in an image classification algorithm.

⁺ Anschrift des Verfassers: Dipl.-Math. Heinz Burger, Institut für Geologie d. FU Berlin,
1000 Berlin 33, Altensteinstr. 34A.

РЕЗЮМЕ

Использование цифровых отображений вносит важный вклад в геологическую интерпретацию аэрофотоснимков и космических фотоснимков. При развитии методов для классификаций, необходимо учитывать особенную структуру отражения на поверхности горных пород в разных спектральных каналах.

Дополнительные значения признаков, определяющие текстурные свойства поверхностей горных пород, можно применять для классификации.

Предпосылка для эффективной обработки изображений - устройство обработки изображений в диалоговом режиме, позволяющее сделать исправления изображений и классификации на экране в реальное время.

Предлагается применение быстрых вычислительных машин к обработке изображений. Цель использования цифровых отображений в геологии - автоматическое распознавание геохимических аномалий (см. труды Лаона 1970, и Смиса 1977). Количественный анализ условных знаков и текстур горных пород, автоматическое картирование шлейфов и дренажных сетей - важные шаги к этой цели.

1. EINLEITUNG

Seit der Entsendung des ERTS-Satelliten (jetzt Landsat genannt) im Jahre 1972, hat die digitale Bildverarbeitung einen bis dahin ungeahnten Aufschwung erfahren. Die Gründe hierfür liegen vor allem in

- der Entwicklung neuer Sensoren, die in mehreren Spektralkanälen Informationen sammeln
- neu entwickelten Methoden der Bildverbesserung und Auswertung mit Hilfe von leistungsfähigen Computern.

Geometrische Bildverzerrung, Kontrastverstärkung, Unterdrückung von Bildstörungen, Klassifizierung von landwirtschaftlichen Nutzflächen sind Beispiele für heute operationelle Verfahren bei der Auswertung von Bilddaten.

Im Bereich der Geologie ist die Erstellung einer geologischen Karte Grundlage für zahlreiche weitere Forschungen. Die Auswertung von Luft- und Satellitenbildern ermöglicht die schnelle Kartierung großer Gebiete der Erdoberfläche. Daten aus geologischen Feldaufnahmen, geophysikalischen Messungen, Bohrungen etc. bilden die Kontrollpunkte bei der Bildauswertung. Bei dieser Auswertung werden die folgenden Bildeigenschaften von Gesteinsoberflächen berücksichtigt:

- Grautonwerte
- Bildtextur
- Lineationen
- Formelemente
- Remissionsverhalten in verschiedenen Spektralbereichen.

Hieraus ergeben sich die Aufgaben der digitalen Bildverarbeitung im Bereich der geologischen Fernerkundung:

- Verbesserung des vorhandenen Bildmaterials
- Quantitative Beschreibung von Texturen
- Verstärkung von Lineamenten
- Quantitative Beschreibung von Formelementen
- Automatische Klassifizierung von Gesteinsoberflächen.

Ziel dieser Arbeit ist es, Möglichkeiten und Probleme der digitalen Bildverarbeitung bei der geologischen Interpretation von Fernerkundungsdaten darzustellen.

2. DIGITALE BILDVERARBEITUNG AN DEN GEOLOGISCH/PALAONTOLOGISCHEN INSTITUTEN DER FREIEN UNIVERSITÄT BERLIN

Hauptziel der digitalen Bildverarbeitung ist die voll automatische Klassifizierung von Luft- oder Satellitenbildern. Hierzu wird das Bild in digitaler Form in den Rechner eingelesen und nach Ablauf eines Klassifizierungsprogramms als thematische Karte geplottet. Dieses Ziel einer automatischen Erkennung von Bildobjekten ist in manchen Bereichen schon erreicht (Lesen von Texten auf Formularen, Sortierung einfacher Formen etc.), im Bereich der Geologie ist man noch weit davon entfernt. Es ist deshalb zweckmäßig, auf eine vollautomatische Interpretation des Bildmaterials zu verzichten und interaktiv mit einer Bildverarbeitungsanlage zu arbeiten. Dabei können Fehlinterpretationen sofort erkannt und durch Änderung der Klassifizierungsparameter berichtigt werden. Interaktive Bildverarbeitung ist nur an einem Prozeßrechner möglich, der für diesen Zweck entwickelt wurde.

Für die digitale Bildverarbeitung ergeben sich daraus zwei Folgerungen:

- a) Bildverarbeitung kann an jedem Rechenzentrum betrieben werden, wenn man nur an speziellen Bildverarbeitungsalgorithmen interessiert ist und mit einer Bildausgabe auf dem Schnelldrucker zufrieden ist (Abb. 1 und 2). Neben den Rechenzeitkosten entstehen nur Kosten durch die Anschaffung von Magnetbändern mit Bildaufzeichnungen (200 US \$ für eine 185 x 185 km² Landsat-Szene).
- b) Zur interaktiven Bildverarbeitung ist umfangreiche Hardware notwendig, die im Wesentlichen aus verschiedenen Bildeingabe- und Bildausgabemodulen und einem Prozeßrechner besteht.

In der Arbeitsgruppe "Fernerkundung" an der FU werden beide Möglichkeiten zur Bildverarbeitung genutzt, wobei die Entwicklung neuer Software vorwiegend am Großrechner des Rechenzentrums geschieht, während die Interpretation von Satellitenbildern innerhalb aktueller Forschungsprojekte am interaktiven hybriden Bildverarbeitungsgerät erfolgen kann.

2.1 Das hybride Bildverarbeitungssystem EARTHVIEW II

Die Hardwarekonfiguration der Bildverarbeitungsanlage ist aus Abb. 3 zu entnehmen. Als Bildeingabe dient die Fernsehkamera, die Magnetbandstation oder Discetten; Ausgabegerät sind Farb- und S/W-Monitore sowie Magnetbänder und Discetten.

Die Magnetbänder geben die Möglichkeit, Ergebnisse der Bildverarbeitung am Großrechner interaktiv weiter zu verarbeiten oder auf Film auszugeben (Hell-Chromograph).

Das Terminal dient der Eingabe von Kommandos an den Rechner, wobei ein großer Anteil der Funktionen über Funktionstasten und den Track-ball (Rollkugel) aufgerufen werden können.

Die Ergebnisse der Bildoperationen können sofort auf dem hoch auflösenden Farbmonitor kontrolliert werden, wobei es auch möglich ist über die Rollkugel Information auf dem Bildschirm einzutragen (Abgrenzung von Trainingsgebieten etc.).

Der X-Y-Monitor liefert ein Pseudo-Relief der Grautonverteilung des Bildes. Durch Rotation des Bildes und Simulation verschiedener Blickwinkel ist es möglich, Strukturen (insbesondere Lineationen) sichtbar zu machen, die auf dem Farbmonitor durch die Informationsfülle schwer erkennbar sind.

2.2 Programme zur Bildverarbeitung

Eine Übersicht über die bisher vorhandenen Programme liefert Abb. 4. Dabei kann das gesamte Preprocessing interaktiv durchgeführt werden, ebenso die überwachte (supervised classification) Klassifizierung mit Signaturparametern.

Besonders wichtig sind hierbei die Grauwert-Transformationen und die Farbkodierung, die global oder lokal an die spezielle Problematik angepaßt werden können. Durch die Look-up table-Technik kann nahezu jede beliebige Bildtransformation interaktiv durchgeführt und das Ergebnis auf dem Farbmonitor kontrolliert werden.

Ferner ist es möglich, die Ergebnisse von Rechnungen am Großrechner für Transformationen im interaktiven System zu verwenden (z.B. die Komponenten der Eigenvektoren einer Hauptkomponentenanalyse als Gewichte bei linearen Bildkompositionen). Ein weiterer Vorteil der Arbeit mit einem Großrechner liegt darin, daß dort meist



Abb. 2: Klassifikation der Szene aus Abb. 1 und Darstellung des Ergebnisses durch Symbole: Blank = Wasser, W = Wald, S = Autobahn, +, - = Felder verschiedener Art.

umfangreiche Programmpakete zur Auswertung multivariater Daten in Bibliotheken vorhanden sind (z.B. CLUSTAN, SPSS, IMSL, NAG etc.), die bis zur Entwicklung eigener, bild- und rechner-spezifischer Software eingesetzt werden können.

3. SPEKTRALE SIGNATUREN IM SATELLITENBILD

Der Landsat-Satellit (auf dessen Daten ich mich im Folgenden beschränken will) umläuft auf einer sonnen-synchronen Bahn die Erde. Seine Umlaufhöhe ist etwa 912 km, die Umlaufzeit beträgt 103 Minuten, so daß die Erde alle 18 Tage einmal vollständig überdeckt wird.

Neben drei Kameras (Return Beam Vidicon) trägt der Satellit ein Scannersystem, das in vier Spektralkanä-len die Erdoberfläche in 185 km breiten Scanlinien abtastet. Das Auflösungsvermögen beträgt dabei ca. 80 m. Die Remissionswerte der Scanner werden zur Erde gefunkt, auf computer-compatible Magnetbänder (CCT) transfor-miert und an die Benutzer weitergegeben.

Die Sensoren arbeiten in den Kanälen

- 4 0.5 - 0.6 μ m
- 5 0.6 - 0.7 μ m
- 6 0.7 - 0.8 μ m
- 7 0.8 - 1.1 μ m

Die beiden Infrarot-Kanäle (6, 7) sind meist sehr hoch korreliert, so daß bei der Herstellung von Falsch-farb-Kompositen die Kanäle 4, 5 und 7 verwendet werden.

Für jedes Bildelement (Pixel) erhält man vier Grautonwerte, die als Komponenten eines Merkmalsvektors aufgefaßt werden. Durch die große Anzahl von Bildpunkten in einer Landsat-Szene (ca. 7.5×10^6 Pixel) ist es nicht unmittelbar möglich, die in der multivariaten Statistik üblichen Verfahren der überwachten oder nicht-überwachten Klassifizierung anzuwenden. Man behilft sich damit, zufällig oder systematisch Bildpunkte heraus-zusuchen, und die Signaturen anhand dieser reduzierten Datenmenge zu analysieren. Haben sich hierbei bestimm-te Gruppierungen und Klassifizierungsverfahren ergeben, so kann das Gesamtbild entsprechend abgearbeitet werden. Kompromisse zwischen der Effizienz der Analyse und der Rechenzeit sind dabei unumgänglich.

3.1 Spektrale Signaturen von Gesteinsoberflächen in ariden Gebieten

Zur Korrelationsanalyse der vier Spektralkanäle werden 300-500 Pixel nach einem Zufallsverfahren aus dem zu untersuchenden Teilbild ausgewählt. Trägt man die Grautonwerte der Pixel in ein Koordinatensystem ein, wobei ein Kanal die Abszisse belegt, der andere die Ordinate, so ergeben sich in günstigen Fällen schon deut-liche Punkthäufungen, die bestimmten Bildgebieten zugeordnet werden können (Abb. 5). In diesem Fall liefern die verschiedenen Spektralkanäle unterschiedliche Information und die Anwendung multivariater Methoden bringt bessere Ergebnisse als die Auswertung eines Bildes mit dessen Grautonwerten.

Untersucht man auf diese Weise die spektralen Signaturen von Gesteinsoberflächen in ariden Gebieten, so ergibt sich in allen bisher hier untersuchten Gebieten eine hohe Korrelation zwischen allen Spektralkanälen (Tab. 1).

	4	5	6
5	0.98		
6	0.97	0.98	
7	0.97	0.98	0.99

Tab. 1: Korrelationskoeffizienten für die Spektralkanäle 4-7. Es wurden 400 Bildpunkte aus der Umgebung des Tousside-Vulkans (Tschad) verwendet.

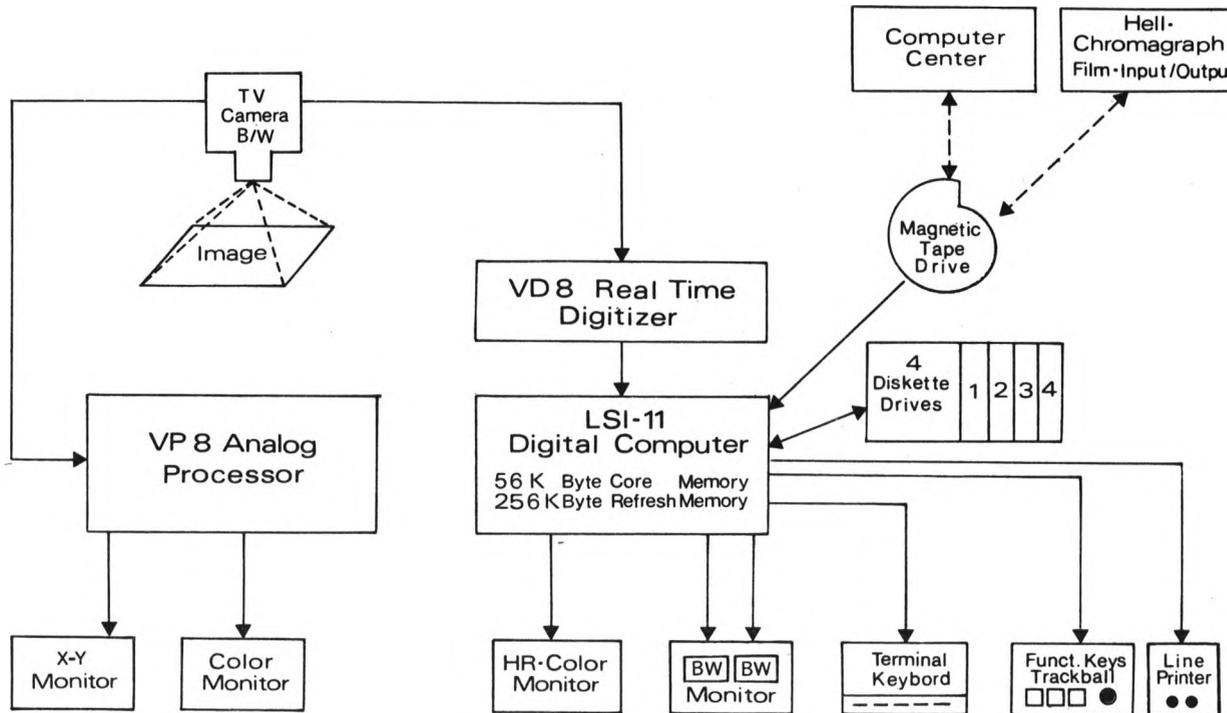
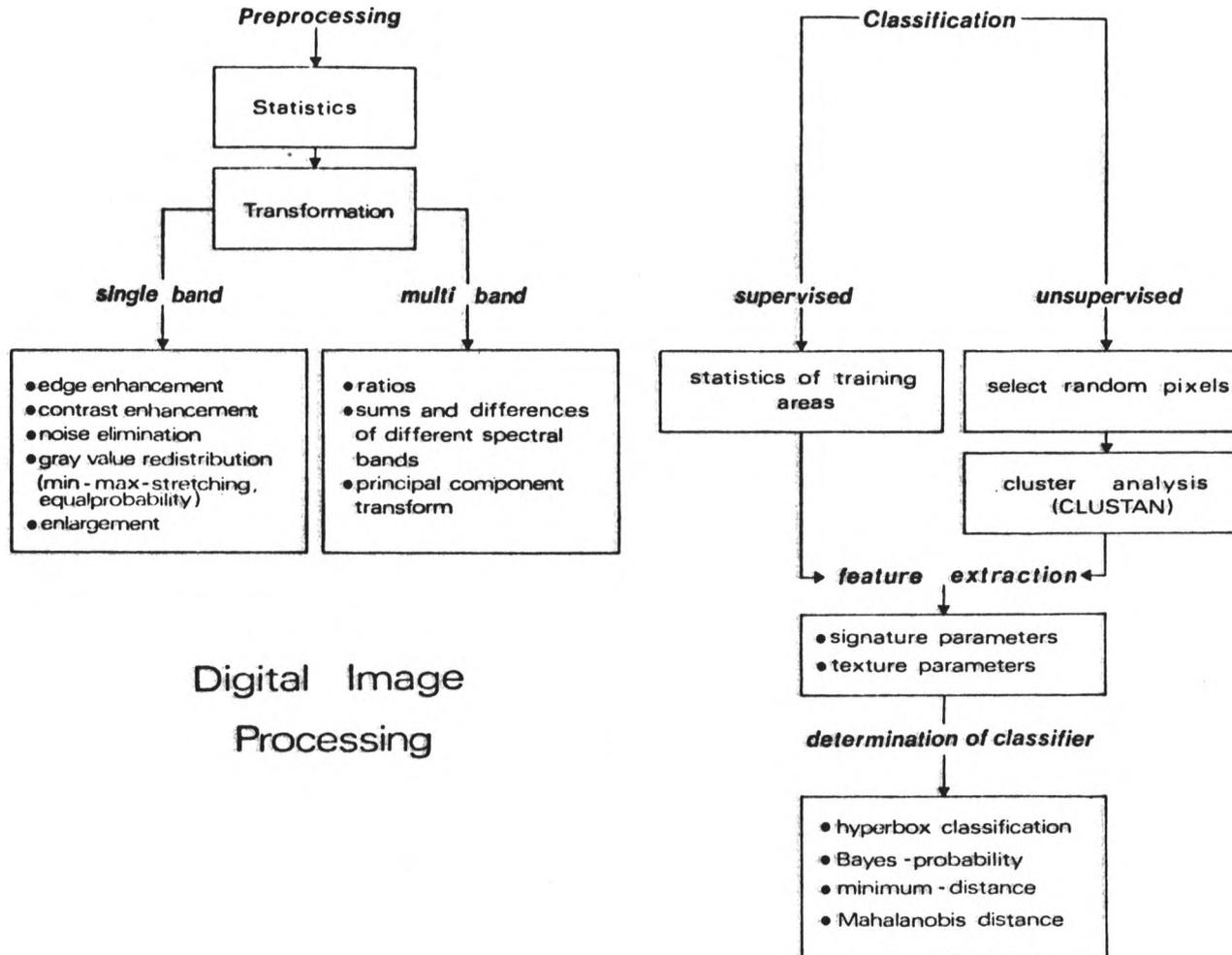


Abb. 3: Schema des hybriden Bildverarbeitungssystems am Institut für Angewandte Geologie der Freien Universität Berlin



Digital Image Processing

Abb. 4: Programme zur digitalen Bildverarbeitung. Die meisten laufen interaktiv an der Bildverarbeitungsanlage. Rechen- und speicherintensive Programme (Texturanalyse, Clusteranalyse), die auf eine ganze Landsat-Szene angewendet werden, laufen über die Großrechner (vgl. Abb. 3)

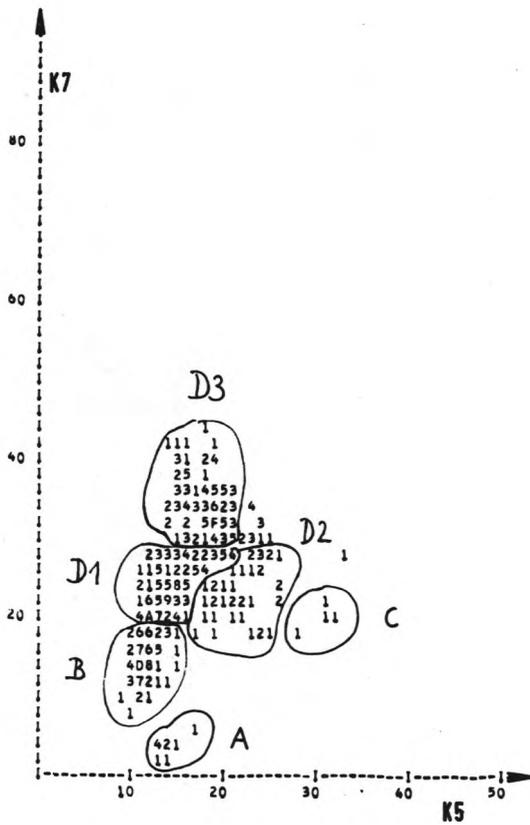
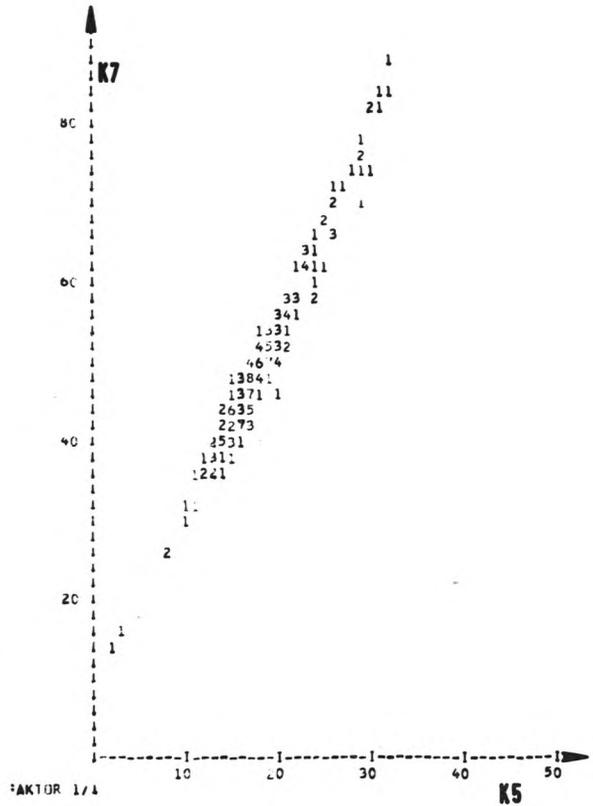


Abb. 5: Scattergramm der Grautonwerte in den Kanälen 7 und 5. Die Bildpunkte wurden nach einem Zufallsverfahren aus der Szene von Abb. 1 (Murnauer Mulde) gewählt. Vergleicht man diese Verteilung mit bekannten Remissionswerten, so ergibt sich etwa die eingezeichnete Zuordnung: A = Wasser, B = Wald, C = Auto- bahn, Stadtgebiete, D1-D3 = unterschiedliche Felder.

Abb. 6: Charakteristisches Scattergramm von Grautonwerten verschiedener Spektralkanäle für Bildpunkte in ariden Gebieten (Ofouni, Tchad). Im Gegensatz zu Abb. 5 sind die Kanäle hier hoch korreliert ($r=0.98$), so daß die Verwendung mehrerer Spektralkanäle redundant erscheint.



Trägt man in diesem Fall die Bildpunkte in ein Scattergramm ein so ergibt sich ein sehr schmaler gerader Streifen, in dem sich die Daten konzentrieren (Abb. 6).

Die verschiedenen Gesteinseinheiten unterscheiden sich in ihren Helligkeitswerten, nicht jedoch in ihrem Spektralverhalten. Deshalb hat LYON schon 1970 darauf hingewiesen, daß eine multispektrale Auswertung der Landsat-Aufnahmen kaum einen Informationszuwachs gegenüber der klassischen einfachen Bildinterpretation bringt. Erst durch die Hinzunahme von Infrarot-Aufnahmen im Bereich zwischen 7 und $14\mu\text{m}$ ist ein Informationszuwachs zu erwarten, d.h. Gesteinseinheiten mit unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung zeigen unterschiedliches Remissionsvermögen in verschiedenen Spektralkanälen. Aus diesem Grund sind die Aufnahmen des Landsat 3 - Satelliten, der ein zusätzlichen Infrarot-Scanner in dem o.g. Spektralbereich enthält, für die geologische Auswertung von besonderem Interesse.

Eine genauere statistische Auswertung der vier Landsatkanäle zeigt, daß verschiedene Gesteine sich im

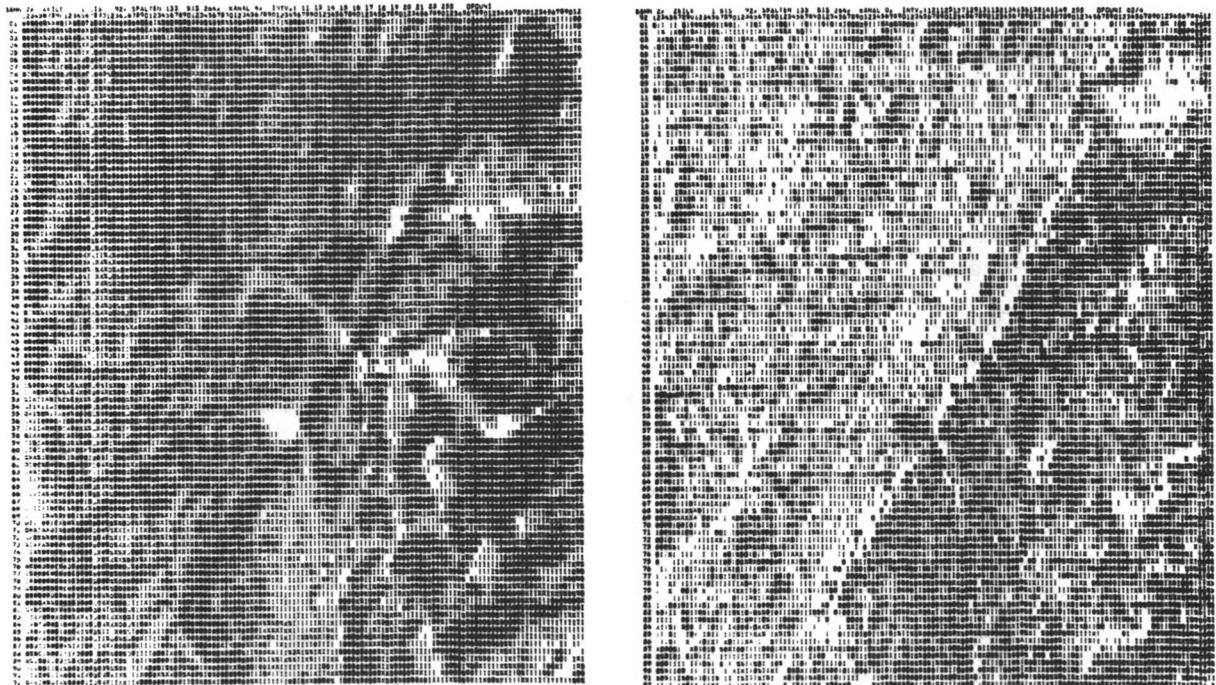


Abb. 7: Grautonsimulation einer Szene östl. Ofuni (Tchad). Die dunkle Diagonale, die von SSW nach NNO streicht, stellt eine Störung dar, die Sandstein (links) und Reste von Basaltdecken (sehr dunkel) von metamorphen Schiefen trennt. Eine Trennung der beiden Einheiten mit Hilfe aufwendiger Klassifizierungsprogramme ist kaum möglich. Ein einfaches Quotientenbild K5/K7 zeigt jedoch eine deutliche Trennung (rechtes Bild).

Remissionsverhalten nicht völlig gleichen. Insbesondere die Sande kann man häufig aufgrund ihrer unterschiedlichen Farben klassifizieren. Betrachtet man Quotientenbilder verschiedener Kanäle, so kommen auch hier Strukturen deutlich heraus, die man aufgrund der hohen Korrelation zwischen den Kanälen nicht erwartet (Abb. 7).

Ein Klassifizierungsverfahren für Gesteinseinheiten, das die Spektralkanäle des Landsat-Satelliten als Klassifizierungsmerkmale benutzt, muß die hohe Korrelation von 0.95-0.99 zwischen allen Spektralkanälen berücksichtigen, um sinnvolle Ergebnisse zu erhalten. Die bekannten Verfahren, die von unabhängigen Merkmalen ausgehen, liefern keine sinnvollen Ergebnisse.

Führt man eine Hauptachsentransformation durch, so liefert der erste Eigenvektor meist 99% der Gesamtinformation. Sie enthält die Grauwertunterschiede der verschiedenen Gesteinseinheiten. Die übrigen Eigenvektoren liefern Information über Unterschiede im Spektralverhalten. Bei einer Klassifizierung ist es deshalb sinnvoll, mit transformierten Merkmalen zu arbeiten, wobei die transformierten Bilder zeigen, wieviel Merkmale zur Klassifizierung ausreichen.

4. TEXTURANALYSE

Bei der Interpretation von Luft- und Satellitenbildern spielt neben dem Grauwert der Gesteinseinheiten die Textur eine entscheidende Rolle. Versucht man die Textureigenschaften bei der digitalen Bildverarbeitung als weiteres Merkmal zu verwenden, so muß man die qualitativen Begriffe wie

- grob und fein
- streifig
- fleckig
- körnig
- kontrastreich etc.

quantifizieren. Für das Erscheinungsbild einer Textur in einem Punkt ist die Verteilung der Grautonwerte in seiner Umgebung von Bedeutung. Damit kann jede lokale Bildoperation (d.h. eine Bildfunktion $f(x, y)$, die nur von Werten in einer Umgebung $U(x, y)$ des Pixels (x, y) abhängt) dazu verwendet werden, Texturparameter zu extrahieren. Man kann dabei im wesentlichen folgende Methoden unterscheiden:

- lokale Grauwertstatistik
- Berechnung von "Nachbarschaftsmatrizen" (HARALICK, 1973)
- Analyse des Powerspektrum (oder andere Orthogonalentwicklungen)

Besondere Probleme bei der Texturanalyse von Multispektralaufnahmen bringt der Umgebungsbegriff: die Umgebung eines Bildpunktes muß so groß sein, daß die extrahierten Parameter die Textur erfassen; andererseits muß sie möglichst klein gehalten werden, um die Rechenzeiten gering zu halten und um Texturgrenzen möglichst genau zu erfassen.

Ferner ist zu berücksichtigen, daß Aufnahmen in verschiedenen Spektralbereichen i.A. verschiedene Texturen zeigen. Um den Rechenaufwand nicht zu groß werden zu lassen, ist es deshalb notwendig, sich bei der Texturanalyse auf einen Spektralkanal zu beschränken. Dabei wählt man zweckmäßigerweise denjenigen Kanal, der die beste Trennung der verschiedenen Klassen erlaubt.

4.1 Abgrenzung von Textur-Nichttextur

Bei der Signaturklassifizierung geht man davon aus, daß zwei Pixel genau dann dieselbe Gesteinseinheit darstellen, wenn sie in allen Spektralkanälen dasselbe Remissionsverhalten zeigen. Differenzen werden innerhalb gewisser Grenzen ignoriert. Um homogene Bildteile gegenüber Texturen abzugrenzen ist es notwendig festzustellen, ob die Differenzen zwischen einem Bildpunkt und seiner Umgebung in allen Spektralkanälen einen bestimmten Schwellenwert nicht überschreiten.

Ein Maß hierfür ist spektrale Distanz zu benachbarten Bildpunkten (etwa in x- und y-Richtung)

$$\begin{aligned}d_x &= \frac{1}{n} \sum |g_{i,j} - g_{i,j+1}| \\d_y &= \frac{1}{n} \sum |g_{i,j} - g_{i+1,j}| \end{aligned} \quad (1)$$

wobei $g_{i,j}$ den Grautonwert in Bildzeile i und Spalte j bezeichnet und die Summation über die n Spektralkanäle erfolgt. Die zweidimensionale Verteilung (d_x, d_y) erlaubt es, die Bildpunkte in zwei Klassen einzuteilen, wobei die erste Klasse das homogene Bild I_h darstellt, die zweite Klasse das inhomogene Bild I_i . Entscheidungsregel ist dabei

$$x_{i,j} \in I_h, \text{ wenn } D(x_{i,j}) = ad_x + bd_y + cd_xd_y < C \quad (2)$$

Die Konstanten a, b, c ergeben sich aus der Verteilung von (d_x, d_y) durch eine Hauptkomponentenanalyse ihrer Varianz-Covarianz-Matrix. Der Schwellenwert C wird am einfachsten anhand bekannter Testgebiete bestimmt. Gehört ein Bildpunkt I_h an, so kann er entsprechend seiner Signatur klassifiziert werden, d.h. die Merk-

malswerte sind die Grautonwerte in den verschiedenen Spektralkanälen.

Gehört der Bildpunkt dem inhomogenen Bild I_i an, so müssen andere Merkmalswerte berechnet werden: die Texturparameter.

4.2 Untersuchung einiger Texturparameter

Zur quantitativen Beschreibung der Texturmerkmale verwendet man verschiedene lokale Bildoperationen. Im Gegensatz zu Merkmalen aus dem Frequenzbereich (nach Fouriertransformation) haben solche Parameter den Vorteil der Anschaulichkeit. Es gibt viele Möglichkeiten den Kontrast, die Rauigkeit, Körnigkeit etc. zu erfassen. Viele Parameter sind hoch korreliert und es ist notwendig eine passende Auswahl zu treffen.

Zur Beschreibung der Rauigkeit in einer Punktumgebung kann man die Streuung der Grautonwerte in der Umgebung $U(x_{i,j})$ des Pixels $x_{i,j}$ verwenden

$$p_1 = \frac{1}{n} \sum (g_{i,j} - g_u)^2 \quad (3)$$

oder die Werte des Gradienten in dieser Umgebung

$$p_2^2 = (g_{i+1,j} - g_{i,j})^2 + (g_{i,j+1} - g_{i,j})^2 \quad (4)$$

$$p_3 = \frac{1}{n} \sum p_2(u) \quad (\text{mittlerer Gradient}) \quad (5)$$

$$p_4^2 = \frac{1}{n} \sum (p_2 - p_2(u))^2 \quad (\text{Varianz des Gradienten}) \quad (6)$$

In der Bildverarbeitung ist es sinnvoll, anstelle der mathematischen Definitionen für die Grauwertänderung (Gradient, Laplace-Operator etc.) vereinfachte Äquivalente zu verwenden, d.h. Absolutbeträge anstelle von Quadraten, Ganzzahl-Arithmetik etc. So ergibt eine Korrelationsanalyse der verschiedenen Gradientendefinitionen (Niemann, 1974) Werte zwischen $r = 0.85$ bis $r = 0.98$.

Zur Beschreibung der Körnigkeit verwendet man ein diskretes Äquivalent des Laplace-Operators

$$p_5 = \frac{1}{8} \sum_{8 \text{ Umgebungen}} (g_{i,j} - g_u)^2 \quad (7)$$

wobei über die umgebenden 8 Grautonwerte summiert wird.

Der Kontrast in einem Bildpunkt kann beschrieben werden durch das Verhältnis

$$p_6 = g_{i,j} / g_u \quad (8)$$

wobei g_u den mittleren Grauwert in der Umgebung bezeichnet. Die Feinheit einer Textur kann durch Abzählen der lokalen Maxima und Minima oder durch die Berechnung der Autokorrelationsfunktion erfaßt werden.

Eine Hauptkomponentenanalyse dieser Parameter zeigt, daß die Korrelationskoeffizienten zwischen 0.15 (für Gradient und Kontrast) und 0.75 (für Kontrast und Körnigkeit) liegen, so daß eine Reduktion der Parameterzahl einen Informationsverlust bedeutet.

4.3 Klassifizierung von Texturen

Bei der Bildklassifizierung unterscheidet man die überwachte und die nicht-überwachte Klassifizierung.

Bei der nicht-überwachten Klassifizierung wählt man aus einer Szene Zufallsbildpunkte mit den zugehörigen Merkmalswerten (Signaturen, Texturparametern etc.) aus. Ein Clusterverfahren (mit dem CLUSTAN-Paket oder anderen Programmen) mit diesen Werten liefert eine Gruppierung der Bildpunkte, wobei die Anzahl der Gruppen und deren Zusammensetzung im Einzelnen vom speziellen Clusterverfahren abhängen. Inwieweit diese Gruppen speziellen Oberflächenstrukturen (Gesteinsarten, Bodenarten, Vegetationstypen etc.) zugeordnet werden können, zeigt sich meist erst bei einer Klassifizierung des Gesamtbildes.

Nichtüberwachte Klassifizierung wurde bei Abb. 2 angewendet, wobei die Einheit "Autobahn, bebautes Gebiet" erst bei der Darstellung des Gesamtbildes identifiziert werden konnte, da sie bei der Grauton-Darstellung (Abb. 1) nicht deutlich hervortritt.

Bei der überwachten Klassifizierung wählt man signifikante Bildteile aus und untersucht deren Merkmalsverteilung. Bei der Texturanalyse ist es zweckmäßig, den Einfluß von Mittelwert und Streuung der Trainingsgebiete zu eliminieren. Hierzu transformiert man die verschiedenen Teilgebiete so, daß sie gleichen Mittelwert m_t und gleiche Streuung s_t besitzen:

$$g_t = m_t + (g_a - m_a) s_t/s_a \quad (9)$$

wobei g_t , g_a den transformierten bzw. alten Grautonwert und m_a , s_a den ursprünglichen Mittelwert und die Streuung bezeichnen. Aus den transformierten Szenen werden sodann die Texturparameter extrahiert und analysiert.

Die Diskriminanzanalyse gibt die Möglichkeit, folgende Probleme zu untersuchen:

- ist eine Trennung der Gruppen aufgrund der gewählten Merkmale möglich
- welche Variablen tragen am meisten zur Trennung bei
- wie sehen die Trennfunktionen zwischen den Gruppen aus.

Zur Berechnung der Diskriminanzfunktion geht man von einem linearen Ansatz aus und transformiert die Parameter der Bildpunkte

$$p = a_0 + a_1 p_a + \dots + a_n p_n \quad (10)$$

so daß die Gruppenmittelpunkte der transformierten Daten möglichst weit auseinander liegen und die Varianz innerhalb der Gruppen minimal wird. Damit erhält man eine Projektion des n-dimensionalen Merkmalsraumes in den ein-dimensionalen Diskriminanzraum, der besonders leicht darstellbar ist.

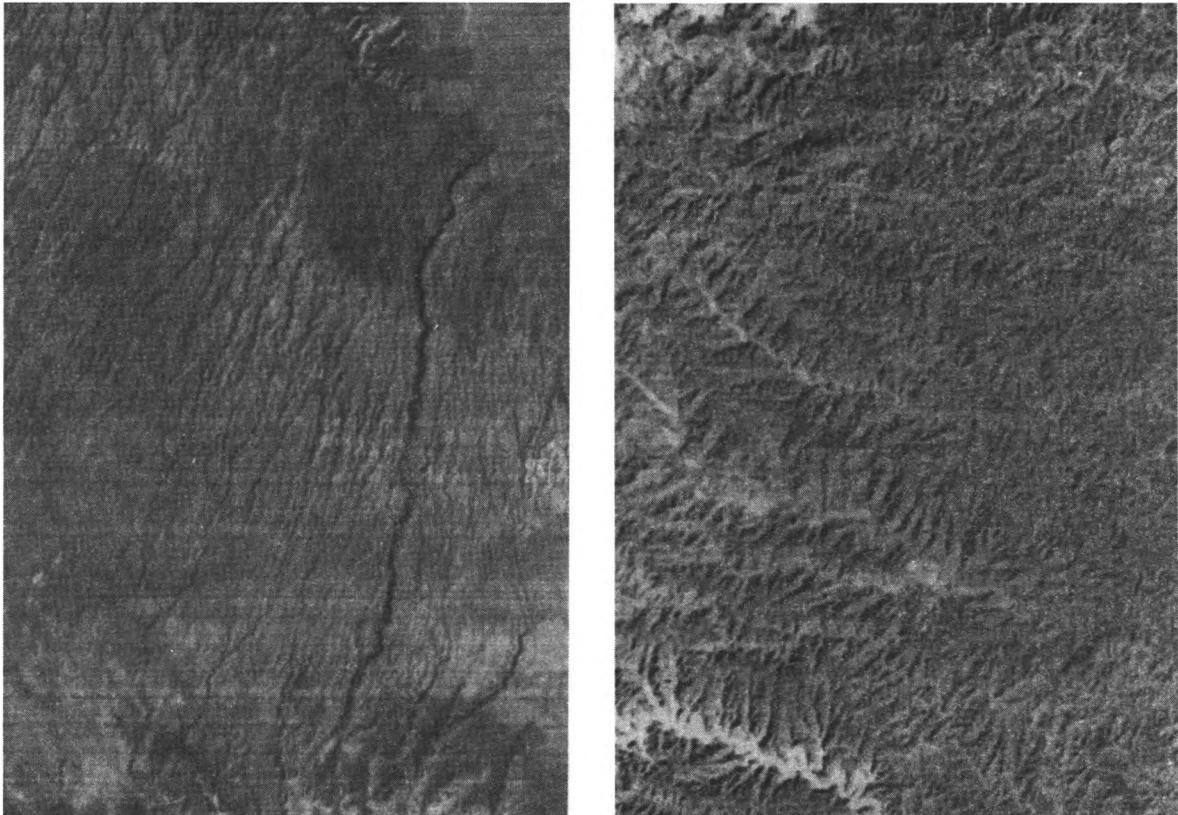


Abb. 8: Zwei charakteristische Texturen aus dem Tibesti-Gebirge (Tchad). Das unterschiedliche Entwässerungsnetz wird durch unterschiedliche Sandsteinkomplexe verursacht, die sich aufgrund ihrer spektralen Signaturen kaum unterscheiden lassen.

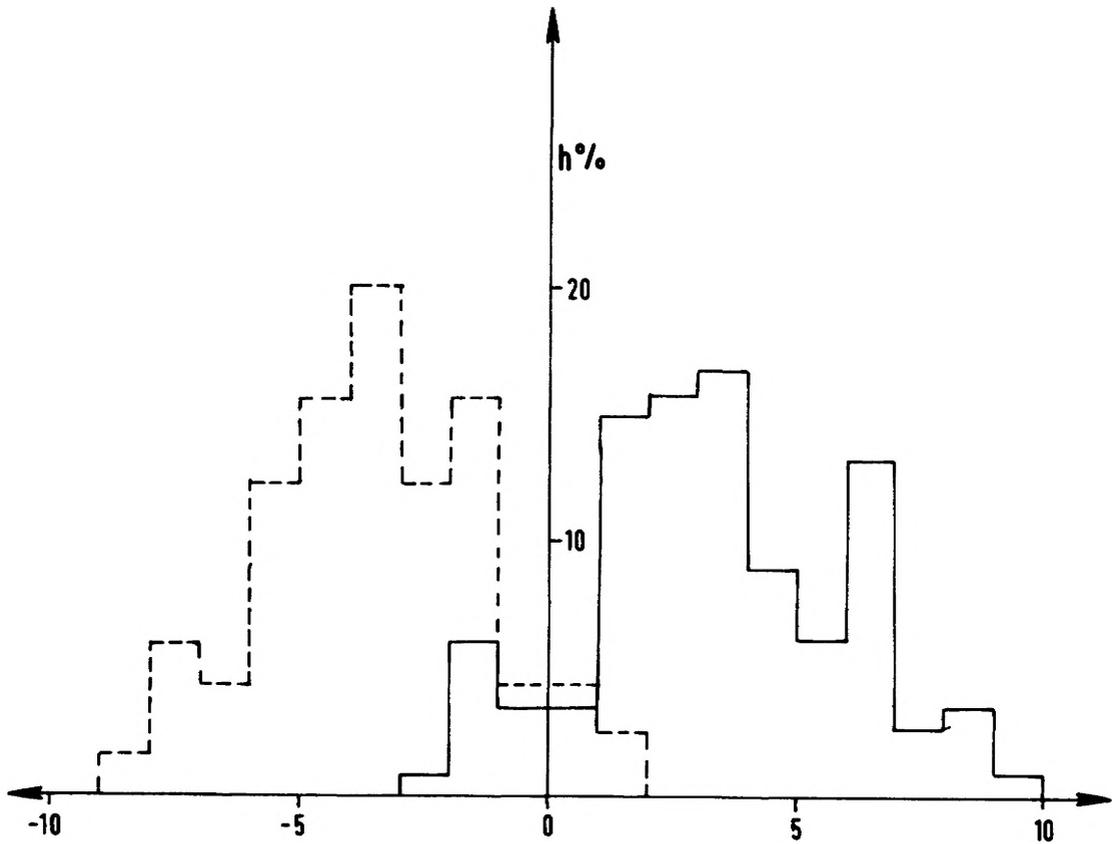


Abb. 9: Häufigkeitsverteilung der Diskriminanz-Scores der Texturparameter von Trainingsgebieten aus den Gebieten von Abb. 8. Trennlinie ist der Score-Wert 0. Die gestrichelte Kurve gehört zu einer Textur, die durchgezogene zur anderen. Trennlinie ist der Score-Wert 0. Fehlklassifikationen liegen beim Überschreiten der 0-Linie auf die "falsche" Seite vor (hier ca. 7%; beide Kurven ergeben 200%)

Abb. 8 zeigt eine Reihe von Texturen, die im Untersuchungsraum häufig sind. Die Textur wird dabei durch die Gesteinsart, die Tektonik und die Erosionsprozesse im ariden Klima bestimmt.

Eine Diskriminanzanalyse der Texturparameter zweier Sandsteinkomplexe zeigt, daß der mittlere Gradient und die Körnigkeit am meisten zur Trennung der beiden Gruppen beitragen. Abb. 9 zeigt die Häufigkeitsverteilung der Diskriminanz-Scores der beiden Gruppen. Der Überschneidungsbereich der beiden Verteilungen ist nur gering; die gute Trennbarkeit der beiden Gruppen zeigt sich auch durch den hohen F-Wert beim Test der Mahalanobis-Distanz (d. i. der Abstand der Mittelwerte der Diskriminanz-Scores der Gruppen).

Benutzt man die zugehörige lineare Diskriminanz-Funktion

$$d_{1,2} = a_0 + a_1 p_1 + a_2 p_2 + \dots + a_n p_n \quad (11)$$

wobei die Konstanten a_i ($i=0, \dots, n$) durch die Diskriminanzanalyse der Trainingsgebiete festgelegt werden und die Texturparameter p_i ($i=1, \dots, n$) für jeden Bildpunkt berechnet werden, so erhält man eine Klassifizierung des Gesamtbildes. Abb. 10 zeigt das Ergebnis dieser Klassifizierung, wobei einfach zwei Bildausschnitte der beiden Sandsteinkomplexe nebeneinander gesetzt wurden.

Liegen mehrere Gruppen vor, so muß man entsprechend viele Diskriminanzfunktionen berechnen und die Rechenzeit steigt entsprechend an. Dabei können die Gruppen paarweise getrennt werden (vgl. oben) und man braucht bei k Gruppen $k(k-1)/2$ Trennfunktionen. Eine Reduzierung dieser Zahl erhält man durch die Transformation der Daten in den "Diskriminanzraum".

Hierzu wählt man wiederum einen linearen Ansatz (im Folgenden wird die Vektor- und Matrizen Schreibweise benutzt)

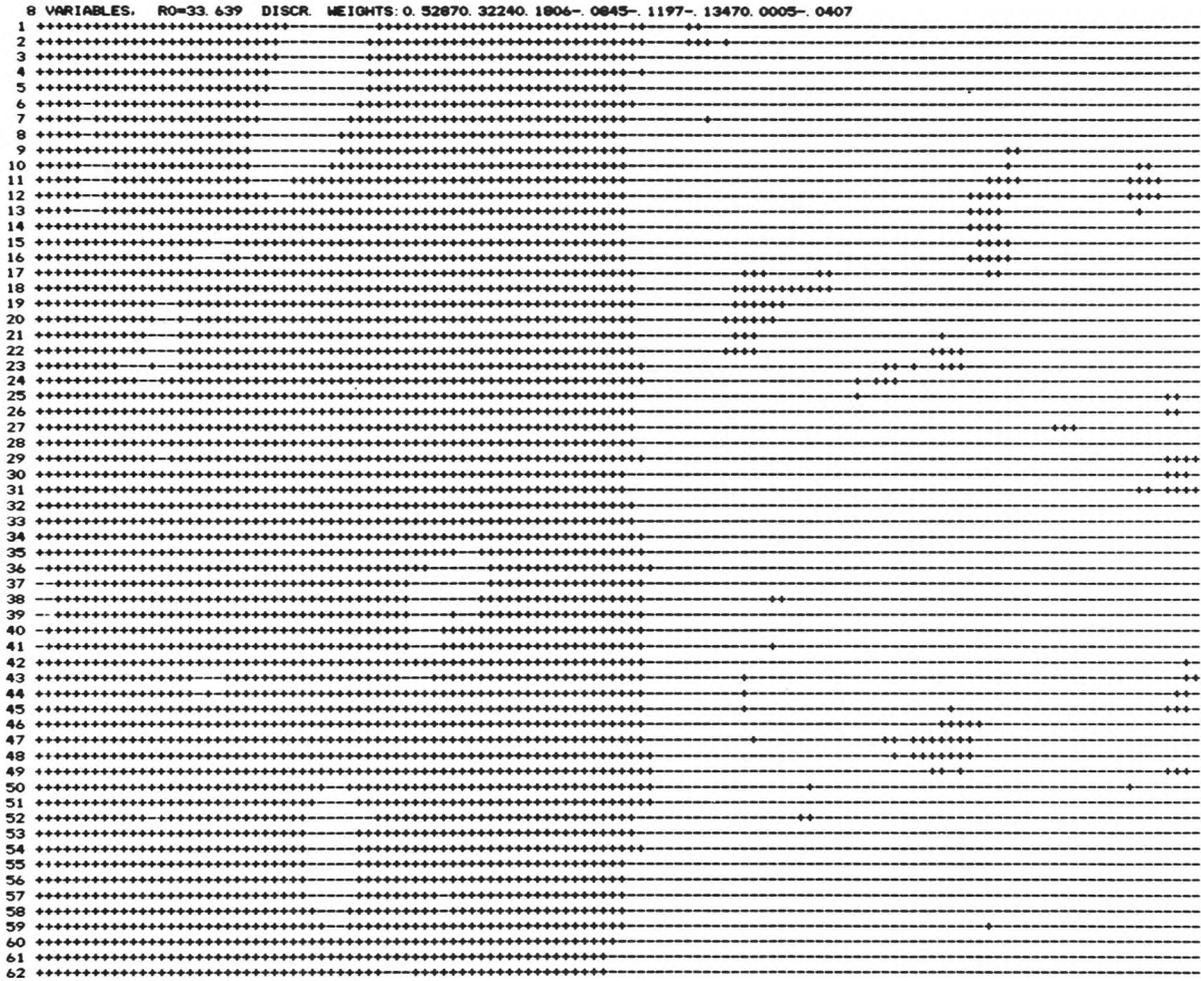


Abb. 10: Klassifizierung der Bildpunkte einer Szene, in der die Texturen von Abb. 8 nebeneinandergesetzt sind. Trennfunktion ist die lineare Diskriminanzfunktion, die die Scores in Abb. 9 lieferte. Liefert die Trennfunktion positive Werte, so wird der zugehörige Bildpunkt der Textur 1 zugeordnet und mit + dargestellt, andernfalls mit -. Die Trennlinie zwischen beiden Texturen liegt in der Bildmitte, so daß sich die Fehlklassifizierungen leicht auszählen lassen (ca. 4%).

$$y = v'p \tag{12}$$

mit unbestimmtem Transformationsvektor v . Ist W die Varianz-Kovarianz-Matrix (VKM) innerhalb der Gruppen und A die VKM zwischen den Gruppen, so transformieren sich diese Größen zu

$$y_i^2 = v'Wv \tag{13}$$

$$y_a^2 = v'Av \tag{14}$$

Man kann die beiden Bedingungen - großer Mittelwertsabstand, kleine Streuung innerhalb der Gruppen - zusammenfassen durch die Bedingung

$$\frac{v'Av}{v'Wv} = \text{maximal} \tag{15}$$

Eine leichte Umformung dieses Ausdrucks und die Einführung der Nebenbedingung $v'v=1$ liefert dann (MORRISON, 1976) die Extremalaufgabe für die Funktion

$$\varnothing = v'W^{-1}Av - \lambda (v'v - 1) \quad | \quad \max \quad (16)$$

Diese Aufgabe führt auf das Eigenwertproblem

$$|W^{-1}A - \lambda I| = 0 \quad (17)$$

Die Dimension des Diskriminanzraums ist abhängig von der Anzahl der Variablen und der Gruppenzahl (die den Rang der Matrix $W^{-1}A$ bestimmen). Die Eigenwerte λ_j der Gleichung (17) liefern die Eigenvektoren v_j , die nach einer Normierung als Koeffizienten für die Berechnung der Diskriminanz-Scores verwendet werden. Die Achsen des Diskriminanzraumes bezeichnet man auch als kanonische Variable.

LITERATURVERZEICHNIS

- HARALICK, R.M., SHANMUGAM, K. & DINSTEN, I. (1973): Textural features for image classification.- Inst. Electr. Electron. Eng. Trans. Systems, Man, and Cybernetics, 3, 6, 610 - 621
- LYON, R.J.P. (1970): The Multiband Approach to Geological Mapping from Orbiting Satellites: Is It Redundant or Vital.- Remote Sensing of Environment, 1, 4, 237 - 244, New York
- " (1972): Infrared spectral remittance in geological mapping: airborne spectrometer data from Pigash Crater, California.- Science, 175, 4025, 983 - 986, Washington, D.C.
- LYON, R.J.P. & LEE, K. (1970): Remote sensing in exploration for mineral deposits.- Econ. Geol., 65, 7, 785 - 800, Lancaster, Pa.
- MORRISON, D.F. (1976): Multivariate statistical methods.- 2. Aufl., 415 S., (McGraw - Hill), New York
- NIEMANN, H. (1974): Methoden der Mustererkennung.- Informationsverarbeitung in technischen, biologischen und ökonomischen Systemen, 2, (Akademische Verlagsgesellschaft), Frankfurt a.M.
- ROSENFELD, A. & KAK, A.C. (1976): Digital picture processing.- 457 S., (Academic Press), New York - San Francisco - London
- SMITH, W.L. (1977): Remote-sensing applications for mineral exploration.- 391 S., (Dowden, Hutchinson & Ross, Inc.), Stroutsburg, Pa.

EINIGE ERGEBNISSE EINES METHODENVERGLEICHS BEI DER
BERECHNUNG VON ERZKÖRPERN

von

JÜRGEN BÜRSTENBINDER⁺

ZUSAMMENFASSUNG

Die hier vorgestellten Methoden wurden von uns bisher ausschließlich nach Beendigung der Explorationsarbeiten angewendet.

Bei den Methoden von Matheron sind wir noch sehr skeptisch bezüglich der Berechnung der theoretischen Variogramme und der dadurch bestimmten Wichtung für das Kriging. Sicher muß man die Variogramme in den Richtungen aller Nachbarblöcke berechnen, die für das Kriging verwendet werden, und dann mit dem Lagerstättenkundler zusammen die Grenzen der gegenseitigen Beeinflussung der Metallgehalte festlegen.

Die Zeichnungen von Isolinienplänen ist z.Zt. noch keine Methode der Vorratsberechnung. Sie dient lediglich einer greifbaren Darstellung des Vorkommens. Eine automatische Berechnung der Flächen zwischen Isolinien ist noch nicht programmiert.

Die Volumenberechnung mit der Monte-Carlo-Methode ist bereits voll einsatzfähig. Wir arbeiten noch an einer Verbesserung der Fehlerschranken.

Bereits während der durchgeführten Arbeiten hat es sich gezeigt, daß die besten Ergebnisse bei einer Zusammenarbeit zwischen Lagerstättenkndlern und Mathematikern erzielt werden können. Jeder für sich kann hier nur suboptimal arbeiten.

SUMMARY

The methods presented here were first put to use after the exploration fieldwork had been completed. The accuracy of Matheron's methods for calculating the theoretical variograms and the corresponding weights for Kriging was not very convincing.

The variogram values must be computed for all the neighbouring blocks, that are to be used in the Kriging equations. The range of influence of the metal content is then determined by both the mining geologist and the geostatistician.

Isoline maps can not be considered a means of estimating reserves. They serve to illustrate the deposit, but no program to automatically calculate the areas between the lines has been developed to date.

The Monte-Carlo system for estimating the volume (of the deposit) already functions well. Minor improvements in order to minimize the estimation error are still being made.

⁺ Anschrift des Verfassers: Dipl.-Math. Jürgen Bürstenbinder, Hahn-Meitner-Institut für Kernforschung Berlin GmbH, 1000 Berlin 39, Glienicker Straße 100.

РЕЗЮМЕ

Представленные здесь методы мы применили исключительно после окончания эксплуатационных работ.

Мы еще сомневаемся, что касается методы Матерона насчет калькуляции теоретических вариограмм и взвешивания для кригинг. Необходимо определить вариограммы в направлении всех смежных блоков, эксплуатированных для кригинга. Потом можно определить вместе с геолог - разведчиком пределы взаимного воздействия металлических содержаний.

Планы с изолиниями до сих пор не считается методом для калькуляции запасов. Этот метод только служит для понятного изображения месторождения. Программа автоматического вычисления площадей между изолиниями еще не существует.

Вычисление объема с методом "Монте-Карло" уже готово для ввода в действие. Мы еще работаем над улучшением диапазона погрешностей.

1. EINLEITUNG

Lassen Sie mich zunächst einige Definitionen vorausschicken bevor ich auf die Ziele unserer Arbeiten, einige Anwendungen und die Grenzen der Methoden zu sprechen komme.

1. Wenn ich die Begriffe "wir" oder "uns" verwende, so steht das für eine Zusammenarbeit zwischen den Lagerstättenkundlern der TU, Prof. Wilke und Dr. Akim, den Mathematikern der Arbeitsgruppe Geochemie im HMI, Dr. Fleischer und mir und Diplomanden der TU und der Ecole des Mines, Paris.
2. Der Begriff "Geostatistik" wird abweichend von Prof. Matheron, der darunter lediglich die Methoden Variogrammberechnung und Kriging zusammenfaßt, für die Gesamtheit der mathematischen und statistischen Methoden zur Berechnung von Lagerstätten verwendet.
3. Der Begriff "mathematische Lagerstättenmodelle" enthält die Ergebnisse von Berechnungen der Wertstoffverteilung und die Abschätzungen von Rohstoffvorkommen.

Die Ziele unserer Arbeiten sind (Abb. 1):

- ABSCHÄTZUNG DER WERTSTOFFVERTEILUNG IN DEM ROHSTOFFVORKOMMEN
- ZEICHNUNG VON ISOLINIENPLÄNEN DER KONZENTRATION IN SCHNITTFLÄCHEN DES VORKOMMENS
- VOLUMENBERECHNUNG DER VORHANDENEN WERTSTOFFMENGEN

Im folgenden werden jeweils die verwendeten Methoden kurz angedeutet und einige Ergebnisse gezeigt. Die Arbeiten wurden mit Daten aus der Komplexerzlagerstätte Harsit Köprübasi, Türkei (Pb, Zn, Cu, Sb), der Lagerstätte Massa Alice, Sardinien (Pb, Zn) und teilweise einer Schwermineralseifenlagerstätte in Indonesien (Fe, Ti) durchgeführt.

Für die getesteten Methoden existieren Rechenprogramme, die auf den Computer Siemens S 7755 im HMI laufen.

1. Explorationsdaten

In einer Datei werden auf dem Rechner die Ergebnisse der Probennahmen gespeichert mit Angaben der räumlichen Koordinaten und den Ergebnisse der chemischen Analysen.

2. Selektionsprogramme

ermöglichen den Zugriff auf einen Teil der Daten, z.B. auf die Gesamtmetallgehalte bei einer konstanten z-Koordinate, d.h. in einer horizontalen Schicht.

3. Geostatistik nach Matheron

Für die Variogrammberechnung und die Durchführung der Krigingprozedur stehen Programme zur Verfügung.

4. Zeichnung von Isolinenplanen

Eine HMI-Software ermöglicht die Berechnung und Darstellung von Isolinen wobei zusätzlich die Meßpunkte und -werte eingezeichnet werden können.

5. Flächenberechnung

Als Teil der Volumenberechnung wird eine Flächenberechnung mit der Monte-Carlo-Methode durchgeführt.

EDV - AUSWERTUNG VON EXPLORATIONS DATEN

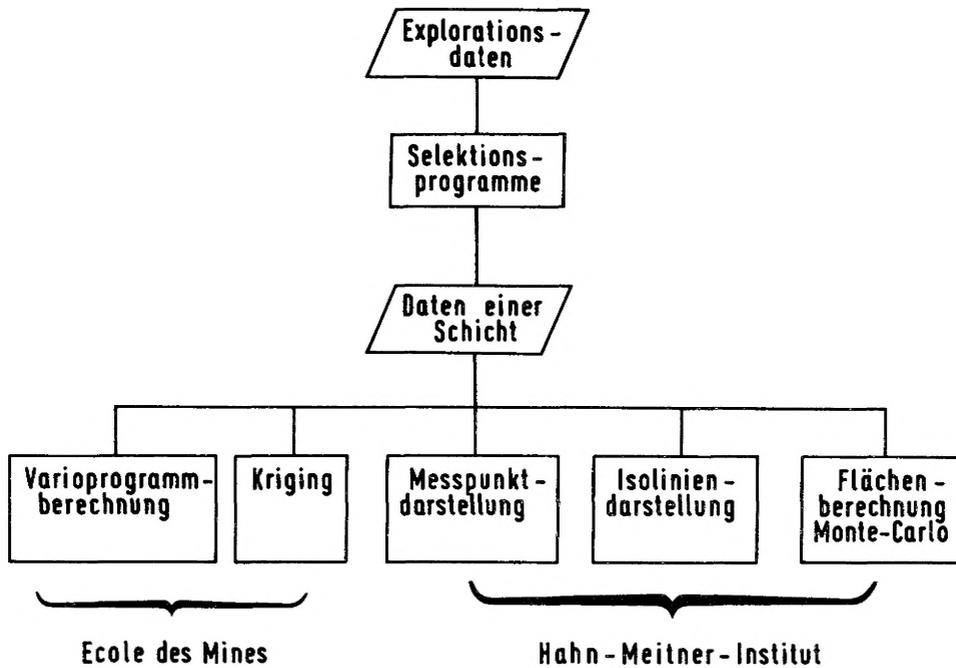


Abb. 1: Schema der Auswertung von Explorationsdaten mittels EDV

2. ANWENDUNG

2.1 Geostatistische Auswertung mit den Methoden von Matheron

Zwei Diplomanden der Ecole des Mines haben diese Methoden bei uns angewendet: Im Jahre 1977 Herr Baudin an der Lagerstätte Harsit und zur Zeit Herr Dubrulle an der Lagerstätte Alice. Im folgenden wird die Methode kurz an der Lagerstätte Harsit erläutert.

Im ersten Arbeitsschritt wurde eine Umrechnung der Analysenergebnisse aus den Bohrlöchern auf 10 m lange Kerne vorgenommen (Abb. 2).

Dabei wurden die Meßwerte mit der Länge innerhalb des 10 m-Intervalls gewichtet. Die 10 m erschien als technisch vernünftiges Maß für den Abbaubetrieb.

Im zweiten Arbeitsschritt wurde ein regelmäßiges Netz über den Bohrlöchern angepaßt mit einer Kanten=

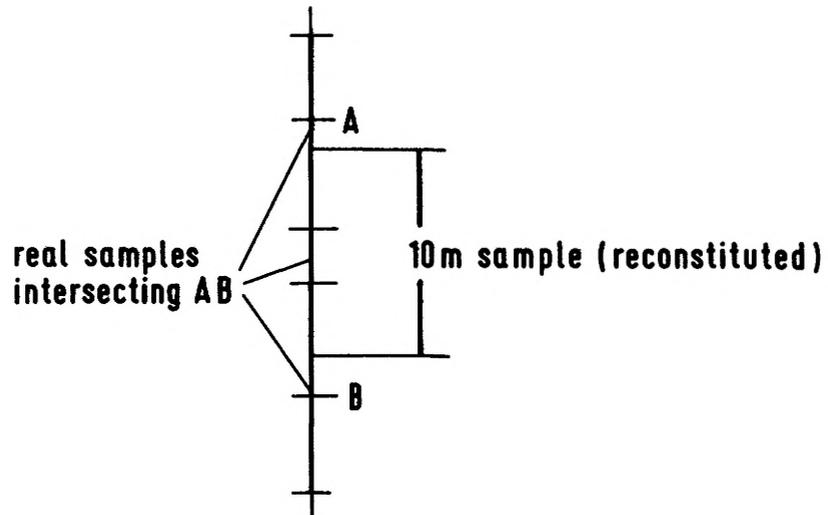


Abb. 2: Wichtung von 10m - Bohrlochabschnitten durch gemessene Proben

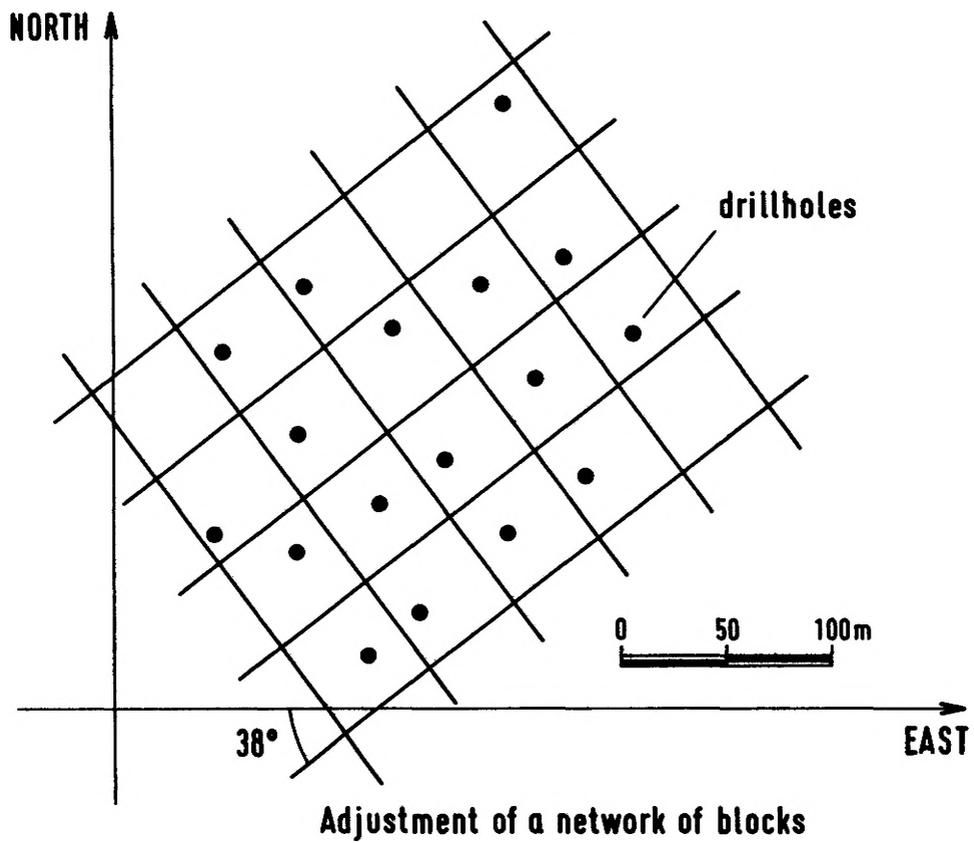


Abb. 3: Festlegung der zu schätzenden Abbaublöcke durch ein regelmäßiges Gitter

länge von 50 m, die durch die Lage der Bohrlöcher vorgegeben war (Abb. 3).

Auf diese Weise erhält man Blöcke von 50 x 50 x 10 m Abmessung.

Im dritten Arbeitsschritt wird die Berechnung des Semivariogramms durchgeführt.

Semivariogramm

$$\begin{aligned} \gamma(h) &= \frac{1}{2V} \int_V (f(x+h) - f(x))^2 dx \\ \gamma'(h) &= \frac{1}{2N} \sum (f(x_i+h) - f(x_i))^2 \end{aligned} \tag{1}$$

N = Anzahl der Wertepaare für ein vorgegebenes h

h = Abstand zweier Probenahmestellen

γ = Autokorrelation

V = Volumen

Anstelle des Semivariogramms $\gamma(h)$ wird bei der praktischen Berechnung die Summation für $\gamma'(h)$ durchgeführt. Der Wert γ ist ein Maß für die Autokorrelation der Meßwerte $f(x)$.

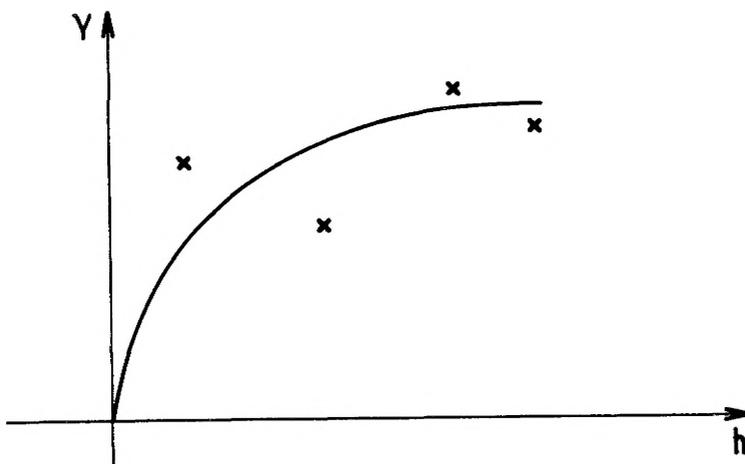


Abb. 4: Anpassung einer Funktion (theoretisches Variogramm) an Meßdaten

Das Ergebnis ist ein experimentelles Variogramm, das durch eine mathematische Funktion approximiert wird. Diese Approximation heißt theoretisches Variogramm (Abb. 4).

Achtung: Für die Wahl des Funktionstyps können mehrere Theorien herangezogen werden und die Approximation kann auch willkürlich vorgenommen werden, ohne die Genauigkeitsmaße zu beeinflussen.

Als vierter Rechenschritt wird die Kriging-Prozedur durchgeführt. Die Analyseergebnisse in einem Block werden durch die gewichteten Werte der Nachbarblöcke korrigiert. Die Wichtung ist abhängig von der Entfernung zum Block und dem Wert aus dem theoretischen Variogramm für diesen Abstand.

Etwas salopp ausgedrückt handelt es sich um eine high sophisticated Methode der Mittelwertbildung.

Diese Methode ist aus der theoretischen Physik in der Potentialtheorie bekannt. Voraussetzung für die Anwendung ist die Homogenität des betrachteten Bereichs. Ob und wie weit das bei einem Rohstoffvorkommen der Fall ist, kann meiner Meinung nach nicht durch die mathematische Betrachtung des Variogramms beantwortet werden, dazu bedarf es des Sachverstands des Lagerstättenkundlers.

Mit dieser geostatistischen Methode wurde in der Lagerstätte Harsit eine Nivellierung einer hochprozentigen Vererzung beobachtet.

Der Analysenwert in einem Block, der bei etwa 16% Gesamtmetallgehalt lag, wurde durch die niedrigen Werte in der horizontalen Umgebung des Blocks auf etwa 7% heruntergemittelt.

Man kann sagen, diese Methode simuliert die Mischung des Erzes, die im späteren Abbau vorgenommen wird. Ob die Gesamtmetallmenge bei der Berechnung erhalten bleibt, geringer wird oder zunimmt, kann z.Zt. noch nicht gesagt werden.

2.2 Zeichnung von Isolinienplänen

Im HMI wurde im Bereich Datenverarbeitung/Mathematik ein Softwarepaket ISOFIX entwickelt, mit dem Isolinien berechnet, auf dem Bildschirm und auf Papier ausgezeichnet werden können.

Als Ausgangswerte werden:

Wertetripel benutzt

x	}	Koordinaten
y		
g (x, y)		Metallgehalt

Die Fläche $g(x, y)$ wird durch eine Fläche $g'(x, y)$ approximiert und das Ergebnis als Isolinienplan, d.h. hier durch Linien gleicher Konzentration dargestellt.

In dem Programm stehen eine Reihe von Manipulationsmöglichkeiten zur Verfügung:

- Festlegung eines Gebietsausschnitts durch die Angabe von Eckpunkten, d.h. ein Teil der Daten einer Schicht wird nicht verwendet.

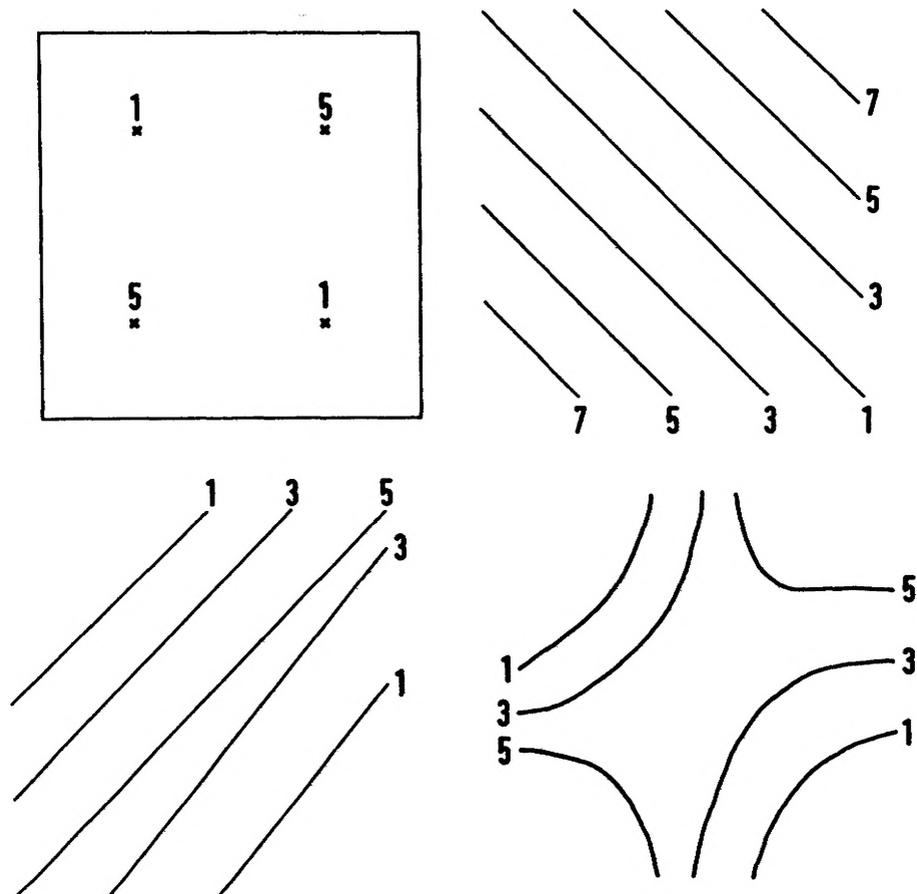


Abb. 5: Anpassung verschiedener Interpolationsflächen vier Meßpunkte

- Festlegung der Rasterung

Das gesamte zu untersuchende Gebiet wird in Teile zerlegt indem die Achsen unterteilt werden.

- Weitere mathematische Parameter wie Schrittweite, Art der Fläche und Anzahl der zu berücksichtigenden Nachbarwerte können vorgegeben werden.

Der Isolinenplan hängt selbstverständlich von allen genannten Parametern ab.

Das Zusammensetzen von Zeichnungen für mehrerer Schichten ergibt ein Modell des Vorkommens.

Die Approximation der Flächen der Konzentration ist keine mathematisch eindeutig lösbare Aufgabe. Daher kann sie auch nicht von dem Mathematiker alleine gelöst werden.

Er muß die Parameter so wählen, daß der Lagerstättenkundler mit seinem Sachverstand sagen kann, daß es sich tatsächlich um ein Modell einer Lagerstätte und zuvor genau der vorliegenden handelt.

Als Beispiel für die Probleme bei der Approximation dient die folgende Situation. In einem Gebiet liegen vier Meßwerte vor (Abb. 5a).

Wie sollen die Linien gleicher Konzentration gezeichnet werden?

1. Vorschlag (Abb. 5b) bildlich gesprochen "ein Tal".
2. Vorschlag (Abb. 5c) ein Bergrücken mit unterschiedlich abfallenden Flanken.
3. Vorschlag (Abb. 5d) ein Sattelpunkt.

Mit Leichtigkeit sind weitere Möglichkeiten denkbar. Hier hat also die Willkür ein freies Spiel und jede Lösung kann als mathematisch richtig angesehen werden. Die tatsächlich weitgehend unbekanntes Verhältnisse

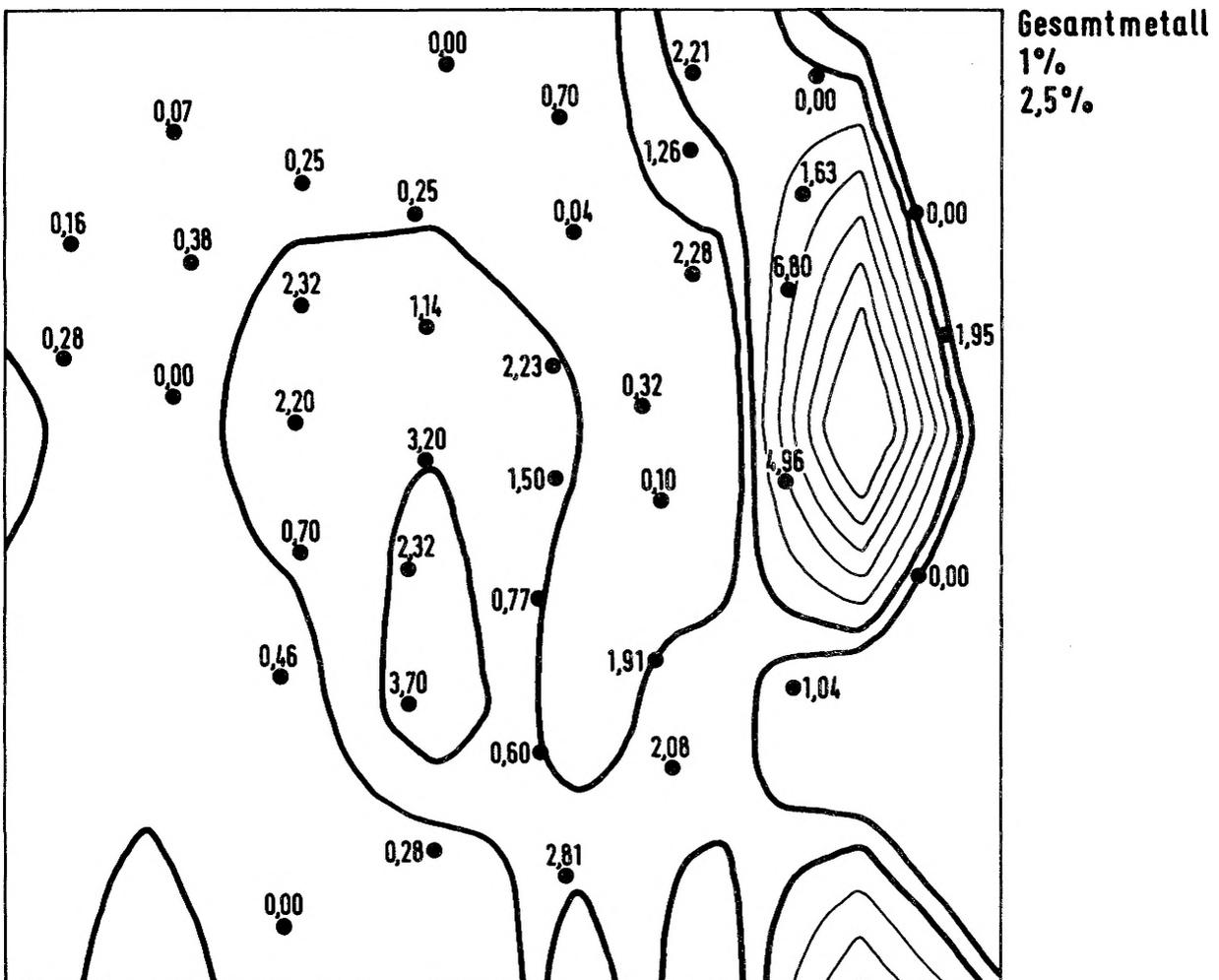


Abb. 6: Interpolation von Meßpunkten mit dem Programm ISOFIX

werden jedoch durch genau eine Lösung beschrieben. Aber welche?

Als Beispiel für Ergebnisse dieser Arbeiten sollen die beiden folgenden Isoliniendarstellungen gelten.

Die Originalmeßwerte für den Gesamtmetallgehalt in einer Schicht (Abb. 6) wurden mit dem Isolinenprogramm bearbeitet. Man erkennt zwei Maxima und eine Senke zwischen diesen beiden. In der unteren Mitte des Bildes liegt eine Situation wie in dem vorangegangenen Beispiel erläutert vor.

Das gleiche Isolinenprogramm mit gleichen Gebietsausschnitt, gleicher Rasterung und gleichen Parametern auf die Werte nach dem Kriging angewendet zeigt nur noch ein niedrigeres Maximum mit einer Ausbuchtung zu dem vorher erkannten zweiten Maximum (Abb. 7).

2.3 Die Monte-Carlo-Methode

Die Volumenberechnung der vorhandenen Wertstoffmengen kann mit der Monte-Carlo-Methode durchgeführt werden.

Die Berechnungsmethode und das Rechenprogramm für diese Aufgabe wurden im HMI von Dr. Fleischer entwickelt. Achtung: In der gängigen Literatur sind von dieser Methode viele Fehler zu finden.

Bei der Berechnung handelt es sich um eine Form der Profilmethode. Das Volumen V ist das Produkt aus Fläche mal Höhe mal mittlerer Konzentration mal Dichte.

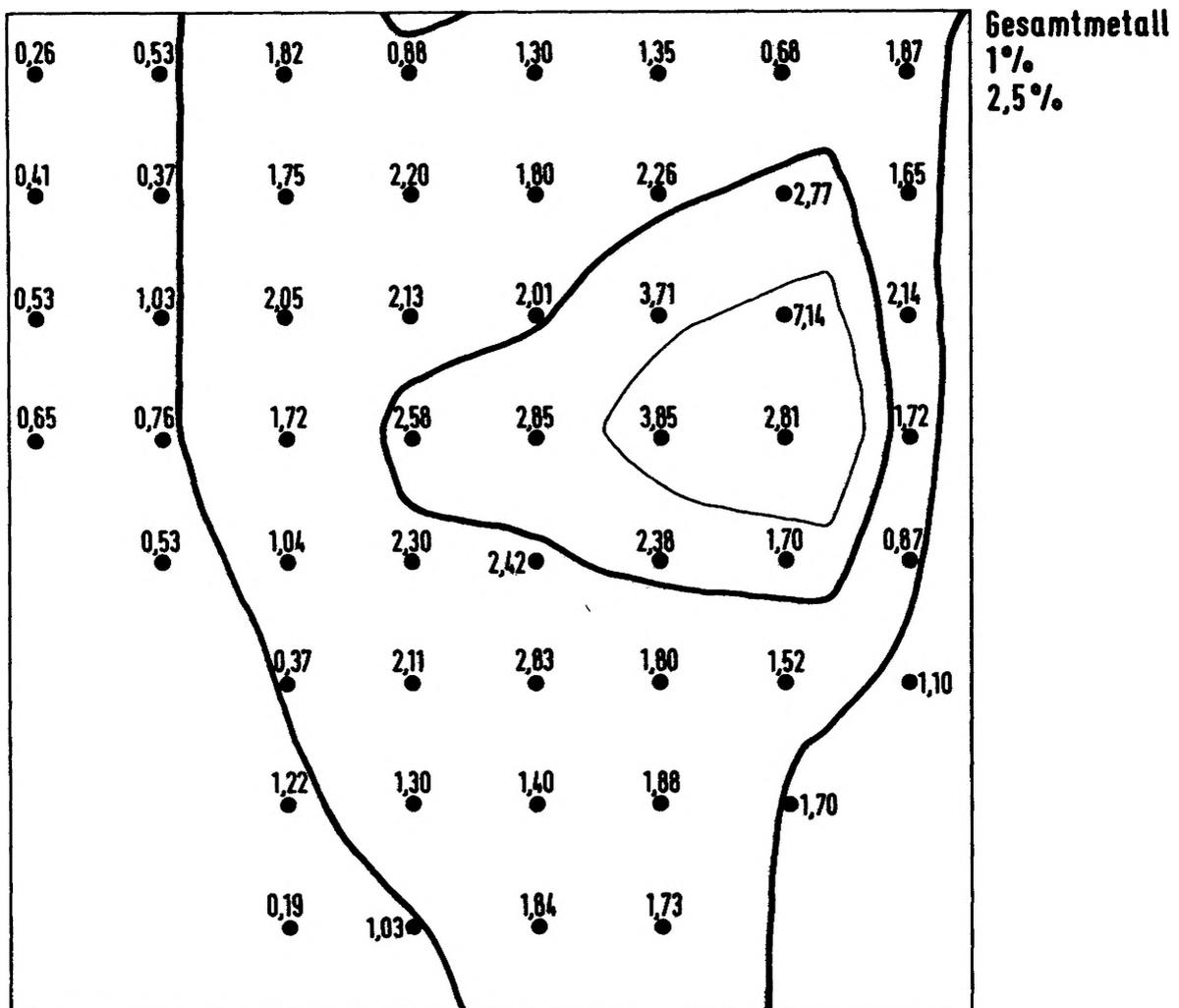


Abb. 7: Interpolation der Meßpunkte von Abb. 6 durch ein Kriging-Programm

$$\text{Volumenberechnung } V \quad V = F \cdot h \cdot \bar{c} \cdot \rho$$

F Fläche
h Höhe
 \bar{c} mittlere Konzentration
 ρ Dichte

Mit der Monte-Carlo-Methode wird der Anteil F einer Gesamtfläche bestimmt, in dem eine vorgegebene Konzentration c angetroffen wird.

Dafür werden die folgenden Berechnungsschritte durchgeführt:

1. Schritt

Abgrenzung einer Gesamtfläche, in der Experimente, d.h. Meßergebnisse an einzelnen Stellen vorliegen.

2. Schritt

Schwanken der Metallgehalte werden vorgegeben, d.h. die Frage wird gestellt: Welche Wertstoffmengen können erwartet werden bei einem Metallgehalt zwischen a und b Prozent. a kann z.B. cut-off grade sein. Durch die Vergabe von a und b werden die Experimente in "Treffer" (liegt im Intervall (a, b)) und "Nichttreffer" (liegt außerhalb des Intervalls (a, b)) eingeteilt.

3. Schritt

Das Verhältnis der Anzahl der Treffer zu der Anzahl der Experimente gibt einen Hinweis auf den Flächenanteil, in dem die vorgegebenen Metallgehalte angetroffen werden können. Man erhält lediglich die Größe, nicht die genaue Lage dieser Fläche. Für eine gegebene Risikowahrscheinlichkeit, z.B. mit 95%iger Sicherheit, werden Fehlerschranken angegeben. Der mittlere Metallgehalt \bar{c} der als Treffer deklarierten Meßergebnisse wird ebenfalls mit Fehlerschranken berechnet.

Flächenabschätzung

$$\begin{aligned} F &= \text{Trefferfläche} \\ F_u &= \text{untere Schranke} & F_u \leq F \leq F_o \\ F_o &= \text{obere Schranke} & \text{z.B.} \\ & & 82\% \leq 85\% \leq 87\% \end{aligned} \quad (3)$$

Die Fehlerschranken sind bei dieser Rechenprozedur unabhängig von der Art der Verteilung der Metallgehalte und der Art des Vorkommens, da hier ein rein formales Verfahren angewendet wird.

Sollten durch den Lagerstättenkundler Zusatzinformationen verfügbar sein, so lassen sich die Fehlerschranken verbessern.

Ein Spezialfall tritt bei 100% Treffen auf.

Besonderheit bei 100% Treffern:

$$F_u \leq F_o \leq F \quad \text{z. B.} \quad 98\% \leq 99\% \leq 100\%$$

Sind z.B. n (100) Experimentale durchgeführt worden und alles Treffer, so heißt das noch nicht, daß auch bei n + m (1000) Experimenten nur Treffer erreicht werden, da die Experimente ja nicht flächendeckend vorgenommen wurden.

Der Zeitaufwand für die Volumenberechnung nach dieser Methode ist sehr gering. An einer Lagerstätte wurde z.B. im Rahmen einer Studienarbeit in drei Monaten die Vorratsberechnung mit der Dreiecks- und der Polygonmethode durchgeführt.

Die gleichen Ergebnisse wurden mit der Monte-Carlo-Methode nach 1 Stunde und 5 Minuten erzielt. Dabei wurde 1 Stunde für das Eintippen und Kontrollieren der Daten benötigt und ca. 5 Minuten am Terminal für die Berechnung.

MULTIVARIATE GRUPPIERUNGSMETHODEN IN PHYLOGENETISCH
ORIENTIERTER PALÄONTOLOGIE (AM BEISPIEL VON GASTRO-
PODEN AUS DEM STEINHEIMER BECKEN).

von

H.G. LINDENBERG⁺ und H. MENSINK⁺

ZUSAMMENFASSUNG

Zur Diskussion der statistischen Behandlung phylogenetisch orientierter Fragestellungen wurden verschiedene Verfahren der multivariaten Analyse biometrischer paläontologischer Daten vergleichend an einem größeren Datensatz angewendet. Bei den Daten handelt es sich um Gehäusemerkmale miozäner Gastropoden ("Planorben") aus dem Steinheimer Becken, die von MENSINK (1967) für eine mono- bzw. bivariate Untersuchung gemessen wurden. Neben der Hauptkomponenten-Analyse, der Analyse canonischer Variate und der Diskriminanz-Analyse wurden vor allem hierarchische Cluster-Verfahren behandelt. Eine neue Methode multipler Clusterung erwies sich als besonders praktikabel und erlaubt in der Kombination mit der Diskriminanz-Analyse klare Aussagen zur morphologischen und profilbezogenen Gliederung des Materials.

SUMMARY

Statistical treatments of paleontological data concerning phylogenetic problems are discussed. Different methods of multivariate analysis were applied to a set of biometrical data. The measurements on Miocene gastropods from the Steinheim Basin in Southern Germany were made by MENSINK (1967). The analysis of principal components, of canonical variates and of discriminant functions were tested in a parallel manner to various cluster procedures. A new technique of multiple clustering proved to be very successful and easy to handle and it allows in combination with discriminant functions a clear vertical and horizontal classification of the material.

РЕЗЮМЕ

Представлены статистические обработки филогенетических проблем. Предлагаются разные методы многомерного анализа биометрических и палеонтологических данных с помощью пакета системных программ. Исследования брюхоногих миоцена из бассейна Штейнгейм (на юге ФРГ) провел Мензинк (1967). Кроме анализа главных компонентов, анализа канонических случайных величин и кластер-анализа представлены иерархические кластер-методы. Этот новый множественный метод оказался очень полезным и дает возможность ясных высказываний о вертикальной и горизонтальной классификаций материала.

⁺ Anschriften der Verfasser: Dr. Hans Georg Lindenberg, Institut für Geologie d. FU Berlin
1000 Berlin 33, Altensteinstr. 34A

Prof.Dr. Hans Mensink, Geologisches Institut der Ruhr Universität Bochum
D-463 Bochum, Postfach 102148.

1. VORBEMERKUNGEN

Eine häufige Fragestellung in der paläontologischen Forschung ist die nach der phylogenetischen Entwicklung mehr oder weniger weit begrenzter taxonomischer Einheiten. Dazu müssen zeitlich, d.h. im Profil aufeinander folgende "Schicht-Populationen" in bestimmten Merkmalen erfaßt und ihre Veränderung quantifiziert werden. Bekannt wurde die uni- bzw. bivariate Darstellung der Merkmalsentwicklung bei Ammoniten (BRINKMANN 1929). Aus der "gerichteten" Veränderung von Modalwerten der Häufigkeitsverteilung eines einfachen oder als Quotient kombinierten Merkmals wird auf die Umbildung eines Taxons in der Zeit und Auf- bzw. Abspaltungen neuer Taxone geschlossen. Diese Methode setzt voraus, daß es ein Merkmal bzw. Merkmalspaar gibt, an dem sich diese Veränderung darstellen läßt. Dies ist meist bei sehr niedrig organisierten Organismengruppen gegeben. Gute Beispiele dafür sind Arbeiten über morphologische Entwicklungen bei Foraminiferen (GRABERT 1959, GERHARDT 1963, MICHAEL 1966, LINDENBERG 1967, BETTENSTEDT 1968, SCOTT 1974). Sehr häufig wird aber eine morphologische Entwicklung eine Vielzahl von Merkmalen in unterschiedlicher und nicht korrelierter Weise erfassen. Bei der Darstellung derartiger Umwandlungen ist man auf die Methoden der multivariaten Statistik angewiesen. In der Literatur existieren zahlreiche Beispiele für den erfolgreichen Einsatz dieser Methoden in der Taxonomie (siehe bei BLACKITH & REYMENT 1971, SNEATH & SOKAL 1973, COLE 1969, SCOTT 1974). Für evolutionsbezogene Fragestellungen ergeben sich jedoch Probleme verschiedener Art: Einmal gehen fast alle multivariaten Methoden von der Voraussetzung homogener "Populationen" aus, die bei divergierenden Entwicklungszuständen innerhalb einer Population meist nicht vorliegen.

Zum anderen ist die "vertikale" Aufgliederung von mutierenden Formgruppen mit besonderen Problemen der Abgrenzung verbunden, wobei Verhältnisse der faziellen Entwicklung und die Umstände der Überlieferung eine besondere Rolle spielen.

Noch gibt es kaum allgemein anerkannte Verfahren und die meisten vorliegenden Untersuchungen zu diesem Thema sind Experimente mit dem Ziel, optimale statistisch fundierte Darstellungen morphologischer Veränderungen zu erreichen.

Bei großen Datensätzen ist aber das "Probieren" mit erheblichem Aufwand an Programmtechnik und Rechenzeit verbunden und viele publizierte Ergebnisse - nicht zuletzt das vorliegende Beispiel - sind in vieler Hinsicht eine Funktion der zur Verfügung stehenden Rechenprogramme. Dazu kommt das Problem der Deutung neu kombinierter multivariater Variablen (Eigenwerte, Achsen, Vektoren) und die Schwierigkeit, den direkten Bezug zu dem Ausgangsmaterial zu behalten.

Dem hier verwendeten Beispiel liegt eine uni- und bivariate Untersuchung eines umfangreichen Materials miozäner Gastropoden aus dem Steinheimer Becken in Süddeutschland zugrunde (Habilitationsschrift MENSINK 1967). Sie führte zu einem bestimmten phylogenetischen Konzept. Zwischenzeitlich sind zahlreiche ergänzende Bearbeitungen durchgeführt worden. Die Gesamtdarstellung wird in Kürze veröffentlicht. In der vorliegenden Abhandlung ist ein Teil des Experimentierfeldes erläutert: An dem "a priori bekannten Ergebnis" wurden multivariate Verfahren erprobt. Sie sollten außerdem die vorhandenen Vorstellungen überprüfen und ggf. ergänzen. Diese zweite Aufgabe und deren Ergebnisse werden in erster Linie in der genannten Gesamtdarstellung erläutert.

2. DAS BEISPIEL

An den kleinen Gastropoden der *Gyraulus*-Gruppe des Steinheimer Beckens (bekannt als "Planorben-Reihe") sind an einer Vielzahl horizontal entnommener Schichtpopulationen von MENSINK (1967) verschiedene Merkmale gemessen worden. Für die vorliegende Auswertung wurden sechs der Merkmale ausgewählt, da sie allein von allen Gehäusen vorliegen:

- Breite und Höhe des 1. und 2. Umganges, jeweils gemessen in Relation zu einem Fixpunkt am Anfang der Schneckenspira. Bei der Höhenmessung ergaben sich nach Lage des Meßpunktes zum Fixpunkt positive (trochospirale Gehäuse) oder negative (planispirale Gehäuse) Werte (Abb. 1).
- Breite und Höhe eines häufig entwickelten, innen gelegenen Windungswulstes, gemessen am 2. Umgang.

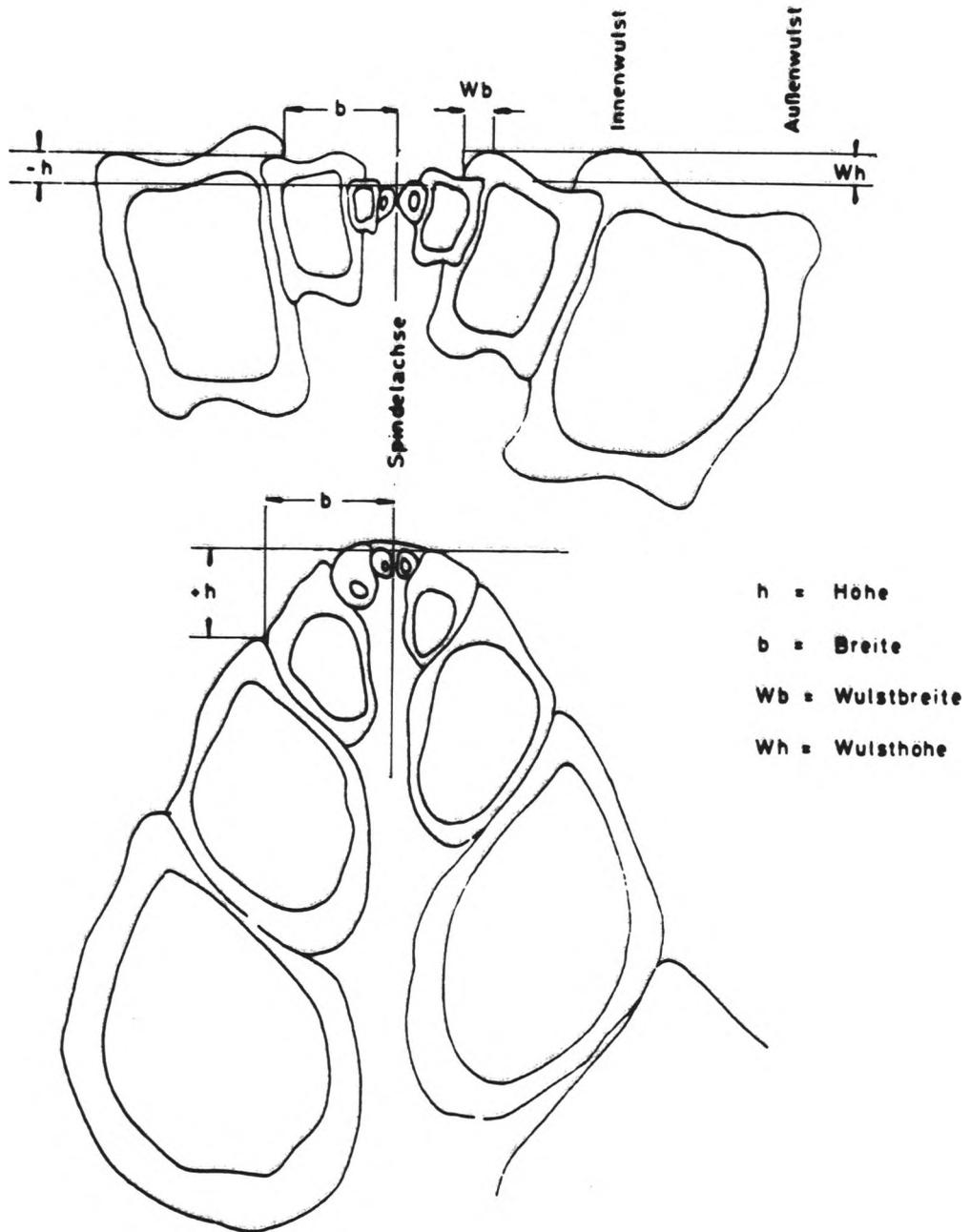
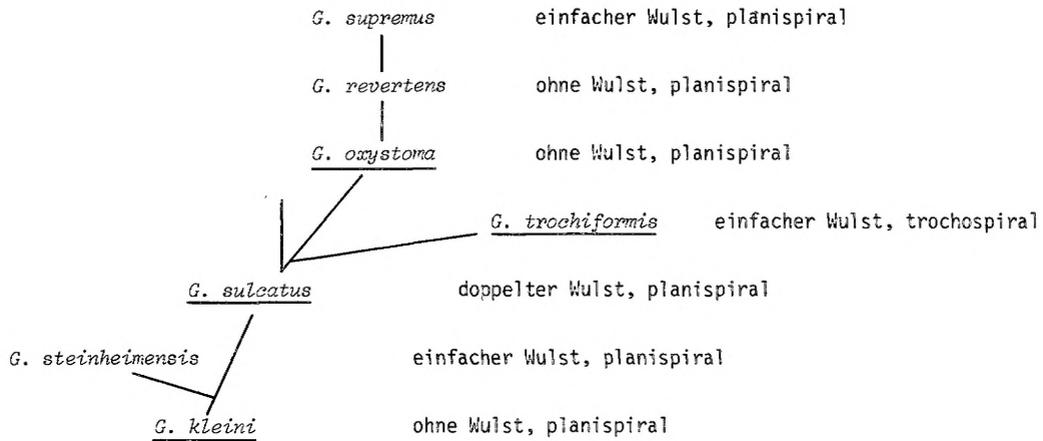


Abb. 1: Definition der gemessenen Merkmale (MENSINK, 1967)

49 Populationen mit je 100 vermessenen Gehäusen wurden ausgewählt; sie entsprechen der von MENSINK ausgewerteten zeitlichen Abfolge.

MENSINK schließt aus seiner Untersuchung auf die Existenz von sieben Taxonen:



Die zum Teil als Arten (unterstrichen), zum Teil als Varietäten aufgefaßten Taxone sind entsprechend den Linien durch gleitende Übergänge miteinander verbunden.

3. MULTIVARIATE METHODIK

Aus Gründen, die z.T. in der Verfügbarkeit von Programmen liegen, wurde anfangs versucht, das Datenmaterial nach einer erneuten univariaten maschinellen Auswertung mit relativ komplexen Methoden zu bearbeiten; während später auf mathematisch einfachere aber leichter praktikable Methoden übergegangen wurde. Es wurden die Hauptkomponenten-Analyse, die Analyse canonischer Variate, verschiedene Cluster-Verfahren und die Diskriminanz-Analyse angewendet.

Alle diesen multivariaten Verfahren ist gemeinsam, daß aus den Rohdaten, nach verschiedenen einzusetzenden Normierungsprozeduren, eine Matrix von Ähnlichkeits-Koeffizienten gebildet wird. In der sog. Q-mode-Technik beschreiben diese Koeffizienten die Ähnlichkeit zwischen jeweils zwei Individuen. Dies ergibt bei 5000 Individuen Matrizen, die in normalen Rechenprogrammen nicht zu bearbeiten sind. Ein primäres Anliegen war daher, die Datenfülle möglichst ohne größeren Informationsverlust zu reduzieren.

Die einfachste Form der Datenreduktion ist die Verwendung statistischer Kennzahlen (z.B. dem arithmetischen Mittel) der ganzen Schichtpopulation. Bei heterogen zusammengesetzten Proben sind diese Werte in erster Linie abhängig von der Häufigkeit einzelner Morphotypen in einer Stichprobe. Da diese Häufigkeiten aber bereits Ausdruck von Entwicklungstrends sein können, sind auch auf dieser Basis interessante Darstellungen zu gewinnen (siehe Abb. 4 und 6). Andere Möglichkeiten mit Mittelwerten zu arbeiten, werden in dem Abschnitt über Cluster-Analyse erläutert.

Um das Lesen der folgenden Abbildungen zu erleichtern wird auf die multivariat erzielte Gruppierung vor=griffen. Es werden sieben Gruppen unterschieden, hier als OTU (=operational taxonomic unit) aufgefaßt. Diese sind nahezu mit den sieben taxonomischen Einheiten bei MENSINK (1967) identisch. Die Benennung der OTUs mit Namen der Planorbenreihe dient nur der Verständigung und impliziert keine taxonomische Zuordnung. Zur besseren

Erkennbarkeit in den Diagrammen ist jeder OTU ein Symbol zugeordnet (Abb. 2). Symbol-Kombinationen in manchen Abbildungen deuten etwa entsprechend zusammengesetzte Schichtpopulationen an.

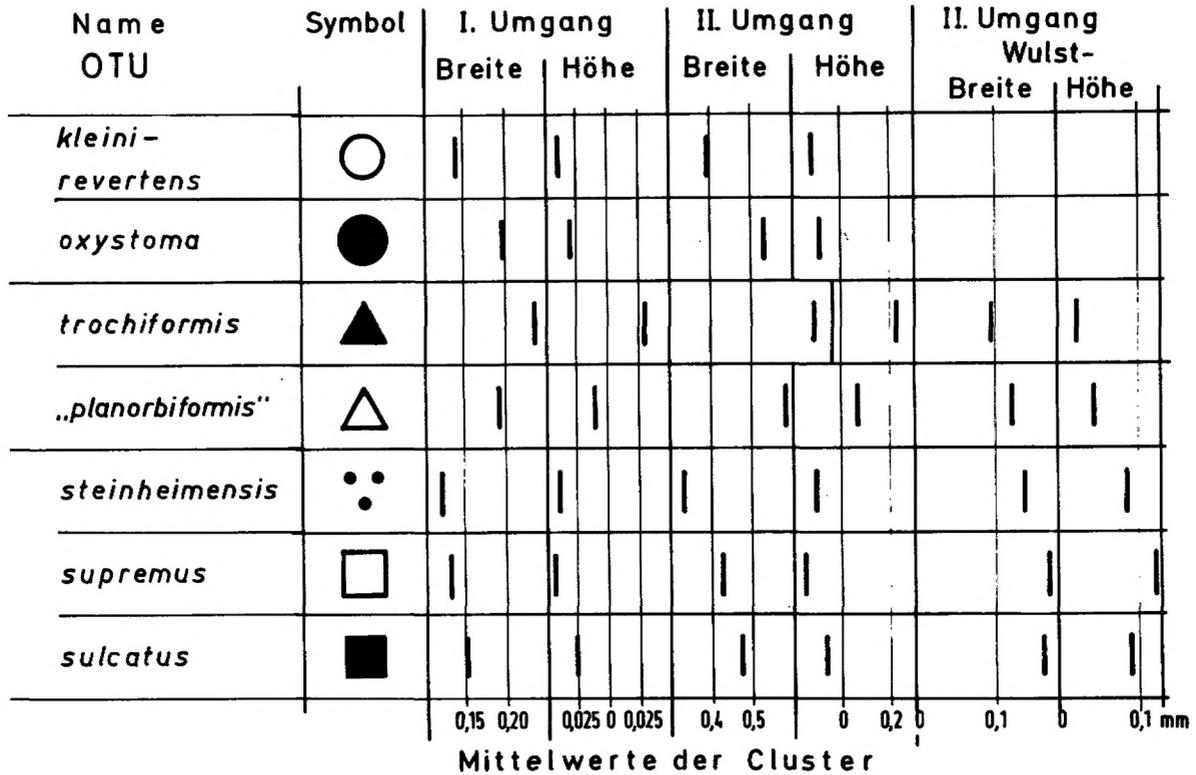


Abb. 2: Aufgliederung der Daten in OTUs und Zuordnung der in den Abbildungen verwendeten Symbole.

3.1 Probleme der Ähnlichkeits-Koeffizienten und Standardisierungen

Die Wahl des zu benutzenden Ähnlichkeitsmaßes sowie der anzuwendenden Standardisierung bzw. Transformierung der Daten beinhaltet Probleme, die vorwiegend durch die Methode von "trial and error" angegangen werden mußten. Es wurden im wesentlichen drei verschiedene Ähnlichkeitsmaße verwendet, die jeweils unterschiedliche Ergebnisse lieferten. Während die Analyse canonischer Variate nur mit der einfachen Dispersionsmatrix (unkorrigierte Kovarianz-Matrix) durchzuführen war, wurden für die Hauptkomponenten, die Diskriminanz- und die Cluster-Analyse auch die Korrelations-Matrix (die der Kovarianz-Matrix normalisierter Daten entspricht) sowie die Matrix der cosinus-Theta-Koeffizienten und die der Euklidischen Distanz verwendet.

Während in der Hauptkomponenten-Analyse vor allem die cosinus-Theta-Koeffizienten (ein Maß, daß auf die Winkel zwischen den Merkmalsvektoren der Einzelindividuen zurückgeht) die beste Trennung erlaubte, waren sowohl in der Diskriminanz- als auch in der Cluster-Analyse das Ähnlichkeitsmaß der Euklidischen Distanz am "erfolgreichsten".

Diese Distanz ist definiert als

$$D_{ij} = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^m (x_{ik} - x_{jk})^2}{m}}$$

wobei x_{ik} die k-te Variable am i-ten Objekt und x_{jk} die k-te Variable am j-ten Objekt ist.

Bei der Benutzung einzelner Ähnlichkeitsmatrizen war wiederum die verwendete Standardisierung der Daten bedeutsam.

Von den Möglichkeiten: keine Standardisierung, Standardisierung (Normalisierung) auf Mittelwert = 0, Varianz = 1 und Standardisierung auf eine Variationsbreite von 0 bis 1 brachte die letztere meist die besseren Resultate und wurde bevorzugt eingesetzt.

Für diese Standardisierung, bei der der kleinste Wert einer Variationsbreite gleich 0, der größte gleich 1 gesetzt wird, ist es entscheidend, daß keine einzelnen Extremwerte innerhalb der Population das Bild verfälschen. Im Zuge der vorausgegangenen univariaten und multivariaten Bearbeitungen wurden solche Werte eliminiert.

3.2 Merkmals-Wertigkeit

Die hier verwendeten Variablen zeigten verschiedene Besonderheiten. Die Höhenwerte waren von der Meßtechnik her entweder positiv oder negativ, was bei gleichzeitigem Auftreten planispiraler und trochospiraler Gehäuse in einer Schichtpopulation zu nichtssagenden Mittelwerten führt. Die anfänglich vorgenommene Transformation der Werte in ausschließlich positive Zahlen wurde im Zusammenhang mit der Standardisierung auf Einheits-Variationsbreite überflüssig. Die Variablen der Wulst-Entwicklung beinhalten eine schwer zu handhabende Mischung von binären Daten (Wulst/kein Wulst) und kontinuierlichen Daten (wenig Wulst/viel Wulst). Bei der Berechnung der Ähnlichkeitsmatrizen wurde der störende 0-Faktor (kein Wulst) durch den Hilfsgriff eliminiert, daß "0" jeweils durch eine sehr kleine, normal verteilte Zufallszahl ersetzt wurde, die sich deutlich von der kleinsten gemessenen Einheit unterschied und das Rechnen mit Null vermeidbar machte. Leider führten diese "dummy"-Werte zu Scheinkorrelationen der anderen Variablen mit den - eigentlich nicht vorhandenen - Wulstdaten, was wiederum den Korrelationskoeffizienten als Ähnlichkeitsmaß einschränkte. Trotzdem hatten natürlich die Wulstmerkmale die größte Varianz aller Variablen und damit den größten Einfluß auf die Clusterbildung. Ansonsten wurden die starken Unterschiede in der Größenordnung der gemessenen Merkmale durch die Standardisierung ausgeglichen.

Die einzelnen Variablen sind in unterschiedlicher Weise miteinander korreliert. Die höchsten - positiven - Korrelationen treten zwischen den analogen Merkmalen beider Umgänge auf, sowie zwischen den beiden Wulstmerkmalen. Deutlich negative Korrelationen treten zwischen der Wulstausbildung und der Höhenentwicklung besonders des 2. Umganges auf.

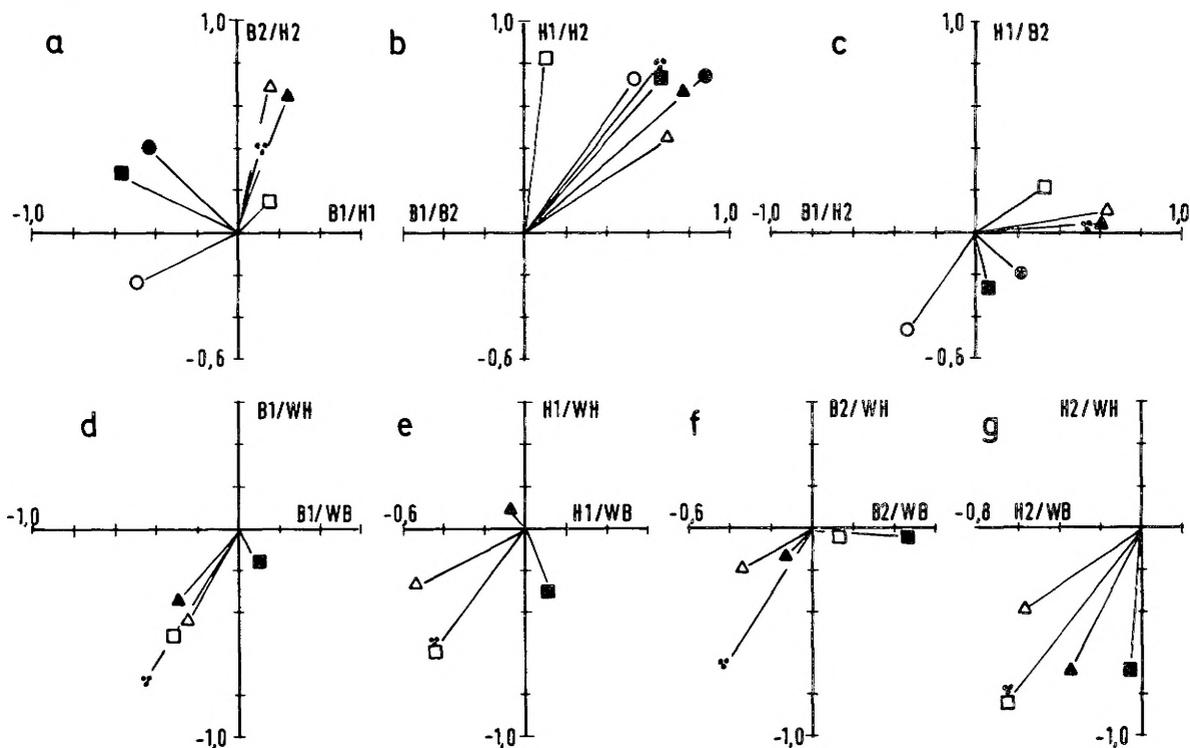


Abb. 3: Korrelations-Diagramme der gemessenen Variablen in den einzelnen OTUs. Jede Achse repräsentiert die Korrelation zwischen zwei Variablen (Namen sinngemäß abgekürzt). Symbole wie in Abb. 2.

Auf Grund der Korrelationen ist keine Variable als überflüssig anzusehen (mit Ausnahme vielleicht der Wulsthöhe). Bei der Hauptkomponenten-Analyse stellen jedoch die ersten 3 Hauptkomponenten 95 bis 99% der Gesamtvarianz, so daß letztlich von nur drei unkorrelierten Variablen ausgegangen werden müßte.

Um die Wertigkeit einzelner Variablen zu erfahren, wurden verschiedene Analysen mit unterschiedlichen Variablen-Kombinationen durchgeführt. Gruppierungen müßten unabhängig sein von der Zahl der verwendeten Variablen, solange die gemessenen Variablen überhaupt gruppenspezifische Merkmale darstellen. Beim Vergleich der Gruppierungen mit und ohne Wulstdaten wurden tatsächlich grundsätzlich ähnliche Cluster erreicht, auch wenn die Assoziierung einzelner Gruppen zueinander stark verschieden war (siehe unter Cluster-Analyse).

3.3 Hauptkomponenten-Analyse

Dies häufig eingesetzte Verfahren beruht auf der Lösung eines Eigenwertproblems. Aus einer Matrix (S) von Ähnlichkeitskoeffizienten zwischen entweder m Variablen (mxm-Matrix, R-mode-Technik) oder n Individuen (nxn-Matrix, Q-mode-Technik) werden die maximal m bzw. n nicht trivialen Lösungen λ_j der Determinanten-Gleichung

$$|S - \lambda I| = 0$$

errechnet (I ist eine nxn bzw. mxm Einheitsmatrix).

Zu jedem Eigenwert λ_j gehört ein Eigenvektor a_j , der sich aus dem Ansatz

$$(S - \lambda I) a = 0$$

bestimmen läßt.

Die Eigenvektoren bestimmen die Raumlage der aufeinander senkrechtstehenden Achsen von der Länge λ eines m- bzw. n-dimensionalen Raumes. Die durch einen Eigenwert ausgedrückte Größe gibt den durch diese Richtung vertretenen Anteil an der Gesamtvarianz an. Die Summe aller Eigenwerte und Eigenvektoren dargestellten Achsen kann man aus den Ursprungsvariablen neu kombinierte Variable (häufig auch Variate genannt) sehen. Im Gegensatz zu den ursprünglichen Variablen sind diese Variate nicht miteinander korreliert und man kann aus ihnen die Zahl von unabhängigen Dimensionen ersehen, die die Gesamtvarianz bzw. einen wesentlichen Teil davon erklären. Mit Hilfe der Eigenvektoren a lassen sich die an einem Individuum gemessenen Merkmalswerte X_j "übersetzen" in die Ausdrucksform der Hauptkomponenten

$$Y = \sum_{i=1}^m a_i X_i$$

Dabei wird jedes Individuum nicht mehr durch die m Variable X_j sondern nur noch durch die wesentlichen $r < m$ Hauptkomponenten repräsentiert.

Die Ausführung dieser Analyse kann zu einer beträchtlichen Datenreduktion führen und empfiehlt sich besonders zur Beurteilung der Variablen (R-mode). Für eine echte Q-mode Analyse sind jedoch kaum zu realisierende Speicherkapazitäten notwendig; gleichzeitig sind bei den vielen Rechenoperationen Rundungsfehler in der Größenordnung der Ergebnisse nicht auszuschließen.

Im vorliegenden Fall wurden R- und Q-mode Hauptkomponenten Analysen nur mit den Mittelwerten der 49 Schichtpopulationen durchgeführt. Das Ergebnis entspricht weitgehend dem in Abb. 4 dargestellten Bild einer Analyse canonischer Variate.

3.4 Diskriminanz-Analyse

Bei dieser Analyse wird eine Funktion - die Diskriminanz-Funktion - gesucht, die zwei zu unterscheidende Gruppen möglichst optimal trennt. Sie wird aus der Formel

$$Y = [x_1 - x_2]' S^{-1} x$$

errechnet, in der $[x_1 - x_2]'$ der transponierte Vektor der Mittelwerte-Differenzen beider Gruppen ist, S^{-1} die Inverse der sog. vereinigten (pooled) Dispersionsmatrix der Proben und X ist ein Vektor von Variablen. Der Vektor von Koeffizienten a der Diskriminanz-Funktion ergibt sich nach

$$a = S^{-1} [x_1 - x_2]$$

Durch Einsetzen von a in eine Formel der Form

$$R = a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2 \dots + a_m \psi_m$$

erzielt man die sog. "discriminant scores" oder Diskriminanz-Werte. Wird $\psi = \bar{x}_1$ (Mittelwerts-Vektor der 1. Gruppe) bzw. $\psi = \bar{x}_2$ gesetzt, erhält man die Größe D^2 oder "Mahalanobis Distance" die den multivariaten Abstand der Zentren beider Gruppen im m -dimensionalen Raum angibt.

Diese Technik erlaubt es, für zwei schwer zu unterscheidende Gruppen eine exakt definierte, optimale Trennung zu erreichen, ferner kann man neu einzuordnende Individuen durch Einsetzen ihrer Meßwerte in die Diskriminanzfunktion der einen oder anderen "Population" zuordnen.

Ein Nachteil der Methode ist, daß die Gruppen a priori definiert sein müssen und daß jeweils nur paarweise Vergleiche stattfinden. Dennoch ist dies wie weiter unten noch dargestellt wird, eine leicht und erfolgreich einzusetzende Methode innerhalb numerischer Taxonomie.

3.5 Analyse canonischer Variate

Diese Methode, die BLACKITH & REYMENT (1971:88) ausführlich darstellen, vereinigt in gewisser Weise die Methoden von Hauptkomponenten- und Diskriminanz-Analyse. Im Gegensatz zur Hauptkomponenten-Analyse können mehrere Gruppen gleichzeitig verglichen werden. Es wird - vereinfacht ausgedrückt - das Achsen-Schema einer die k Einzel-Punktvolken im $k \times m$ -dimensionalen Raum "umhüllenden" Funktion berechnet. Auf diese canonischen Achsen, die auf einander senkrecht stehen, werden die Werte der einzelnen Gruppen-Punktvolken projiziert. Die Einzel-Punktvolken, die im Idealfall die Form von m -dimensionalen "Rotationsellipsoiden" haben, liegen mit ihren Hauptachsen nicht parallel. Die längste Achse der Umhüllenden ist in die Richtung der sich aus dem Einzelvarianzen ergebenden größten Varianzanteils gestreckt. Die zweitlängste Achse, kennzeichnet die Richtung des zweitgrößten Anteils der Gesamtvarianz usw. Damit sind neue Variable definiert, die canonischen Variate, die in etwas unschärferer Weise als bei der Hauptkomponenten-Analyse aus den ursprünglichen Variablen linear kombiniert sind. Der Vorteil dieser Methode ist, daß die Gesamtvarianz eines ganzen Kollektivs von Einzelgruppen in unkorrelierte Variate aufgliederbar ist. Der Zusammenhang der canonischen Variate mit den ursprünglichen Variablen kann aus der Zusammensetzung der zu den Variaten gehörigen Eigenvektoren abgelesen werden. Mathematisch handelt es sich um die Lösung der Determinantengleichung

$$|B - z W| = 0$$

in der B die Dispersionsmatrix zwischen den k Gruppen ($k \times k$), W die vereinigte Dispersionsmatrix innerhalb der k Proben mit m Variablen ($m \times m$) darstellt; z sind die latenten Wurzeln (Eigenwerte) der Gleichung und die ihnen zugeordneten latenten Vektoren t werden aus der Gleichung

$$(B - z W) t = 0$$

bzw. standardisiert als canonische Achsen u aus

$$u = (t' \frac{W}{n-k} t)^{1/2}$$

errechnet.

Das von BLACKITH & REYMENT 1971 publizierte Computer-Programm, das hier benutzt wurde, liefert als Nebenprodukt der Homogenitätsprüfung der Einzel-Gruppen auch eine vereinfachte Hauptkomponentenanalyse jeder betei-

ligten Einzelgruppe. Das ist für die Beurteilung der wechselnden Achsenlagen von großem Wert. Meist sind mit 2 oder 3 der canonischen Variate bereits über 90% der Gesamtvarianz repräsentiert. Nach BLACKITH & REYMENT können übrigens auch noch kleine Varianz-Beträge für Unterscheidungen einzelner Gruppen erfolgreich herangezogen werden.

Diese Analysenart wurde an dem vorliegenden Material in verschiedenerlei Art eingesetzt. Einmal wurde das gesamte Datenmaterial simultan bearbeitet (was mit geringerem Rechenaufwand als eine Q-mode Hauptkomponenten-Analyse verbunden ist). Es zeigte sich, daß das Ergebnis - zumindest der größten Achsen - weitgehend identisch ist mit dem, das auch der Hauptkomponenten-Analyse gewonnen wurde. Abb. 4 zeigt die Darstellung der 1. und 2. canonischen Variate für (fast) alle Schichtpopulations-Mittelwerte.

Canonische Variate

47 Mittelwerte, 6 Variable

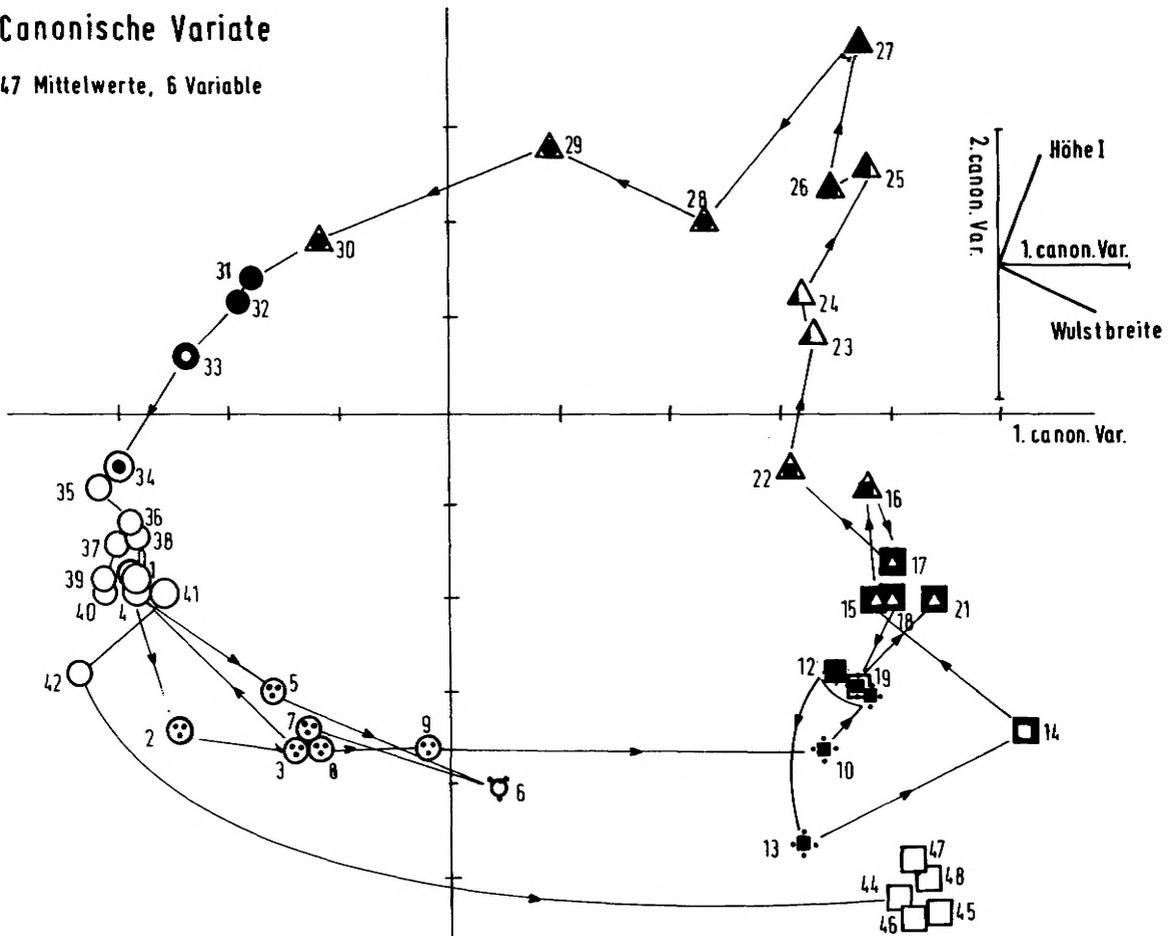


Abb. 4: Analyse canonischer Variate. 47 Schichtpopulationen, 6 Variable; das kleine Diagramm rechts oben zeigt die Besetzung der 1. und 2. canonischen Variaten mit den wichtigsten Variablen (höchste Werte der jeweiligen Eigenvektoren). Symbole wie in Abb. 2.

Die zeitliche Aufeinanderfolge der einzelnen Gruppen ist durch Pfeile angedeutet; die Zusammensetzung der Gruppierungen - aus anderen Analysen ermittelt - ist durch Symbole ausgedrückt. Es zeigt sich dabei ein seltsamer "Kreisverkehr" in der Aufeinanderfolge. Dominierend sind in dieser Darstellung die Variablen Wulstbreite im 2. Umgang (sie beeinflusst die 1. canonische Variate besonders stark) und die Höhe im 1. Umgang (sie hat den größten Anteil an der 2. canonischen Variaten). Auffällig ist die perlschnurartige Anordnung der Probenpunkte in dieser Darstellung mit "Knoten" in den Bereichen morphologischer Überlappung. Die Untrennbarkeit der im Profil tieferen Proben (0, 1, 4) mit "*G. kleini*" von den relativ jüngeren Proben (35-42) mit "*G. revertens*" kommt bereits bei diesem Verfahren deutlich zum Ausdruck. Auch die Hinzunahme weiterer canonischer Variate erlaubt keine Abtrennung. Die anderen Proben, die diese Form enthalten, sind durch das gleichzeitige Vorkommen anderer Morphotypen aufgrund der Mittelwertbildung abgesetzt.

Eine andere Anwendung der Analyse canonischer Variate erlaubt es, eine "Cluster-Analyse" der einzelnen Schichtpopulationen durchzuführen. Es wurden dabei jeweils nur wenige, einander ähnliche Proben aus kleinen Profilabschnitten gleichzeitig betrachtet. Durch die Ähnlichkeit der Variabilität der einzelnen Proben wird eine "Parallellage" der Punktwolken im multivariaten Raum erreicht. Aus dieser Verringerung der Varianz gegenüber der Gesamtanalyse resultiert eine größere Trennschärfe. Läßt man die auf die Individuen rückgerechneten Werte der canonischen Variate stichprobenweise ausplotten, ergibt sich ein gutes Bild der Homo- bzw. Heterogenität innerhalb der Probe (Abb. 5). Durch Übereinander-Projizieren von aufeinanderfolgenden Proben kann man die zeitlich bedingte Veränderung verfolgen. Extremwerte und falsche Daten können mit dieser Methode leicht erkannt werden. Ihr Vorhandensein beeinflußt aber gleichzeitig die Ausrichtung der canonischen Achsen. Die relative Instabilität dieser Achsen in Abhängigkeit von beteiligten Proben und Einzeldaten ist ein gewisser Nachteil dieser Methode.

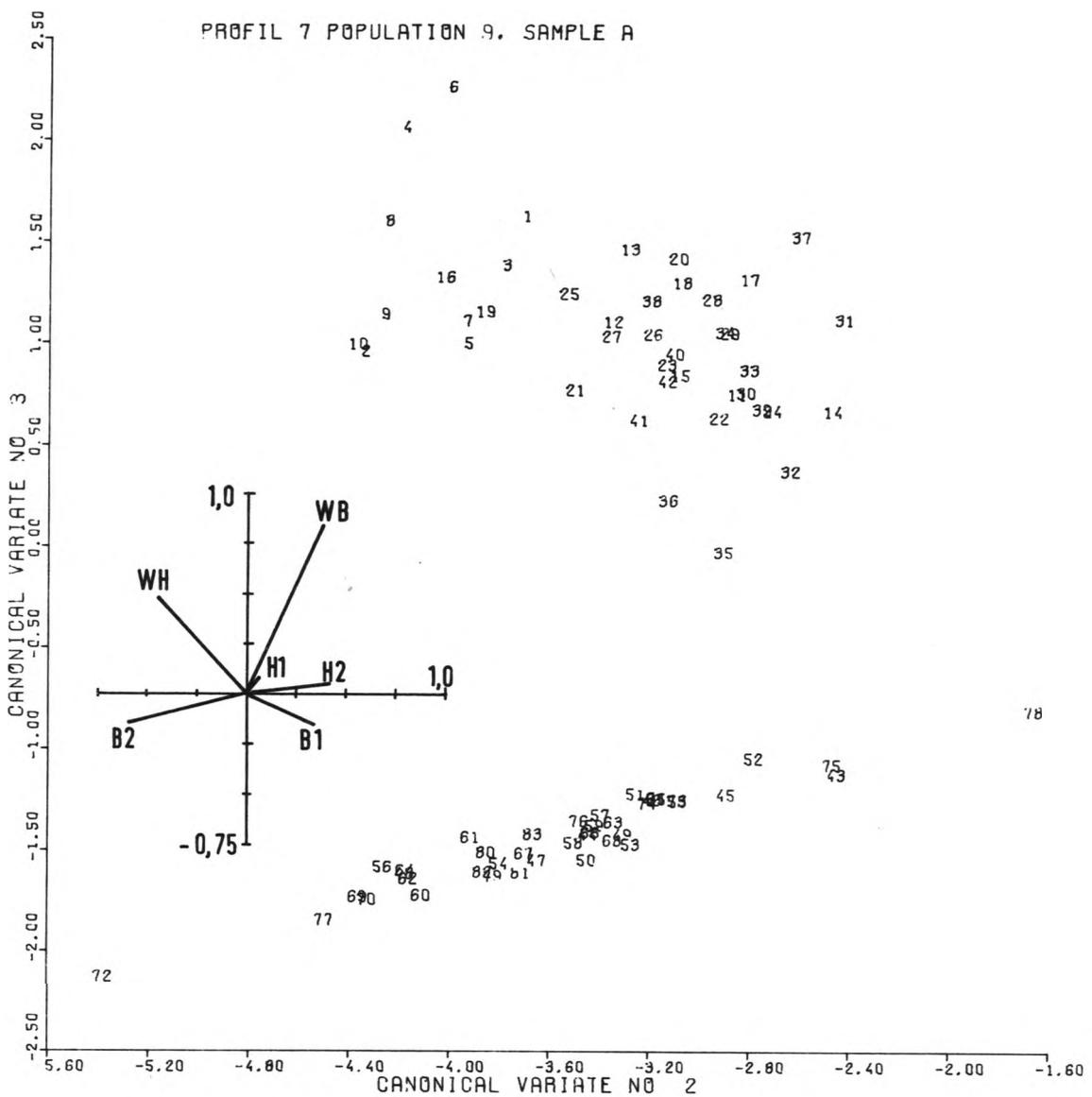


Abb. 5: Computer-Plot der Werte der 2. und 3. canonischen Variaten für die Individuen einer Schichtpopulation. Das kleine Diagramm verdeutlicht die zugehörigen Eigenvektoren, aus denen auf die Bedeutung einer canonischen Variate geschlossen werden kann.

4. CLUSTER-ANALYSE

Im Gegensatz zu den bisher beschriebenen Methoden kann man Gruppierungen durch hierarchische Gliederung der Ähnlichkeits-Koeffizienten erreichen.

Es gibt eine Vielzahl von Verfahren diese Gruppierung durchzuführen (ANGERBERG 1973). Hier wurde die "unweighted pair group"-Methode bevorzugt. Aus einer Matrix von Ähnlichkeitskoeffizienten werden Paare mit jeweils größter Ähnlichkeit gesucht; nach Bildung eines Clusters werden die Ähnlichkeits-Koeffizienten der beteiligten Einzelwerte unter Berücksichtigung deren Anzahl gemittelt. Die entstehende hierarchische Ordnung kann als sog. Dendrogramm gezeichnet werden⁺.

Bei jedem Cluster-Verfahren entstehen Verzerrungen der ursprünglichen Koeffizientenwerte. Man kann diese Verzerrungen messen, indem man aus dem Dendrogramm eine Ähnlichkeitsmatrix zurückgewinnt und sie mit den Ausgangs-Koeffizienten korreliert. Je höher die Korrelation zwischen beiden Matrizen, desto besser ist die Abbildung der Ausgangsmatrix durch das Dendrogramm. Diese copheneticische Korrelation ist beim verwendeten Verfahren durchweg zwischen 0.75 und 0.9, also ausreichend gut.

Anfangs wurde ein Cluster-Diagramm unter Verwendung der Mittelwerte der 49 Schichtpopulationen hergestellt (Abb. 6). Da die Stichproben in sich nicht homogen sind, ist eine klare Trennung einheitlicher Taxone so nicht zu erreichen. Eine Alternative zu dieser Methode wäre, die Einzelwerte des gesamten Materials in einem Gang zu clustern, was aus rechentechnischen Gründen nicht möglich ist.

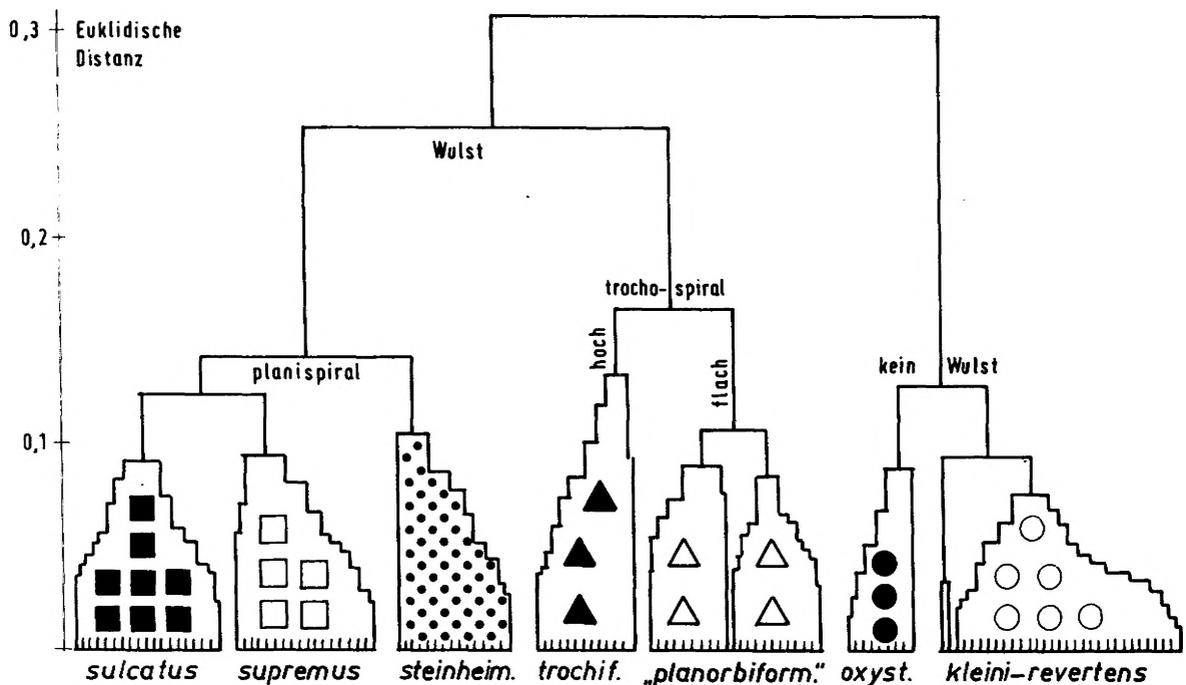


Abb. 6: Dendrogramm aus den Mittelwerten von 6 Variablen aus 49 Schichtpopulationen der *Gyraulus*-Gruppe. Symbole wie in Abb. 2.

Erfolgreich erwies sich schließlich ein Verfahren, mit dem die Datenfülle auf relativ wenige statistische Kennzahlen reduziert werden konnte, die jedoch jeweils homogene Gruppen repräsentierten. Dazu wurde für jede einzelne Schichtpopulation einer Cluster-Analyse durchgeführt und jeweils die fünf unähnlichsten Cluster nach

⁺ Da das verwendete Programm (McCAMMON & WENNINGER 1970) nur mit einer Ausgabemöglichkeit des Dendrogrammes auf dem Calcomp-Plotter ausgerüstet war, wurde eine Subroutine für dieses Programm geschrieben (siehe Anhang), die ein gleichwertiges Dendrogramm auch auf dem Schnelldrucker erstellt.

ihren statistischen Kenndaten hin geprüft. Zur Beurteilung der Zahl der sinnvollen Cluster wurde nach einem von OXFORD (1976) beschriebenen Verfahren für jedes Dendrogramm die Redundanz- und Ähnlichkeits-Kurven berechnet. Mit Hilfe dieser Werte sowie nach Signifikanz-Tests der statistischen Kennzahlen der einzelnen Cluster und der "subjektiven" Auswertung des Dendrogramms wurden ggf. benachbarte Gruppen wieder zusammengefaßt. Pro Schichtpopulation wurden zwischen 2 und 5 Subclustern behalten. Das Ergebnis bleibt auch dasselbe, wenn keinerlei Clusterauswahl stattfindet, sondern jeweils alle maschinell bestimmten Subcluster weiter verarbeitet werden. Damit eröffnet sich eine Möglichkeit, die durch dieses Verfahren erreichte Datenreduktion zu automatisieren. Die maximale Zahl von zu berücksichtigenden Subclustern ergab sich aus der Kenntnis des Materials, und aus den Dendrogrammen. Da ein Rechenprogramm die statistischen Kenndaten der signifikanten Cluster jeweils berechnete und auf Lochkarten ausgab, war die weitere Bearbeitung dieser Werte einfach. Diese statistischen Zahlen ließen innerhalb jeden Subclusters auf minimale Varianz und Normalverteilung schließen. Die multivariate Variationsbreite jeder Schichtpopulation war also in homogene Subpopulationen aufgeteilt; je größer die ursprüngliche Varianz bzw. Heterogenität einer Schichtpopulation war, desto mehr Subcluster mußten berücksichtigt werden.

Diese Trennung der Schichtpopulationen in Subcluster und die vorher beschriebene Clusterung aufgrund der Analyse canonischer Variate ergab weitgehend übereinstimmende Gruppierungen. Das Ergebnis der Cluster-Analyse ist jedoch mit weitaus geringerem Arbeitsaufwand zu erreichen und führt direkt zu einer Datenreduktion ohne Veränderung der Datenstruktur.

Im vorliegenden Fall wurden aus den 49 Schichtpopulationen 127 Subcluster gewonnen. Mit den Daten der Subcluster wurde eine erneute Cluster-Analyse durchgeführt, die eine klare Trennung in sieben OTUs ergab (Abb. 7): Drei Hauptgruppen (mit Wulst, planispiral; mit Wulst, trochospiral; ohne Wulst, planispiral) waren in je 3 bzw. 2 Untergruppen gegliedert, die auf unterschiedliche Proportions-Verhältnisse zurückgehen (siehe Abb. 2).

Es lassen sich die statistischen Kennzahlen und Häufigkeitsverhältnisse der Subcluster auf vielfältige Weise darstellen und ausdeuten. Damit bleibt ständig die Verbindung zu den Ausgangsdaten gewahrt. Hier wurde

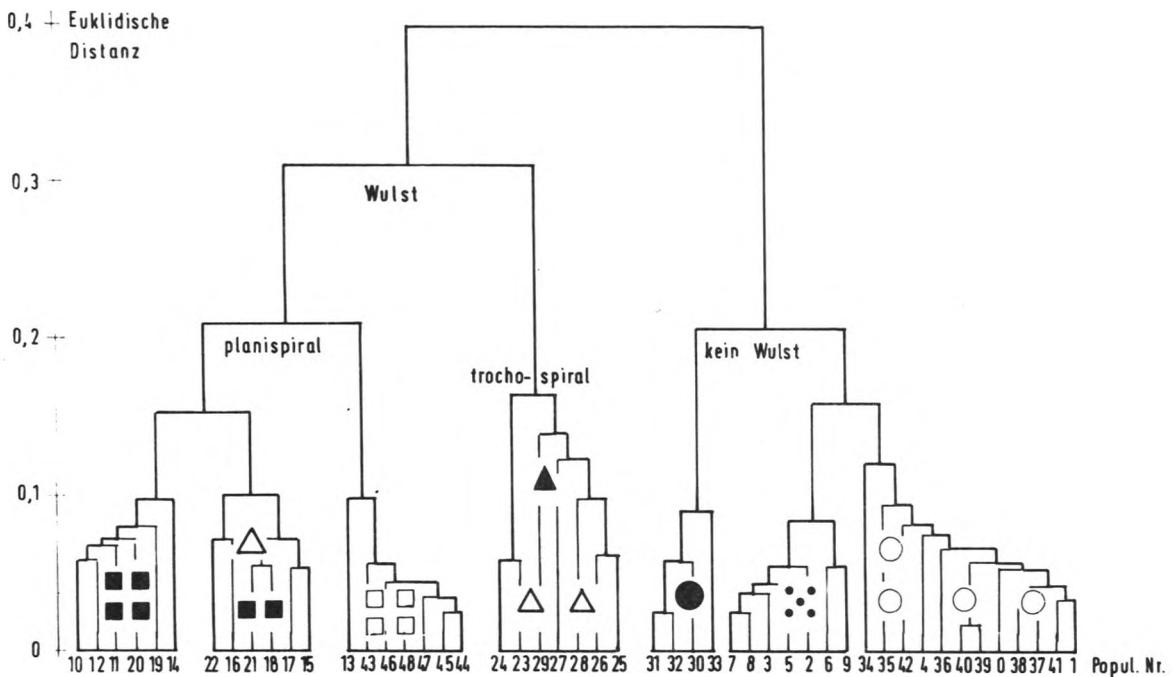


Abb. 7: Dendrogramm aus den Mittelwerten von 6 Variablen aus 127 Subclustern der 49 Schichtpopulationen der *Gyraulus*-Gruppe. Symbole wie in Abb. 2; Kennzeichnung der einzelnen Subcluster in Abb. 8.

als Beispiel eine Darstellung gewählt (Abb. 8), in der die Mittelwerte von 2 Variablen der 127 Subcluster mit einem Häufigkeitsdiagramm der OTUs kombiniert ist. Diese Darstellung zeigt klar die Aufeinanderfolge bzw. Gleichzeitigkeit der einzelnen OTUs und die morphologische Entwicklung.

Diese Entwicklung sowie die taxonomischen und phylogenetischen Folgerungen werden in der zusammenfassenden Darstellung beschrieben.

Aus Abbildung 8 geht auch recht gut die Schwierigkeit hervor, die Wulstdaten kontinuierlich zu behandeln, da Zwischenwerte, d.h. Annäherungen an Null praktisch fehlen (bzw. solche Werte nicht mehr meßbar waren).

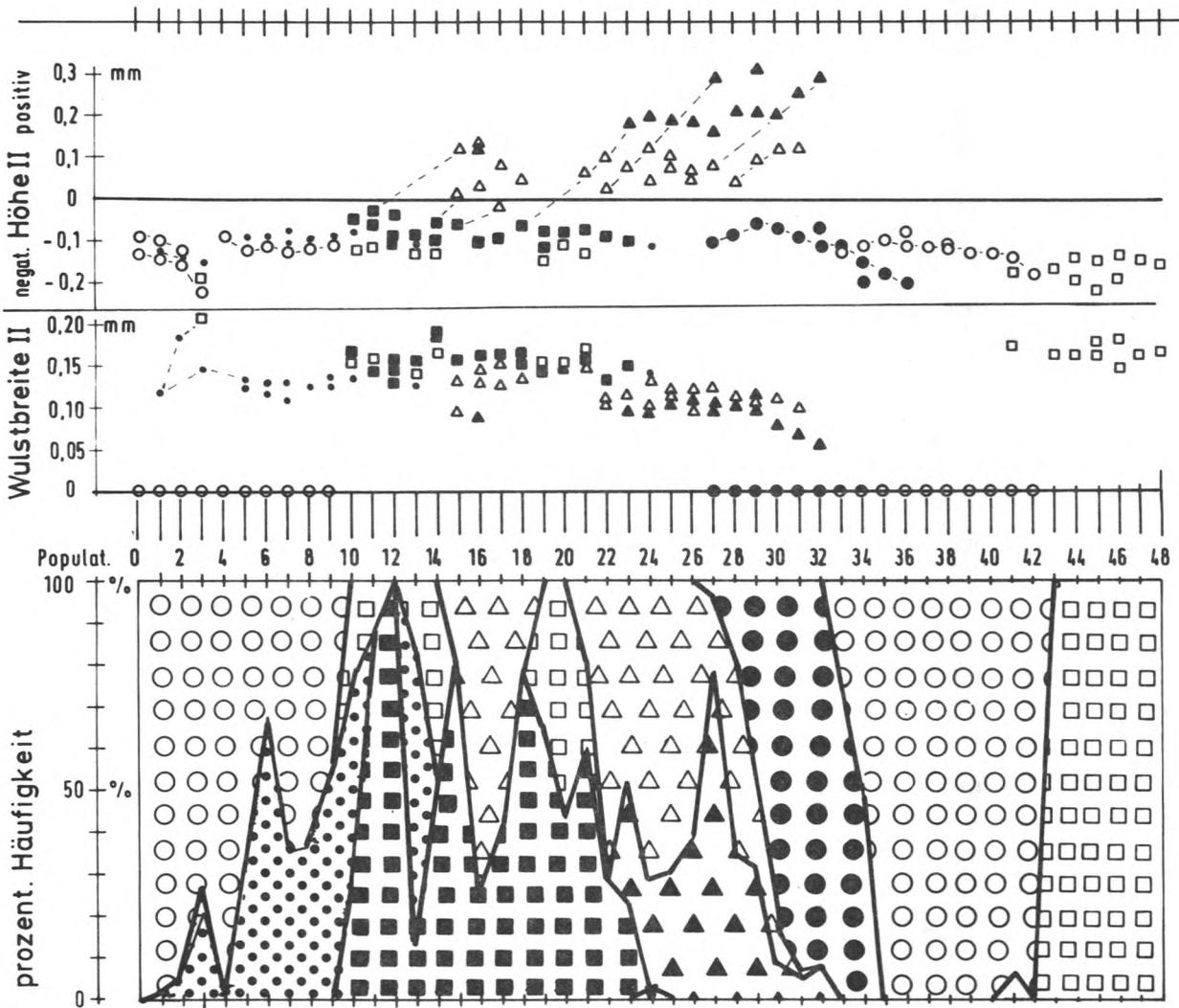


Abb. 8: Stratigraphische Anordnung der Mittelwerte von 2 Variablen aus 127 Subclustern (von links nach rechts) und die Häufigkeitsverteilung der zugrunde gelegten 7 OTUs. Symbole wie in Abb. 2.

Um die Wertigkeit der Wulst-Merkmale zu prüfen, wurde das gleiche Cluster-Verfahren auch ohne Wulstdaten durchgeführt. Abb. 9 zeigt eine Gegenüberstellung der Ergebnisse. Zum Vergleich ist auch die Clusterung der gesamten Schichtpopulationen eingezeichnet.

Links ist die Clusterung mit 6 Variablen, rechts die mit 4 Variablen angetragen; unten das Dendrogramm der Schichtpopulationen. Von je zwei zusammengehörigen Zeilen der Graphik gehört die obere zu dem 6-Variablen-Dendrogramm, die untere zu dem mit 4 Variablen. Jedes Symbol steht für ein Subcluster. Ein Schnitt durch das Diagramm von unten nach oben kennzeichnet also die Aufgliederung der Schichtpopulationen (unterste Zeile) in

Subcluster. Die Definition der OTUs geht vom 6-Variablen-Dendrogramm aus. Subpopulationen, die beim 4-Variablen Versuch anders eingestuft wurden als im 6-Variablen-Dendrogramm, sind entsprechend gekennzeichnet.

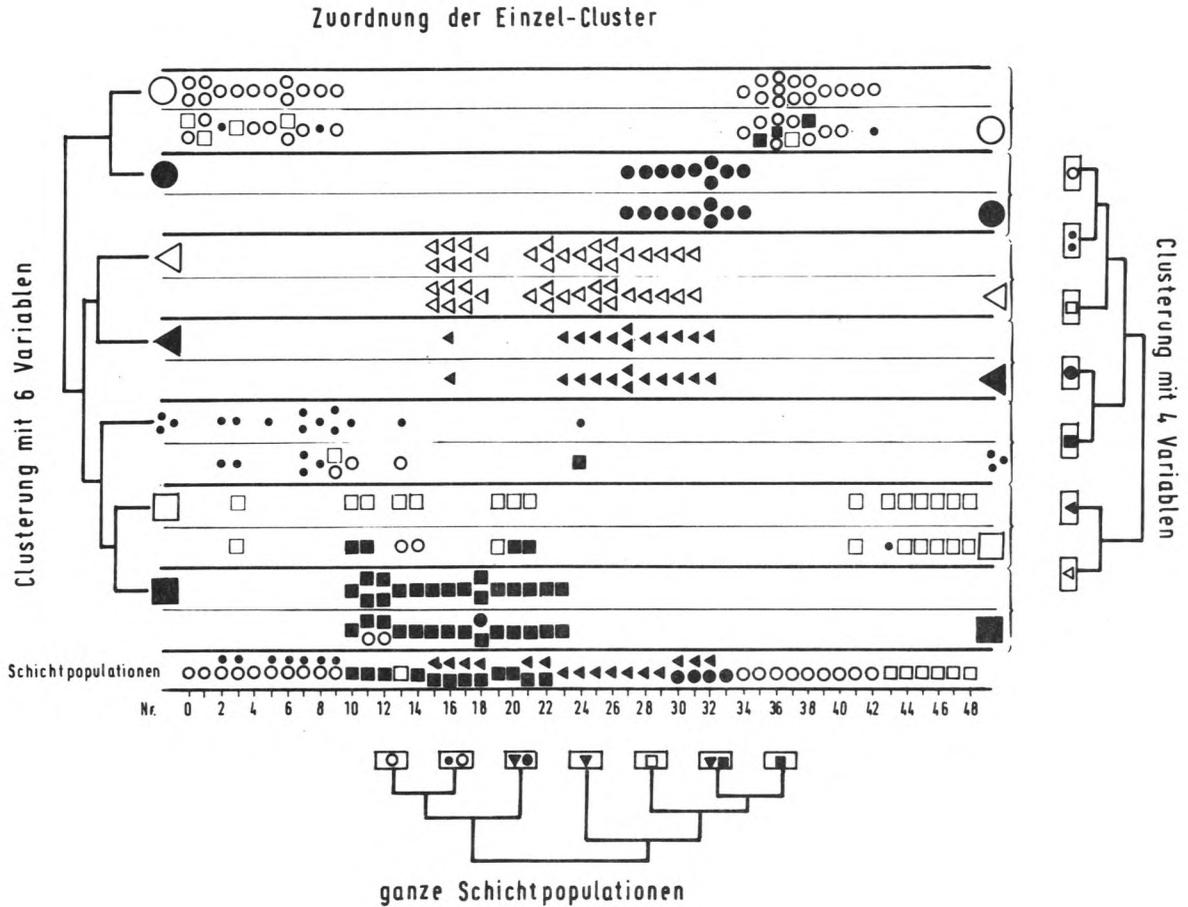


Abb. 9: Vergleich von Cluster-Zuordnungen der 127 Subcluster auf der Basis von Mittelwerten von 6 Variablen (mit Wulstdaten, jeweils obere Zeile) bzw. 4 Variablen (ohne Wulstdaten, jeweils untere Zeile). Unterste Zeile: Clusterzuordnung der 49 Schichtpopulationen nach Mittelwerten von 6 Variablen. Symbole wie in Abb. 2.

Es zeigt sich, daß die Gruppenerkennung bei beiden Verfahren sehr ähnlich ist. Die durch Δ , \blacktriangle und \bullet gekennzeichneten OTUs stimmen in beiden Verfahren genau überein. Schwierigkeiten der Gruppenerkennung ergeben sich in erster Linie bei den OTUs, die im 6-Variablen Verfahren durch die Wulstlosigkeit eindeutig abgesetzt sind, im 4-Variablen-Verfahren aber in ganz enge Nachbarschaft rücken (\circ , $\circ\circ$, \square). Die durch das gemeinsame Merkmal "Wulstlosigkeit" erzwungene Ähnlichkeit von \bullet und \circ im 6-Variablen Dendrogramm erweist sich als äußerst fragwürdig, wenn man das Ergebnis des 4-Variablen Tests daneben stellt, in dem sich \bullet und \blacksquare als sehr ähnlich herausstellen.

Kein Verfahren erlaubt eine Trennung von *G. kleini* (Pop. 0-9) und *G. revertens* (Pop. 31-42). Deshalb werden diese beiden Formen als einheitliche OTU behandelt (\circ), obwohl sie wegen ihrer jeweiligen Stellung in der Abfolge der "Planorben" des Steinheimer Beckens bisher als selbstständige Taxone aufgefaßt werden (MEN-SINK 1967).

5. KOMBINATION VON CLUSTER- UND DISKRIMINANZ-ANALYSE

Mit den durch die Cluster-Analyse definierten OTUs, bzw. mit den Mittelwerten der Subcluster nach OTUs geordnet kann man erneut eine Diskriminanz-Analyse ausführen, bei der paarweise die einzelnen OTUs durch eine Diskriminanz-Funktion getrennt und ihr Abstand (Mahalanobis Distance, D^2) berechnet wird.

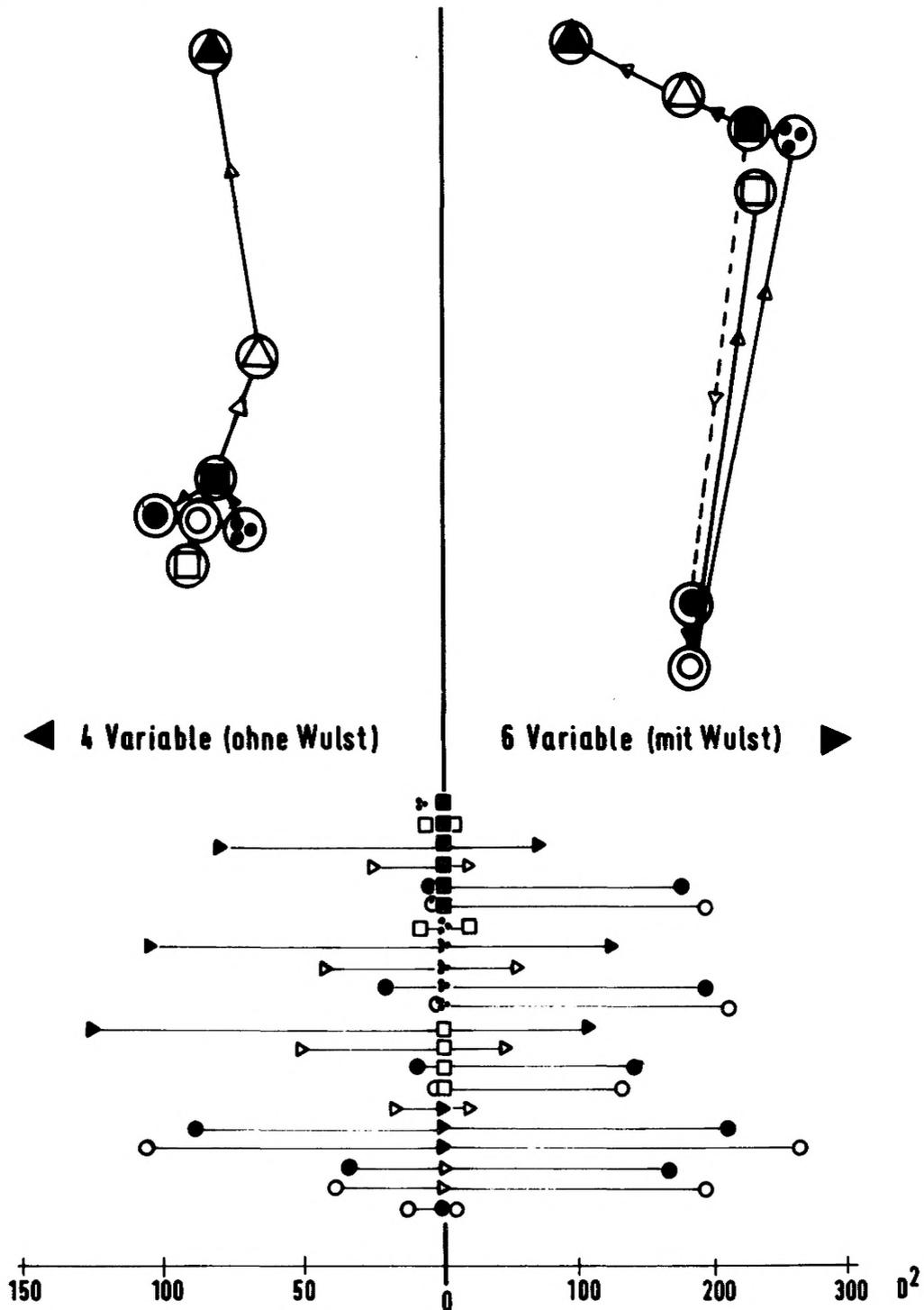


Abb. 10: Mahalanobis-Distance-Diagramm der 7 OTUs nach 6 Variablen (rechts) und 4 Variablen (links). Im unteren Diagramm sind die Abstände zwischen je zwei OTUs angegeben, aus denen das "Verwandtschaftsmodell" darüber angenähert konstruiert ist. Symbole wie in Abb. 2.

Nimmt man diese Abstände zwischen den Zentren der einzelnen OTUs zur Grundlage der Konstruktion eines Ähnlichkeits-Diagrammes (Abb. 10) so werden die je nach Verwendung der Wulstdaten unterschiedlichen "Verwandtschafts-Verhältnisse" besonders deutlich.

Eine Entscheidung über die Wertigkeit dieser Merkmale in phylogenetischer Hinsicht kann aus einer derartigen Analyse nicht abgeleitet werden. Es wird aber offensichtlich, daß die Auswahl von Variablen einen gravierenden Einfluß auf das Ergebnis multivariater Statistik hat und daß auf diesen Punkt bei der Bearbeitung eines derartigen Problems besondere Sorgfalt zu verwenden ist.

Eine weitere Möglichkeit, die Diskriminanz-Analyse bei bereits klar getrennten Gruppen zu verwenden, besteht darin, die Daten der Subcluster in die Diskriminanz-Funktion einzusetzen und aus den profilmäßig geordneten Werten ein "Entwicklungsbild" zu erhalten. Ein Beispiel soll das verdeutlichen.

Abb. 11 zeigt die Aufeinanderfolge der vereinigten OTUs "*kleini-revertens*" (○) + "*steinheimensis*" (◐) gegen die OTU "*sulcatus*" (■). Auffällig ist die sinusförmige Aufeinanderfolge der Häufigkeitsmaxima mit deutlicher Annäherung der Diskriminanz-Werte im Bereich der zeitlichen Überlappung. Das abweichende Verhalten von Schichtpopulation 13 verdient dabei besondere Beachtung.

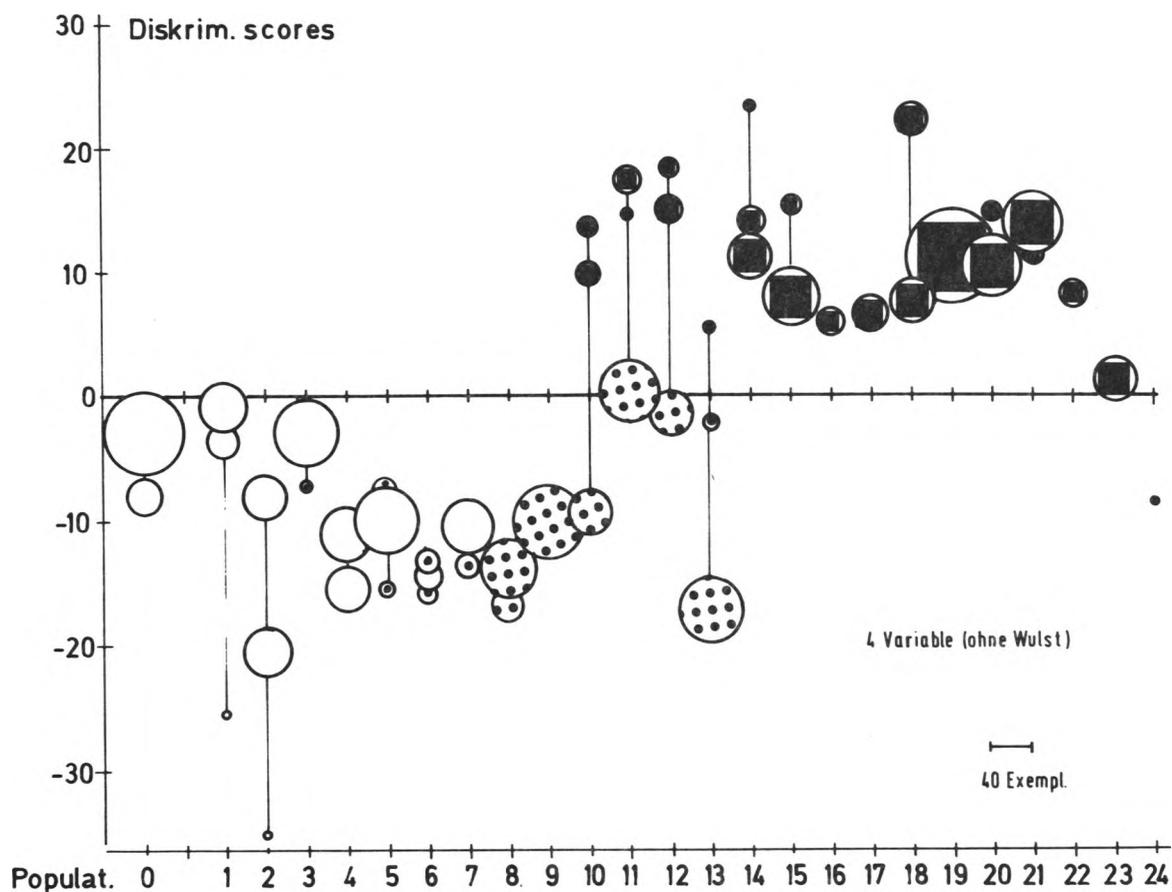


Abb. 11: Diskriminanz-Werte der OTUs "*kleini-revertens*" (○) + "*steinheimensis*" (◐) gegen "*sulcatus*" (■). Die Größe der Kreisdurchmesser ist proportional der Anzahl der Individuen je Subcluster.

6. METHODISCHE FOLGERUNGEN

Neben den mathematisch aufwendigen multivariaten Methoden der Hauptkomponenten-Analyse und ähnlicher auf Eigenwertproblemen aufgebauten Verfahren wird hier eine Methode wiederholter Cluster-Analyse an einem Beispiel demonstriert. Die Methode ist gut geeignet, heterogene Stichproben in homogene Einheiten aufzugliedern, die ihrerseits durch erneutes Clustern zu OTUs zusammengefaßt werden können. Der Bezug zu den Ausgangsdaten bleibt während der Analyse erhalten.

Die Möglichkeit, auch ein großes Datenmaterial in kleinen Abschnitten mit kurzen Rechenzeiten bearbeiten zu können, ist bei überlasteten Rechenzentren ein Argument, das bei der Auswahl von Methoden zu berücksichtigen ist.

Bei der Planung biometrischer Vorhaben ist es zu empfehlen, vor Beginn der eigentlichen Datenerfassung mit Hilfe einer Pilotstudie methodische Möglichkeiten auf ihre Verfügbarkeit und Einsetzbarkeit hin auszuwählen. Kein multivariates Verfahren kann auf "Antrieb" optimale Ergebnisse liefern und einzelne Analysenarten sind meist auf das spezifische Problem hin anzupassen. Wahl der Datentransformation und -Standardisierung, Auswahl der Ähnlichkeitskoeffizienten u.ä. sind für das Ergebnis oft ähnlich ausschlaggebend, wie die Wahl der Methode selber. Eine Pilotstudie an einem kleinen aber repräsentativen Material würde aber vor allem die Möglichkeit bieten, nur wirklich relevante Variable auszuwählen. Aus möglichst allen meß- und zählbaren Variablen eines Objektes sind redundante Merkmale mit Hilfe von Korrelations- und Eigenwert-Analysen meist unschwer zu ermitteln. Varianz- und Cluster-Analysen geben Auskunft über die Homogenität des Materials und über die Wertigkeit von Variablen in diesem Zusammenhang. Die eigentliche Datenerfassung und anschließende Analyse des Materials kann dann gezielt an ausgewählten Merkmalen und auf das Problem hin angepaßten statistischen Verfahren zeitlich und methodisch optimiert werden.

Von ihrer Anlage her eignen sich statistische Verfahren am besten zum Testen, genauer Ablehnen von Hypothesen. Die Annahme von Hypothesen erfolgt immer nur mangels ausreichender Evidenz für das Gegenteil. So wäre es z.B. verfehlt, phylogenetische und systematische Zusammenhänge aus statistischen Ergebnissen allein ableiten oder beweisen zu wollen. Jede statistische Methode kann nicht mehr sein als ein Werkzeug, mit Hilfe dessen Daten geordnet, versteckte Information verdeutlicht und mittelbar gemacht werden kann und durch das Mittel bereitgestellt werden, ein erzieltes Ergebnis gegen den Zufall abzuwägen. Ob beispielweise die aus dem untersuchten Datenmaterial abzuleitende Identität der in der OTU "*kleini-revertens*" (\bigcirc) vereinigten Gehäuse wirklich besteht, ist durch die Daten nicht zu entscheiden. Nur, eine Trennung ist aufgrund des vorliegenden Datenmaterials nicht möglich. Ob die "Verwandschaft" zwischen den Gruppierungen, wie sie sich aus den Analysen quantifizieren läßt, eher auf der Grundlage von Wurstmerkmalen oder aber auf der von Spiralmerkmalen "richtig" ist, ist gleichfalls von der Datenseite her nicht anzugeben.

Wie die n Wurzeln einer mathematischen Gleichung n -ter Ordnung jede für sich richtig ist und doch nur eine Teillösung darstellt, sind die vielen möglichen Ergebnisse statistischer Untersuchung nur "Angebote", Lösungsmöglichkeiten, die der sichtenden Wertung eines notwendigerweise subjektiven Bearbeiters bedürfen, um angenommen oder verworfen zu werden.

Notwendige Dateien: PLOTD schreibt in eine vorher zu kreierende sequentielle Datei mit der logischen Geräte Nummer 2 (Variable NAM in PLOTD); durch Drucke-Befehl ergibt deren Inhalt das Dendrogramm.

Begrenzungen: In der vorliegenden Form ist PLOTD auf 150 Objekte begrenzt. Bei größerem M1 muß die Dimension von KON in Zeile 10 und der Schleifenparameter in Zeile 11 entsprechend verändert werden.

```
10      SUBROUTINE PLOTD(WIGR, NP, IORD, NAME, A, KSS, M, M1)
20 C    ERZEUGT DENDROGRAMM AUF SCHNELLD RUCKER (LINDENBERG, 1976)
30 C    PLOTD SCHREIBT IN EINE VORHER ZU KREIERENDE DATEI MIT DER
40 C    LOGISCHEN GERÄTENR. 2 . ZUR AUSGABE DRUCKE-KOMMANDO
50      REAL NAME
60      INTEGER SEARCH
70      DIMENSION AUS (113), JJ(10), KI(10), IIZ(10)
80      DIMENSION WIGR(M1 ), NP(M1 ),          IORD(M1 ), NAME(2, M1 ), A(18)
90      DATA BLANK, STERN, WAAG, SENK/' ', '*','-', 'I' /
100     LOGICAL PIP1, PAPA, TOT, ABST, POPO, KON(150), BERG , PEPE, PAPE
110     DO 12  I = 1, 150
120     12  KON(I) = . TRUE.
130         IF(IABS(KSS). NE. 2) GOTO 13
140         DO 14  I = 1, M
150         IF(WIGR(I). GT. 1. ) WIGR(I) = 1.
160         14  WIGR(I) = ARCOS(WIGR(I))
170         KSS = KSS/2
180         13  CALL AUSS(AUS, 1, 113, BLANK)
190         NAM = 2
200         MI = M-1
210         IORD(M+1) = 0
220         WIGR(M+1) = 0.
230         IH = SEARCH(IORD, MI)
240         TOTY = WIGR(IH)
250         TOTO = TOTY
260         IF(KSS. NE. 0) TOTO = COS(TOTY)
270         SCAY = 112. /TOTY
280         WRITE(NAM, 11) (A(I), I=1, 18)
290         11  FORMAT(1H1, 5X, 18A4)
300         IF(KSS) 2015, 2016, 2017
310         2015 WRITE(NAM, 2005)
320         GOTO 2018
330         2016 WRITE(NAM, 2006)
340         GOTO 2018
350         2017 WRITE(NAM, 2007)
360         2018 WRITE(NAM, 2019) TOTO
370         2999 WRITE(NAM, 121)
380         121 FORMAT(1H0, 30X, 'FINAL RESULTS'///' NUMBER', 1X, 'SIMIL.' 2X,
390         1'ORDER' 8X'NAME')
400         KS = NP(1)
410         2019 FORMAT(1H , 'GERINGSTE AEHNLICHKEIT = 'F6. 4)
420         IWGR = (WIGR(2)*SCAY)+1.
430         CALL AUSS(AUS, 1, IWGR-1, WAAG)
440         AUS(IWGR) = SENK
450         WRITE(NAM, 81) KS, (NAME(L, KS), L=1, 2), AUS
460         81  FORMAT(1H , I4, 20X,  2A4,  4X, 'I', 113A1)
470         KIII = 0
480         IZ = 0
490         KO = 1
500         IBERG = 1
510         TOT = . TRUE.
520         PAPA = . TRUE.
530         BERG = . TRUE.
540         DO 4020  MO = 1, 10
550         KI(MO) = M
560         JJ(MO) = MI
570         4020 IIZ(MO) = 1
580         DO 3000  I = 2, M
590         WIGK = WIGR(I)
600         IF(KSS. NE. 0) WIGK = COS(WIGR(I))
610         IWGR = (WIGR(I)*SCAY)+1.
620         IWGR2 = (WIGR(I+1)*SCAY)+1.
630         CALL AUSS(AUS, 1, IWGR-1, BLANK)
640         KS = NP(I)
650         IF(IORD(I). GT. IORD(I+1))GOTO 2500
660         ABST = . TRUE.
670         AUS(IWGR) = SENK
680         AUS(IWGR2) = SENK
```

```
690      IF(PAPA) GOTO 2040
700      IF(IWGR2.LT. IZ. OR. IZ. EQ. 1) GOTO 2040
710      CALL AUSS(AUS, IWGR+1, IZ-1, WAAG)
720      GOTO 2900
730 2040 IF(.NOT. KON(I+1))          GOTO 2900
740      CALL AUSS(AUS, IWGR+1, IWGR2-1, WAAG)
750 2900 WRITE(NAM, 181) WIGK, IORD(I), AUS
760      181 FORMAT(1H 5X, F8. 4, 5X, I3, 15X, 'I', 113A1)
770      CALL AUSS(AUS, 1, IWGR-1, WAAG)
780      IF(PAPA) GOTO 2050
790      IF(IWGR2.LT. IZ. OR. IZ. EQ. 1) GOTO 2050
800      CALL AUSS(AUS, IWGR+1, IZ, BLANK)
810      AUS(IZ) = BLANK
820      GOTO 2086
830 2050 CALL AUSS(AUS, IWGR+1, IWGR2-1, BLANK)
840 2086 WRITE(NAM, 81) KS, (NAME(L, KS), L=1, 2), AUS
850      PAPA = .TRUE.
860      GOTO 3000
870 2500 CONTINUE
880      IF(.NOT. ABST) GOTO 2060
890      WRITE(NAM, 85) AUS
900      85 FORMAT(1H 36X, 'I', 113A1)
910      WRITE(NAM, 85) AUS
920      ABST = .FALSE.
930 2060 PIFI = .TRUE.
940      POPO = .TRUE.
950      AUS(IWGR) = SENK
960      IF(WIGR(I).EQ. TOTY) TOT = .FALSE.
970      IF(I.EQ. M) GOTO 2077
980      IF(IBERG.EQ. 1. OR. .NOT. PAPA) GOTO 4040
990      DO4030 MO = 1, IBERG
1000     IF(I.EQ. JJ(MO))          GOTO 4015
1010 4030 CONTINUE
1020     GOTO 4040
1030 4015 BERG = .FALSE.
1040     IBERG = IBERG-1
1050     IZ = IIZ(MO)
1060     JJ(MO) = MI
1070     IIZ(MO) = 1
1080     PAPA = .FALSE.
1090     GOTO 4100
1100 4040 IEND = KI(IBERG) - 1
1110     DO 4050 MO= I, IEND
1120     IF(IORD(MO).GT. IORD(I))          GOTO 4060
1130 4050 CONTINUE
1140 4060 KI(IBERG+1) = MO
1150 4100 KII = KI(IBERG+1)-1
1160     IF(KII.GT. KIII) KIII = KII
1170     II = I+1
1180     IMAX = IORD(I+1)
1190     DO 4070 MO = II, KII
1200     IF(IORD(MO).GT. IMAX) GOTO 4080
1210     GOTO 4070
1220 4080 IMAX = IORD(MO)
1230     JJ(IBERG+1) = MO
1240 4070 CONTINUE
1250     IF(IMAX.EQ. IORD(II)) GOTO 2065
1260     IJ = JJ(IBERG+1)-1
1270     DO 4090 MO = II, IJ
1280     IF(IORD(MO).LT. IORD(MO+1). AND. IORD(MO+1).NE. IMAX) GOTO 4110
1290 4090 CONTINUE
1300     GOTO 2065
1310 4110 DO 4120 MO = II, IJ
1320     IF(IORD(MO).GT. IORD(MO+1). AND. IORD(MO+1).LT. IMAX) GOTO 4130
1330 4120 CONTINUE
1340     GOTO 2065
1350 4130 IBERG = IBERG+1
1360     IIZ (IBERG) = IWGR
1370     KO = KI(IBERG)
1380     IF(.NOT. KON(KO))          PAPA = .FALSE.
1390     KON(KO) = .FALSE.
1400     BERG = .TRUE.
1410     IF(.NOT. PAPA)          GOTO 2070
1420     IF(TOT) GOTO 2106
1430     PAPA = .FALSE.
1440     GOTO 2070
1450 2065 IF(.NOT. PAPA)          GOTO 2070
1460     DO 2090 MO = I, KII
```

```
1470      IF(IORD(MO).LT.IORD(MO+1).AND.IORD(MO+1).GT.IORD(I))GOTO 2085
1480      GOTO 2090
1490 2085 IF(KON(MO+1))          GOTO 2101
1500      POPO = .FALSE.
1510      GOTO 2090
1520 2101 IF(IORD(MO+1).GT.IORD(KO)) GOTO 2100
1530 2090 CONTINUE
1540      PAPA = .FALSE.
1550      GOTO 2070
1560 2100 KO = MO+1
1570      KON(MO+1) = .FALSE.
1580 2105 IF(POPO) GOTO 2106
1590      IWGR4 = IWGR3+1
1600      GOTO 2107
1610 2106 IWGR4 = IWGR
1620 2107 IWGR3 = (WIGR(KO)*SCAY)
1630      IF(WIGR(KO).EQ.TOTY) TOT = .FALSE.
1640      CALL AUSS(AUS,IWGR4+1,IWGR3,WAAG)
1650      AUS(IWGR3+1) = SENK
1660 2070 IF(IZ.LT.IWGR)GOTO 2080
1670      DO 2075 MO = I,KIII
1680      IWGR5 = (WIGR(MO)*SCAY)+1
1690 2075 IF(IWGR5.GT.IWGR)          GOTO 2076
1700      GOTO 2077
1710 2076 IF(IWGR5.LT.IZ) GOTO 2140
1720 2077 CALL AUSS(AUS,IWGR+1,IZ-1,WAAG)
1730      PIPI = .FALSE.
1740      GOTO 2140
1750 2080 IZ = IWGR
1760 2140 WRITE(NAM,181) WIGK,IORD(I),AUS
1770      IF(I.NE.M) GOTO 2120
1780      CALL AUSS(AUS,1,IWGR-1,WAAG)
1790      GOTO 2130
1800 2120 CALL AUSS(AUS,1,IWGR2-1,WAAG)
1810      AUS(IWGR2) = SENK
1820 2130 IF(PIPI) GOTO 2150
1830      CALL AUSS(AUS,IWGR+1,IZ,BLANK)
1840      AUS(IZ) = BLANK
1850      IZ = IWGR
1860 2150 AUS(IWGR) = SENK
1870      IF(.NOT.PAPA)          GOTO 2151
1880      CALL AUSS(AUS,IWGR4+1,IWGR3,BLANK)
1890 2151 IF(.NOT.BERG) GOTO 124
1900      IF(IBERG.LE.1) GOTO 124
1910      BERG = .FALSE.
1920      IZ = 1
1930      KO = 1
1940 124 WRITE(NAM,81) KS,(NAME(L,KS),L=1,2),AUS
1950      PAPA = .FALSE.
1960 3000 CONTINUE
1970 2005 FORMAT(1H0'SIMILARITY MATRIX IS COSINUS THETA COEF.')
1980 2006 FORMAT(1H0'SIMILARITY MATRIX IS EUKLIDIAN DISTANCE')
1990 2007 FORMAT(1H0'SIMILARITY MATRIX IS CORRELATION COEFFICIENT')
2000      RETURN
2010      END
2020      SUBROUTINE AUSS(AUS,IBEG,IEND,SYMB)
2030      DIMENSION AUS(1)
2040      IF((IEND-IBEG).LT.0) RETURN
2050      IF((IEND-IBEG).NE.0) GOTO 5
2060      AUS(1) = SYMB
2070      RETURN
2080 5 DO 10 I = IBEG,IEND
2090 10 AUS(I) = SYMB
2100      RETURN
2110      END
```

LITERATURVERZEICHNIS

- ANDERBERG, M.R. (1973): Cluster Analysis for Applications.- 359 S., (Academic Press), New York - San Francisco - London
- BETTENSTEDT, F. (1968): Wechselbeziehungen zwischen angewandter Mikropaläontologie und Evolutionsforschung.- Beih. Ber. Naturh. Ges., 5 (Keller-Festschrift), 337 - 391, Hannover
- BLACKITH, R.E. & REYMENT, R.A. (1971): Multivariate Morphometrics.- 412 S., (Academic Press), London - New York
- BRINKMANN, R. (1929): Statistisch-biostratigraphische Untersuchungen an mitteljurassischen Ammoniten über Artbegriff und Stammesentwicklung.- Abh. Ges. wiss. Göttingen, math. phys. Kl., N.F., 13, 3, 249 S., Berlin
- COLE, A.J. (1969): Numerical Taxonomy.- Proceedings of the Colloquium in Numerical Taxonomy held in the University of St. Andrews, September 1968, 324 S., (Academic Press), New York
- DAVIS, J.C. (1973): Statistics and Data Analysis in Geology.- 550 S., (Wiley & Sons), New York - London - Sydney - Toronto
- GERHARDT, H. (1963): Biometrische Untersuchungen zur Phylogenie von Haplophragmium und Triplasia (Foram.) aus der tiefen Unterkreide Nordwestdeutschlands.- Boll. Soc. Paleont. Italiana, 2, 2, 9 - 74, Modena
- GRABERT, B. (1959): Phylogenetische Untersuchungen an Gaudryina und Spiroplectinata (Foram.) besonders aus dem nordwestdeutschen Apt und Alb.- Abh. Senckenberg. naturf. Ges., 489, 71 S.; Frankfurt a.M.
- HILGENDORF, F. (1866): Ober Planorbis multiformis im Steinheimer Süßwasserkalk.- Monatsber. d. k. pr. Akad. Wiss., Berlin
- HYATT, A. (1880): The Genesis of the Tertiary species of Planorbis at Steinheim.- Anniversary Mem., Boston Soc. Nat. hist., Boston
- KLAHN, H. (1923): Paläontologische Methoden und ihre Anwendung auf die paläobiologischen Verhältnisse des Steinheimer Beckens.- Berlin
- LINDENBERG, H.G. (1967): Untersuchungen an lituoliden Foraminiferen aus dem SW-deutschen Dogger, 2: Die Arten von Haplophragmium und Triplasia.- Abh. senckenberg. naturf. Ges., 514, 74 S., Frankfurt a.M.
- MCCAMMON, R.B. & WENNINGER, G. (1970): The Dendrograph.- Comp. Contrib., 48, 1 - 28, Lawrence, Kans.
- MENSINK, H. (1967): Zur Entstehungsgeschichte der tertiären Planorben aus dem Steinheimer Becken in Süddeutschland.- 66 S., Habilitationsschrift Ruhr-Universität Bochum
- MICHAEL, E. (1966): Die Evolution der Gavelliniden (Foram.) in der NW-deutschen Unterkreide.- Senck. leth., 47, 5,6, 411 - 459, Frankfurt a.M.
- OXFORD, J.D. (1976): Implementation of Criteria for Partitioning a Dendrograph.- J. intern. Assoc. Math. Geol., 8, 1, 75 - 84, New York
- SCOTT, G.H. (1974): Biometry of the foraminiferal shell.- In: HEDLEY, R.H. & ADAMS, C.G. (Eds.) (1974): Foraminifera.- vol. 1, 55 - 152, (Academic Press), London - New York
- SNEATH, P.H. & SOKAL, R.R. (1973): Numerical Taxonomy. The principles and practice of numerical classification.- 571 S., (W.H. Freeman & Co.), San Francisco
- SOKAL, R.R. & ROHLF, F.J. (1969): Biometry. The principles and practice of statistics in biological research.- 776 S., (W.H. Freeman & Co.), San Francisco
- TYRON, R.C. & BAILEY, D.E. (1970): Cluster Analysis.- 347 S., (McGraw Hill Book Comp.), New York

SURFACE II, EIN GRAPHISCHES COMPUTER-SYSTEM

von

JOAO LUIS PENA⁺

ZUSAMMENFASSUNG

Das an der CYBER 175 des Wissenschaftlichen Rechenzentrums Berlin (WRB) adaptierte Software-System SURFACE II wird vorgestellt. Es werden Beispiele für die verschiedenen Anwendungsmöglichkeiten dieses Programmpaketes gegeben.

SUMMARY

The computer software system SURFACE II, adapted at the "Wissenschaftliches Rechenzentrum Berlin" (WRB) is introduced. Examples of the various applicabilities of this package are given.

РЕЗЮМЕ

Представлен пакет программного обеспечения "SURFACE II", с которым работает вычислитель CYBER 175 Научного вычислительного центра в Зап. Берлине. Показаны примеры разных возможностей применения этой программы.

1. EINLEITUNG

SURFACE II ist ein Software-System zur graphischen Darstellung räumlich verteilter Daten. Die uns zur Überarbeitung vorgelegte Fassung des Systems wurde von R.J. SAMPSON 1975 entwickelt. Ein einfaches Beispiel räumlich verteilter Daten stellen Höhenmessungen der Erdoberfläche dar. Die geographischen Koordinaten der Kontrollpunkte bilden zwei Variablen: X und Y, und die Höhe, beispielsweise vom Meeresniveau aus gemessen, stellt eine dritte Variable, Z, dar.

SURFACE II erzeugt graphische Darstellungen, denen die kontinuierliche Form der Variablen Z im Areal, das die Kontrollpunkte enthält, zu entnehmen ist. Die Einsatzmöglichkeiten des Systems sind vielfältig; folgende Einschränkungen sind jedoch zu beachten:

- Das (X, Y)-Koordinatensystem muß orthogonal sein
- Die kartierte Variable darf nur Einzelwerte umfassen.

⁺ Anschrift des Verfassers: Joao Luis Pena, Institut für Geologie d. FU Berlin,
1000 Berlin 33, Altensteinstr. 34A.

Die wichtigste graphische Darstellungsart von SURFACE II ist die Konturkarte, in der die abhängige Variable Z in Form von Linien gleichen Variablenwertes im (X, Y)-Koordinatensystem ausgedrückt wird. Eine Konturlinie ist somit eine Linie, die alle Punkte der Fläche miteinander verbindet, die denselben Wert der Variablen Z besitzen.

SURFACE II erzeugt zudem perspektivische Blockdiagramme. Diese können als ein deformiertes rechteckiges Maschenwerk angesehen werden, indem die Abstände zwischen den Linien einheitlichen Inkrementen der Variablen X und Y entsprechen. Perspektivische Betrachtungen von jedem gewünschten Blickwinkel aus sind möglich. Blockdiagramme können auch als Stereopaare gezeichnet werden.

Eine weitere Möglichkeit bietet SURFACE II durch die Darstellung der Variablen Z im Streudiagramm, indem diese entsprechend ihrer (X, Y)-Koordinaten in Form gewünschter Drucksymbole aufgetragen werden.

Konturkarten und Streudiagramme können über Schnelldrucker und Plotter ausgegeben werden, perspektivische Blockdarstellungen nur über Plotter.

Zwei Eingabedateien müssen vom Benutzer kreiert werden; eine Datei enthält die (X, Y, Z)-Datentripel in einem vom Benutzer frei wählbaren Format, die andere Datei die SURFACE II - Kommandos, mit denen die gewünschten Rechenverfahren und Ausgaben gesteuert werden. Der Aufbau der Kommandos ist einheitlich und übersichtlich. Er enthält neben dem Kommando-Namen eine Reihe von Spezifikationen, die genauere Anweisungen hinsichtlich der Ausführung der Kommandos geben.

2. ÜBERSICHT ÜBER DIE WICHTIGSTEN RECHENVERFAHREN

Grundlage aller Rechenoperationen in SURFACE II bildet die Erstellung eines rechteckigen, äquidistanten Gitters, das die graphisch darzustellende Fläche numerisch repräsentiert. Das Gitter bildet eine Matrix, die Messungen der Variablen Z an den durch die (X, Y)-Koordinaten bestimmten Gitterpunkten enthält.

Der Aufbau des regelmäßigen Gitters kann in SURFACE II nach zahlreichen, unterschiedlichen Methoden erfolgen. Von diesen werden in der vorliegenden kurzen Übersicht einige wichtige ausgewählt und an Hand von Beispielen erläutert. Das Datenmaterial hierzu stellen Inkohlungsgrad-Bestimmungen durch Messung des Reflexionsvermögens nach KALKREUTH 1976 dar. Diese wurden an Proben aus insgesamt 182 Meßpunkten in einem 2279 km² großen Areal im Bereich des Ostsauerländer Hauptsattels (Rheinisches Schiefergebirge) durchgeführt. Das Reflexionsvermögen der analysierten Proben variiert generell zwischen 0.4% (Braunkohle) und 6% (Anthrazit). Die Auswertung der Daten ermöglichten KALKREUTH 1976 Aussagen unter regionalgeologisch-paläogeographischen Aspekten.

3. GLOBALER FIT (TRENDFLÄCHEN-ANALYSE)

Zur Erstellung des regelmäßigen Gitters werden sämtliche zur Verfügung stehende Daten verwendet. Eine globale Anpassung erfolgt über Polynomial-Entwicklungen mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate

$$z_k = b_0 + b_1 x_k + b_2 y_k + b_3 x_k^2 + b_4 x_k y_k + b_5 y_k^2 + \dots e_k \quad (1)$$

wobei e_k einen Zufallsfehler darstellt, der ausgeglichen werden soll. Eine Trendflächenanalyse 5. Grades der Inkohlungsmessungen zeigt Abb. 1, das zugehörige Blockdiagramm ist aus Abb. 2 ersichtlich.

Nachteile dieser Methode liegen unter anderem darin, daß durch die Ausgleichung gegenüber den natürlichen Verhältnissen oft sehr einfache Flächen errechnet werden und außerdem gehen in die Schätzung eines Gitterpunktes sämtliche Datenpunkte mit gleichem Gewicht ein. Die Einfachheit der errechneten Flächen kann jedoch auch einen Vorteil darstellen, etwa, wenn eine regionale Struktur gesucht wird und lokale Anomalien hervorgehoben werden sollen.

Dieser Vorteil ist bei den Inkohlungsmessungen von Interesse, da hier eine Auswertung unter regionalem Aspekten stattfinden soll. Die Trendfläche 2-ten Grades zeigt ein Inkohlungsmaximum im Zentrum des Gebietes. In der Trendfläche 5-ten Grades (Abb. 1) ist neben diesem Maximum eine Zunahme der Inkohlung nach Norden und Westen erkennbar.

Der multiple Korrelationskoeffizient, der ein Maß für die Anpassung der Trendflächen an die Daten darstellt, nimmt für den Trend zweiten Grades den Wert 0.64 an, für den Trend 5-ten Grades beträgt er 0.74. Der gegebenen Anzahl von Datenpunkten entsprechend kann in beiden Fällen von einer signifikanten Anpassung gesprochen werden.

4. LOKALER FIT

Die Knotenpunkte des Gitters werden aus den n nächstliegenden Punkten der Umgebung errechnet. Unterschiedliche Umgebungsmuster können gewählt werden. Die zur Schätzung z_k herangezogenen n Punkte z_i der Umgebung werden auf verschiedene Art gewichtet (w_i).

$$z_k = \sum_{i=1}^n w_i z_i \quad (2)$$

Wichtungen - beispielsweise mit dem inversen Quadrat der Entfernung $1/D^2$ - liefern Interpolationslösungen, da sie Flächen liefern, die durch die Schätzpunkte hindurchgehen (Abb. 3 und 4).

Eine errechnete Matrix kann zusätzlich geglättet werden. Auch hier werden die n nächstliegenden Knotenpunkte des zu glättenden Punktes berücksichtigt.

$$z_{c, r} = \frac{\sum_{i=-k}^k \sum_{j=-m}^m w_{ij} z_{c+1, r+j}}{\sum_{i=-k}^k \sum_{j=-m}^m w_{ij}} \quad (3)$$

5. KRIGING (KRIGEAGE)

Durch die Berücksichtigung der Autokorrelation der Stützpunkte erzielt man mit Hilfe des Krigings eine optimale Schätzung der Gitterpunkte. Diese Methode verlangt die vorherige Berechnung des Semivariogramms. Das Semivariogramm ist eine Funktion der Kovarianz der ortsabhängigen Variablen und der Entfernung der Stützstellen.

Dieser Rechenvorgang fehlt im graphischen System SURFACE II; er muß mit Hilfe eines anderen Programms ergänzt werden. Als Modell des Semivariogramms wird von SURFACE II lediglich ein lineares Modell berücksichtigt, dagegen wird polynomiale Drift mit einbezogen (universal kriging). Ein großer Vorteil dieses Verfahrens liegt darin, daß neben der Karte der Schätzwerte auch eine Karte der Schätzfehler errechnet und gezeichnet werden kann. Im übrigen sei hier auf SCHOELE (1979) verwiesen.

Abb. 7 und 8 zeigen die entsprechenden Konturkarten der Inkohlungsmessungen nach KALKREUTH (1976).

LITERATURVERZEICHNIS

- KALKREUTH, W. (1976): Kohlenpetrologische und geochemische Untersuchungen an organischem Material paläozoischer Sedimentgesteine aus der variskischen Geosynklinale.- 139 S., Unveröff. Diss. RWTH Aachen
- SAMPSON, R.J. (1975): SURFACE II Graphics System.- Series on Spatial Analysis, 1, 240 S., (Kansas Geological Survey), Lawrence, Kans.
- SCHOELE, R. (1979): Geostatistik - Ein System von Rechenprogrammen zur Theorie der ortsabhängigen Variablen.- Berl. Geowiss. Abh., A15, Berlin (im Druck)

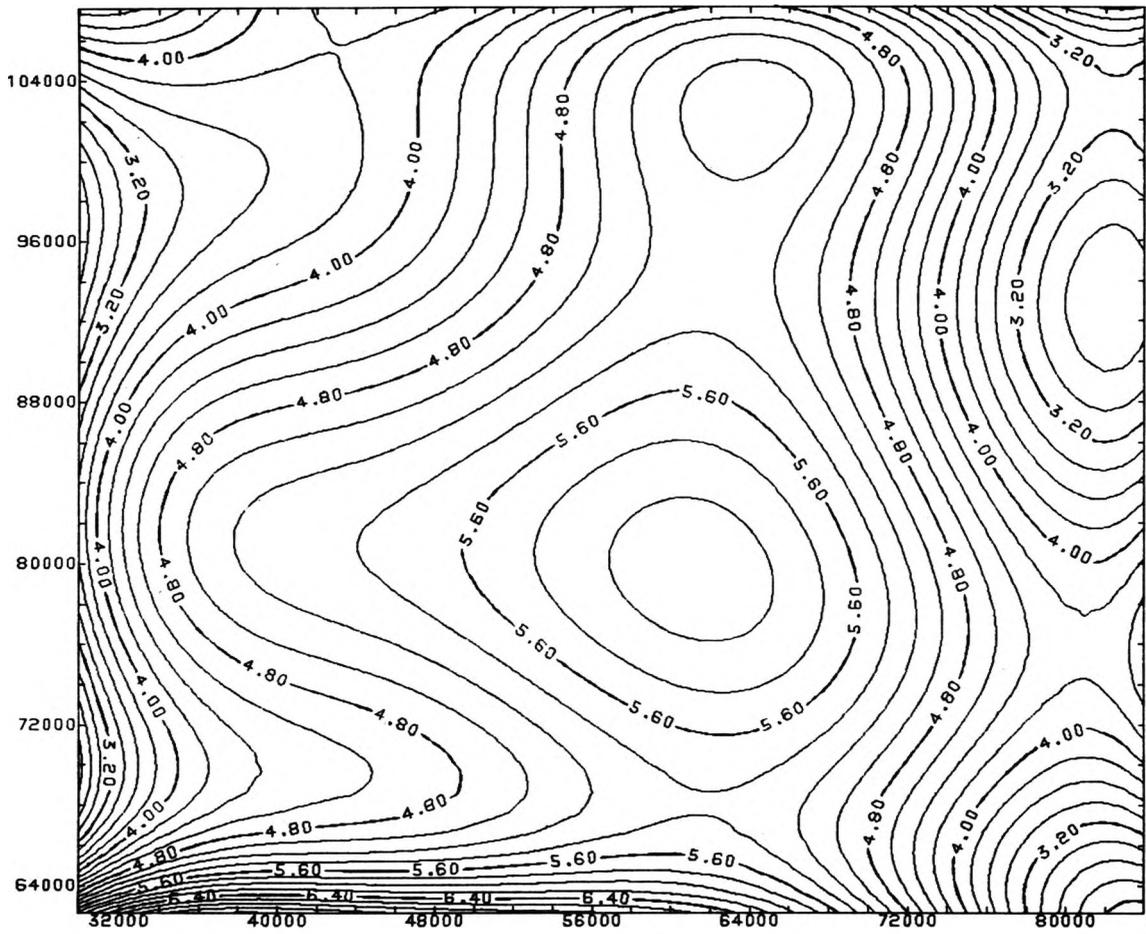


Abb. 1: Trendflächenanalyse 5. Grades, erstellt mit dem Software-System SURFACE II (Datenmaterial aus KALK=REUTH (1976))

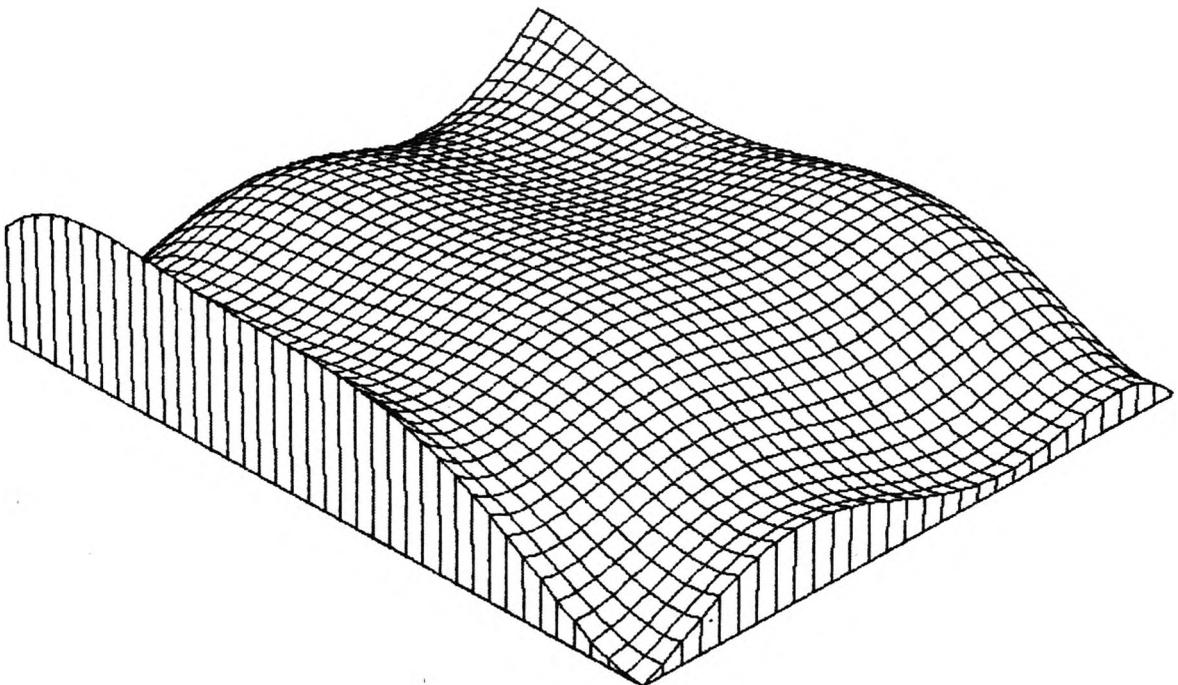


Abb. 2: Blockbild zu Abb. 1

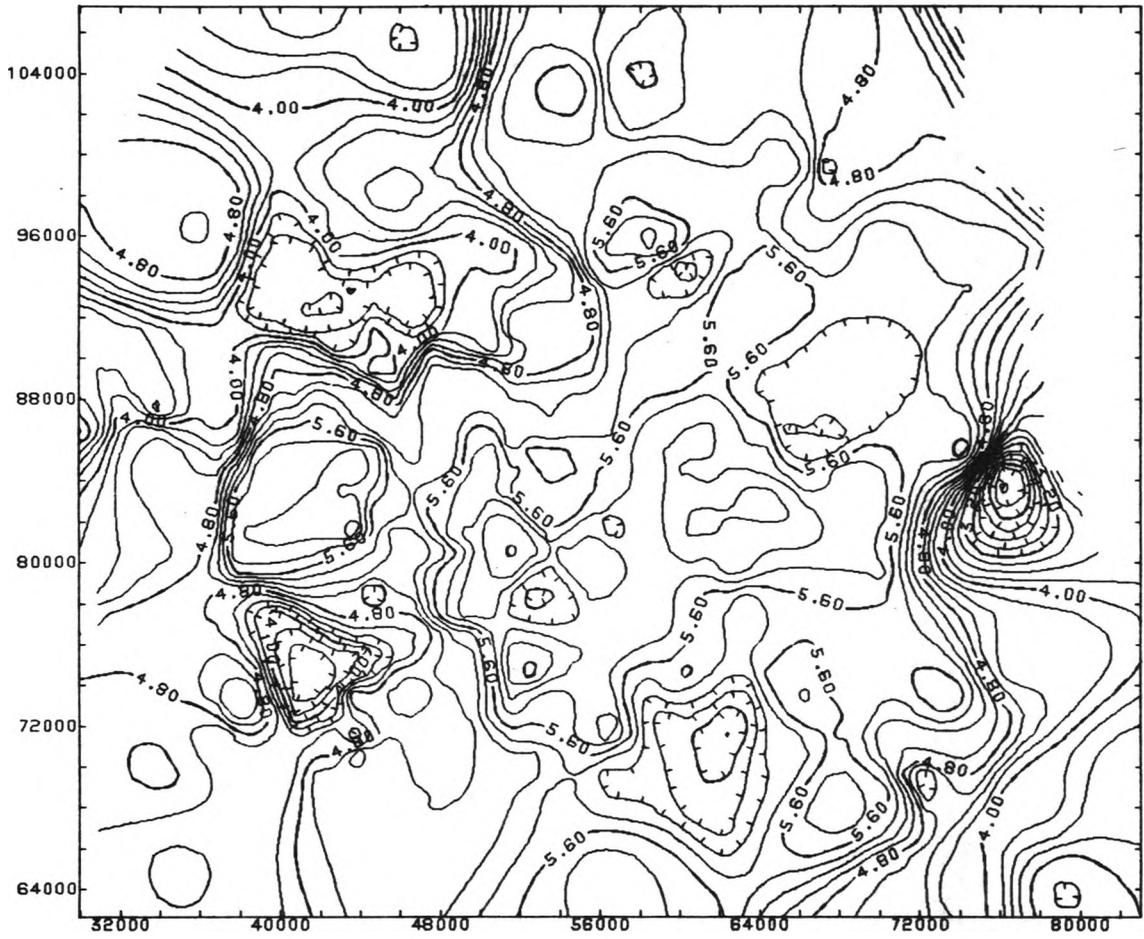


Abb. 3: Lokaler fit, nicht geglättet; erstellt mit dem Software-System SURFACE II (Datenmaterial aus KALKREUTH (1976))

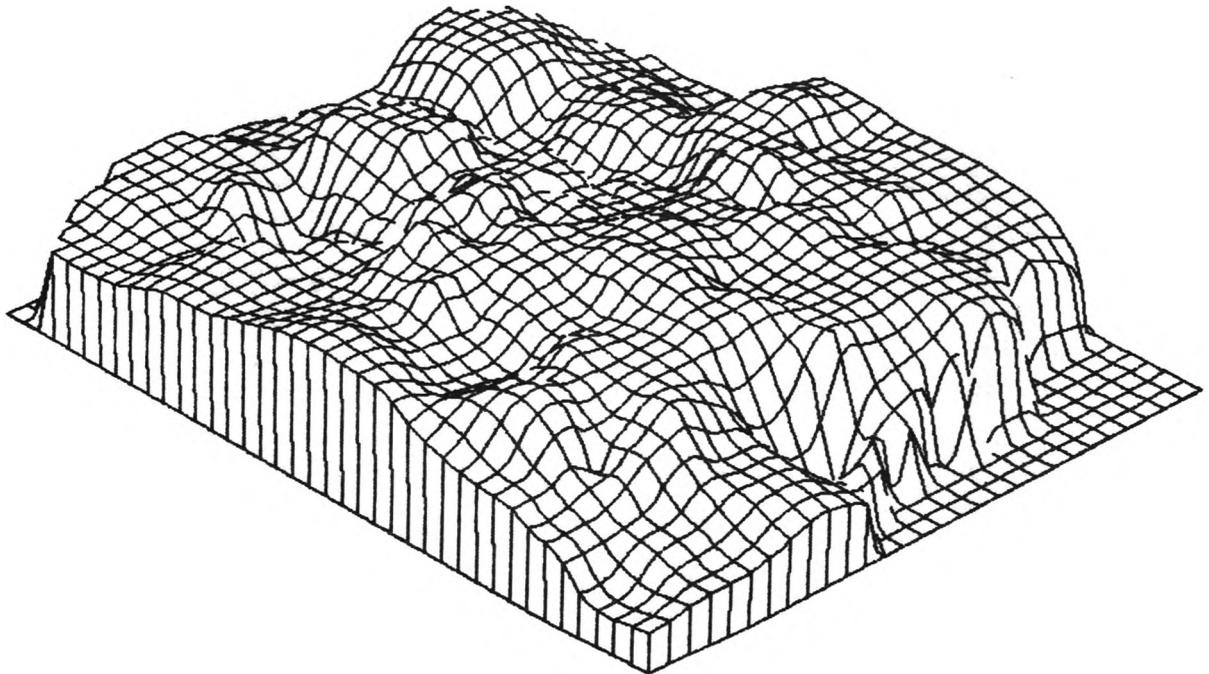


Abb. 4: Blockbild zu Abb. 3

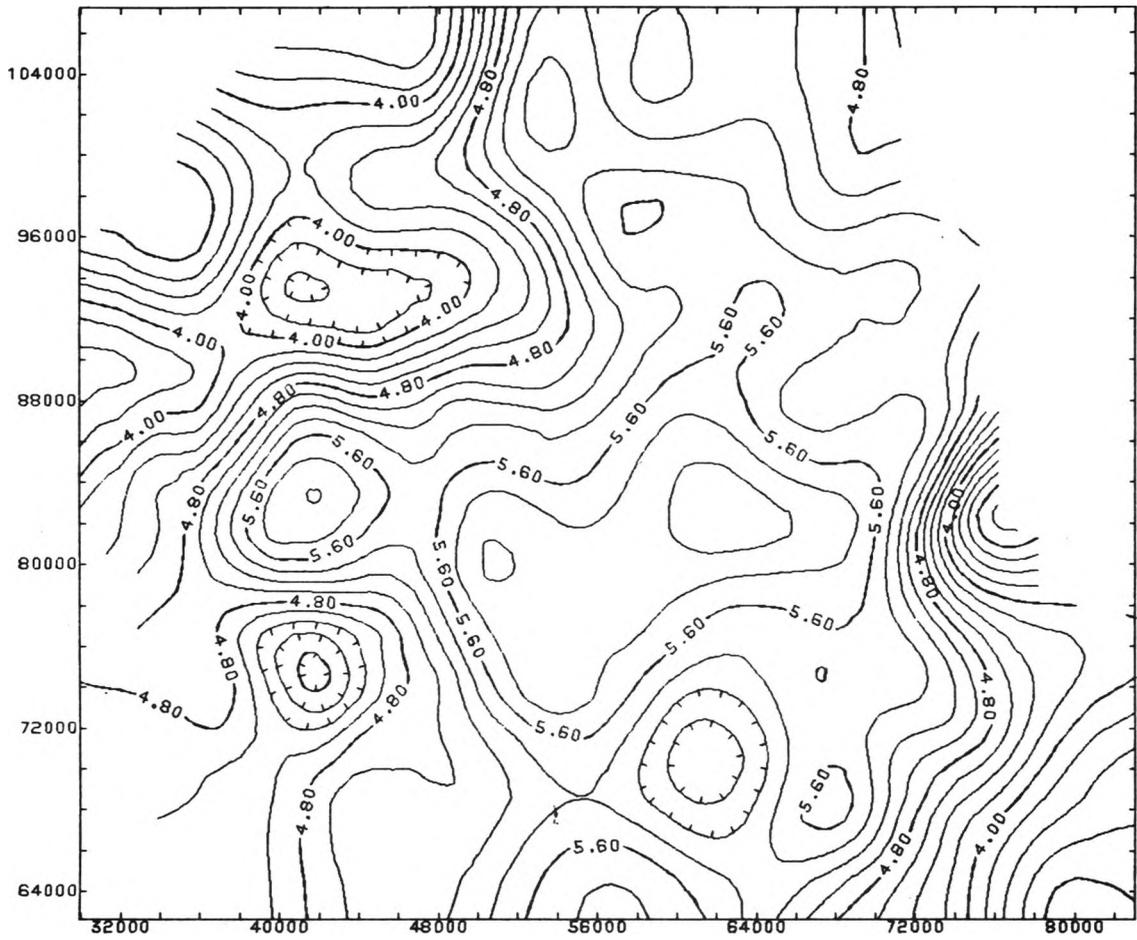


Abb. 5: Lokaler fit, geglättet; erstellt mit dem Software-System SURFACE II (Datenmaterial aus KALKREUTH (1976))

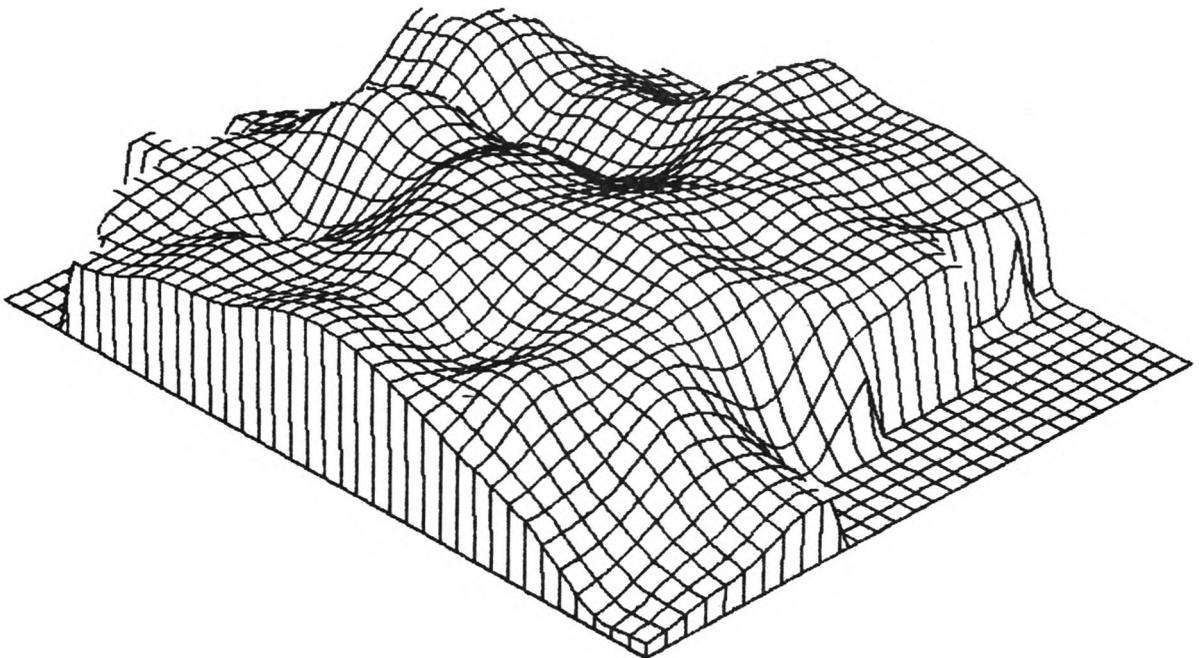


Abb. 6: Blockbild zu Abb. 5

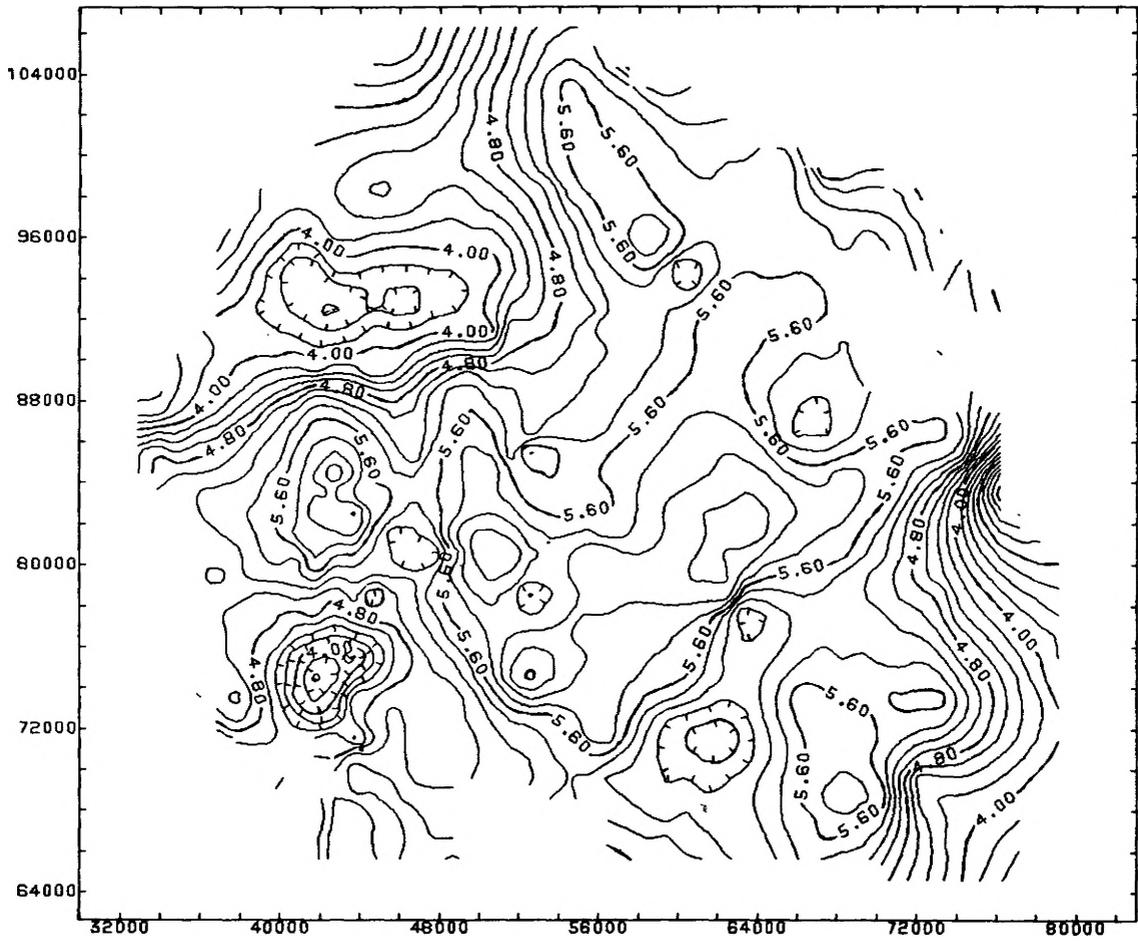


Abb. 7: Kriging mit dem Software-System SURFACE II (Datenmaterial aus KALKREUTH (1976))

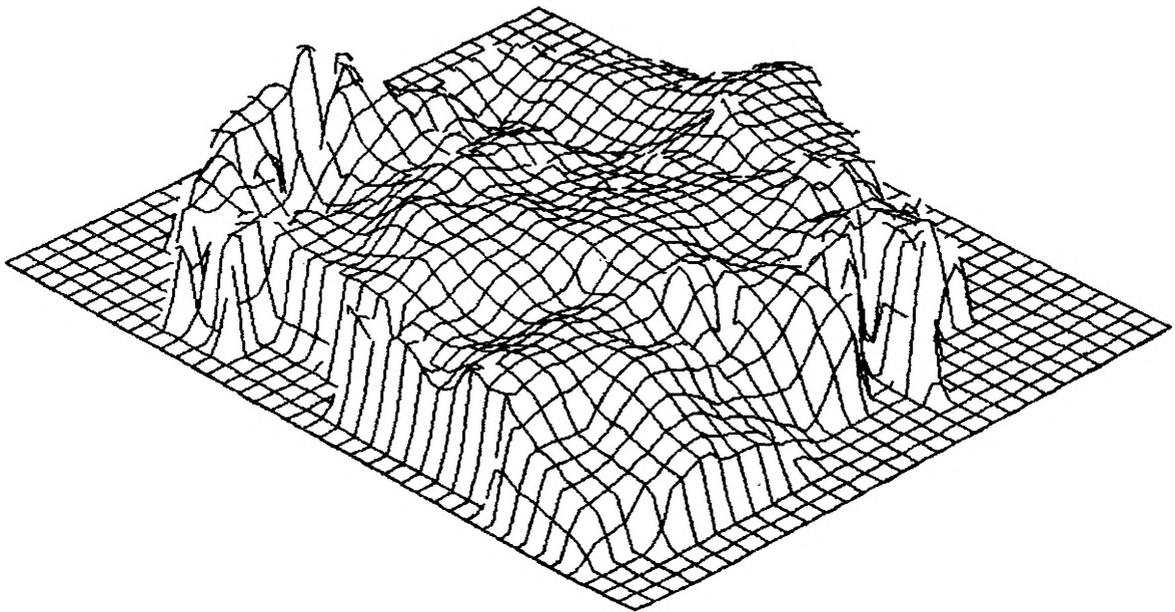


Abb. 8: Blockbild zu Abb. 7

DIE ANWENDUNG EINER METHODE GLEITENDER GEWICHTETER
MITTELWERTE AUF DIE VORRATSBERECHNUNG EINER
GANGERZLAGERSTÄTTE

von

RENE PRISSANG⁺

ZUSAMMENFASSUNG

Bei einer Lagerstättenvorratsberechnung mit Hilfe einer Methode gleitender gewichteter Blockmittelwerte werden die Erzgehalte in den unbekanntem Abbauelementen aus denen der benachbarten beprobten Blöcke berechnet. In einem bereits abgebauten Teil der Grubenanlage, in dem eine ähnliche geologische Situation wie im unbekanntem Baufeld vorliegt, wird die gleitende Mittelwerts-Gleichung über eine multiple lineare Regression der Erzmengen in den Nachbarblöcken auf das zentrale Element aufgestellt. Da meist nicht jeder Block im zum Abbau vorgesehenen Gebiet beprobt werden kann, wechselt die Anzahl und die Lage der nächsten Nachbarn und damit auch die Zahl der Regressionskoeffizienten ständig. Es besteht die Möglichkeit, neben der Karte der wahrscheinlichen Erzgehalte eine Karte der Schätzvarianzen zu erstellen. Die Schätzvarianz findet außerdem bei der Bestimmung der sicheren und angedeuteten Vorräte Verwendung.

SUMMARY

According to a weighted moving average technique, estimated ore grades are a function of the mean ore grades in the adjacent sampled blocks. The weights attached to the block means are determined by a multiple linear regression of the mean ore grades of the neighbouring blocks on the grade of the central element in the so called training area (i.e. an already mined out part of the deposit with a geological situation similar to that in the unknown area). As it is not feasible to sample each block in the unknown area, the positions and numbers of the adjacent elements change with each step. Maps of the estimated ore grades and of the estimation variances can be drawn. The estimation variance is used to calculate the indicated and inferred reserves.

РЕЗЮМЕ

Содержание руды в неизвестных эксплуатационных элементах вычисляется из содержаний блоков калькуляцией запасов при помощи метода взвешенных средних значений смежного блока. В уже эксплуатационной части шахты, в которой имеется подобная геологическая ситуация как в неизвестном выемочном поле, составлено скользящее уравнение средних значений при применении множественной линейной регрессии количества руды в смежных блоках над центральным элементом. Так как не возможно взять пробы от каждого блока в эксплуатационной области, постоянно изменяется количество и залегание смежных блоков и также число коэффициентов регрессий. Кроме карты предположительного содержания руды, возможно разработать карту с оценкой дисперсии. Кроме того применяется оценка дисперсии для определения верных и предположительных запасов.

⁺ Anschrift des Verfassers: René Prissang, Institut für Geologie d. FU Berlin
1000 Berlin 33, Altensteinstr. 34A.

1. EINLEITUNG

Seit der Entwicklung moderner elektronischer Rechenanlagen können große Datenmengen in kurzer Zeit verarbeitet werden. Damit waren die Voraussetzungen für eine breite Anwendung statistischer Methoden in Wissenschaft und Forschung geschaffen. In der Lagerstättenvorratsberechnung begann man neben geometrischen auch statistische Verfahren einzusetzen. Oft lieferten die Schätzungen nur wenig zufriedenstellende Ergebnisse, da alle Proben als Zufallswerte betrachtet wurden und außerdem die Anordnung der Probenpunkte im Raum unberücksichtigt blieb (klassische Statistik).

KRIGE (1951) wies auf den Aspekt der Ortsabhängigkeit der Proben (Regionalisierung) hin und legte die theoretischen Grundlagen für alle Methoden gleitender gewichteter Blockmittelwerte. Auf dieser Basis konnte MATHERON (1971) die Theorie der regionalisierten Variablen aufstellen. Er führte das Variogramm zur Untersuchung von Datenstrukturen in die Lagerstättenvorratsberechnung ein und entwickelte das Schätzverfahren "Kriging" (siehe SCHOELE 1979 in diesem Heft).

Als Entscheidungsgrundlage für die Planung des selektiven Abbaus in einer Goldlagerstätte stellt KRIGE (1966) eine über die Methode gleitender gewichteter Mittelwerte berechnete Trendfläche der Erzgehalte von Abbaublöcken vor. In der Schätzgleichung werden die über eine multiple lineare Regressionsanalyse bestimmten Koeffizienten durch speziell auf die Blöcke bezogene Gewichte ersetzt. Eine Abschätzung größerer Gebiete, von denen nur die Randwerte bekannt sind, ist nicht durchgeführt worden.

Ein Schätzalgorithmus nach der Methode der gleitenden gewichteten Mittelwerte ist stets an einen Lagerstättentyp oder ein einziges Projekt gebunden. Um den Belangen des Gangerzbergbaus in Bad Grund (Oberharz) Rechnung zu tragen, mußte das von KRIGE (1966) beschriebene Verfahren stark modifiziert bzw. erweitert werden.

2.1 Theoretische Grundlagen

Alle Methoden gleitender gewichteter Mittelwerte gehen von der Annahme aus, daß die Varianz von Blockmittelwerten kleiner ist als die Varianz mehr oder weniger punktförmiger Proben. Bei zunehmender Probengröße verhält sich die Varianz nach Überschreitung eines kritischen Blockvolumens (V_{krit}) stabil (Abb. 1). Diese Gesetzmäßigkeit wurde erstmals von KRIGE (1951) im Zusammenhang mit Untersuchungen in südafrikanischen Goldfeldern erkannt.

Da in modernen bergbautechnischen Verfahren die Größe der Abbaublöcke oberhalb des "kritischen Blockvolumens" liegt, kann bei weiteren Berechnungen von Homoskedastizität, d.h. von gleichbleibenden Varianzen ausgegangen werden.

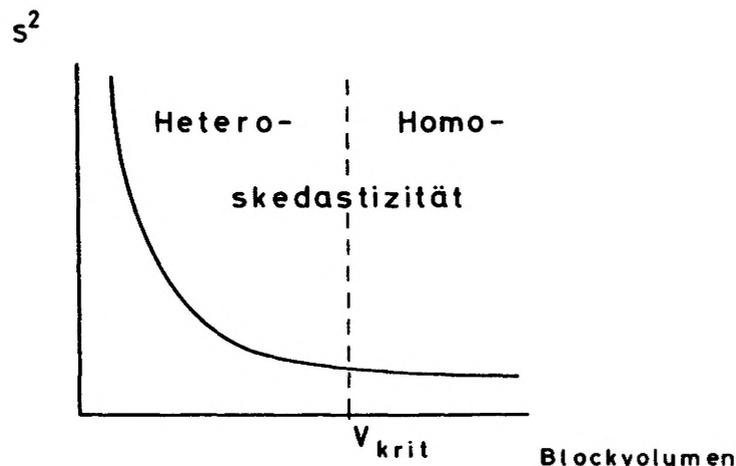


Abb. 1: Theoretische Änderung der Varianz bei zunehmendem Probenvolumen (nach DAVIS 1973)

KRIGE (1966) konnte weiterhin nachweisen, daß ein Schätzverfahren, das auch die Nachbarblöcke berücksichtigt, bessere Ergebnisse liefert, als eine Schätzung, die nur auf den Proben innerhalb eines Blockes beruht. Solche Schätzwerte sind für erzeiche Partien meist zu hoch, für erzarme dagegen zu niedrig. Werden die in einer geeigneten Umgebung liegenden Blöcke über eine Methode gleitender gewichteter Mittelwerte in die Berechnung des Schätzwertes einbezogen, verringert sich dieser systematische Fehler (Bias).

In der hier vorgestellten Methode wird zunächst eine Region als "Trainingsgebiet" (training area) ausgewählt, in der die Gewichte der gleitenden Mittelwerts-Gleichungen bestimmt werden. Sie muß sich in unmittelbarer Nähe des Zielgebietes befinden, d.h. des unbekanntem Bereichs, in dem die Schätzung durchgeführt werden soll. Die geologischen Verhältnisse (z.B. Lagerung, Erzführung, tektonischer Bau) dürfen nur geringfügig von denen der unbekanntem Region abweichen. Fällt die Wahl auf ein nicht geeignetes Trainingsgebiet, liefert der Schätzalgorithmus im Zielgebiet (target area) unbrauchbare Resultate. Es sei abschließend darauf hingewiesen, daß die Auswahl des Trainingsgebietes eine der wichtigsten Aufgaben des Geologen ist.

2.2 Aufstellung der Schätzgleichung

Für alle im Trainingsgebiet bestimmten Gewichte gilt:

$$\sum \beta = 1 \quad (1)$$

Die Berechnung der Gewichte β kann mit Hilfe der multiplen linearen Regression durchgeführt werden, die von folgendem Modellansatz ausgeht:

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i \cdot X_i + \epsilon \quad (2)$$

ϵ = Zufallsschwankung

Es ist somit nachstehendes Gleichungssystem zu lösen:

$$\begin{aligned} Y_1 &= \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i X_{1,i} \\ Y_2 &= \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i X_{2,i} \\ &\vdots \\ Y_m &= \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i X_{m,i} \end{aligned}$$

Die Koeffizienten werden nach Erstellung eines Systems von Normalgleichungen über die Methode der kleinsten Quadrate ermittelt:

$$\begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m & \sum x_1 & \dots & \sum x_m \\ \sum x_1 & \sum x_1^2 & \dots & \sum x_1 x_m \\ \sum x_2 & \sum x_2 x_1 & \dots & \sum x_2 x_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_m & \sum x_m x_1 & \dots & \sum x_m^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sum y \\ \sum x_1 y \\ \sum x_2 y \\ \vdots \\ \sum x_m y \end{bmatrix} \quad (3)$$

Ob das lineare Modell eine adäquate Vorstellung für die Datenstruktur im Trainingsgebiet ist, kann nicht aus den Regressionskoeffizienten geschlossen werden. Ein anschauliches Maß für die Qualität einer Regression stellt dagegen Güte der Anpassung (goodness of fit) dar. Um sie zu berechnen, wird für jeden Wert Y im

Trainingsgebiet ein Schätzwert \hat{Y} über die Regressionsgleichung bestimmt. Die Güte der Anpassung ergibt sich nach folgender Formel:

$$R^2 = \frac{s_{\hat{Y}}^2}{s_Y^2} = \frac{\sum_{i=1}^m \hat{Y}_i^2 - \frac{1}{m} \left(\sum_{i=1}^m \hat{Y}_i \right)^2}{\sum_{i=1}^m Y_i^2 - \frac{1}{m} \left(\sum_{i=1}^m Y_i \right)^2} \quad (4)$$

Sind die \hat{Y} -Werte gute Schätzungen, so liegt das Verhältnis der Varianzen nahe 1.

Der multiple Korrelationskoeffizient R, ein weiterer Kennwert für die Zuverlässigkeit einer Regression, ist als Quadratwurzel der Güte der Anpassung definiert:

$$R = \sqrt{R^2} \quad (5)$$

Um eine Schätzgleichung zu erhalten, die von einem eventuell vorhandenen Trend unabhängig ist, wird das absolute Glied β_0 durch Division durch den allgemeinen Mittelwert des Trainingsgebietes (grand mean, DAVIS 1973) normiert:

$$\beta'_0 = \frac{\beta_0}{\bar{X}} \quad (6)$$

Nach Einsetzen von β'_0 in die Regressionsgleichung erhält man die gleitende Mittelwerts-Gleichung zur Schätzung eines unbekanntes Blocks:

$$\begin{aligned} \hat{Y} &= \beta'_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i X_i \\ \hat{Y} &= \beta'_0 \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i + \sum_{i=1}^n \beta_i X_i \end{aligned} \quad (7)$$

In der Praxis können häufig nicht alle Blöcke beprobt werden, so daß die Methode, ein vorgegebenes Raster über dem unbekanntes Baufeld zu verschieben, nicht anwendbar ist. Statt dessen berechnet man für jede im Zielgebiet auftretende Konfiguration bekannter Nachbarblöcke spezielle Gewichte. Güte der Regression und Schätzfehler sind vom Typ der Konfiguration abhängig (Abb. 2).

Der multiple Korrelationskoeffizient sagt nichts über die Zuverlässigkeit der Schätzwerte aus. Es wird daher für jede Schätzgleichung (d.h. für jede Konfiguration) ein mittlerer Fehler \bar{E} berechnet, der sich aus den Abweichungen der Schätzungen von den wahren Erzgehalten ergibt:

$$\bar{E} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m E_i = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m |x_i - \hat{x}_i| \quad (8)$$

Unter der Annahme, daß Abweichungen E_i normalverteilt sind, können Schätzvarianz und Standardabweichung berechnet werden:

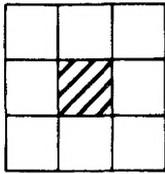
$$s_E^2 = \frac{m \sum_{i=1}^m E_i^2 - \left(\sum_{i=1}^m E_i \right)^2}{m(m-1)} \quad (9)$$

$$s_E = \sqrt{s_E^2}$$

Die Kenntnis der Schätzvarianz s_E^2 ermöglicht es, pessimistische und optimistische Prognosen zu stellen (GOCHT 1978). Bei einer Irrtumswahrscheinlichkeit von 0.05, d.h. mit einer Sicherheit von 95% gelten folgende Gleichungen:

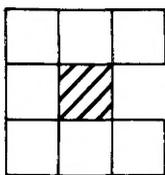
$$\begin{aligned} \hat{Y}_p &= \hat{Y} - 2s_E \\ \hat{Y}_o &= \hat{Y} + 2s_E \end{aligned} \quad (10)$$

Umgebung

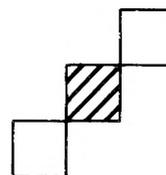


R = 0.89

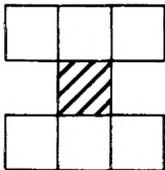
Konfigurationen



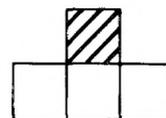
R = 0.84



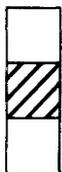
R = 0.45



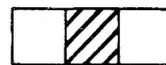
R = 0.50



R = 0.38



R = 0.49



R = 0.86

Abb. 2: Verschiedene Konfigurationen und ihr Einfluß auf den multiplen Korrelationskoeffizienten bei Regression auf den zentralen Block (am Beispiel der Zinkblendegehalte zwischen zwei Sohlen des Erzbergwerks Grund).

Mit Hilfe der Schätzwerte \hat{Y}_p , \hat{Y} und \hat{Y}_o kann eine Klassifizierung in sichere (Vs), wahrscheinliche (Vw) und ange deutete Vorräte (Va) durchgeführt werden:

$$V_s = \sum_{i=1}^k \hat{Y}_{p_i}$$

$$V_w = \sum_{i=1}^k \hat{Y}_i \tag{11}$$

$$V_a = \sum_{i=1}^k \hat{Y}_{o_i}$$

3.1 Geologie des Grunder Gangreviers

Die letzte noch im Betrieb befindliche Bergwerksanlage des Oberharzes ist das Erzbergwerk Grund der PREUSSAG AG, das 1931 aus dem Zusammenschluß der Blei-Zink-Gruben "Hilfe Gottes" und "Bergwerkswohlfahrt" hervorging.

Charakterisiert wird das Grunder Revier durch den sogenannten Grunder Sattel (SPERLING in BUSCHENDORF, DENNERT u.a. 1971), einen zur Clausthaler Faltenzone gehörenden Großsattel. Im Bereich dieser Struktur herrscht - wie in der gesamten Clausthaler Faltenzone - ein NW-vergenter Faltenbau vor. Als wichtigste lithologische Einheiten sind die mächtigen Sedimente des Unterkarbons in Kulm-Fazies (Grauwackenschiefer, Grauwacken und Konglomerate) und lokale Vorkommen von darüber transgredierendem Rotliegenden zu erwähnen.

Das Störungssystem der WNW - ESE streichenden, steil einfallenden Grunder Gänge entstand durch mehrphasige tektonische Bewegungen, die nach der postnamurischen Faltung (BEDERKE 1962) einsetzen und noch vor dem Zechstein 1 abgeklungen sind (SPERLING 1973). Die durch Abwärtsbewegungen von einzelnen Schollen geschaffenen Hohlräume wurden in vier Phasen durch ascendente Lösungen unter epi- bis mesothermalen Bedingungen mineralisiert (SPERLING 1973). Von wirtschaftlicher Bedeutung sind die zinkblende- und bleiglanzreichen Partien. Das in Tetraedrit, Bleiglanz und Rotgültigerzen enthaltene Silber stellt ein wertvolles Nebenprodukt dar.

Die Erzgänge spalten sich in verschiedene Trümer auf, die als liegendes (L), mittleres (M) und hangendes (H) Trüm bezeichnet werden.

3.2 Übersicht der im Erzbergwerk Grund gebräuchlichen Abbaufverfahren

Bis zur Einführung des Blockbaus mit Rahmenzimmerung im Jahre 1958 war der Firstenstoß- und Querbau das einzige angewandte Abbaufverfahren. Da mit der älteren Methode nur geringe Abbauleistungen erzielt werden konnten und keine Möglichkeit zur Mechanisierung bestand, führte man in den folgenden Jahren neue Techniken ein:

- Teilsohlenbruchbau (1960)
- Mechanisierter Firstenstoßbau mit gleislosen Diesel-Fahrladern (1970).

Geringmächtige Gangteile mit hohen Erzgehalten wurden weiterhin im Firstenstoßbau gewonnen. Der Teilsohlenbruchbau eignet sich für mäßig vererzte Partien mit geringen Mächtigkeiten. Im Gegensatz zum Firstenstoßbau schreitet bei diesem Verfahren der Abbau von oben nach unten fort. Seit 1970 wurden mit dem mechanisierten Firstenstoßbau sowohl in erzeichen als auch in erzarmen Trümmern so gute Erfahrungen gemacht, daß

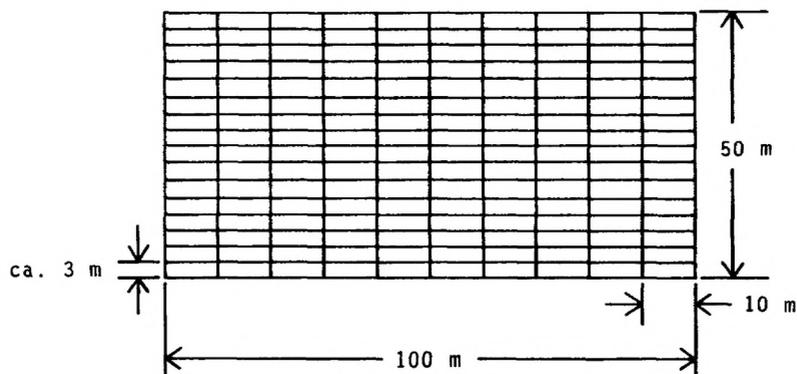


Abb. 3: Schematischer Seigerriß eines Baufeldes

zukünftig bis zu 80% des Erzes nach dieser Methode ausgebracht werden sollen (LANGE & v. SCOTTI in SPERLING 1973).

Das Erzbergwerk Grund ist in folgende Grubenfelder untergliedert (von W nach E):

- Hilfe Gottes Westfeld
- Hilfe Gottes Ostfeld
- Feld Bergwerkswohlfahrt

Alle Grubenfelder sind in einem seigeren Abstand von 50 m durch Sohlen ausgerichtet. Die B a u f e l = d e r liegen zwischen den Sohlen und erstrecken sich im Streichen auf jeweils 100 m, während ihre Breite mit der Gestalt des Trums wechselt. Für die Ermittlung der Erzvorräte sind sie in E l e m e n t e aufgeteilt worden, die eine Länge von 10 m und eine Höhe von ca. 3 m haben (ECKMANN & EHRISMANN 1976)(Abb. 3).

4. Das Schätzverfahren und seine Bedeutung in der Praxis

Zur optimalen Planung des Betriebs in einer Bergwerksanlage sind Vorratsberechnungen unerlässlich. Für die verschiedenen Planungszeiträume müssen die entsprechenden Schätzungen als Entscheidungshilfe vorliegen.

Die langfristige Planung für die Lagerstätte Bad Grund erfordert eine Prognose über den Erzgehalt der Baufelder. Das während des laufenden Verhiebes gewonnene Datenmaterial und die Ergebnisse von Erkundungsbohrungen bilden die Grundlage für die mittelfristige Vorhersage der Erzmengen (Abb. 4).

Für die kurzfristige Planung während des laufenden Abbaus sollen möglichst genaue Schätzwerte für die Erzgehalte in einzelnen Elementen berechnet werden.

Da im Teilsohlenbruchbau das Gebirge vollständig entspannt ist, kann sowohl der Streckenvortrieb als auch der Rückbau für eine gewisse Zeitspanne unterbrochen werden, ohne daß nachteilige Folgen durch den Gebirgsdruck zu fürchten sind (WAGENER & SCHMIDT, 1961).

Es besteht somit die Möglichkeit, bei einer Veränderung der Bauwürdigkeitsgrenze, die z.B. durch eine Schwankung der Metallpreise hervorgerufen werden kann, den Abbau in gewissem Umfang zu steuern.

Zur lang-, mittel- und kurzfristigen Vorratsschätzung im Erzbergwerk Grund wurde ein FORTRAN-IV-Rechenprogramm entwickelt, das jedoch an anderer Stelle beschrieben werden soll.

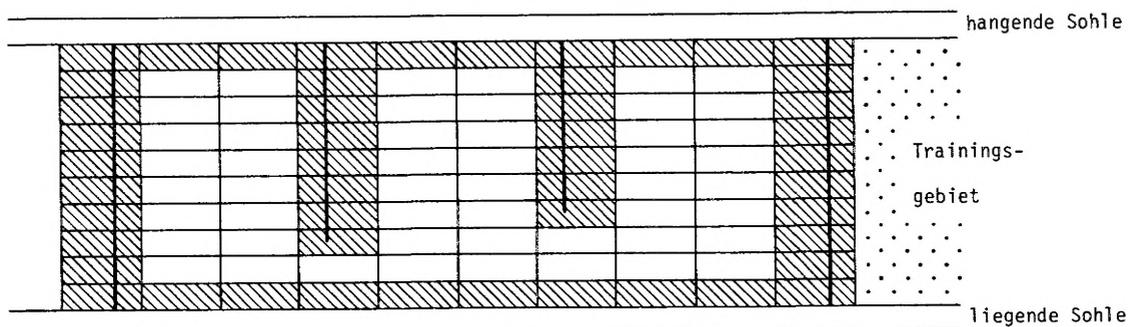


Abb. 4: Beispiel einer möglichen Verteilung beprobter Abbauelemente innerhalb eines unbekanntes Baufeldes (schraffiert : beprobte Elemente)

5. Danksagung

Der PREUSSAG AG, insbesondere Herrn Dr. W. EHRISMANN, danke ich für die mir in freundlicher Weise gewährte Unterstützung.

LITERATURVERZEICHNIS

- AGTERBERG, F.P. (1974): Geomathematics.- Developments in Geomathematics, 1, 596 S., (Elsevier), Amsterdam - Oxford - New York
- BEDERKE, E. (1962): Das Alter der Harzfaltung.- N. Jb. Geol. Paläont. Mh., 1962, 1, 24 - 27, Stuttgart
- BLAIS, R.A. & CHARLIER, P.A. (1967): Applications of geostatistics in ore evaluation.- Can. Inst. Min. Metall., Spec. vol., 9, 41 - 68, Ottawa
- BURGER, H. & SKALA, W. (1978): Die Untersuchung ortsabhängiger Variablen: Modelle, Methoden und Probleme.- Geol. Rundschau, 67, 3, 823 - 839, Stuttgart
- DAVIS, J.C. (1973): Statistics and Data Analysis in Geology.- 550 S., (Wiley & Sons), New York - London - Sydney - Toronto
- ECKMANN, W. & EHRISMANN, W. (1976): Erkundung von NE-Lagerstätten mittels Kernbohrung und Ermittlung der Erzvorräte mit Hilfe einer Datenbank.- III. Internat. Symposium für Markscheidewes., Vorträge, 1, 21 - 28, Leoben
- FLEISCH, A. (1963): Erfahrungen mit dem Teilsohlenbruchbau auf dem Erzbergwerk Grund.- Erzmetall, 16, 3, 123 - 127, Stuttgart
- GOCHT, W. (1978): Wirtschaftsgeologie.- 200 S., (Springer), Berlin - Heidelberg - New York
- KREYSZIG, E. (1977): Statistische Methoden und ihre Anwendungen.- 6. Aufl., 451 S., (Vandenhoeck & Ruprecht), Göttingen
- KRIGE, D.G. (1951): A statistical approach to some basic mine valuation problems on the Witwatersrand.- J. Chem. Metall. Min. Soc. South Africa, 52, 119 - 139, Johannesburg
- " (1966): Two-dimensional weighted moving average trend surfaces for ore evaluation.- Proc. Symposium on math. Statistics and Computer Application in Ore Evaluation, 13 - 38, Johannesburg
- LANGE, J. & SCOTTI, H.H.v. (1973): Betriebsverhältnisse.- In: SPERLING, H. (1973): Die Erzgänge des Erzbergwerks Grund (Silbernaaler Gangzug, Bergwerksglucker Gang und Laubhütter Gang).- Geol. Jb., D2, 140 - 149, Hannover
- LEHMANN, H. (1954): Montangeologische Aufnahmen auf der Blei-Zink-Erzgrube "Hilfe Gottes" im Oberharz.- 60 S., Unveröff. Dipl. Arbeit, FU Berlin
- MATHERON, G. (1963): Principles of geostatistics.- Econ. Geol., 58, 8, 1246 - 1266, New Haven, Conn.
- " (1971): The Theory of Regionalized Variables and its Applications.- Les Cahier du Centre de Morphologie Mathématique, 5, 211 S., Fontainebleau
- RICHTER, M. (1941): Entstehung und Alter der Oberharzer Gänge.- Geol. Rundschau, 32, 1/2, 93 - 105, Stuttgart
- " (1953): Metallogenese und Tektonik westdeutscher Blei-Zink-Erzlagerstätten.- Geol. Rundschau, 42, 1, 79 - 80, Stuttgart
- SCHOELE, R. (1979): Geostatistik - Ein System von Rechenprogrammen zur Theorie der ortsabhängigen Variablen.- Berl. Geowiss. Abh., A15, Berlin (im Druck)
- SCHWAN, W. (1956): Über das Harzvariszikum.- Geol. Rundschau, 45, 2, 284 - 296, Stuttgart
- SPERLING, H. (1971): Tektonik.- In: BUSCHENDORF, F., DENNERT, H. et al. (1971): Geologie des Erzgang-Reviere, Mineralogie des Ganginhaltes und Geschichte des Bergbaus im Oberharz.- Beih. Geol. Jb., 118, 34 - 45, Hannover
- " (1973): Die Erzgänge des Erzbergwerks Grund (Silbernaaler Gangzug, Bergwerksglucker Gang und Laubhütter Gang).- Geol. Jb., D2, 205 S., Hannover
- STOCES, B. (1958): Wahl und Beurteilung von Abbauverfahren im Bergbau.- 411 S., (Enke), Stuttgart
- WAGENER, W. & SCHMIDT, D. (1961): Selektiver Abbau einer absätzigen Lagerstätte, insbesondere im Teilsohlenbruchbau.- Erzmetall, 14, 1, 1 - 5, Stuttgart

GEOSTATISTIK - EIN SYSTEM VON RECHENPROGRAMMEN
ZUR THEORIE DER ORTSABHÄNGIGEN VARIABLEN

von

REINHARD SCHOELE⁺

ZUSAMMENFASSUNG

Es wird ein Programmpaket zur Analyse und Darstellung räumlich verteilter Daten vorgestellt. Grundlage hierfür ist die von MATHERON u.a. entwickelte Theorie der regionalisierten Variablen, die die besonderen Probleme bei der Vorratsschätzung mineralischer Rohstoffe am besten erfaßt.

Eine kurze Beschreibung der Programmteile zur Anpassung eines Variogrammodells, zur zwei- und dreidimensionalen Schätzung von Funktionswerten und zur Ausgabe der Ergebnisse auf dem Schnelldrucker oder auf dem Plotter wird gegeben.

SUMMARY

A program is introduced for analysis and representation of data distributed in space. The basis of the program is the theory of regionalized variables as developed by MATHERON, which has proven to be particularly applicable for the special problems connected with the estimation of mineral reserves.

A short description of the routines necessary to adapt a variogram model, a two- and three-dimensional estimate of the function values and a display of the results on the plotter is given.

РЕЗЮМЕ

Предлагается программа для анализа и изображения пространственно распределенных данных. Основание для этого является теорией Матерона и.д. о региональных переменных. Она лучше всего охватывает особые проблемы оценки запасов минеральных сырьев. Изложено краткое описание частей программы для приспособления модели вариограммы, для двумерного и трехмерного оценки функциональных величин и для выпуска результатов на быстроходное печатающее устройство или на построитель кривых.

⁺ Anschrift des Verfassers: Reinhard Schoele, Institut für Geologie d. FU Berlin,
1000 Berlin 33, Altensteinstr. 34A.

EINLEITUNG

In den geologischen Wissenschaften treten häufig Probleme auf, zu deren Lösung mathematische Schätzverfahren eingesetzt werden:

- Ermittlung der Vorräte von Erzlagerstätten
- Erstellung von Isolinienplänen
- Kartierung geochemischer und geophysikalischer Daten

Die hierzu verwendeten Verfahren lassen sich in drei Gruppen einteilen:

1. Interpolationsverfahren
2. Trendflächen Analysen
3. Geostatistische Verfahren

Eine vergleichende Darstellung dieser Methoden hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit auf verschiedene Problemstellungen wurde von BURGER & SKALA (1978) durchgeführt.

Interpolationsmethoden eignen sich zwar zum Schätzen von Punkten (z.B. zum Schätzen eines regelmäßigen Gitters aus unregelmäßig verteilten Proben), Erzgehalte in Abbaublöcken jedoch können hiermit nicht ermittelt werden. Auch Trendflächen-Analysen werden zur Vorratsberechnung nur selten herangezogen. Sie haben insbesondere den Nachteil, daß sie für unregelmäßig beprobte Gebiete keine zuverlässigen Ergebnisse liefern. Beide genannten Methoden lassen im Allgemeinen keine Aussagen über Fehler der Schätzung zu.

Geostatistische Verfahren nutzen eine zusätzliche Information aus den Daten: Die Korrelation der untersuchten Variablen im Raum. Die theoretische Grundlage bietet dabei die Theorie der ortsabhängigen Variablen (MATHERON 1971), aus der unter anderem das Kriging-Schätzverfahren entwickelt wurde.

Eine praktische Einführung unter besonderer Berücksichtigung des Bergbaus geben DAVID 1977, HUIJBREGTS 1976 und 1975 und DELFINER 1975. Auf das Schätzen von nichtstationären Variablen und einer globalen Drift geht OLEA 1975 näher ein (Universal Kriging). Grundlage jeder Schätzung durch Kriging ist eine Strukturanalyse der Daten durch das Variogramm.

Das Variogramm ist eine Vektorfunktion, die die mittlere Änderung der Funktionswerte der untersuchten Variablen zwischen zwei Punkten mißt. Es liefert Aussagen über Varianz und Korrelation der Daten, sowie über Meßfehler oder Unstetigkeiten im kleinsten Distanzbereich. Unterschiedliche Korrelation, Varianz und Einflußbereich der Daten in verschiedenen Raumrichtungen (Anisotropie) sind aus dem Variogramm ersichtlich. Das aus den Daten ermittelte experimentelle Variogramm muß durch eine Modellfunktion angepaßt werden, um die Koeffizienten für das Kriging-Schätzverfahren liefern zu können. Damit werden alle durch das Variogramm beschriebenen Eigenschaften der Ausgangsdaten durch das Schätzverfahren berücksichtigt. Auch die Angabe einer Schätzvarianz durch Kriging stützt sich auf diese Variogrammfunktion.

Kriging eignet sich nicht nur zum Schätzen von Punkten, sondern auch von Volumina. Dabei werden Proben sowohl innerhalb als auch außerhalb des zu schätzenden Blockes ausgewertet. Clusterförmige Anhäufungen von Proben an einer Stelle führen nicht zu Überbewertung. Durch den Screen-Effekt (Abschätzungseffekt) erhalten die Proben im Cluster niedrigere Gewichte, als einzelne Proben in der gleichen Entfernung vom Schätzpunkt. Die Gewichtungsfaktoren werden so gewählt, daß die Schätzvarianz minimal wird. Kriging liefert die beste lineare Schätzung, die mit Hilfe der vorhandenen Information möglich ist.

Am Centre de la Morphologie mathématique in Fontainebleau (Prof. G. MATHERON) sind umfangreiche Programmsysteme entwickelt worden, die die Strukturanalyse der Daten und das Schätzen durch Kriging ermöglichen; sie sind der Wissenschaft jedoch nicht frei zugänglich. Die Deutsche Forschungsgemeinschaft fördert daher zur Zeit ein Forschungsprojekt der Arbeitsgruppe Mathematische Geologie der FU Berlin (Prof. W. SKALA) mit Sach- und Personalmitteln, das die Entwicklung eines entsprechenden Programmsystems zum Ziele hat. Es soll vor allem Anwendung des Kriging auf möglichst vielfältige Problemstellungen zulassen.

Das Variogramm

Grundlage für das Kriging ist eine Untersuchung des Datenmaterials auf seine Korrelations-Struktur, d.h. auf die Abhängigkeiten der Datenpunkte untereinander.

Der einfachste Weg, zwei Werte (z.B. zwei Gehalte $Z(x)$ und $Z(x+h)$) an zwei Punkten x und $x+h$ miteinander zu vergleichen, besteht darin, deren Differenz zu betrachten. Da nicht das Vorzeichen der Differenz, sondern der Absolutbetrag von Interesse ist, wird $|Z(x) - Z(x+h)|$, oder wegen der besseren Eigenschaften $(Z(x) - Z(x+h))^2$ verwendet. Um eine gültige Aussage für die Gesamtheit aller Daten zu bekommen, berechnet man den Mittelwert dieser quadratischen Differenzen für alle Datenpunktpaare, die einen Abstand von h Metern haben und erhält das Variogramm:

$$2 \gamma(\vec{h}) = \frac{\sum_{i=1}^m (Z(x_i) - Z(x_i + \vec{h}))^2}{m}$$

In der Anwendung wird meistens $\gamma(\vec{h})$ benötigt und als Semi-Variogramm oder ebenfalls als Variogramm bezeichnet. \vec{h} durchläuft alle Werte vom kleinsten bis zum größten möglichen Abstand. Bei mehrdimensional verteilten Daten ist \vec{h} ein Vektor, so daß das Variogramm auch von der Richtung vom \vec{h} abhängt. Es repräsentiert damit auch die unterschiedliche Korrelation der Daten in verschiedenen Richtungen.

Berechnung des Variogramms

In der Praxis hat man zumeist unregelmäßig verteilte Daten, so daß die Abstände von je zwei Punkten und die Richtung ihrer Verbindungsgeraden verschieden sind. Um mehrere Punktpaare für die Berechnung eines Variogrammwertes zu erhalten, wird in Vektorklassen eingeteilt, die von der Länge und Richtung des Abstandes abhängen.

Für alle Datenpunkte wird nun die quadratische Differenz zu allen anderen Punkten, deren Abstand in die selbe Vektorklasse fällt, gemittelt. Für jede Klasse erhält man einen experimentellen Variogrammpunkt. Die Punkte einer Richtung werden als Graph gezeichnet und bilden ein sogenanntes Richtungsvariogramm. Haben alle Richtungsvariogramme einen ähnlichen Verlauf, so kann man von einer gleichmäßigen Korrelation in allen Richtungen ausgehen und ein isotropes Variogramm (auch Gesamtvariogramm genannt) berechnen, das nur von der Entfernung $|\vec{h}|$ abhängt.

Anisotropie

Zeigen die Richtungsvariogramme einer Datenmenge in verschiedenen Richtungen ein unterschiedliches Aussehen, so spricht man von Anisotropie. Die Beziehungen der Daten sind richtungsabhängig (Abb. 1).

Ist lediglich der Anstieg der Graphen im Ursprung unterschiedlich, so kann man einen elliptischen Einflußbereich der Daten beobachten; die Reichweiten sind auf einer Ellipse verteilt. In diesem Fall kann eine einfache Koordinatentransformation einen gleichmäßigen Einflußbereich schaffen. Anderenfalls ist das Variogramm von den einzelnen Koordinaten abhängig und läßt sich in folgender Form darstellen:

$$\gamma(h) = \gamma(h_1) + \gamma(h_2) \quad h = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix}$$

Deutung des Variogramms

Ein Variogramm verläuft in vielen Fällen nach einer gewissen Distanz in einer gleichbleibenden Höhe, die Sill (Stützung) genannt wird und der Probenvarianz in dieser Richtung entspricht. Haben die Richtungsvariogramme einen unterschiedlichen Sill, so ist die Schwankungsbreite der untersuchten Variablen richtungsabhängig. Es liegt eine zonale Anisotropie vor (s.o. zweiter Fall). Den Bereich des Variogramms bis zum Erreichen des Sills nennt man die Reichweite (Range). Sie gibt die Entfernung an, bis zu der die Abhängigkeit der Daten reicht. Auch sie kann in verschiedenen Richtungen unterschiedlich sein, wenn eine geometrische Anisotropie vorliegt (erster Fall).

Ein Variogramm, das keinen Sill hat, also mit zunehmender Entfernung ständig ansteigt, repräsentiert Daten ohne endliche Varianz. Trotzdem läßt sich für eine endliche Probenanzahl immer eine scheinbare Varianz berechnen. Ein Beispiel für eine unendliche Varianz ist der Fall einer linearen Drift, d.h. die Probenwerte werden in einer Raumrichtung immer größer.

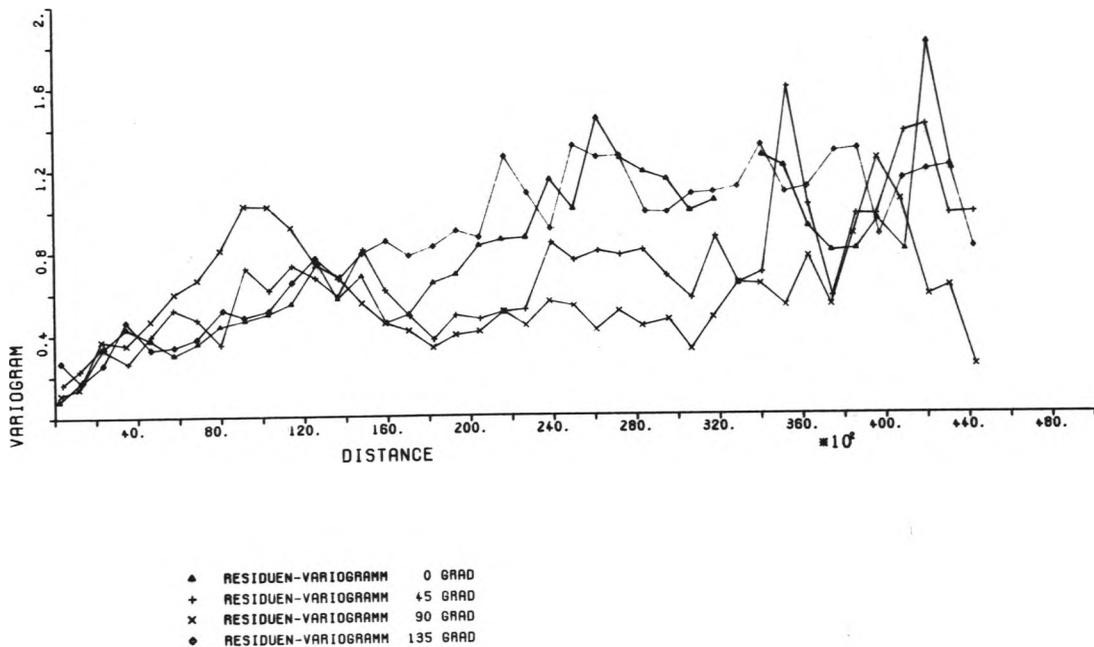


Abb. 1: Unterschiedliche Richtungsvariogramme der Inkohlungsmessungen von KALKREUTH (1977)

Für kleine Distanzen strebt das Variogramm oft gegen einen Wert größer als Null. Dieses Phänomen kann als Fehler bei der Probenahme gedeutet werden, was wohl tatsächlich die häufigste Ursache ist. Unstetigkeiten der untersuchten Variablen im kleinsten Distanzbereich erzeugen den gleichen Effekt und führten zur Bezeichnung "Nugget-Effekt" (von Nugget: Goldklumpen).

Der Nugget-Effekt hat beim Kriging-Verfahren eine große Bedeutung, da er die Gewichtung nahe beieinander liegender Punkte beeinflusst: Der Screen-Effekt wird mit zunehmendem Nugget-Effekt abgeschwächt.

Variogramm Modelle

Um Koeffizienten für das Kriging liefern zu können, muß das experimentelle Variogramm durch eine positiv definierte Funktion approximiert werden. Es stehen mehrere Modelle zur Verfügung, die durch ihre Parameter gegeben sind. Über die Auswahl des Modells entscheidet die Form des experimentellen Variogramms, dessen Verhalten nahe dem Ursprung, die Existenz eines Sills, das Verhalten im Bereich der Reichweite. Bis zu welcher Distanz das Modell angepaßt werden muß, hängt von der Entfernung zwischen Schätz- und Probenpunkten im Kriging ab. Besonders wichtig ist eine gute Anpassung für kleine Entfernungen, da diese Datenpunkte den größten Einfluß auf die Schätzung haben.

Lineares Modell

Eine sehr einfach anzupassende Funktion ist das Lineare Modell (Abb. 2):

$$\gamma(h) = Ah + C_0$$

Es hat keinen Sill; seine Parameter sind:

C_0 = Nugget-Effekt

A = Steigung der Geraden

Ist das Modell nur für Entfernungen bis zu einer bestimmten Grenze angepaßt, darf der Einflußbereich der Schätzung dieser Grenze nicht überschreiten.

Sphärisches Modell

Ein sehr oft angewendetes Modell ist das Sphärische Modell (Abb. 3) oder Matheron-Modell. Es besitzt einen linearen Verlauf nahe dem Ursprung und eine starke Krümmung im Bereich der Reichweite, bevor es in den konstanten Sill übergeht. Es wird häufig bei sedimentären Lagerstätten angetroffen. Seine Formel lautet:

$$\begin{cases} \gamma(h) = C \left(\frac{3}{2} \frac{h}{a} - \frac{1}{2} \frac{h^3}{a^3} \right) + C_0 & \text{für } h \leq a \\ \gamma(h) = C + C_0 & \text{für } h > a \\ \gamma(0) = 0 \end{cases}$$

Dabei sind:

C_0 = Nugget-Effekt

$C + C_0$ = Sill

a = Reichweite (Range)

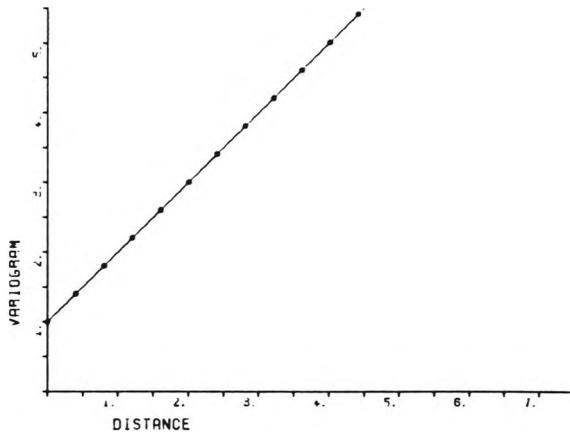


Abb. 2 LINEARES VARIOGRAMM
 • LINEAR C0 = 1 A = 1

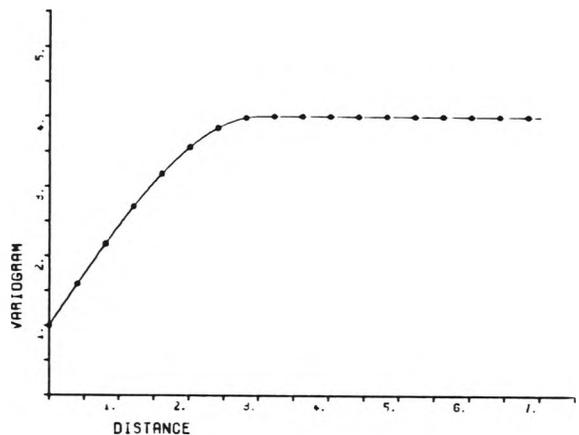


Abb. 3 SPHERISCHES VARIOGRAMM
 • SPHERICAL C0 = 1 C1 = 4 A = 3

De Wijs-Modell

Trägt man das experimentelle Variogramm auf logarithmischem Papier auf, so läßt sich das De Wijs-Modell (Abb. 4) ebenso leicht wie das lineare anpassen, da es hier eine Gerade bildet:

$$\gamma(h) = A \ln(h) + B$$

Wobei A = Steigung der Geraden und

$B = \gamma(1)$.

Da es Berechnungen ohne Computer ermöglicht, wird es von vielen Autoren favorisiert. Es läßt sich bei vielen Variogrammen hydrothormaler Lagerstätten anpassen.

Gauß-Modell

Untersucht man Schichtmächtigkeiten, wird man oft auf Variogramme treffen, die im kleinen Distanzbereich einen konkaven Verlauf haben. Durch das Gauß-Modell (Abb. 5) kann ein solches Variogramm beschrieben werden. Die Formel lautet:

$$\gamma(h) = C_0 + C \left(1 - e^{-\frac{h^2}{a^2}} \right)$$

mit den Parametern:

C_0 = Nugget-Effekt

$C_0 + C$ = Sill

a = Range (Wendepunkt)

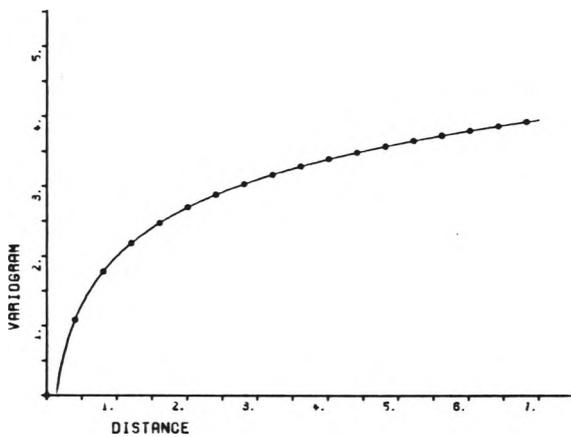


Abb. 4 DEVIJS VARIOGRAMM

• DEVIJS A = 1 B = 2

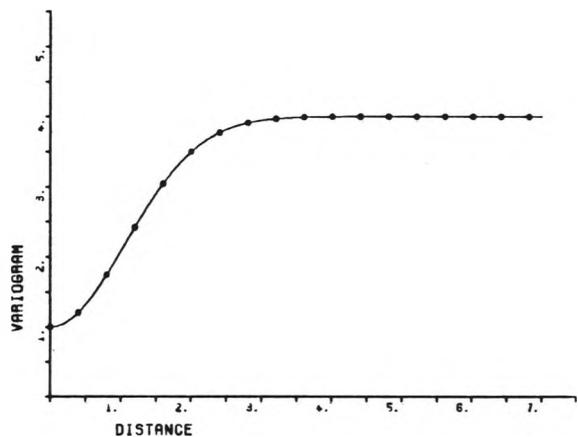


Abb. 5 GAUSS VARIOGRAMM

• GAUSS C0 = 1 C1 = 4 A = 1.5

Hole-Effekt-Modell

In einem Gebiet mit periodisch schwankendem Gehalt, wenn erzhaltige und erzarme Schichten wechseln, wird auch das Variogramm einen wellenförmigen Verlauf haben. In diesem Fall kann das Hole-Effekt-Modell (Abb. 6) angepaßt werden:

$$\gamma(h) = C_0 + C \left(1 - \frac{\sin ah}{ah} \right)$$

mit C_0 = Nugget-Effekt

$C_0 + C$ = Sill

a = 2π / Wellenlänge (Range)

Es hat wie das Gauß-Modell nahe dem Ursprung einen konkaven Verlauf und pendelt um des Sill.

Verschachtelte Modelle

Durch die Addition verschiedener Variogramm-Modelle lassen sich neue Funktionen bilden und den jeweiligen Bedürfnissen anpassen. Ein oft angewendetes verschachteltes Modell entsteht durch die Addition zweier sphärischer Variogramme (Abb. 7).

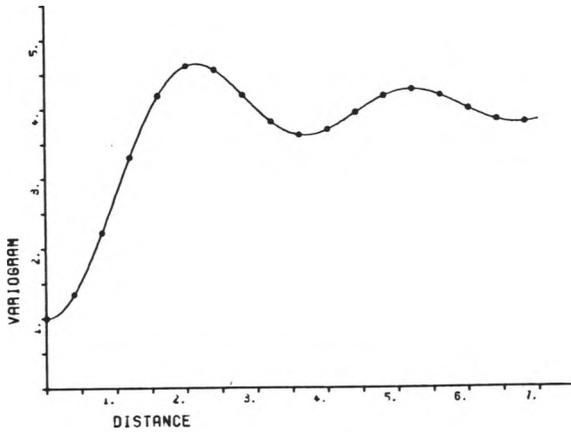


Abb. 6 HOLE EFFEKT VARIOGRAMM
 ○ HOLE EFF. C0 = 1 C1 = 4 A = 1.5

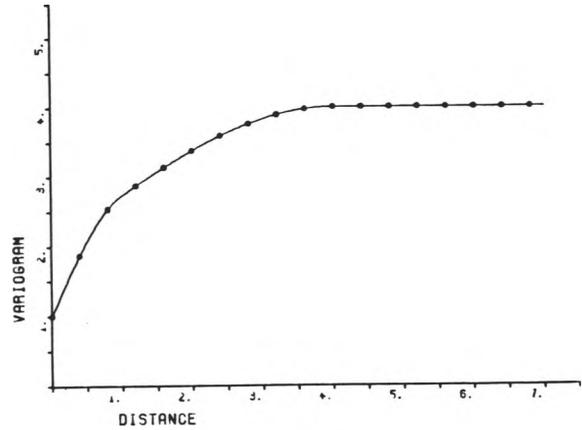


Abb. 7 BISPHERISCHES VARIOGRAMM
 ○ NESTED C0 = 1 C1 = 1 A1 = 1 C2 = 2 A2 = 4

KRIGING

Ein Block V mit dem unbekanntem Gehalt $Z = \frac{1}{V} \int_V Z(x) dx$ wird durch punktförmige Proben x_i mit den Gehalten $Z(x_i)$ geschätzt durch:

$$Z' = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i)$$

d.h. jedem Gehalt wird ein Gewicht λ_i zugeordnet.

Dabei soll die Schätzvarianz minimal sein.

$$\sigma_E^2 = \text{VAR} [Z - Z'] \longrightarrow \text{Minimum}$$

Gleichzeitig soll der Schätzwert korrekt sein, d.h. die Differenz zwischen geschätztem Wert und wahren Wert soll im Mittel Null sein:

$$E [Z - Z'] = 0$$

Dies wird erreicht, indem man die Gewichte so wählt, daß ihre Summe gleich eins ist:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$$

($[Z - Z']$ ist Linearkombination von $Z(x) - Z(x+h)$ mit $E [Z(x) - Z(x+h)] = 0$).

Die Schätzvarianz ist:

$$\begin{aligned} \sigma_E^2 &= \text{VAR} [Z - Z'] \\ &= 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \cdot \bar{\gamma}(x_i, V) - \bar{\gamma}(V, V) - \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n \lambda_i \lambda_j \bar{\gamma}(x_i, x_j) \\ &= 2 \text{COV} (Z, Z') - \text{COV} (Z, Z) - \text{COV} (Z', Z') \end{aligned}$$

wobei $\bar{\gamma}(x_i, V)$ das mittlere Variogramm für x_i und Volumen V ist:

$$\bar{\gamma}(x_i, V) = \frac{1}{V} \int_V \gamma(x - x_i) dx$$

Durch Einführen des Lagrange-Parameters μ erhält man das Kriging-System:

$$\sum_{j=1}^m \lambda_j \gamma(x_i - x_j) + \mu = \bar{\gamma}(x_i, V) \quad i = 1, 2, \dots, m$$

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$$

Die minimale Schätzvarianz ist dann:

$$\sigma_K^2 = -\bar{\gamma}(V, V) + \mu + \sum_{j=1}^m \lambda_j \bar{\gamma}(x_j, V)$$

Das Kriging-System läßt sich in Matrixschreibweise angeben:

$$[K] \times [A] = [M]$$

$$[K] = \begin{bmatrix} \gamma(x_1 - x_1) = 0 & \gamma(x_1 - x_2) & \dots & \gamma(x_1 - x_n) & 1 \\ \gamma(x_2 - x_1) & \gamma(x_2 - x_2) = 0 & \dots & \gamma(x_2 - x_n) & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \gamma(x_n - x_1) & \gamma(x_n - x_2) & \dots & \gamma(x_n - x_n) = 0 & 1 \\ 1 & 1 & & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$[A] = \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ \mu \end{bmatrix} \quad [M] = \begin{bmatrix} \bar{\gamma}(x_1, V) \\ \bar{\gamma}(x_2, V) \\ \vdots \\ \bar{\gamma}(x_n, V) \\ 1 \end{bmatrix} \quad \gamma(x_k - x_k) = 0$$

Es ist ein Gleichungssystem mit $n + 1$ Gleichungen und $n + 1$ Unbekannten λ_j und μ zu lösen.

Statt eines Volumens kann Kriging auch Punkte schätzen. In diesem Fall wird in dem vorangehenden Gleichungen das Volumen V durch den Punkt x_0 ersetzt.

Auf diese Weise können unregelmäßig verteilte Daten auf ein regelmäßiges Gitter interpoliert werden, wenn zum Beispiel Isolinenpläne gezeichnet werden sollen. Hat das Variogramm-Modell keinen Nugget-Effekt, so laufen die Isolinen durch die Datenpunkte. Ein Nugget-Effekt, der als Meßfehler aufgefaßt werden kann, wirkt ausgleichend. Die Isolinen laufen nicht mehr durch die Datenpunkte.

Eigenschaften des Kriging-Verfahrens

Kriging liefert die beste lineare Schätzung, die mit der vorhandenen Information möglich ist. Die Gewichtungsfaktoren werden so gewählt, daß die Schätzvarianz minimal wird.

Das Kriging-System berücksichtigt:

- Die Struktur der Datenmenge und deren räumliche Korrelation (durch das Modell $\gamma(h)$).
- Die relative geometrische Lage der verwendeten Datenpunkte und des zu schätzenden Volumens.
- Durch den Abschattungseffekt (Screen effect) erhält nur der innerhalb eines Clusters dem Schätzpunkt am nächsten liegende Datenpunkt ein Gewicht, das (signifikant) größer als Null ist. Cluster von Datenpunkten werden somit nicht überbewertet.
- Kriging vermeidet systematische Fehler (Bias). Zum Schätzen eines Blockes werden auch außerhalb des Blockes liegende Datenpunkte in die Berechnung einbezogen.
- Für jeden Schätzwert wird eine Schätzvarianz als Maß für die Zuverlässigkeit der Schätzung berechnet.

DAS PROGRAMMSYSTEM

Für die Anwendung des Kriging-Schätzverfahrens wurde ein Programmsystem erstellt, das zur Zeit aus mehreren selbständigen Fortran-Programmen besteht:

1. RESVAR zur Berechnung des Variogramms
2. GAMFIT zur Darstellung des experimentellen Variogramms und eines Modells auf Bildschirm oder Plotter
3. KRIGET zum Durchführen der Schätzung ggf. mit transformierten Datenkoordinaten
4. Programme zur graphischen Darstellung der Schätzergebnisse

Die einzelnen Programme werden laufend weiterentwickelt. Großer Wert wird dabei auf ihre benutzerfreundliche Bedienung gelegt. So zum Beispiel muß der Benutzer nur wenige Programmparameter angeben und vermeidet durch formatfreie Eingabe zusätzliche Fehler. Treten bei der Verarbeitung der Daten Fehler auf, so erzeugt das Programm verständliche Fehlermeldungen (z.B. bei Überschreitung der Kapazität). Die Programme werden auf dem Telefunken-Rechner TR440 entwickelt, sind aber auf andere Anlagen leicht übertragbar.

Programm RESVAR

Das Programm RESVAR erstellt ein Variogramm von zufällig verteilten zweidimensionalen Daten mit einer Variablen oder der Akkumulation zweier Variablen (Gehalt und Mächtigkeit). Die Datenkoordinaten können dabei transformiert werden, um eine geometrische Anisotropie zu überprüfen oder unterschiedliche Maßstäbe in beiden Richtungen auszugleichen. Daneben werden statistische Daten wie Mittelwert und Varianz berechnet. Die Berechnung des Variogramms erfolgt nach dem schon genannten Verfahren: Es werden die durch jedes Punktepaar beschriebenen Vektoren klassifiziert (Länge und Richtung), und die quadratischen Differenzen der Variablen jeden Punktepaares einer Klasse summiert.

Für jede Vektorklasse wird ein Variogrammwert berechnet (Mittelwert der quadratischen Differenzen) und jeweils für alle Klassen einer Richtung ein Graph gezeichnet (Entfernung/Variogramm). Durch Mittelwertbildung der einfachen Variablen-Differenzen $Z(x) - Z(x+h)$ berechnet das Programm gleichzeitig die lineare Drift (mittlere Zunahme der Variablen in einer Richtung), sowie ein um die Drift korrigiertes Variogramm. Dieses wird zusammen mit dem Roh-Variogramm auf dem Drucker grafisch ausgegeben. Ist keine (lineare) Drift vorhanden ($E[Z(x) - Z(x+h)] = 0$), decken sich beide Variogramme. Zuverlässige Werte lassen sich jedoch erst ab ca. 100 Paaren je Klasse ermitteln. Als mögliche Eingabeparameter des Programms sind u.a. die Richtungen, in denen ein Variogramm berechnet werden soll, und für jede Richtung ein Abweichungswinkel, der die zulässige Streuung um die vorgegebene Richtung angibt, zu nennen.

Bei einem Abweichungswinkel von 90° wird das Gesamt-Variogramm (über alle Richtungen gemittelt) berechnet. Auch für die Entfernungen kann eine Klassenbreite angegeben werden.

Fehlen die Angaben über Richtung und Klassenbreite, berechnet das Programm das Gesamt-Variogramm mit 40 Entfernungsklassen einer Breite von $1/60$ des maximalen Punkteabstandes. Die Anpassung von logarithmischen Modellen (De Wijs-Modell) wird durch wahlweise logarithmisch skalierte Koordinaten-Achsen unterstützt.

Programm GAMFIT

GAMFIT ist ein Zeichenprogramm, daß das von RESVAR berechnete experimentelle Variogramm zusammen mit einer Modell-Funktion zeichnet. Bei schneller Ausgabe der Zeichnung auf einen Bildschirm können interaktiv die Funktionsparameter geändert werden. Auf diese Weise ist es möglich, rasch das beste Modell zu finden und dieses anzupassen.

Mehrere Richtungsvariogramme lassen sich in dasselbe Koordinatensystem zeichnen, um sie miteinander vergleichen zu können (Abb. 1). Eine mehrfarbige Ausgabe auf dem Plotter erleichtert dabei die Übersicht.

Programm KRIGET

Für das Kriging-Schätzverfahren wurde ein Programm erstellt, das wahlweise Blöcke oder Punkte aus zufällig verteilten zweidimensionalen Daten schätzen kann.

Es benötigt als Eingabe die Art und Parameter der Variogramm-Funktion (es stehen sechs Modelle zur Auswahl), wie sie mit Hilfe des Programms GAMFIT gefunden wurden. Eine geometrische Anisotropie wird durch Angabe der Parameter für eine Koordinatentransformation berücksichtigt. Die Wirkung dieser Transformation konnte bereits bei der Variogrammberechnung überprüft werden. Die Anzahl der für die Schätzung eines Blockes oder Punktes verwendeten Datenpunkte sowie ihre Entfernung können zur Rechenzeiterparnis begrenzt werden. Zur Definition der zu schätzenden Punkte oder Blöcke ist es möglich, den unteren Eckpunkt des Netzes, die Anzahl der Punkte oder Blöcke und die Punktabstände bzw. Block-Kantenlängen jeweils in X- und Y-Richtung anzugeben.

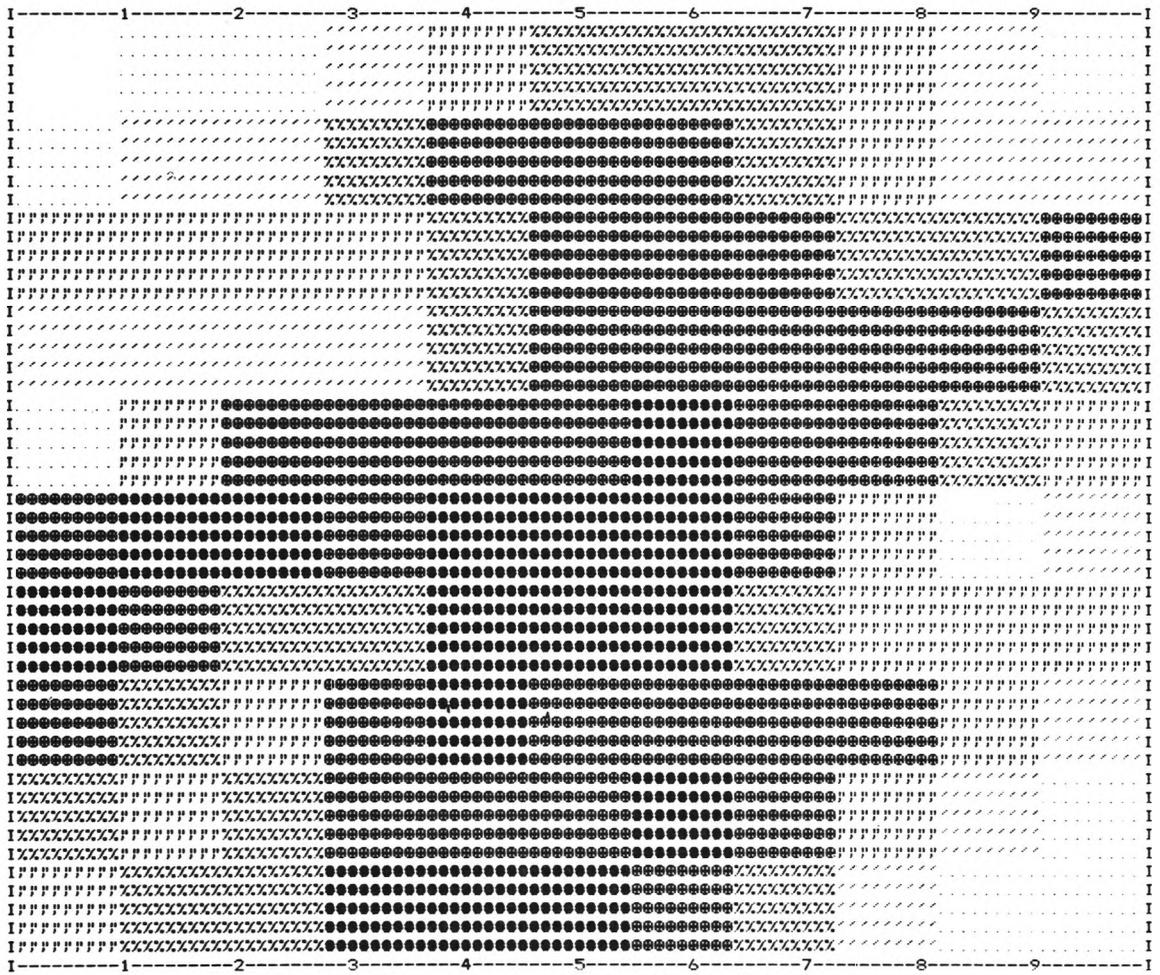
Als Ergebnis erhält man für jeden geschätzten Block oder Punkt den Schätzwert, die Schätzvarianz, die Varianz der Proben und den Einflußradius für diese Schätzung. Außerdem wird ein Grautonbild der Blöcke nach ihren Schätzwerten gedruckt (Abb. 8a). Die vier obengenannten Ergebnisparameter werden zusammen mit den Koordinaten sequentiell auf ein File ausgegeben, um eine Weiterverarbeitung durch ein Isolinien-Programm (Abb. 9) und die grafische Darstellung der Schätzvarianz (Abb. 8b) zu ermöglichen.

LITERATURVERZEICHNIS

- BURGER, H. & SKALA, W. (1978): Die Untersuchung ortsabhängiger Variablen: Modelle, Methoden und Probleme.- Geol. Rundschau, 67, 3, 823 - 839, Stuttgart
- DAVID, M. (1977): Geostatistical ore reserve estimation.- Developments in Geomathematics, 2, (Elsevier), Amsterdam - Oxford - New York
- DELFINER, P. (1975): Geostatistical estimation of hydrocarbon reserves.- 120 S., (École nationale supérieure des Mines de Paris - Centre de Morphologie Mathématique), Fontainebleau
- HUIJBREGTS, C. (1975): Three-day short course on practical mining geostatistics.- 120 S., (Unveröff. Manuskript), Clausthal
- " (1976): Practical introduction to mining geostatistics.- 115 S., (École nationale supérieure des Mines de Paris - Centre de Geostatistique), Fontainebleau
- KALKREUTH, W. (1976): Kohlenpetrologische und geochemische Untersuchungen an organischem Material paläozoischer Sedimentgesteine aus der variskischen Geosynklinale.- 139 S., Unveröff. Diss. RWTH Aachen
- MATHERON, G. (1971): The Theory of Regionalized Variables and its Applications.- Les Cahiers du Centre de Morphologie Mathématique, 5, 211 S., Fontainebleau
- OLEA, R.A. (1975): Optimum mapping techniques using regionalized variable theory.- Series on Spatial Analysis, 2, 137 S., (Kansas Geological Survey), Lawrence, Kans.

INKOHLUNGSMESSUNGEN (KALKREUTH-DATEN)

BLOCK KRIGING

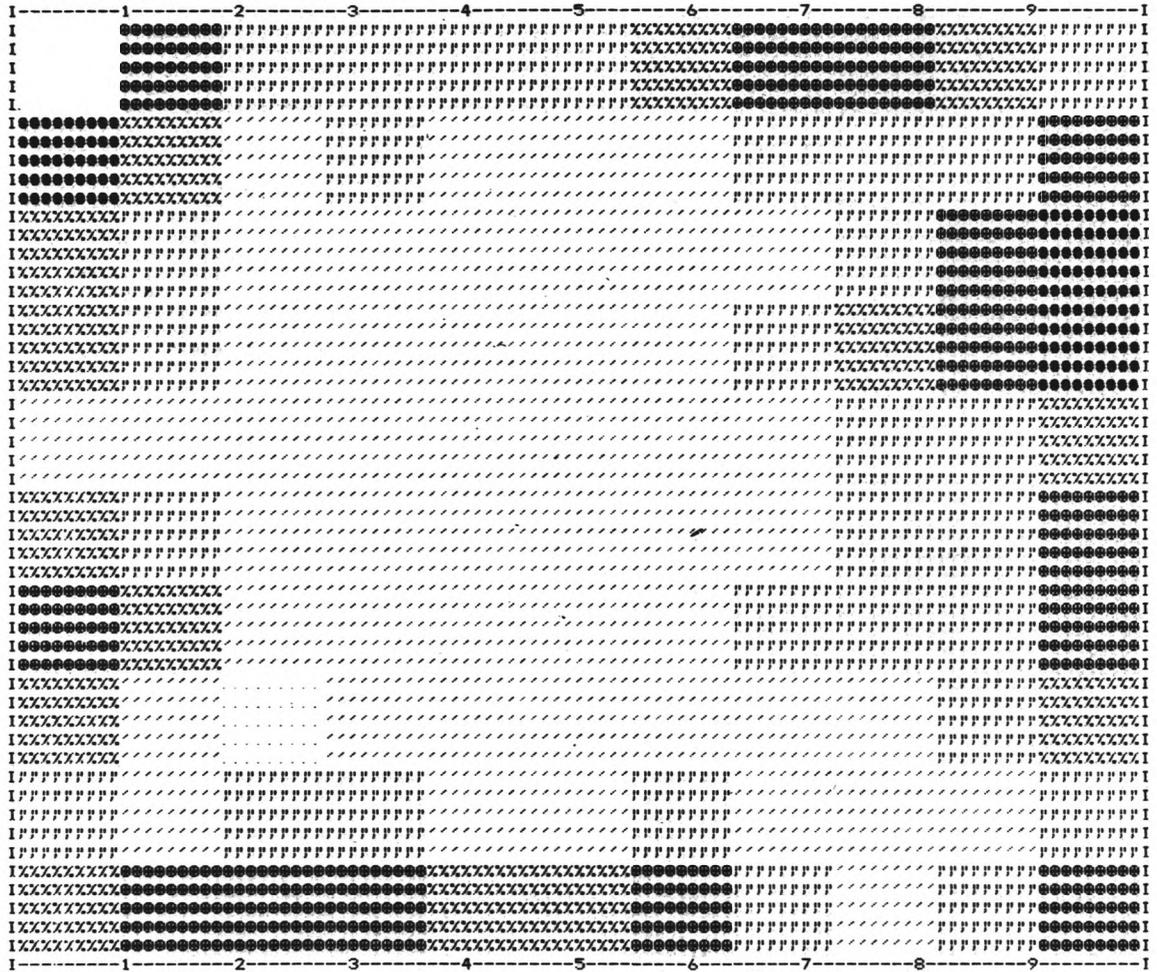


, QUERFORMAT, X-MIN = 0. 30000E+05, BREITE = 0. 55000E+05, Y-MIN = 0. 60000E+05, HOEHE = 0. 50000E+05

*, * = 0. 362E+01, *' = 0. 411E+01, *P = 0. 460E+01, *% = 0. 509E+01, *# = 0. 557E+01, *@ = 0. 606E+01,

Abb 8a: Block-Kriging von Inkohlungsmessungen nach KALKREUTH (1976)
Grautonbild der geschätzten Blöcke

INKOHLUNGSMESSUNGEN (KALKREUTH-DATEN) SCHAETZVARIANZ



, QUERFORMAT, X-MIN = 0. 30000E+05, BREITE = 0. 55000E+05 ,Y-MIN = 0. 60000E+05, HOEHE = 0. 50000E+05

* * = 0. 143E+00 , *' * = 0. 286E+00 , *' * * = 0. 429E+00 , *% * = 0. 572E+00 , *% * * = 0. 716E+00 , *% * * * = 0. 859E+00

Abb. 8b: Block-Kriging von Inkohlungsmessungen nach KALKREUTH (1976)
Grautonbild der Schätzvarianz jedes Blockes

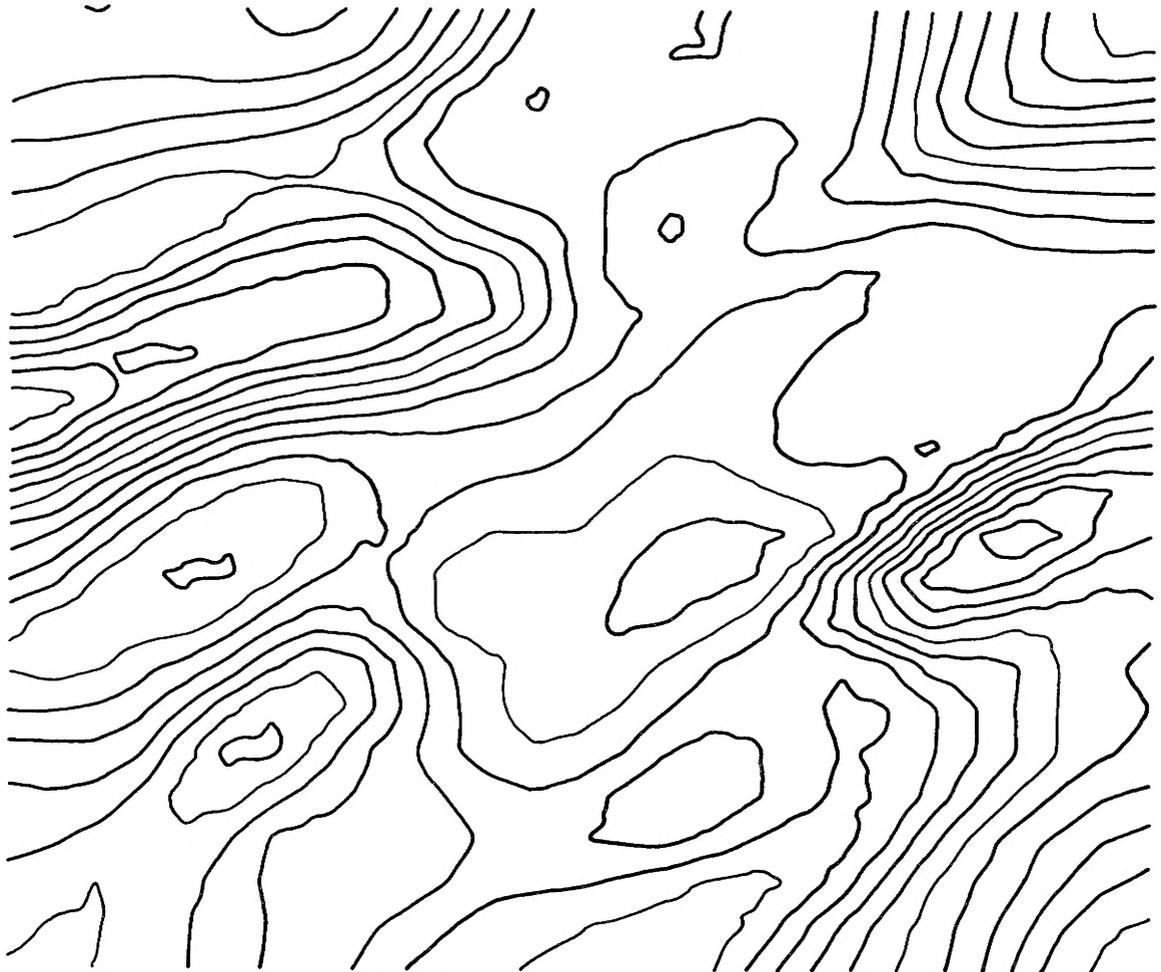


Abb. 9: Isolinienplan von Inkohlungsmessungen nach KALKREUTH (1976) durch Interpolation mittels gewichteter Mittel

METHODEN DER SOZIALRAUMANALYSE

von

THOMAS SCHUMANN⁺

ZUSAMMENFASSUNG

Die Q-Korrelationen zwischen sozialgeographischen Raumeinheiten ergaben eine nützliche geometrische Darstellung der Raumstrukturen. Dabei ließ sich die Korrelationsmatrix immer nur partiell (zu einem Vergleichsgebiet oder zwischen benachbarten Gebieten) auswerten. In den multivariaten Methoden der Faktoren- und Clusteranalyse werden alle Merkmale und Raumeinheiten gleichzeitig und gleichberechtigt verarbeitet. In Erweiterung der Q-Technik ermöglichen sie eine inhaltlich komplexe Klassifikation der Raumeinheiten in sich nicht überschneidende Klassen.

SUMMARY

The Q-correlations among social geographic unit areas resulted in a useful graphic illustration of the spatial structures. The correlation matrix, however, could be partially analyzed only (with respect to a comparable area or between neighbouring areas). All the attributes and the areas are handled simultaneously and with equal consideration according to multivariate methods of factor and cluster analysis. By expanding the Q-technique, it is possible to establish a complex classification of the areas with no overlapping classes.

РЕЗЮМЕ

Q-корреляции между социально-географическими единицами местности показали полезное геометрическое изображение структура местности. При этом только частично было возможно интерпретировать корреляционную матрицу (по отношению к сравнительной области или между смежными областями). Обработаны, одновременно и равноправно, все признаки и единицы местности в многомерных методах факторного анализа и кластер-анализа. При расширении Q-техники эти методы дают возможность сложной по содержанию классификации единиц местности в непересекающихся классах.

Einleitung

Innerhalb einer Stadt sind die Wohnstandorte unterschiedlicher Sozialgruppen nicht gleichmäßig verteilt sondern räumlich konzentriert. Um Infrastruktureinrichtungen den unterschiedlichen Bedürfnissen der einzelnen Bevölkerungsgruppen entsprechend planen zu können, ist eine kleinräumige Analyse der sozialräumlichen Differenzierung einer Stadt nach den Strukturmerkmalen der Wohnbevölkerung notwendig. Mögliche Techniken zur sozialräumlichen Differenzierung werden im folgenden am Beispiel von Berlin (West) dargestellt.

+ Anschrift des Verfassers: Thomas Schumann, Institut für Anthropogeographie, Angewandte Geographie und Kartographie der FU,
1000 Berlin 41, Grunewaldstr. 35.

Die Datenbasis

Die amtliche Statistik bietet für Berlin (West) eine Gliederung in 97 statistische Gebiete an. Für diese 97 Raumeinheiten hat die Arbeitsgruppe "Wertgleichheit" 25 Sozialindikatoren erstellt (siehe Tabelle 1). Die Rohdaten hierzu wurden in der Volkszählung 1970 und der Gebäude und Wohnungszählung 1968 erhoben. Aktuelle Analysen sind wegen fehlender Fortschreibung auf dieser Bezugsbasis nur nach Alter, Geschlecht und Nationalität möglich.

Der Korrelationskoeffizient als Ähnlichkeitsmaß für Raumeinheiten

In den meisten Untersuchungen wird die Korrelationsanalyse benutzt, um die Stärke und Richtung eines linearen Zusammenhangs zwischen zwei Variablen zu messen.

Ebenso läßt sich mit dem Korrelationskoeffizienten die Ähnlichkeit zweier Objekte (Raumeinheiten) bezüglich einer Menge von Merkmalen bestimmen (vergleiche [2]). Hierbei kehrt sich lediglich die Betrachtungsrichtung um: Sind die Daten in einer Matrix angeordnet mit den Variablen als Spalten und den Raumeinheiten als Zeilen, werden die Korrelationskoeffizienten statt zwischen den Spaltenvektoren (R-Technik) zwischen den Zeilenvektoren (Q-Technik) berechnet. Wertepaare sind nicht mehr zwei Variablen in n Raumeinheiten, sondern

1. Sozialindikatoren für die statistischen Gebiete von Berlin (West)

lfd. Nr.	Merkmal	Einheit
1	Anteil der Personen im Alter bis unter 15 Jahre	%
2	" von 15 bis u. 60 Jahre	%
3	" von 60 Jahren und mehr	%
4	Geschlechterproportion (Anteil der Frauen)	%
5	Anteil der Nichtdeutschen	%
6	Bevölkerungsdichte	Einw./ha
7	Anteil der Arbeiter an den Erwerbstätigen	%
8	" Angestellten und Beamten "	%
9	" Selbständigen	%
10	Anteil der Personen mit höchstem Schulabschluß Volks- und Hauptschule an den Personen mit abge- schlossener Schulausbildung	%
11	" Mittlere Reife	%
12	" Abitur	%
13	" Berufs-, Fach-, Ingenieurschule "	%
14	" Hochschule	%
15	Anteil der Wohnungen bis 30 qm	%
16	" 31 bis 70 qm	%
17	" 71 bis 130 qm	%
18	" 131 qm und mehr	%
19	Anteil der Wohnungen mit gleicher Anzahl Personen u. Räume	%
20	" mit 1 bis 2 Personen mehr als Räume	%
21	" mit 3 bis 4 Personen mehr als Räume	%
22	" mit 1 bis 2 Räumen mehr als Personen	%
23	" mit 3 bis 4 Räumen mehr als Personen	%
24	Anteil der Wohnungen ohne Bad	%
25	Anteil der Wohnungen ohne Toilette	%

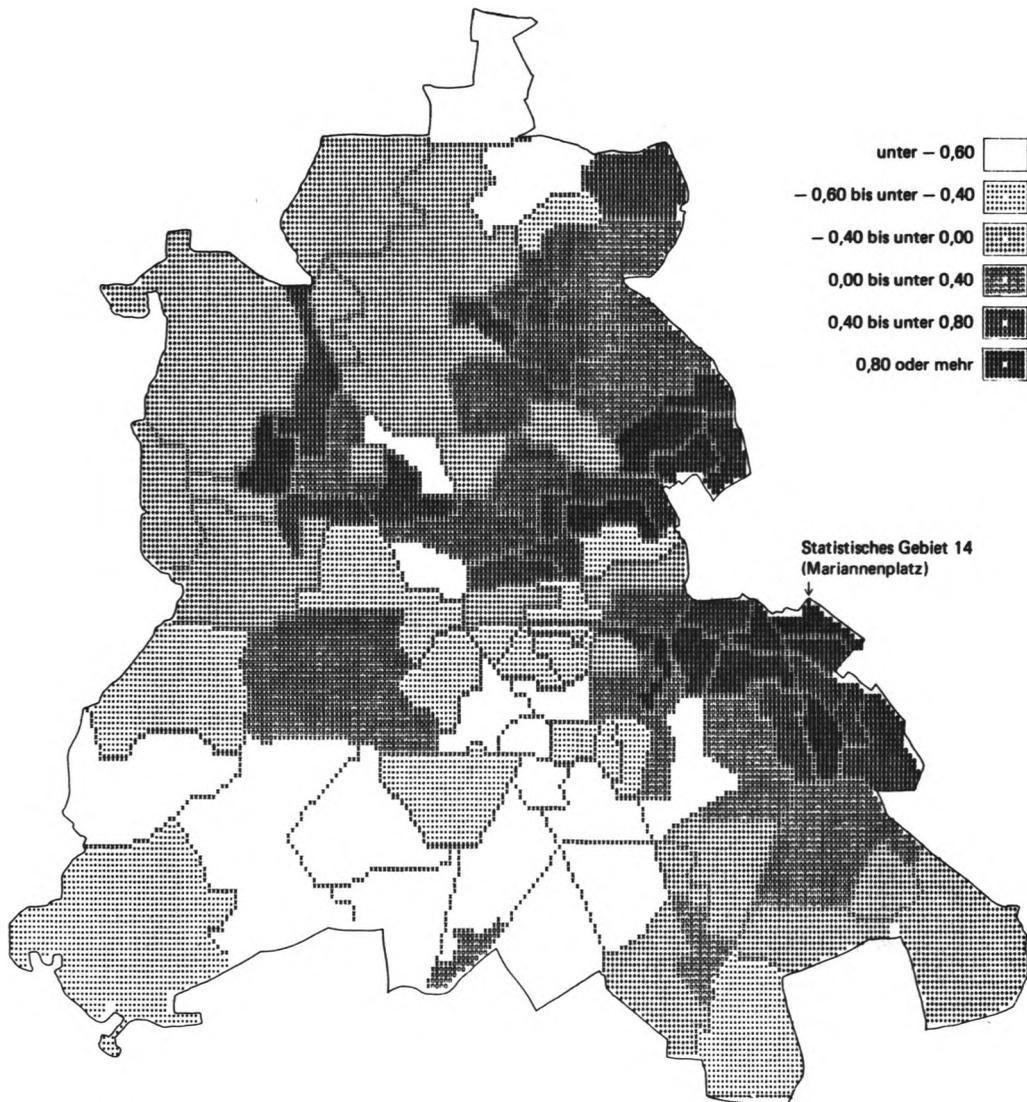


Abb. 1: Korrelationen mit dem statistischen Gebiet 14 (Mariannenplatz) in Berlin (West)
(SYMAP - Schnelldruckerkarte, erstellt am Statistischen Landesamt Berlin)

die Ausprägung von m Variablen in zwei Raumeinheiten. Haben diese Variablen in beiden Gebieten ähnliche Werte, treten niedrige, mittlere und hohe Variablenwerte paarweise auf. Die Raumeinheiten haben eine vergleichbare Struktur. Je größer ein Variablenwert in der einen Raumeinheit ist, desto größer ist der Wert auch in der anderen Raumeinheit.

Je nach Stärke des Zusammenhangs ist der Korrelationskoeffizient unterschiedlich hoch positiv. Sind die Variablenausprägungen in zwei Gebieten extrem verschieden, erscheinen hohe Variablenwerte in einer Raumeinheit zusammen mit niedrigen Variablenwerten in der anderen Raumeinheit und umgekehrt. Dies bewirkt einen negativen Korrelationskoeffizienten.

Um den verzerrenden Einfluß der unterschiedlichen Variablendimensionen auszuschalten, müssen die einzelnen Merkmale zuvor normiert werden. Dies geschieht am besten durch Standardisierung jeder Variablen mit der Z-Transformation:

$$Z_i = \frac{(X_i - \bar{X})}{S}$$

X_i = Variablenwert im Gebiet i

\bar{X} = Mittelwert der Variablen

S = Standardabweichung der Variablen

Z_i = transformierter Variablenwert
im Gebiet i

Die transformierten, dimensionslosen Variablen haben jetzt alle den Mittelwert 0.0 und die Standardabweichung 1.0. Sie sind hinsichtlich ihrer durchschnittlichen Größenordnung und Streuung unmittelbar vergleichbar.

Durch diese (notwendige) Transformation ist der Korrelationskoeffizient zwischen Raumeinheiten kein absolutes, sondern nur ein relatives Ähnlichkeitsmaß. Er ist abhängig von der Auswahl der Variablen und von der Gesamtheit der betrachteten Gebiete, denn diese bestimmen Mittelwert und Standardabweichung der beobachteten Variablen und damit die standardisierten Werte. Die Ähnlichkeit zwischen zwei Stadtgebieten ist demnach unterschiedlich, je nachdem, ob man sie im Rahmen eines Ortsteils oder im Rahmen der ganzen Stadt bestimmt. Korrelationskoeffizienten um 0.0 sind für einen untersuchten Raum jeweils durchschnittlich, ein Wert von +0.5 weist auf eine besonders hohe Ähnlichkeit hin, während ein Wert von -0.5 eine besonders große Verschiedenheit zweier Gebiete bedeutet. Kausalitäts- oder Signifikanzüberlegungen werden hier nicht angestellt.

Die Verteilungen der statistischen Gebiete wichen nicht wesentlich von einer Normalverteilung ab. Die Voraussetzung für die Berechnung einer Matrix der Produktmoment - Korrelationskoeffizienten von PEARSON war also erfüllt. Dieser Koeffizient entspricht dem Cosinus des Winkels, den zwei Raumeinheiten im Variablenraum bilden. Eine Verwendung des nur Ordinalskalenniveau voraussetzenden Rangkorrelationskoeffizienten von SPEARMAN wäre ebenfalls möglich.

Die symmetrische 97 x 97 Matrix enthält die Ähnlichkeitsmaße zwischen jedem möglichen Paar der statistischen Gebiete. Die Ähnlichkeit eines für bestimmte Probleme typischen Gebiets mit allen anderen statistischen Gebieten läßt sich durch Kartierung der entsprechenden Zeile oder Spalte der Korrelationsmatrix darstellen.

Hierzu wurde exemplarisch das statistische Gebiet 14 (Mariannenplatz) im Bezirk Kreuzberg gewählt (Abb.1). Die ca. 25.000 Bewohner dieses Gebiets haben einen besonders niedrigen sozialen Status. Der Anteil der Personen mit geringer Bildungs- und Berufsqualifikation ist sehr hoch. Oberdurchschnittlich viele Wohnungen sind klein und überbelegt, die sanitäre Ausstattung ist häufig unzureichend: 77% der Wohnungen haben kein Bad und 52% keine Inntoilette.

Mit diesem Gebiet korrelieren hoch positiv nahezu alle statistischen Gebiete innerhalb des im Westen durch den Tiergarten unterbrochenen Wilhelminischen Wohnrings. Auch die Altstadt von Spandau hat eine ähnliche Ausprägung der 25 Sozialindikatoren. Hohe negative Korrelationen findet man überwiegend in den südwestlichen Bezirken Zehlendorf und Steglitz, strukturell von dem statistischen Gebiet Mariannenplatz besonders verschiedene Stadtteile.

Eine Karte der Korrelationskoeffizienten mit einem Gebiet statushoher Wohnbevölkerung (z.B. stat. Gebiet 50 Argentinische Allee) zeigt ein nahezu komplementäres Bild. Dagegen ergibt sich ein völlig neues Raummuster, wenn man die Ähnlichkeiten zu einer Raumeinheit zwischen diesen Extremen (z.B. stat. Gebiet 24 Stuttgarter Platz) darstellt (Karten in [1]).

Die dem Vergleichsraum sehr ähnlichen Gebiete können als ein relativ homogener Stadtteiltyp zusammengefaßt werden. Ein besonderer Vorteil dieser Methode ist, daß man durch die freie Wahl des Vergleichsgebietes den Typenmittelpunkt bzw. Schwerpunkt der Gruppe selbst festlegen kann.

Homogene Regionen und wichtige sozialräumliche Grenzen treten deutlicher hervor, wenn man die Korrelationskoeffizienten zwischen benachbarten statistischen Gebieten kartiert. In Abb. 2 wurden die Grenzlinien je nach Ähnlichkeit verschieden stark eingezeichnet und zusätzlich besonders ähnliche Gebiete ($r + 0.85$) mit einem Gleichheitszeichen verbunden.

Sofort fallen drei große Regionen auf, in denen kaum Unterschiede zwischen Nachbargebieten bestehen:

1. Der innerhalb des Wilhelminischen Großstadtgürtels liegende Teil des Bezirks Wedding zusammen mit Moabit.
2. Der Bezirk Kreuzberg mit Ausnahme der Friedrichstadt und das nördliche Neukölln.
3. Ein vom südwestlichen Stadtrand bis in die Innenstadt regender Keil entlang der Achse Berlin-Potsdam.

Dünnbesiedelte Gebiete wie der Grunewald oder der Tiergarten erscheinen deutlich abgesondert, ebenso isolierte Industriegebiete wie die Goerzwerke oder das statistische Gebiet Flottenstraße. Ganz allgemein erweist sich der Norden Berlins als besonders heterogen, was sicher auch mit der überdurchschnittlich großen Bedeutung der Industrie in diesem Teil der Stadt zusammenhängt.

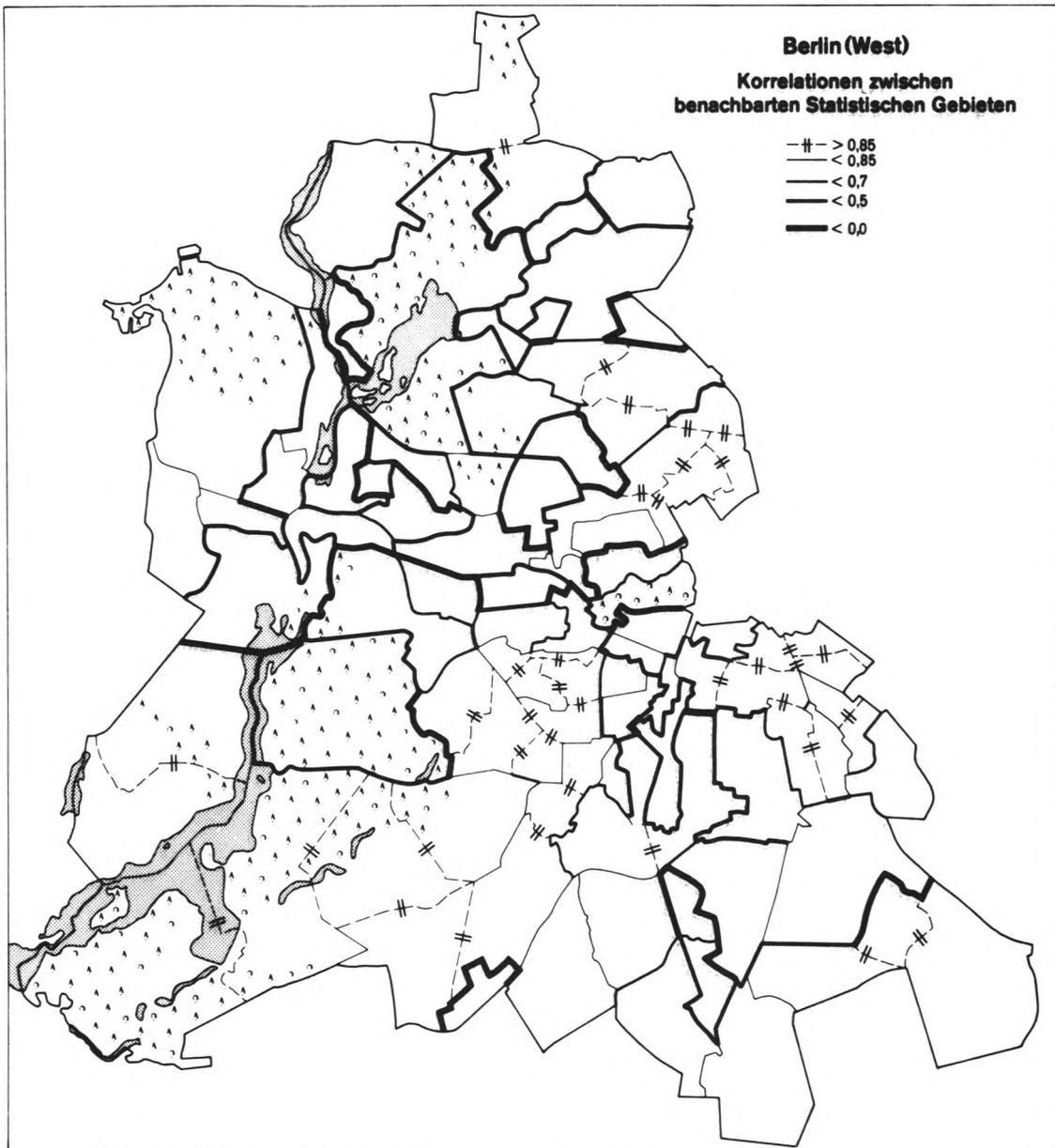


Abb. 2: Korrelationen zwischen benachbarten statistischen Gebieten in Berlin (West)

Karten dieser Art erleichtern eine Abgrenzung von zusammenhängenden Regionen. Eine Typisierung kann jedoch hieraus allein nicht abgeleitet werden. So sind die Ähnlichkeiten getrennt liegender Gebiete wie die der Bezirke Kreuzberg und Wedding aus dieser Karte nicht ersichtlich. Umgekehrt können zwei nicht ähnliche Raumeinheiten durch eine Kette von Gebieten hoher Ähnlichkeit miteinander verbunden werden, falls sich der Sozialraum nur ganz allmählich und kontinuierlich ändert.

Lediglich die Veränderung der Sozialstruktur innerhalb einer Stadt wird dargestellt, keine inhaltlichen Aussagen zur Sozialstruktur selbst. Durch die Analyse und Darstellung der wichtigen sozialräumlichen Grenzen erhält man aber einen guten Einblick in die innere Differenzierung eines Raumes.

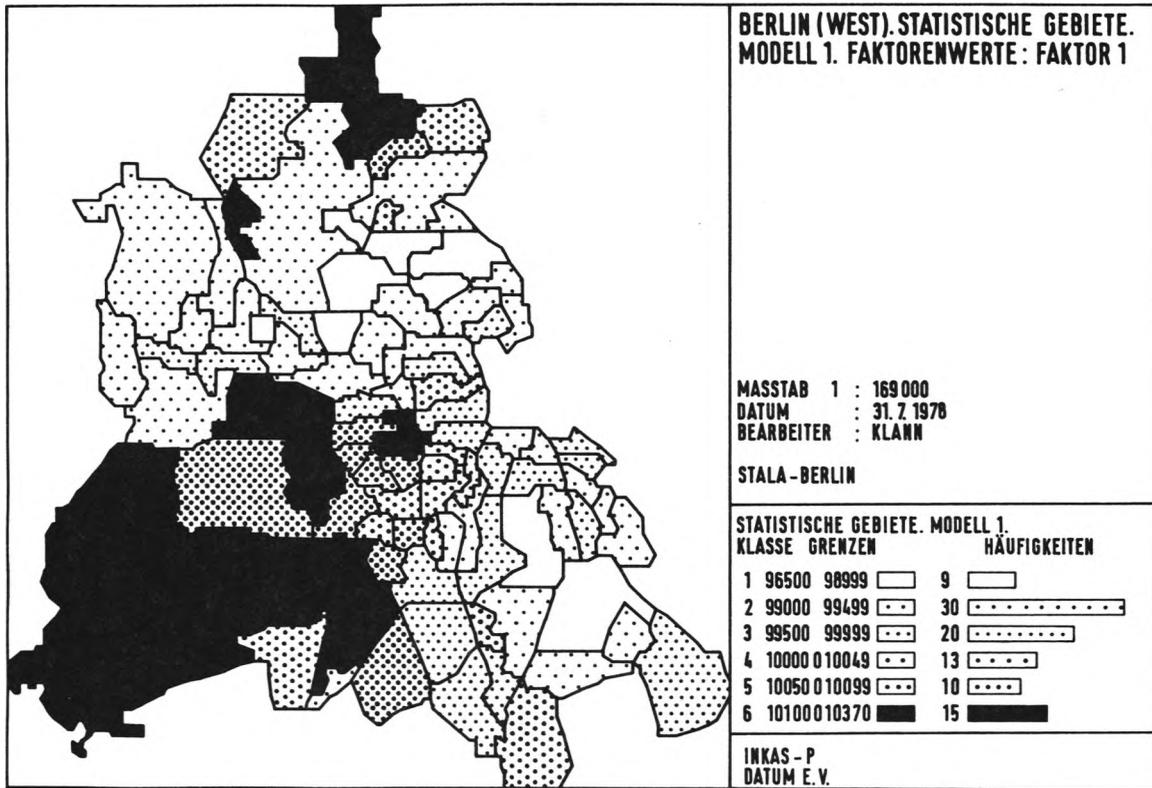


Abb. 3: Statistische Gebiete in Berlin (West): Faktor 1 - sozialer Status -

Stadtteiltypisierung mit Faktoren- und Clusteranalyse

Clusteranalyse ist ein Sammelbegriff für eine ganze Anzahl automatisierter Klassifikationsverfahren, die ähnliche Objekte zu Gruppen oder Typen zusammenfassen. Dabei sollen die gefundenen Gruppen in sich weitgehend homogen, voneinander aber gut separiert sein. Die Faktorenanalyse isoliert aus den Variablen wenige überschaubare Größen, die die komplexe Ausgangsinformation hinreichend genau beschreiben und erklären. Da die Faktoren zueinander unkorreliert sind, eignen sich die Faktorwerte als Klassifikationsmerkmale einer Clusteranalyse.

In der Faktorenanalyse wurden nicht alle 25 Sozialindikatoren verwendet. Verschiedene Variablengruppen ergänzen sich zu 100%. Dies würde die Korrelationsmatrix überbestimmen. Bei geschlossenen Prozentsystemen wurde mindestens eine Variable ausgeschlossen. In Faktorenanalysen mit unterschiedlicher Variablenauswahl erwies sich eine Lösung mit 3 Faktoren als stabil und interpretierbar. Die 3 Faktoren erklären zusammen 68.9% der Gesamtvarianz der benutzten 19 Variablen.

Die Ausprägungen der Faktoren in den statistischen Gebieten (Faktorwerte) bilden voneinander unabhängige Grundmuster der Variation der Raumeinheiten. In Abb. 3 sind die Werte des ersten Faktors (Varianzenanteil 34.6%) dargestellt. Dieser Faktor ist durch hohe Ladungen der Variablen Anteil der Selbstständigen (+0.908), Anteil der Personen mit Hochschulabschluß (+0.856), Anteil der Wohnungen mit über 130 qm (+0.913) sowie Anteil der Wohnungen mit 3 bis 4 Räumen mehr als Personen (+0.906) charakterisiert. Die Gebiete mit hohen Faktorwerten sind die von den oberen sozialen Schichten bevorzugten Wohnstandorte. Besonders deutlich ist ihre Konzentration in der Umgebung des Grunewalds.

Die 25 Sozialindikatoren korrelieren untereinander hoch. Damit überlappen sie sich in ihrem Informationsgehalt. Werden miteinander hoch korrelierende Variablen für eine Klassifikation verwendet, wird ein Teil der Information mehrmals in die Analyse eingegeben. Eine solche künstliche Gewichtung wird vermieden, wenn man die zueinander unkorrelierten Faktoren als Gruppierungsvariablen verwendet. Sie enthalten die raumrelevanten Aussagen der Variablen in komprimierter, sich nicht überschneidender Form.

Klassifikation anhand von 3 extrahierten Faktoren
(erklärte Varianz von 68,9 v.H.)

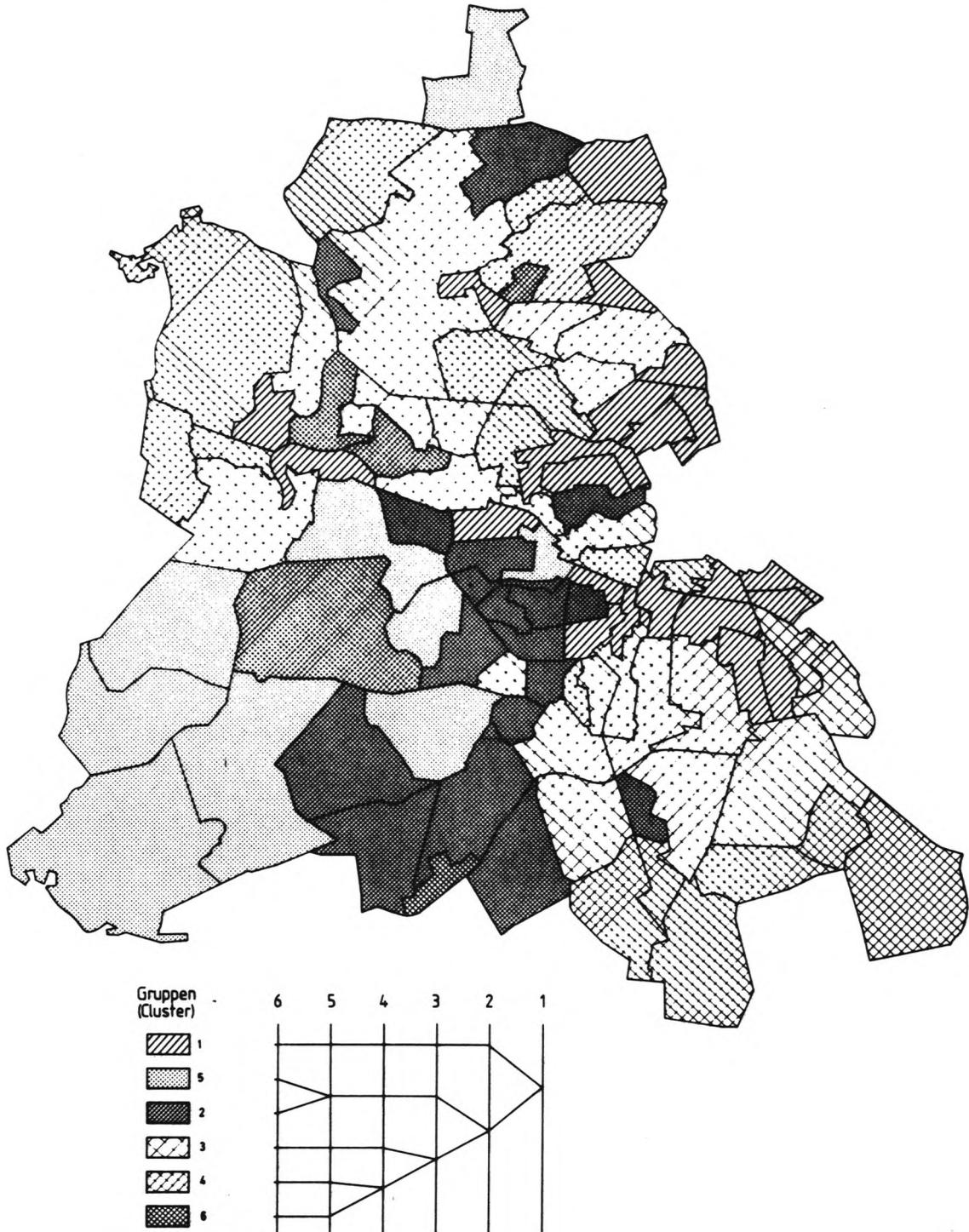


Abb. 4: Klassifikation anhand von drei extrahierten Faktoren (erklärte Varianz von 68.9 v.H.)

Jede Klassifikation von unterschiedlichen Objekten ist mit einer Verallgemeinerung und daher mit einem Informationsverlust verbunden. Statt der individuellen Variablenwerte der Raumeinheiten werden nur noch die Mittelwerte der Variablen in den Klassen betrachtet. Der durch eine Gruppierung entstehende Informationsverlust läßt sich exakt durch die Varianz innerhalb der Gruppen messen, der sogenannten "error sum of squares". Sie ist definiert als Summe der quadrierten Distanzen der Individuen zu ihren Clustermittelpunkten. Auf dieser Messung des Informationsverlustes beruht das hier angewandte Klassifikationsverfahren von WARD (vergleiche [4]).

Es handelt sich um ein hierarchisch agglomeratives Verfahren, d.h. alle n Raumeinheiten werden zu Beginn der Analyse als einzelne Cluster angesehen. In $n-1$ Fusionsschritten werden jeweils zwei Cluster zusammengefaßt. Dieser Prozeß wird bei einer geeigneten Anzahl von Klassen unterbrochen. Nach WARD wird vor jedem Schritt jede mögliche Fusion geprüft. Die beiden Cluster werden zusammengefaßt, die das geringste Anwachsen des Informationsverlustes bewirken. Das Verfahren von WARD wird dadurch sehr rechenzeitintensiv, die Cluster sind aber meist homogener und kompakter als bei anderen Techniken.

Die Berechnungen erfolgten mit dem für Clusteranalysen entwickelten Programmpaket CLUSTAN von D. WISHART [5]. Da beim Übergang von sechs auf fünf Gruppen der Informationsverlust sprunghaft zunahm, wurde die Einteilung in sechs Klassen gewählt (Abb. 4).

Wegen der räumlichen Nachbarschaft strukturähnlicher Sozialgruppen bzw. wegen der räumlichen Trennung unterschiedlicher Sozialgruppen sind die einer Klasse zugehörigen statistischen Gebiete nicht zufällig über Berlin verstreut, sondern sie treten auch räumlich geklumpt auf. Gruppe 1 enthält die Altbaugebiete mit sozial schwacher Wohnbevölkerung. Hierzu gehören die größten Teile der Bezirke Wedding und Kreuzberg. Die statistischen Gebiete in Gruppe 3 und Gruppe 4 haben hinsichtlich ihres Sozialstatus ungefähr für Berlin durchschnittliche Werte. Sie unterscheiden sich aber deutlich voneinander im Alter der Wohnbevölkerung. In den überwiegend am Stadtrand gelegenen statistischen Gebieten der Gruppe 4 ist der Anteil der Kinder und Jugendlichen an der Wohnbevölkerung groß, während die Bevölkerung in Cluster 3 überaltert ist. Cluster 5 und Cluster 2 stellen die sehr guten bzw. guten Wohngegenden Berlins dar. Mit Ausnahme dreier Gebiete am nördlichen Stadtrand (Frohnau, Hermsdorf, Konradshöhe) liegen sie in einem kompakten Keil im südwestlichen Teil der Stadt. Gruppe 6 ist eine Zusammenfassung von kaum bewohnten Industrie- oder Waldgebieten.

Diese Klassifikation deckt sich weitgehend mit den Ergebnissen der oben beschriebenen Q-Technik bei der Korrelationsanalyse. Benachbarte statistische Gebiete mit niedrigen oder negativen Korrelationskoeffizienten gehören zu verschiedenen Klassen. Cluster 1 enthält nahezu alle Raumeinheiten, die mit dem statistischen Gebiet Mariannenplatz hoch korrelieren. Wiederum erscheint der Norden Berlins im Vergleich zum Süden sehr inhomogen.

Will man z.B. neue Planungsbereiche abgrenzen, sollen die zu einer Gruppe gehörenden räumlichen Einheiten möglichst zusammenhängende Regionen bilden. Eine solche Regionalisierung ist ebenfalls mit Faktorenanalyse und Clusteranalyse möglich. Neben den Faktorwerten werden die topographischen Koordinaten der Gebietsmittelpunkte mit Hoch- und Rechtswert in standardisierter Form als Gruppierungsmerkmale eingegeben (Karte in [1]).

Dabei läßt sich der Nachbarschaftseffekt je nach Fragestellung unterschiedlich gewichten, wenn man die standardisierten Lagekoordinaten streckt bzw. staucht. Als Ergebnis werden mehr oder weniger bevorzugt räumlich beieinander liegende Gebiete zu einem Cluster zusammengefaßt.

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] BRAUN, G., KOPP, N & SCHUMANN, T. (1978): Einführung in die Quantitative und Theoretische Geographie.- Empirische, Theoretische und Angewandte Regionalforschung, 1, 2. Aufl., 370 S., (Manuskripte des Geographischen Instituts der FU Berlin), Berlin
- [2] COLE, I.P. & KING, C.A.M. (1968): Quantitative Geographie.- 692 S., (Wiley & Sons), London - New York - Sydney
- [3] OBERLA, K. (1971): Faktorenanalyse.- 2. Aufl., 339 S., (Springer), Berlin - Heidelberg - New York
- [4] WARD, H.J. (1963): Hierarchical Grouping to Optimize an Objective Function.- J. Am. Statist. Assoc., 58, 236 - 244, New York
- [5] WISHART, D. (1970): CLUSTAN IA User Manual.- 118 S., (Computing Laboratory University of St. Andrews), St. Andrews, Scotl. (Computerausdruck - ZEDAT, Zentraleinrichtung für Datenverarbeitung der FU Berlin)

KLASSIFIZIERUNG VON OSTRACODENSCHALEN MIT
HILFE VON FOURIER-KOEFFIZIENTEN

von

CURT-ALBERT SCHWIETZER⁺

ZUSAMMENFASSUNG

Es besteht die Möglichkeit, die merkmalsarmen Ostracoden der Gattung Darwinula über ihren Schalenumriß zu bestimmen. Hierzu wird der Umriß der vergrößerten Ostracode digitalisiert, eine Spline-Interpolation der entstehenden Kurve durchgeführt und diese einer Fourier-Transformation unterworfen. Mit den ersten 10 Koeffizienten der Power-Spektren wird eine Clusteranalyse nach WARD (1963) unter Verwendung des Programmpaketes CLUSTAN von WISHARD (1978) durchgeführt. Nach diesem Verfahren lassen sich zwei Gruppen unterscheiden, die mit herkömmlichen Methoden nur schwer zu trennen sind.

SUMMARY

The usually featureless ostracods, in this study the species Darwinula, can possibly be classified according to their shell outlines. For this purpose a digital model is made of the ostracod's shell contour and a Spline interpolation is carried out on the resulting curve, followed by a Fourier transformation. The first 10 coefficients of the power spectrum are then subjected to a cluster analysis (WARD 1968) using the program CLUSTAN from WISHARD (1978). In this manner two groups can now be distinguished that were formerly extremely difficult to separate.

РЕЗЮМЕ

Возможно определить остракоды безхарактерных черт рода Darwinula при помощи контура оболочки. Для этого контур остракодов подвергается преобразованию в цифровую форму, проведена "сплайн" интерполяция результирующей кривой. Кривая подвергается преобразованию по Фурье. С первыми 10 коэффициентами спектральной функции проведен кластер-анализ по Варду (1963) под применением пакета системных программ "CLUSTAN" Вишарда (1978). Согласно с этим методом возможно отличать две группы. Трудно было бы разделить эти группы с помощью знакомых методов.

⁺ Anschrift des Verfassers: Curt-Albert Schwietzer, Institut für Paläontologie der FU Berlin,
1000 Berlin 33, Schwendener Str. 8.

Ein immer wiederkehrendes Problem der Paläontologie stellt die Bestimmung von Fossilien dar. Ist dies bei merkmalsreichen Individuen noch relativ leicht durchzuführen, so stößt man bei der Einordnung merkmalsarmer Fossilien auf große Schwierigkeiten.

Die Ostracodenarten der Gattung *Darwinula* (BRADY & ROBERTSON 1885) gehören zu dieser Gruppe. Im Gegensatz zur Zoologie, die die Ostracoden über den Weichkörper bestimmt, geschieht dies, gezwungenermaßen, in der Paläontologie über deren Schale.

Darwinula ist vom Karbon bis in die Gegenwart bekannt. Sie ist ein glattschaliger schwimmunfähiger Süßwasserbewohner, kann aber auch vereinzelt im Brackwasser auftreten und zeigt dann meistens eine Aussüßung des Sedimentationsraumes an (BRENNER 1976).

Die Literatur nennt etwa 80 Arten (MOLLER, G.W. 1912; ZHONG, X. 1964; ZALANYI, 1959; BATE, A. 1965; LYUBIMOVA, P. 1955).

Diese Beschreibungen sind teilweise wenig zureichend, so daß eine Bestimmung der Art oftmals schwierig ist.

Da das Muskelfeld innerhalb einer Art variieren kann, Porenkanäle bis heute nicht beobachtet wurden und das Geschlecht schwer bestimmbar ist (meistens ist der männliche Vertreter einer Art unbekannt), kann die Bestimmung nur über den Schalenumriß erfolgen (SOHN, I.G. 1976; MCGREGOR, D. 1969).

Die Schalenform wird meist nur als "ovalförmig mit spitzem vorderen Ende und stumpf abgerundeten hinteren Ende" charakterisiert.

Da die Anzahl der meßbaren Parameter wie Länge, Höhe, Breite beschränkt ist und auch eine Approximation des vorderen und hinteren Endes der Ostracodenklappe durch Kreise die Schalenform ungenügend widerspiegelt, würde eine statistische Untersuchung der üblichen quantitativen Parametern der *Darwinula*-arten wenig Aussagen erbringen. Auf ähnliche Probleme stießen M. CLARK & I. CLARK 1976 bei der statistischen Bearbeitung von Sedimentkörnern, die sie auf Grund ihrer Form unterschiedlichen Sedimentationsräume zuordnen wollten. Sie lösten das Problem, indem sie Sedimentkornumrisse durch Fourier-Reihen approximierten.

Ausgehend von dieser Arbeit soll im Folgenden nun eine Möglichkeit gezeigt werden, Individuen aufgrund ihrer Schalenumrißform zu trennen oder zu Gruppen zusammenzufassen.

Für diese Untersuchungen wurden Vertreter der Gattung *Darwinula* (Ostracoda) von zwei verschiedenen Fundpunkten ausgewählt.

Bei diesen beiden Lokalitäten handelt es sich um Masaya, am Titicaca See auf bolivianischer Seite gelegen, und um die Kohlengrube Guimarota, die sich in der Nähe von Leiria in Portugal befindet. Die *Darwinulae* aus Masaya sind subrezent, die aus Guimarota stammen aus dem Kimmeridge.

Die rechten Klappen adulter Tiere (Masaya 48 Stück; Guimarota 55 Stück) wurden mit Hilfe eines Zeichenmikroskops 350x vergrößert und mittels eines Digitalizer, Marke Aristogrid digitalisiert (Abb. 1a).

Aus den so gewonnenen kartesischen Koordinaten, etwa 400 je Schale, wurde der Schwerpunkt errechnet und die Koordinaten in der Weise transformiert, daß der Schwerpunkt der Ursprung eines neuen Koordinatensystems darstellt (Abb. 1b).

Danach wurden die kartesischen Koordinaten in Polarkoordinaten umgewandelt, durch eine Spline-Interpolation 3-ten Grades interpoliert und 256 äquidistante Stützstellen geschaffen (Abb. 1c, 1d) (SAUER, R).

Diese 256 neu errechneten Punkte sind für die spätere Fast Fourier Transformation erforderlich.

Trägt man die Polarkoordinaten XP und YP im rechtwinkigen Koordinatensystem gegeneinander auf, so erhält man eine Kurve, die an eine harmonische Schwingung mit der Periode 2π erinnert (Abb. 2).

Daraufhin erfolgte eine Fourier-Transformation der gesplinten Polarkoordinaten:

$$YP = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos n\pi x + b_n \sin n\pi x)$$

Vergleichsanalysen mit den ersten 10, 15 und 20 Fourierkoeffizienten ($a_1, a_2, a_3, \dots, a_{10}$) und ($b_1, b_2, b_3, \dots, b_{10}$) ergaben keine nennenswerten Unterschiede zwischen diesen. Bereits die ersten 10 Fourierkoeffizienten erklären also den Kurvenverlauf ausreichend. Aus den Koeffizienten wurde danach das Power-Spektrum der Fourierreihe ermittelt.

Führt man mit diesen 10 für die Ostracodenschale charakteristischen harmonischen Zahlen des Powerspektrums eine Clusteranalyse mit dem Programmpaket CLUSTAN (WISHART 1978) nach WARD 1963 durch, so läßt sich

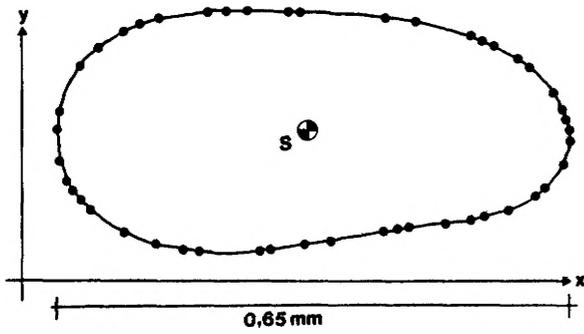


Abb. 1a

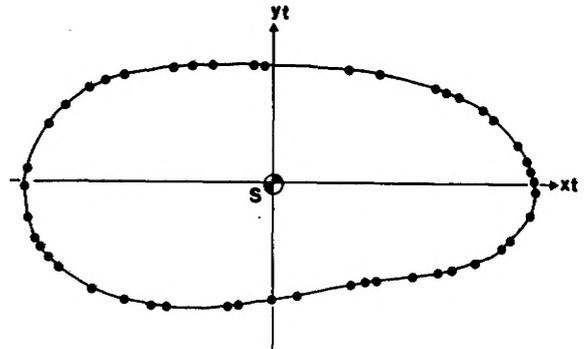


Abb. 1b

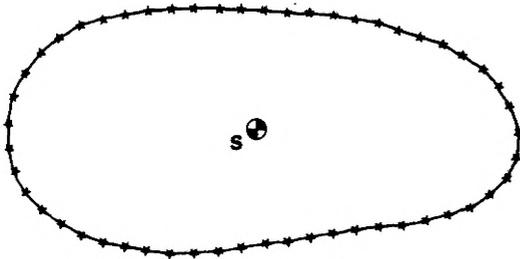


Abb. 1c

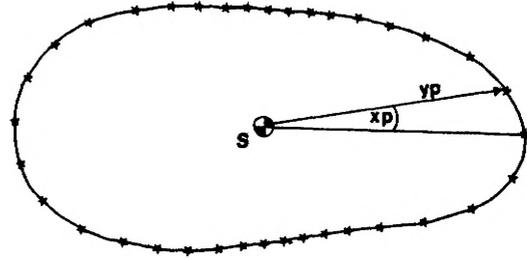


Abb. 1d

Abb. 1: a, b Digitalisierung und kartesische Koordinatentransformation von Schalenurissen der Ostracoden-Gattung DARWINULA
c, d Transformation der Daten in Polarkoordinaten und Spline-Interpolation 3. Grades zur Schaffung äquidistanten Stützstelle

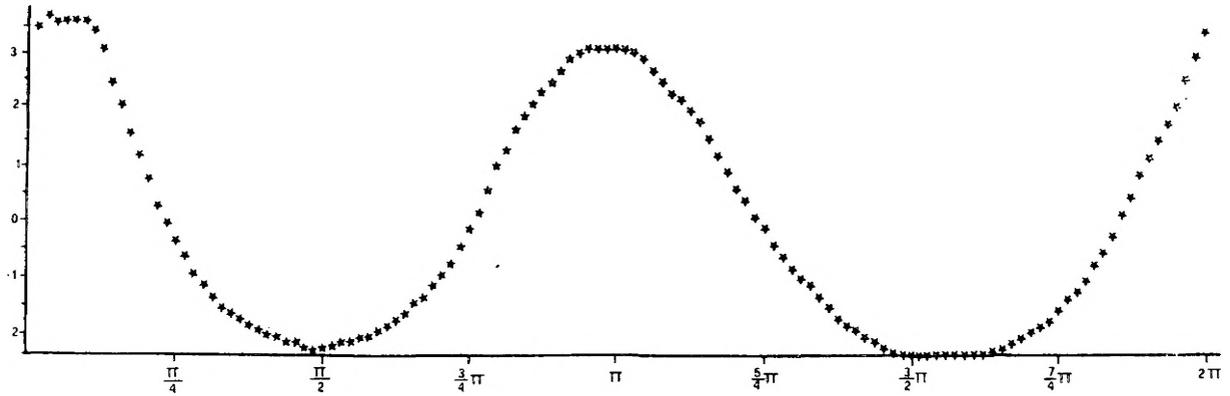


Abb. 2: Darstellung der 128 äquidistant verteilten, auf den Mittelwert 0 normierten Stützstellen im kartesischen Koordinatensystem

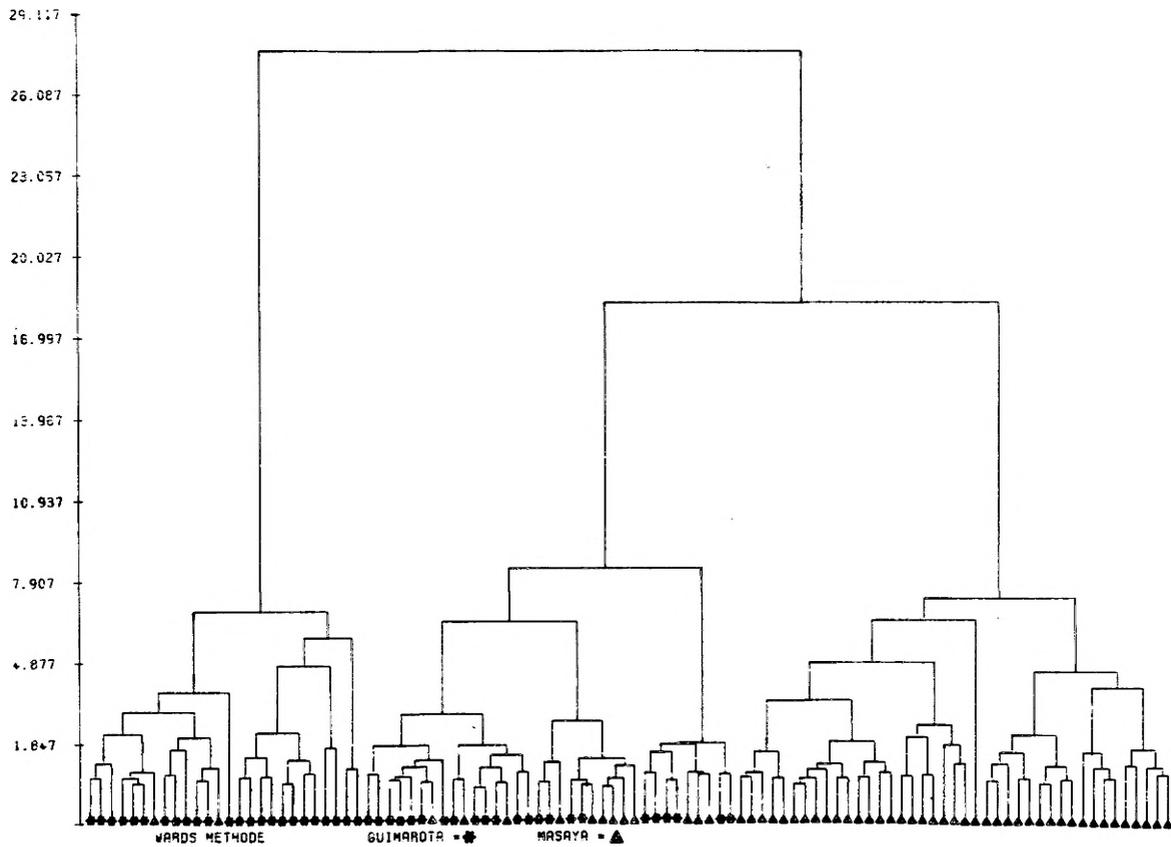


Abb. 3: Dendrogramm der Ostracoden von den Fundpunkten Guimarota und Masaya (aus den ersten 10 Koeffizienten des Power-Spektrums, nach der von WARD (1963) entwickelten Methode)

Abb. 4: Arbeitsgang zur Unterscheidung zweier Ostracodenpopulationen mittels Fourier- und Clusteranalyse



eine Trennung der Darwinulae der Fundpunkte Masaya und Guimarota erkennen (Abb. 3). WARD's Verfahren wurde angewandt, da es versucht eine möglichst homogene Gruppierung zu finden. Dies geschieht, indem sukzessive jeweils jene Gruppen fusioniert werden, die den geringsten Zuwachs zu einem "Heterogenitätsmaß" liefern. Als solches wird das Varianzkriterium verwendet.

Nach jedem Gruppierungsschritt werden jene Gruppen zusammengefaßt, die das Varianzkriterium minimal vergrößern (WARD 1963).

Ob es sich bei den hier mittels Clusteranalyse getrennten Individuen um unterschiedliche Arten handelt oder, ob der Formenunterschied der Ostracodenklappe durch Faziesunterschiede begründet werden kann, soll an dieser Stelle nicht weiter erörtert werden. Es soll vielmehr gezeigt werden, daß durch die Angabe der ersten 10 Fourierkoeffizienten der Schalenumriß einer Darwinulaart besser und genauer beschrieben werden kann als durch subjektive Angaben, wie "spitz oval oder gut gerundet". Die Bestimmung der 10 harmonischen Zahlen soll natürlich die übliche Formbeschreibung der Ostracodenschale in keiner Weise ersetzen, sondern nur ergänzen.

Abschließend möchte ich darauf hinweisen, daß älteren Autoren eine Bestimmung von Fourierkoeffizienten aus rechentechnischen Gründen unmöglich war. Heutzutage aber, da entsprechende Rechenprogramme und Digitalizer zur Verfügung stehen, sind derartige Fourieranalysen durchaus sinnvoll, da der Zeitaufwand im Vergleich zum Ergebnis als vertretbar erscheint.

LITERATURVERZEICHNIS

- BATE, R.H. (1967): The Bathonian Upper Estuarine Series of eastern England (Part I: Ostracoda).- Bull. British Mus. (Natural Hist.), Geol.14, 28 - 29, London
- BRADY & ROBERTSON (1885): Genus Darwinula.- In: JONES, T.R. (1885): On the Ostracoda of Purbeck Formation; with notes on Wealden species.- Q. Jl. geol. Soc. London, 41, S. 346, London
- BRENNER, P. (1976): Ostracoden und Charophyten des span. Wealden.- Palaeontographica, A152, 4-6, 91 - 201, Stuttgart
- CLARK, M. & CLARK, I. (1976): A Sedimentological Pattern Recognition Problem.- In: MERRIAM, D. (Ed.) (1976): Quantitative Techniques for the Analysis of Sediments.- Computers and Geology, 1, 121 - 141, (Pergamon Press), Oxford etc.
- LYUBIMOVA, P.S. (1955): Mesozoic Ostracodes from Middle Volga area and Obshchiy Syrt (in Russisch).- In: LYUBIMOVA, P.S. & KHABAROVA, T.N. (1955): Mesozoic ostracodes from the Volga-Ural region (in Russisch).- Vses. Neft. Nauchno-Issled. Geol.-Razved. Inst. (VNIGRI), Trudy, 1956 n.s., 84, S. 27, Leningrad
- " (1956): Ostracoda of the Cretaceous deposits of the eastern part of the Mongolian People's Republic and its significance for stratigraphy (in Russisch).- Vses. Neft. Nauchno-Issled. Geol.-Razved. Inst. (VNIGRI), Trudy, 1956 n.s., 93, 119 - 120, Leningrad
- MCGREGOR, D. (1969): The reproductive potential, life history and parasitism of the freshwater Ostracod Darwinula stevensoni (BRADY & ROBERTSON).- In: NEALE, J. (Ed.) (1969): The taxonomy and ecology of recent Ostracoda.- 195 - 221, (Oliver & Boyd), Edinburgh
- MOLLER, G.W. (1912): Das Tierreich, eine Zusammenstellung und Kennzeichnung der rezenten Tierformen.- Auftr. K. preuss. Akad. Wiss., 31, 1 - 434, Berlin
- SOHN, I.G. (1976): Antiquity of the adductor muscle attachment scar in Darwinula.- Abh. Verh. naturwiss. Ver. Hamburg, N.F., 18/19 Suppl., 305 - 308, Hamburg
- WARD, H.J. (1963): Hierarchical Grouping to optimize an Objective Function.- J. Am. Statist. Assoc., 58, 236 - 244, New York
- WISHART, D. (1978): CLUSTAN User Manual.- Inter University/Research Councils Series, 47, 3. Aufl., 175 S., (Program Library Unit), Edinburgh
- ZALANYI, B. (1959): Eszak-Bakonyi apti Ostracoda Fauna'k.- Magyar Állami Földt. E'vk, 47, 2, 368 - 430, Budapest
- ZHONG, X. (1964): Upper Triassic and middle Jurassic ostracods from the Ordons Basin (in Chinesisch).- Acta Pal. Sinica, 12, 3, 432 - 451, Peiping

THE GEOLOGIC APPLICABILITY OF SOME CONSTITUTIVE EQUATIONS

von

MICHAEL SHULMAN⁺

SUMMARY

In theoretical tectonics the constitutive equation forms the basis of any numerical or analytical solution. Although many constitutive equations have been utilized, the difference between them have rarely been investigated. The difference between several elementary constitutive equations and their applicability are examined in regard to cleavage.

ZUSAMMENFASSUNG

Das Stoffgesetz bildet bei der Erklärung tektonischer Gefüge eine der größten Unbekannten. Hier werden die Unterschiede verschiedener Stoffgesetze aufgezeigt und ihre Anwendbarkeit auf die Schieferung untersucht.

РЕЗЮМЕ

Закон веществ является одной из самых значительных неизвестных при объяснении тектонических сложений. Показан различие разных законов веществ и исследована их применимость к сланцеватости.

The last 20 years have seen a growing literature on the mechanics of folding. The impulse given by the publications of papers by BIOT (1957) and RAMBERG (1959) has enabled us to gain an insight into the initial formation of folds. Whereas the investigations of Biot and Ramberg utilized a linear constitutive equation, later publications have incorporated nonlinear constitutive equations in an attempt to receive a more realistic fold geometry (see CHAPPLE (1969), FLETCHER (1974), SMITH (1977), PARRISH (1973), or JOHNSON (1977)). The constitutive equations currently being applied can be written as

$$T = f(D) \quad (1)$$

where T is the stress tensor and D the strain rate tensor. A fluid that behaves according to (1) is called a Reiner-Rivlin fluid. These constitutive equations have been derived from triaxial tests. HOBBS (1972) pointed out that under the limiting conditions of a triaxial test, whose deformation corresponds to a pure shear, all simple fluids behave as a Reiner-Rivlin fluid and therefore the constitutive equations derived

⁺ Author's addresses: Dipl.-Min. Michael Schulman, Institut für Geologie d. FU,
1000 Berlin 33, Altensteinstr. 34A.
Technische Universität Berlin, Institut für Kerntechnik,
1000 Berlin 10, Marchstr. 18.

from the triaxial tests are insufficient to predict behaviour due to other deformations. Furthermore HOBBS (1972) showed that if a generalized shearing motion is imposed all simple fluids behave as a Rivlin-Ericksen fluid. Thus the deformation determines the constitutive equation and following PIPKIN (1972:132) we can assume that a material has many different constitutive equations, the choice being dictated by the deformation. Since the constitutive equation depends on the deformation, the differences between different constitutive equations can be easily ascertained. This paper examines (1) the differences between certain constitutive equations due to general deformations and (2) whether it is possible from the resulting stress fields to limit the applicability of the constitutive equations.

Two constitutive equations were chosen, a Maxwell fluid and a Rivlin-Ericksen fluid. Depending on the choice of constants however the Rivlin-Ericksen constitutive equation includes the Navier-Stokes and the Reiner-Rivlin fluids. The Rivlin-Ericksen fluid is defined as

$$T = -p I + \alpha_0 A_1 + \beta_0 A_1^2 + \gamma_0 A_2 \quad (2)$$

where A_1, A_2 are the first and second Rivlin-Ericksen tensors, $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ material constants or material functions, I the unit tensor, and p the pressure. If α_0, β_0 and γ_0 are not equal to zero, then they must be constants for an incompressible fluid (ASTARITA and MARRUCCI (1974:199)). A fluid obeying this constitutive equation is called a second-order fluid. If γ_0 equals zero, then α_0 and β_0 are material functions of the invariants of A_1 . For an incompressible fluid only the second invariant is not equal to zero. In this case equation (2) defines a Reiner-Rivlin fluid. Due to thermodynamical arguments, both α_0 and β_0 can not be constant. If β_0 and γ_0 equal zero, equation (2) is transformed into a Navier-Stokes fluid. It must be noted however that equation (2) does not exhibit stress relaxation since the Rivlin-Ericksen tensors equal zero when the deformation ceases.

A Maxwell fluid is defined as

$$T + \lambda \dot{T} = 2\mu D \quad (3)$$

where λ is the relaxation time and μ the viscosity. Since a stress derivative is included in the constitutive equation, a Maxwell fluid exhibits stress relaxation. In addition, the stress derivative chosen must be invariant.

The deformations chosen are motions with constant stretch histories. Such motions do not depend on the time t of the observation, but only on the stretch history $s = t - \tau$, where τ is the time of the initiation of the deformation. Simple and pure shear are examples of motions with constant stretch histories. It can be shown that for such a motion

$$\begin{aligned} \nabla V &= K(X, Y) N \\ (\text{Tr } NN^T)^{1/2} &= 1 \end{aligned} \quad (4)$$

where ∇V is the velocity gradient, N a constant tensor, and K a function of X and Y . An isochoric deformation requires additionally that the trace of N equals zero. For a motion with constant stretch history the Rivlin-Ericksen tensors are defined as

$$\begin{aligned} A_1 &= K(N + N^T) = 2D \\ A_2 &= K^2(N^2 + N^T2 + 2N^TN) \end{aligned} \quad (5)$$

In the following discussion only incompressible plane deformations will be considered.

Since the constitutive equations are functions of ∇V , it is only necessary to define ∇V . If

$$\nabla V = \begin{vmatrix} f_x & f_y & 0 \\ g_x & g_y & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad (6)$$

then assuming a cartesian coordinate system

$$K = (f_x^2 + f_y^2 + g_x^2 + g_y^2)^{1/2}$$

$$N = \begin{vmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & 0 \\ \alpha_3 & \alpha_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad (7)$$

with

$$\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2 + \alpha_4^2 = 1 \quad (8)$$

If α_1 and α_4 are not equal to zero, the deformation corresponds to a pure shear, whereas α_2 equal to 1 defines a general shear. If α_1, α_2 and α_4 are not equal to zero, then a horizontal layer undergoes shearing with a simultaneous compression. The effect of α_3 is a rotation of the axial plane. Only the two cases - $\alpha_2 = 1$ and $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_4 \neq 0$ - will be considered.

Although the stresses can be very easily calculated (see SHULMAN (1979)), for our purposes it is only necessary to consider the principal stress direction θ . θ corresponds to the angle between the X-direction and the largest principal stress. It is defined as

$$\tan 2\theta = \frac{2 T_{12}}{T_{11} - T_{22}} \quad (9)$$

Since tension is positive, it is necessary to add 90 degrees to obtain the principal compressive stress.

Fig. 1 shows the relationship between the different quantities for a general shearing deformation. The principal stress directions for the Rivlin-Ericksen and the Maxwell fluid are

$$\tan 2\theta = \frac{\eta_0 \alpha_2 + 2\gamma_0 K \alpha_1 \alpha_2}{\eta_0 (\alpha_1 - \alpha_4) - \gamma_0 K \alpha_2^2} \quad (10)$$

$$\tan 2\theta = \frac{\alpha_2 - 2\lambda K \alpha_1 \alpha_2}{(\alpha_1 - \alpha_4) + \lambda K \alpha_2^2}$$

If the principal stress and strain directions and therefore their tensors coincide, they are said to be coaxial. Both the Maxwell and second-order fluid are not coaxial, whereas the Reiner-Rivlin and the Navier-Stokes are. For the latter

$$\tan 2\theta = \frac{\alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_4} \quad (11)$$

Equation (11) shows that although the magnitude of the stresses may be different since they depend on η_0 and β_0 , the principal stress directions are the same.

In deciding which constitutive equations are geologically applicable, it is necessary to choose a fabric which allows us to make a comparison. Although all fabrics can be either stress- or strain-induced, most fabrics are thought to be formed by the latter. This reflects the fact that the strain can be measured and analysed, whereas the stress cannot. There is little evidence to show whether a stress pattern is realistic

or not. However, this problem does not arise if the stress and strain are coaxial. Foliation was chosen as the basis for the comparison. It is assumed that the foliation results from neocrystallisation and is stress- and not strain-induced. Furthermore, it is assumed that the foliation is parallel to the axial plane in the hinge zone, although it can diverge or converge in the limbs. Since the foliation is generally thought to be formed either perpendicular to the largest principal compressive stress or parallel to a maximum shear stress, only these two possibilities will be discussed.

If $\alpha_2 = 1$ and K is not constant, a shear fold would be formed. θ is constant and equal to 45 degrees for a Navier-Stokes and a Reiner-Rivlin fluid. Thus the formation of foliation parallel to the axial plane would require that the foliation correspond to a maximum shear stress. At the same time movement can be expected along the foliation plane. The second-order fluid and the Maxwell fluid exhibit the same stress pattern, although different magnitudes of stress, if we define χ_0 according to viscoelastic theory (PIPKIN (1972:142)):

$$\chi_0 = - \tau_0 \lambda = \int_0^{\infty} t C(t) dt \quad (12)$$

where $C(t)$ is the relative right Cauchy-Green tensor. Therefore

$$\tan 2 \theta = \frac{1}{\lambda K} \quad (13)$$

θ is thus dependent on the product of the relaxation time and the strain rate. An estimate of greater than or equal to 10^{11} sec has been made by SCHEIDEGGER (1957) for the relaxation time of the crust. PRICE (1959) calculated on the basis of experiments conducted by GRIGGS (1939) a relaxation time of at least 10^{12} sec and possibly greater than 10^{14} sec. The geologic strain rate is assumed to vary between 10^{-12} and 10^{-14} sec (PRICE (1975), HEARD (1976)). However, although θ can vary between 0 and 45 degrees (see Fig. 2), shear folds form in very plastic rocks which can be expected to possess a small relaxation time. Therefore θ must approach 45 degrees requiring the foliation to form parallel to a maximum shear stress.

If α_1 , α_2 , and α_4 are not equal to zero, the stress pattern of the Navier-Stokes and the Reiner-Rivlin fluids deviate from the previous case. The deviation, however, must be slight, since we can assume that the shear component, α_2 , is much larger than the pure shear, α_1 and α_4 , component. Fig. 3 shows θ as a function of α_2 and α_1 . Since the Navier-Stokes and Reiner-Rivlin fluids are coaxial, θ is independent of all constants. In a multilayer therefore refraction of the foliation must also be slight even if the viscosity differences between the layers are large. Although the viscosity can be expected to influence the deformation, α_1 , α_2 , and α_4 are not likely to be drastically changed. The foliation must be approximately parallel to a maximum shear stress. Fig. 4 shows the principal compressive stress direction as a function of λK for different values of α_1 for the Maxwell and second-order fluid. The stress pattern is again strongly dependent on λK . Whereas shear folds form in layers with similar rheologic properties, a multilayer normally exhibits different rheologic properties. The value of the relaxation time determines the stress pattern and thus a strong refraction of the foliation is possible. Assuming a large relaxation time for a competent layer and a small relaxation time for an incompetent layer, a difference in θ of up to 45 degrees can be expected.

From the discussion it is evident that any decision regarding which constitutive equation to use depends on the relaxation time of the material being investigated. The Navier-Stokes and Reiner-Rivlin fluids can be used only if the plasticity of the rocks is very high, i.e. a small relaxation time. In a multilayer refraction of the stress can not be expected if coaxial constitutive equations are used. It must be noted however, that the Navier-Stokes and Reiner-Rivlin fluids are usually considered to represent secondary creep, the elastic component being neglected. The elastic component greatly alters the stress pattern as a comparison of the Navier-Stokes and Maxwell fluids shows. Since a variety of stress patterns are possible with a viscoelastic constitutive equation, it appears to be more realistic than the Navier-Stokes and Reiner-Rivlin fluids. The second-order fluid does not exhibit stress relaxation and therefore is less applicable than the Maxwell fluid.

LITERATURE

- ASTARITA, G. & MARRUCCI, G. (1974): Principles of Non-Newtonian Fluid Mechanics.- 289 p., (McGraw Hill), Maidenhead
- BIOT, M.A. (1957): Folding instability of a layered viscoelastic medium under compression.- Proc. Roy. Soc. London, Ser. A, 242, 444 - 454
- CHAPPLE, W.M. (1969): Fold shape and rheology: The folding of an isolated viscous-plastic layer.- Tectonophysics, 7, 97 - 116
- FLETCHER, R.C. (1974): Wavelength selection in the folding of a single layer with power law rheology.- Am. J. Sci., 274, 1029 - 1043
- GRIGGS, D. (1939): Creep of Rocks.- J. Geol., 47, 225 - 251
- HEARD, H.C. (1976): Comparison of the flow properties of rocks at crustal conditions.- Phil. Trans. R. Soc. London, A283, 173 - 186
- HOBBS, B.E. (1972): Deformation of non-newtonian materials in simple shear.- Am. Geophys. Monograph, 16, 243 - 258
- JOHNSON, A.M. (1977): Styles of Folding.- 406 p., (Elsevier), Amsterdam
- PARRISH, D. (1973): A nonlinear finite element fold model.- Am. J. Sci., 273, 318 - 334
- PIPKIN, A.C. (1972): Lectures on viscoelasticity Theory.- 180 p., (Springer), New York
- PRICE, N.J. (1959): Mechanics of jointing in rocks.- Geol. Mag., 96, 149 - 167
- " (1975): Rates of deformation.- J. geol. Soc. London, 131, 553 - 575
- RAMBERG, H. (1959): Evolution of pygmatic folding.- Norsk Geol. Tidsskr., 39, 99 - 151
- SCHEIDEGGER, A.E. (1957): Rheology of the earth: the basis problem of geodynamics.- Can. J. Phys., 35, 383 p.
- SHULMAN, M.J. (1979): Theoretische und numerische Untersuchungen bestimmter Deformationen und Stoffgleichungen in bezug auf ihre geologische Anwendbarkeit.- 115 p., Unveröff. Diss. FU Berlin
- SMITH, R.B. (1977): Formation of folds, boudinage, and mullions in non-newtonian materials.- Geol. Soc. Am. Bull., 88, 312 - 320

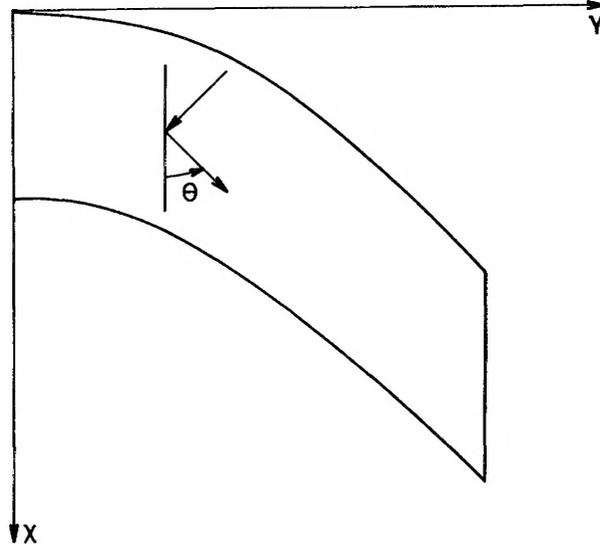


Fig. 1: Orientation of the principal stress direction

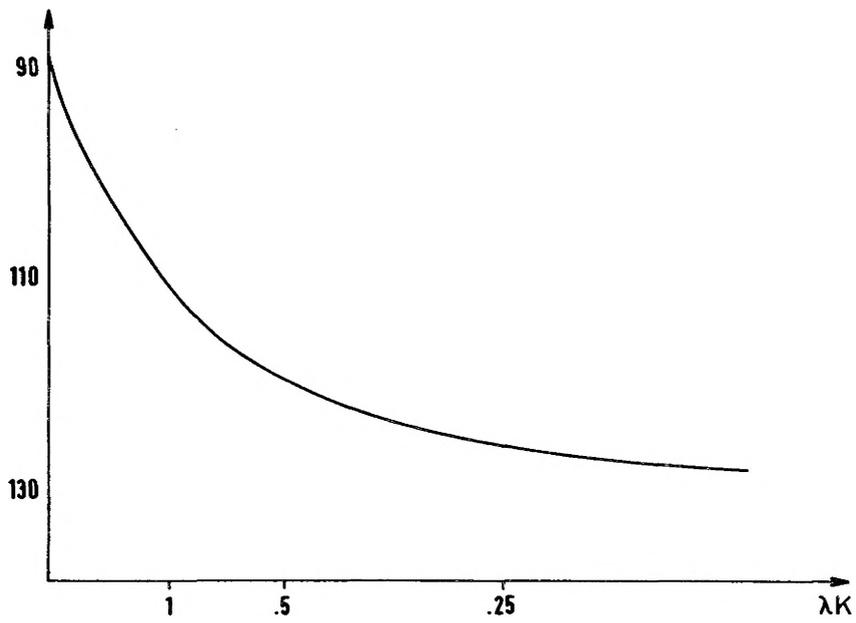


Fig. 2: The principal compressive stress direction as a function of λK for $\alpha_2 = 1$

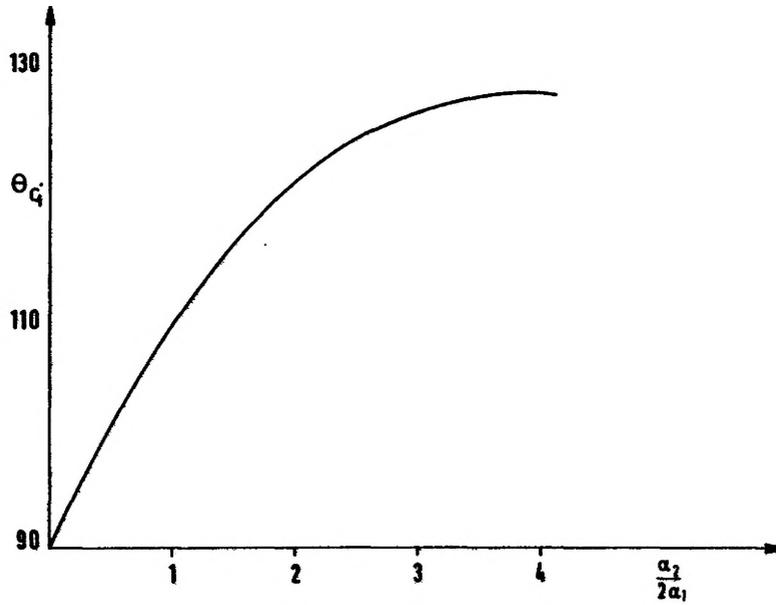


Fig. 3: The principal compressive stress as a function of $\alpha_2 / 2\alpha_1$

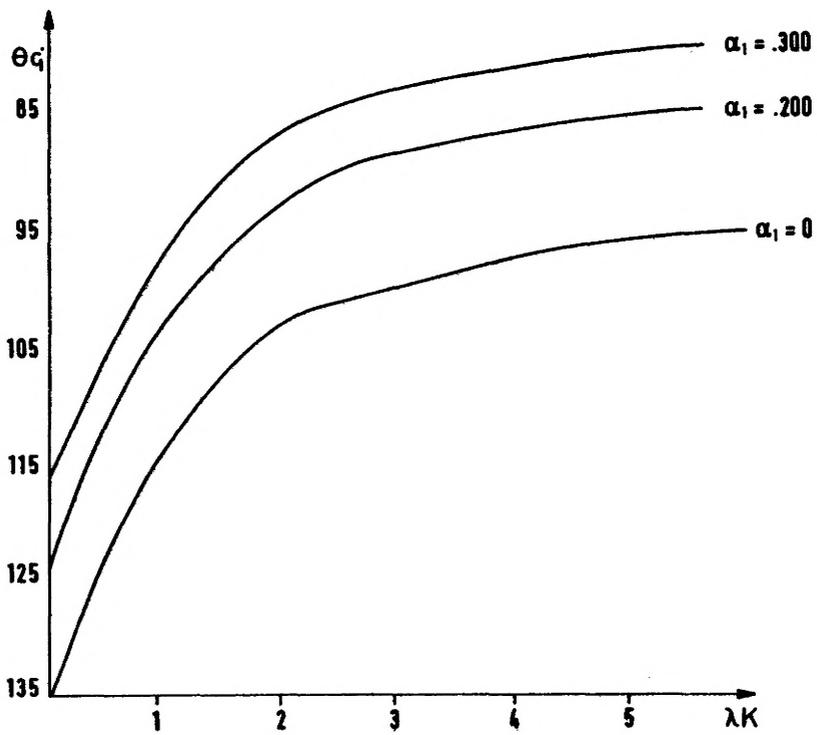


Fig. 4: The principal compressive stress as a function of λK for different values of α_1

EINIGE EIGENSCHAFTEN GESCHLOSSENER PROZENTSYSTEME

von

WOLFDIETRICH SKALA⁺

ZUSAMMENFASSUNG

In Zusammenhang mit der Auswertung geochemischer Daten treten häufig Fehlinterpretationen auf, sofern Variablen mit konstanten Summen untersucht werden. Diese Problematik soll hier an Hand von drei typischen Beispielen erläutert werden :

- Korrelationen eines Systems von Haupt- und Nebenkomponenten
- Dreiecksdiagramme als graphische Darstellungsmöglichkeit
- Verhältniszahlen in Streudiagrammen

SUMMARY

False interpretations of geochemical data occur frequently in investigations involving variables with constant sums. The three examples discussed here serve to illustrate more clearly the extend of the "closure" problem. They include the following :

- correlations of a system of main and minor components
- triangular diagrams as graphical representations
- ratios in scatter diagrams

РЕЗЮМЕ

В соответствии с использованием геохимических данных часто возникают неправильные интерпретации при исследовании переменных с постоянными суммами. Эта проблематика поясняется посредством трех типичных примеров:

- Корреляции системы главных и второстепенных компонент
- Треугольные диаграммы как возможность графического представления
- Решения в диаграммах рассеивания.

1. EINLEITUNG

Der in den letzten Jahren verstärkte Einsatz moderner technischer Geräte in der geowissenschaftlichen Forschung hat unter anderem die Möglichkeit zur raschen Gewinnung großer Datenmengen geschaffen. Mit Hilfe von Computern ist es vor allem durch die Anwendung mathematisch-statistischer Methoden möglich geworden, die=

⁺ Anschrift des Verfassers: Prof.Dr. Wolfdietrich Skala, Institut für Geologie d. FU Berlin
1000 Berlin 33, Altensteinstr. 34A.

se Datenmengen rationell zu verarbeiten, um zu objektiven Aussagen zu gelangen. Einerseits werden beispielsweise für geochemische und sedimentologische Fragestellungen in zunehmendem Maße Methoden der multivariaten Statistik angewendet (Cluster-Analyse, Diskriminanz-Analyse, Hauptkomponenten-Analyse), um unter anderem auf quantitativem Wege eine Klassifizierung des Bildungsmilieus von Gesteinen durchführen zu können (MERRIAM 1976, 1978). Andererseits stehen Fragen der Zuverlässigkeit, wie etwa die Fehlerabschätzung bei der Probennahme oder der Labor-Analyse im Vordergrund.

Die meisten statistischen Methoden gehen von bestimmten Annahmen hinsichtlich der Datenstrukturen aus. Im allgemeinen werden normal verteilte, statistisch unabhängige Variablen gefordert, die die Eigenschaften der Linearität und Homoskedastizität besitzen. Werden die Beziehungen zwischen den Proben hinsichtlich der ermittelten Variablen untersucht (Q-Modus), so sind diese Voraussetzungen häufig in ausreichendem Maße vorhanden. In anderen Verfahren stehen dagegen die Beziehungen zwischen Variablen in bezug auf die untersuchten Proben (R-Modus) im Vordergrund (Hauptkomponenten-Analyse im R-Modus, multiple Regressionsanalyse, kanonische Korrelationsanalyse). In diesen Fällen steht man häufig besonderen Schwierigkeiten bei der Auswertung der Daten gegenüber, da es sich im allgemeinen um "zusammengesetzte" Variablen handelt. Die Tatsache, daß die Summe aller Variablen einer Probe eine Konstante darstellt, die für alle Proben denselben Wert annimmt (meist 100%), zerstört die potentielle Unabhängigkeit der Varianzen und Kovarianzen, von der die elementare Korrelations-Theorie ausgeht. Dies verursacht eine Tendenz zu negativen Korrelationen (CHAYES 1971), auch wenn zwischen den Variablen keinerlei Beziehungen bestehen. Diese Schwierigkeiten treten nicht nur in geochemischen und sedimentologischen Untersuchungen auf und sind keineswegs auf multivariate statistische Verfahren beschränkt. Geochemische Variablen reagieren jedoch besonders empfindlich auf Verzerrungen des geschlossenen Systems.

2. DIE PROBLEMATIK GESCHLOSSENER SYSTEME

Seit PEARSON 1897 beschäftigt sich eine umfangreiche Literatur mit der Problematik geschlossener Proben-systeme ("spurious correlation"). Im Vordergrund aller Publikationen steht das Bestreben, die Einflüsse formaler Korrelationen in geschlossenen Systeme auszuschalten, um auf diese Weise Rückschlüsse auf die tatsächlichen, kausalen Korrelationen ziehen zu können. Im geowissenschaftlichen Bereich haben zunächst CHAYES (1948, 1949, 1960, 1962, 1971), VISTELIUS (1954, 1956) und SARMANOV & VISTELIUS (1959, 1961) die Problematik formaler Korrelationen beschrieben und einige wesentliche Gesetzmäßigkeiten herausgestellt. In den Arbeiten von MOSIMAN 1962 und CONNOR & MOSIMANN 1969 findet sich das Problem in wahrscheinlichkeitstheoretischer Form behandelt. Während die praktische Bedeutung dieser Publikationen zunächst gering ist, setzt das Testverfahren von CHAYES & KRUSKAL 1966 wichtige Erkenntnisse in die Praxis um. Dieses Verfahren testet auf statistische Unabhängigkeit der untersuchten Variablen. Es wurde zum Beispiel von SZUROWSKI 1967, SAHA, BHATTACHARYYA & LAKSHMIPATHY 1974 und BUTLER 1975 erfolgreich angewendet. Ein entsprechendes FORTRAN-Rechenprogramm publizierte ZODROW 1974. Ein ähnliches Verfahren zur Beurteilung von Korrelations-Koeffizienten in geschlossenen Variablen-Systemen beschreibt KOLLER 1969. Kritik an dem Testverfahren von CHAYES & KRUSKAL 1966 hat zum Beispiel KORK 1977 geübt.

Das Problem kann folgendermaßen formuliert werden: Gegeben sei eine Stichprobe von n zufälligen Spaltenvektoren X_j ($j=1,2,\dots,n$) mit m Proben x_{ij} ($i=1,2,\dots,m$), Mittelwerten \bar{x}_j und Varianzen s_j^2 . Das offene System stellt eine Stichprobe des Umfanges m für jede Variable X_j dar, deren einzelne Werte aus der standardisierten Variablen Z_j berechnet werden können

$$x_{ij} = z_{ij}s_j + \bar{x}_j \quad (1)$$

Das geschlossene System erhält man durch Division durch die Zeilensummen u_i :

$$\begin{aligned}
 y_{11} &= (z_{11}s_1 + \bar{x}_1)/u_1, & y_{12} &= (z_{12}s_2 + \bar{x}_2)/u_1, & \dots, & y_{1n} &= (z_{1n}s_n + \bar{x}_n)/u_1 \\
 y_{21} &= (z_{21}s_1 + \bar{x}_1)/u_2, & y_{22} &= (z_{22}s_2 + \bar{x}_2)/u_2, & \dots, & y_{2n} &= (z_{2n}s_n + \bar{x}_n)/u_2 \\
 \vdots & & & & & & \\
 y_{m1} &= (z_{m1}s_1 + \bar{x}_1)/u_m, & y_{m2} &= (z_{m2}s_2 + \bar{x}_2)/u_m, & \dots, & y_{mn} &= (z_{mn}s_n + \bar{x}_n)/u_m
 \end{aligned} \tag{2}$$

Liegt eine Stichprobe von Daten y_{ij} im geschlossenen System vor, so sind die Zeilensummen u_i im allgemeinen unbekannt. Eine Rekonstruktion des offenen Systems aus den Größen des geschlossenen ist auf algebraischem Wege somit nicht möglich, da sie in jedem Falle auf ein nicht eindeutig lösbares Gleichungssystem führen würde.

In Ausnahmefällen ist jedoch eine Approximation des offenen Systems zulässig: Mittelwerte und Varianzen des offenen Systems können zum Beispiel errechnet werden, wenn die Variablen unkorreliert sind (CHAYES 1971, CHAYES & KRUSKAL 1966). VISTELIUS & SAMANOV (1959, 1961) haben einige Spezialfälle beschrieben, in denen das offene System teilweise rekonstruiert werden kann. Stellt eine der Variablen im geschlossenen System eine Konstante dar, so ist das Problem beispielweise lösbar ("concretional scheme"). Dieser Fall tritt ein, wenn eine geochemische Variable in allen Proben denselben Wert annimmt.

In eigenen Untersuchungen wurde an Monte Carlo-Modellen einerseits zunächst versucht, den Grad der Verzerrung der Korrelationen des geschlossenen Systems in Abhängigkeit von den Parametern des offenen Systems zu erfassen (SKALA 1977). Andererseits wurde (SKALA 1979) ein probabilistischer Weg zur Rekonstruktion von Parametern des offenen Systems aus dem geschlossenen gesucht.

Die vorliegende Studie beschreibt nun einige Eigenschaften von Variablen in geschlossenen Systemen, wie sie in der Praxis geochemischer Untersuchungen häufig auftreten und daher besondere Beachtung finden sollten. Die dazu notwendigen Untersuchungen wurden mit Hilfe des Monte Carlo-Modells von SKALA 1977 am Computer TR 440 (Telefunken) des Großrechenzentrums Berlin durchgeführt.

Um die Korrelationen zwischen den Variablen des x_{ij} -Systems mit jenen des y_{ij} -Systems vergleichen zu können, geht das vorliegende mathematische Modell von normalverteilten Variablen aus, die durch ihre Mittelwerte, Varianzen und Kovarianzen bestimmt sind und simuliert die Entstehung des y_{ij} -Systems und deren Korrelations-Matrix. Die x_{ij} -Werte werden einer n -dimensionalen Normalverteilung entnommen. Dies erfolgt mit Hilfe einer speziellen Lineartransformation, mit deren Hilfe aus n unabhängigen Zufallsvektoren normalverteilte Vektoren erzeugt werden, die die vorgegebene Varianz-Kovarianz-Matrix besitzen. Die Transformationsmatrix wurde entsprechend den Vorschlägen von SHREIDER 1964 entwickelt. Mit Hilfe dieses Modelles war es möglich, den Übergang offener in geschlossener Systeme nachzuvollziehen.

3. KORRELATIONEN VON SYSTEMEN VON HAUPT- UND NEBENKOMPONENTEN

In der Geochemie werden häufig Systeme von Variablen unterschiedlicher Größenordnung untersucht. Liegen neben Messungen an Hauptkomponenten in Prozenten auch Nebenkomponten oder Spurenelemente vor, deren Meßwerte zum Beispiel um das Zehnfache geringer sind (Messungen in Promille oder ppm), so entstehen im geschlossenen System instabile Verhältnisse.

Diese Erscheinung, die meist zu einer empfindlichen Verfälschung der Korrelationen führt, kann am Monte Carlo-Modell an Hand eines Beispiels veranschaulicht werden.

Gegeben seien 50 Proben, an denen Messungen an sechs Variablen im offenen System -- drei Hauptkomponenten und drei Nebenkomponten -- vorliegen. Mittelwerte und Varianzen der Hauptkomponenten X_1 , X_2 und X_3 und

Nebenkomponenten X_4 , X_5 und X_6 sind Tab. 1 zu entnehmen:

	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6
s_j^2	25.	25.	25.	.25	.25	.25
\bar{x}_j	100.	100.	100.	10.	10.	10.
a)	1.	.176	.109	.107	.144	.023
		1.	.090	.237	.004	-.043
			1.	.198	-.013	.078
				1.	.028	-.056
					1.	.041
						1.
b)	1.	-.286	-.554	.084	.102	.089
		1.	-.617	.068	.053	.043
			1.	-.319	-.320	-.302
				1.	.974	.971
					1.	.977
						1.

Tab. 1: Varianzen s_j^2 , Mittelwerte \bar{x}_j und Korrelationsmatrizen im offenen (a) und geschlossenen (b) System eines Systems aus drei Haupt- und drei Nebenkomponenten

Die Mittelwerte der Hauptkomponenten betragen das Zehnfache der Mittelwerte der Nebenkomponenten, die Varianzen wurden so gewählt, daß der Variationskoeffizient \bar{x}/s konstant 20. beträgt. Um die Verhältnisse besonders anschaulich darstellen zu können, wurden im offenen System statistisch unabhängige Variablen angenommen. Die geringen, in Tabelle 1 enthaltenen Korrelationen haben ihren Grund in Rechenungenauigkeiten.

Die Datenmatrix wird nun durch den Vektor der Zeilensummen u_i dividiert, so daß das offene in das geschlossene System transformiert wird. Im geschlossenen System treten (Tab. 1) zwischen den Hauptkomponenten signifikante negative Korrelationen auf, während zwischen den Nebenkomponenten signifikante positive Korrelationen um 0.97 zu beobachten sind. Die geringen Korrelationen um Null haben sich nur zwischen den Haupt- und Nebenkomponenten erhalten.

Die Verzerrung der Korrelationen kann mit Hilfe der Ergebnisse von SKALA 1977 erklärt werden: Sie dürfte ihre primäre Ursache in den großen Varianz-Unterschieden der Variablen haben. Die unterschiedlichen Mittelwerte bzw. die Anzahl der Variablen dürfte auf die Verzerrung nur geringen Einfluß haben.

Dieses Ergebnis läßt den Schluß zu, daß hohe positive Korrelationen zwischen geochemischen Variablen, die in geschlossenen Prozentsystemen mengenmäßig untergeordnete Komponenten (z.B. Spurenelemente) bilden, meist Scheinkorrelationen darstellen. Andererseits geben auch die signifikanten negativen Korrelationen zwischen den Hauptkomponenten ein falsches Bild der tatsächlichen Verhältnisse wieder. Eine Rekonstruktion des offenen Systems, auch auf probabilistischem Wege ist, bis heute nicht zuverlässig möglich (SKALA 1979). Die einzige Möglichkeit, die Signifikanz der Korrelationen im geschlossenen System zu prüfen, bildet bis heute das Verfahren von CHAYES & KRUSKAL 1966.

4. DREIECKSDIAGRAMME

In petrographischen und geochemischen Problemen werden häufig Dreiecksdiagramme verwendet, um die quantitativen Verhältnisse zwischen Variablen ternärer Systeme, in denen die Variablen als Zahlentripeln mit konstanten Summen auftreten, graphisch darzustellen. Die Interpretation von Dreiecksdiagrammen ist problematisch und kann zu Fehlbeurteilungen führen, die ihre Ursache in den Eigenschaften geschlossenen Prozentsysteme haben. Wie CHAYES 1971 ausführt, sind die Verzerrungen der statistischen Parameter in ternären Systemen extrem stark und nach den Untersuchungen von SKALA 1977 nehmen sie mit der Anzahl der Variablen im geschlossenen System ab.

Bereits SMITH 1972 stellte aus seinen Computer-Simulationen fest, daß in Dreiecksdiagrammen unimodale Cluster von Datenpunkten auch dann zu erwarten sind, wenn die drei Variablen voneinander vollkommen unabhängig und über endliche Intervalle gleichmäßig verteilt sind. SKALA 1977 konnte diese Beobachtung bestätigen und zeigen, daß eine deutliche Clusterung von Punkten in Dreiecksdiagrammen aus völlig unkorrelierten Variablen erzeugt werden kann, wenn geeignete Mittelwerte und Varianzen im offenen System vorliegen.

Multivariate statistische Untersuchungen, wie sie in der Geochemie in den letzten Jahren häufig durchgeführt worden sind (multiple Regression, Diskriminanzanalyse) gehen vom Konzept n-dimensionaler normalverteilter Datenstrukturen aus. Diese lassen sich durch die Parameter n-dimensionaler Normalverteilungen, deren Mittelwerte und deren Varianz-Kovarianz-Matrix beschreiben. Geometrisch können n-dimensionale normalverteilte Populationen als Cluster im n-dimensionalen Raum aufgefaßt werden. Graphische Darstellungen solcher Daten sind ohne Informationsverlust nur in einer entsprechenden Anzahl zweidimensionaler Schnitte möglich.

Abb. 1 zeigt zwei Zufallsstichproben zu je 50 Proben aus dreidimensional normalverteilten Populationen graphisch im ebenen Schnitt dargestellt. Zur Veranschaulichung der Verhältnisse reicht eine Darstellung der ersten gegen die zweite Variable aus; die beiden anderen Schnittebenen zeigen weitgehend ähnliche Punktlagen.

Die Parameter der beiden Normalverteilungen sind Tab. 2 zu entnehmen: Zwischen den Varianz-Kovarianz-Matrizen bzw. den Korrelationen der beiden Stichproben bestehen keinerlei Beziehungen. Die Varianzen wurden beliebig gewählt, die Korrelationen extrem unterschiedlich, um die Verhältnisse besonders deutlich zu machen. Die Mittelwerte der beiden Stichproben unterscheiden sich untereinander zwar zahlenmäßig, sind einander jedoch streng proportional.

Wir dividieren die Daten durch ihre Zeilensummen und gehen auf diese Weise vom offenen zum geschlossenen System über. Die Darstellung der beiden Stichproben kann nun im Dreiecksdiagramm (Abb. 2) erfolgen. Die Stichproben überlagern sich nun in einer Weise, daß nur noch ein einziger, weitgehend homogener Cluster zu erkennen ist.

Diese Erscheinung hat ihren Grund vor allem darin, daß die Lage des Mittelpunktes des Clusters in Dreiecksdiagramm lediglich von den Proportionen der Mittelwerte im offenen System abhängig ist. Die von Varianzen und Kovarianzen bestimmte Form der beiden Cluster im offenen System ändert sich unter den Einflüssen des geschlossenen Systems, so daß die Parameter des offenen Systems in der Dreiecksdarstellung nicht mehr zu erkennen sind (SMITH 1972, SKALA 1977).

Für praktische Zwecke bedeutet dies, daß Dreiecksdiagramme nicht dazu geeignet sind, um Populationen geochemischer Variablen an Hand von Stichproben voneinander anzutrennen. Sie reagieren nur auf die Verhältnisse der Mittelwerte (Proportionen) empfindlich. Andere wichtige Parameter, wie Varianzen und Kovarianzen lassen sich im Dreiecksdiagramm kaum zum Ausdruck bringen. Es ist daher wesentlich sinnvoller, die Abtrennung von Stichproben mit Hilfe multivariater statistischer Methoden (Diskriminanz-Analyse) möglichst unmittelbar an den Ausgangsdaten vorzunehmen und Dreiecksdarstellungen nur zur Beschreibung der Mittelwerts-Proportionen heranzuziehen.

5. DIE DARSTELLUNG VON VERHÄLTNISSZAHLEN IN STREUDIAGRAMMEN

Zur Lösung zahlreicher geochemischer Probleme, etwa bei der Charakterisierung der Genese von Gesteinen, hat es sich als günstig erwiesen, Verhältniszahlen von Variablen (z.B. von Spurenelementen) als Indikatoren

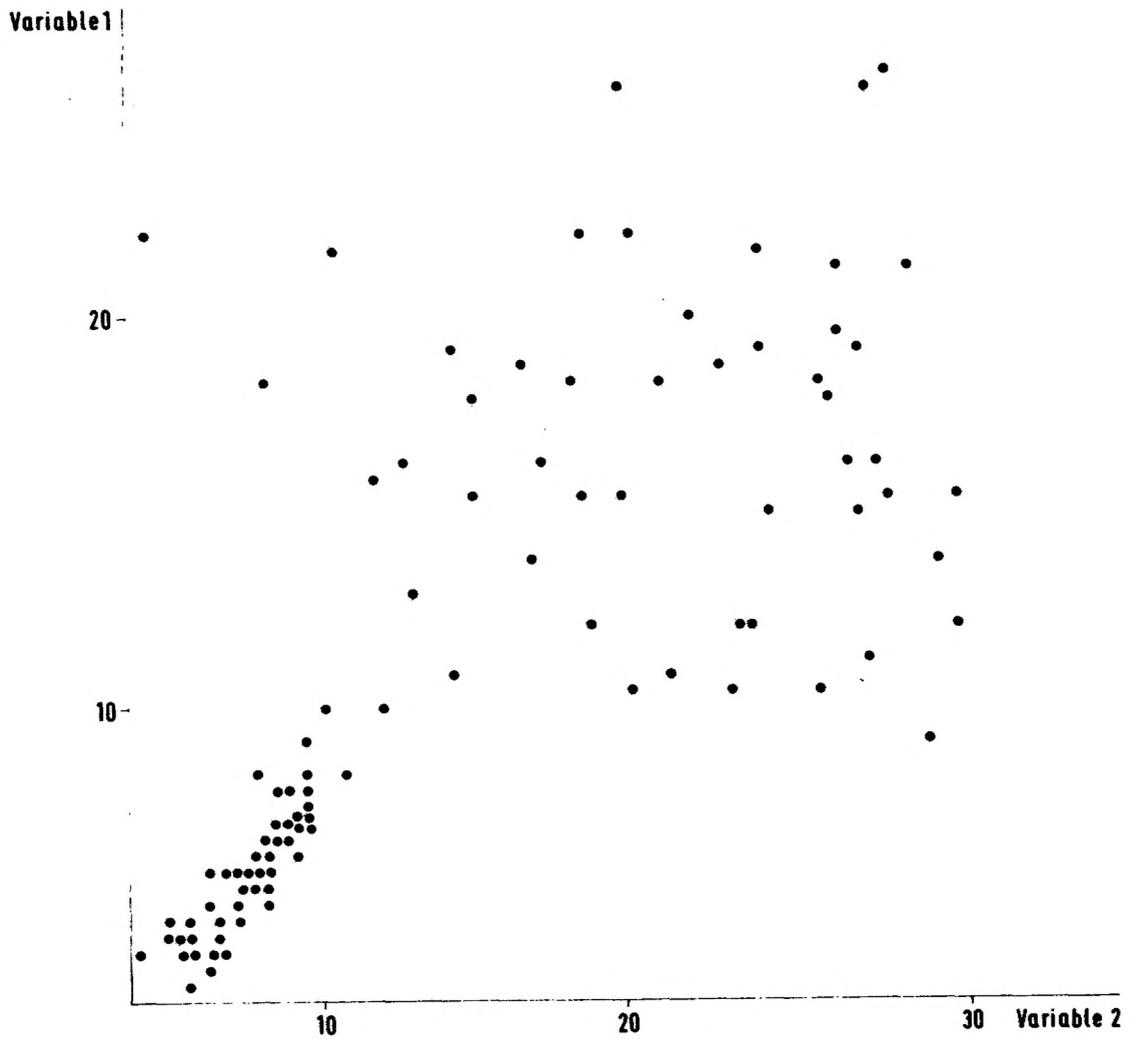


Abb. 1: Zwei Zufallsstichproben zu je 50 Werte-Tripeln wurden den dreidimensionalen Normalverteilungen P_1 und P_2 entnommen: Die Abbildung zeigt das Streudiagramm der 1. gegen die 2. Variable. Die zugehörigen statistischen Parameter können Tabelle 2 entnommen werden.

	P_1			P_2		
	X_1	X_2	X_3	X_1	X_2	X_3
s_j^2	2.	2.	2.	5.	7.	10.
\bar{x}_j	6.	8.	14.	18.	24.	42.
X_1	1.	.903	.867	1.	-.155	-.008
X_2		1.	.874		1.	.295
X_3			1.			1.

Tab. 2: Varianzen s_j^2 , Mittelwerte \bar{x}_j und Korrelationsmatrizen im offenen System zweier dreidimensionaler Normalverteilungen P_1 und P_2 .

heranzuziehen. Wie bereits CHAYES 1960, 1971 festgestellt hat, unterliegen die statistischen Parameter dieser Variablen den Bedingungen des geschlossenen Systems.

Zunächst muß betont werden, daß die Anwendung von Verhältniszahlen nur dann sinnvoll sein kann, wenn enge Beziehungen (hohe positive Korrelationen) zwischen den untersuchten Variablen bestehen. Stellen diese Spurenelemente dar, kann es sich zudem um Scheinkorrelationen handeln, wie im vorangehenden Abschnitt ausgeführt worden ist.

Auch in der paläontologischen Literatur werden zur Beschreibung morphologischer Merkmale häufig Verhältniszahlen benutzt. In solchen Fällen hatte bereits ZORN 1972 zu großer Vorsicht gemahnt, vor allem, wenn es um die Ermittlung subtiler Unterschiede geht, die etwa besondere Umweltbedingungen kennzeichnen sollen. Er hatte zudem beobachtet, daß sich die Parameter von Verhältniszahlen auch verschieben können, ohne, daß sich die Merkmale tatsächlich ändern, etwa, wenn in einer phylogenetische Reihe eine Größenzunahme zu beobachten ist.

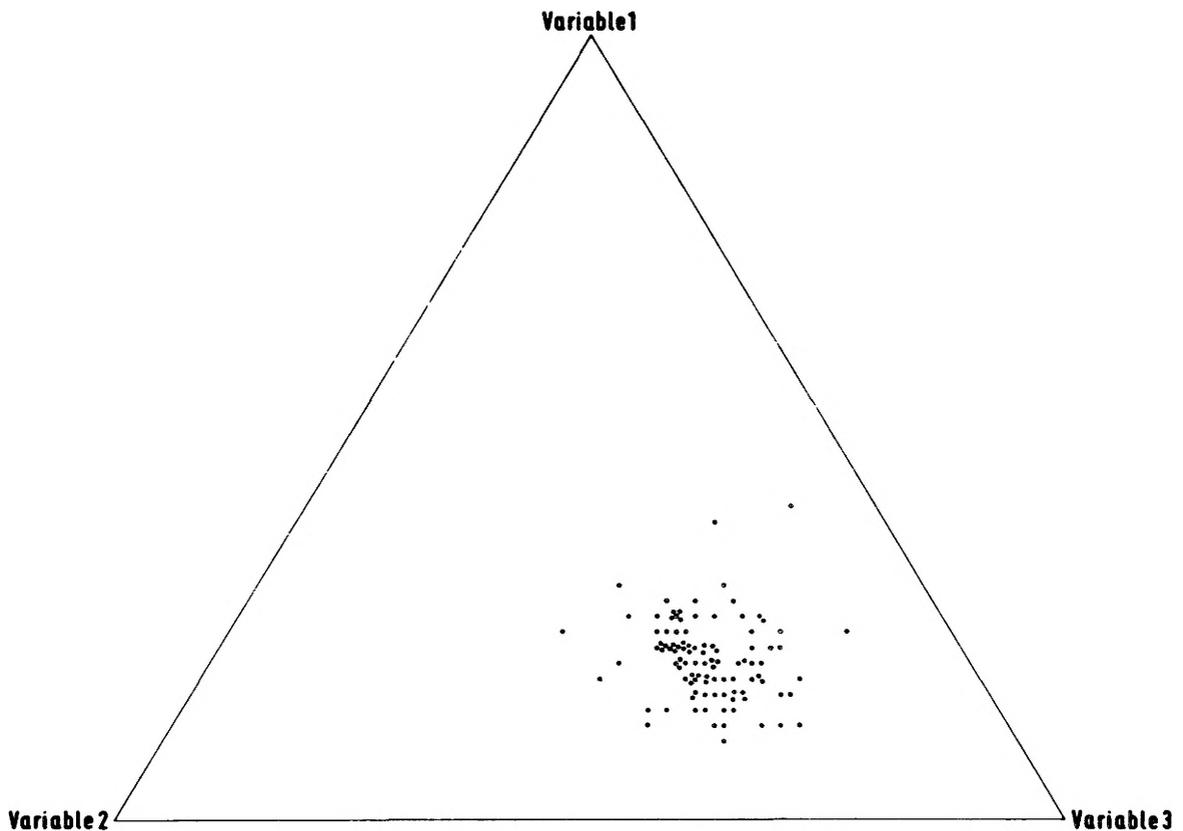


Abb. 2: Dreiecksdiagramm zweier Zufallsstichproben zu je 50 Werte-Tripeln, die den dreidimensionalen Normalverteilungen P_1 und P_2 entnommen worden sind. Die zugehörigen statistischen Parameter können Tabelle 2 entnommen werden.

Ober die Darstellung von Verhältniszahlen in Streudiagrammen wird, wie über Dreiecksdiagramme bisweilen versucht, Kriterien zur Unterscheidung der Bildungsmilieus von Sedimenten zu gewinnen (FRIEDMAN 1967). Werden beispielsweise zwei Stichproben Populationen entnommen, die sich auf Grund ihrer statistischen Parameter deutlich unterscheiden lassen, so kann bei der Anwendung von Verhältniszahlen im Streudiagramm ein einziger Cluster entstehen, der eine Trennung der Stichproben unmöglich erscheinen läßt.

Derartige Verhältnisse lassen sich wieder mit Hilfe der in Tab. 2 zusammengestellten Daten aus zwei normalverteilten Populationen demonstrieren. In Abb. 3 ist das Verhältnis der ersten zur zweiten Variable gegen das Verhältnis der ersten zur dritten Variable im Streudiagramm aufgetragen. Wie in der Dreiecksdarstellung entsteht auch hier der Anschein einer einzigen, hoch korrelierten Population, obwohl die Daten zwei stark unterschiedlichen Populationen (Abb. 1) entnommen worden sind.

Streudiagramme von Verhältniszahlen stellen also, wie Dreiecks-Diagramme kein geeignetes Mittel dar, um Populationen geochemischer Variablen auf Grund von Stichproben voneinander anzugrenzen. Multivariaten statistischen Analysen möglichst an den originalen Daten ist in solchen Fällen der Vorzug zu geben.

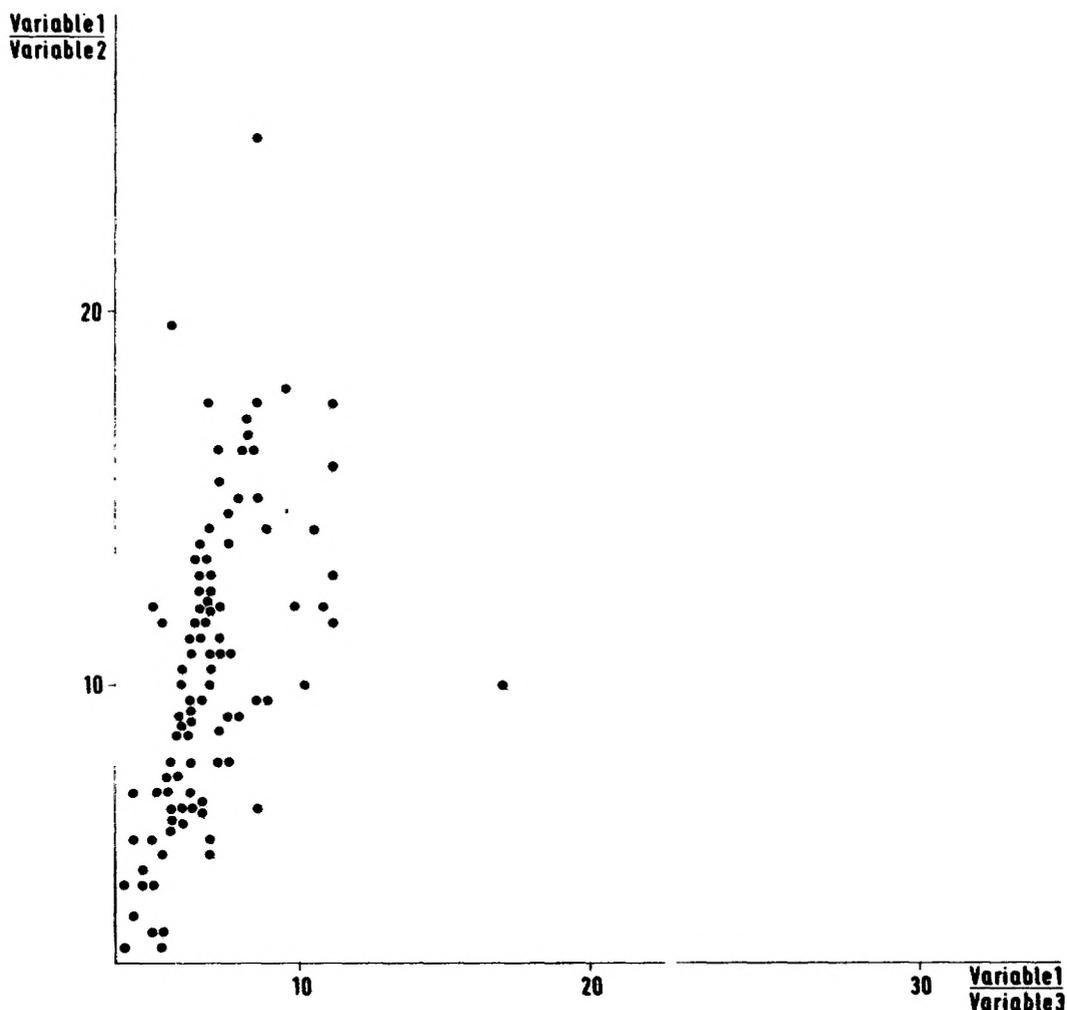


Abb. 3: Verhältniszahlen in Streudiagrammen: Die Verhältnisse der Variablen 1 und 2 der Normalverteilungen P_1 und P_2 sind gegen die Verhältnisse der Variablen 1 und 2 aufgetragen. Die zugehörigen statistischen Parameter können Tabelle 2 entnommen werden.

LITERATURVERZEICHNIS

- BUTLER, J.C. (1975): Occurrence of negative open variances in ternary systems.- Jour. Math. Geol., 7, 31 - 45
- CHAYES, F. (1948): A petrographical criterion for the possible replacement origin of rocks.- Amer. Jour. Sci., 246, 413 - 425
- " (1949): On ratio correlation in petrography.- Jour. Geol., 56, 239 - 254
- " (1960): On correlation between variables of constant sum.- Jour. Geophys. Research, 65, 4185 - 4193
- " (1962): Numerical correlation and petrographic variation.- Jour. Geol., 70, 440 - 452
- " (1971): Ratio correlation.- 99 S., (The University of Chicago Press), Chicago - London
- CHAYES, F. & KRUSKAL, W. (1966): An approximate statistical test for correlations between proportions.- Jour. Geol., 74, 692 - 702
- CONNOR, R.J. & MOSIMANN, J.E. (1969): Concepts of independence for proportions with generalization of the Dirichlet distributions.- Jour. Amer. Statist. Assoc., 64, 1994 - 2006
- FRIEDMAN, G.M. (1967): Dynamic processes and statistical parameters compared for size frequency distribution of beach and river sands.- Jour. Sediment. Petrol., 37, 327 - 354
- KOLLER, S. (1968): Neue graphische Tafeln zur Beurteilung statistischer Zahlen.- 167 S., (Steinkopf), Darmstadt
- KORK, J.O. (1977): Examination of the Chayes-Kruskal procedure for testing correlations between proportions.- Jour. Math. Geol., 9, 543 - 562
- MERRIAM, D.F. (Ed.) (1976): Quantitative Techniques for the Analysis of Sediments.- Computers and Geology, 1, 174 S., (Pergamon Press), Oxford etc.
- " (Ed.) (1978): Recent Advances in Geomathematics.- Computers and Geology, 2, 230 S., (Pergamon Press), Oxford etc.
- MOSIMANN, J.E. (1962): On the compound multinomial distribution, the multivariate beta-distribution and correlations among proportions.- Biometrika, 49, 65 - 82
- PEARSON, K. (1897): On a form of spurious correlation which may arise when indices are used in the measurements of organs.- Proc. Roy. Soc. London, 60, 489 - 502
- SAHA, A.K., BHATTACHARYYA, C. & LAKSMIPATHY, S. (1974): Some problems of interpreting the correlations between the modal variables in granitic rocks.- Jour. Math. Geol., 6, 245 - 258
- SARMANOV, O.V. & VISTELIUS, A.B. (1959): Correlation between percentage values.- Doklady Akad. Nauk. SSR, 126, 22 - 25
- SARMANOV, O.V. & VISTELIUS, A.B. (1961): On the correlation between percentage values: Major component correlation in ferromagnesium micas.- Jour. Geol., 68, 145 - 153
- SHREIDER, Y.A. (1964): Methods of statistical testing: Monte Carlo Method.- 303 S., (Elsevier), Amsterdam
- SMITH, F.G. (1972): A computer program to plot random or real proportions of three components of a mixture.- Jour. Math. Geol., 4, 263 - 268
- SKALA, W. (1977): A mathematical model to investigate distortions of correlation coefficients in closed arrays.- Jour. Math. Geol., 9, 519 - 528
- " (1979): A Monte Carlo Model for reconstructing open arrays from closed arrays.- 10th Congress IAS Publications (im Druck)
- SZUROWSKI, H. (1967): Zu einigen Problemen der Korrelations- und Regressionsanalyse bei geochemischen Untersuchungen.- Zeitschr. Angewandte Geol., 13, 317 - 321
- VISTELIUS, A.B. (1954): Mineral associations and characteristic paragenetic relations in the Aptian-Cenomanian terrigenous sequence of the trans-Caspian region.- Doklady Akad. Nauk. SSR, 97, 503 - 506
- " (1956): The problem of studying correlations in mineralogy and petrography.- Zap. Vses. Mineralog. Obshch., 85, 58 - 74
- ZODROW, E.L. (1974): Closure correlation.- Computer Applications, 2, 267-274.
- ZORN, H. (1972): Sind morphologische Merkmale von Organismen durch Verhältniszahlen quantitativ zu erfassen?.- N. Jb. Geol. Paläont. Abh., 140, 354-377.

VEKTORSTATISTISCHE METHODEN ZUR ERMITTLUNG VON REGELUNGSGRADEN
UND ZUR BESCHREIBUNG VON VERTEILUNGSFORMEN TEKTONISCHER DATEN

von

ECKARD WALLBRECHER⁺

ZUSAMMENFASSUNG

Es werden Regelungsgrade und Eigenwerte und -vektoren der häufigsten Gefügetypen ermittelt. Systematische Variationen dieser Verteilungsmuster werden simuliert und die Abhängigkeit der Eigenwerte von diesen Variationen ermittelt. Außerdem werden weitere Parameter zur Charakterisierung von sphärischen und zirkularen Verteilungen vorgestellt.

SUMMARY

The degree of preferred orientation and the eigenvalues and eigenvectors for various distribution patterns of orientation data (unimodal, bimodal, small circles, and several different great circle distributions) are calculated via the resultant length of unit vectors and the cross product matrices of their direction cosines. The relation between the shape of distribution and the degree of preferred orientation and the eigenvalues is studied and described by functions of the angle which describes the variation in each distribution pattern. Further parameters for the characterization of unimodal spherical and circular distributions are presented and explained using field measurements.

РЕЗЮМЕ

Изложены степени упорядоченности и собственные значения и собственные векторы частых типов сложения. Систематические изменения этих образцов распределения моделируются. Показана зависимость собственных значений от этих изменений. Кроме того представлены параметры для характеристики сферических и циркулярных распределений.

1. EINLEITUNG

Neben den bekannten Methoden der Darstellung von Dichteverteilungen von Richtungsdaten mit Hilfe von Isopyknen auf der Lagenkugel wurde von zahlreichen Autoren ein anderer Weg aufgezeigt, um über einen vektoriel-
len Ansatz zu statistischen Kennwerten für Richtungsverteilungen zu kommen (FISCHER 1953; BRAITSCH 1956; WATSON 1956a, 1956b, 1965, 1966; WATSON & IRVING 1957; DIMROTH 1962, 1963; FARA & SCHEIDEGGER 1963; STEPHENS

⁺ Anschrift des Verfassers: Dr. Eckard Wallbrecher, Institut für Geologie d. FU Berlin
1000 Berlin 33, Altensteinstr. 34A.

1964; BINGHAM 1964; SCHEIDEGGER 1965; KIRALY 1969; MARK 1973 and WOODCOCK 1977). Zur Charakterisierung von Verteilungs-Schwerpunkten wurde der Summenvektor

$$\vec{R} = \sum_{i=1}^n \vec{v}_i \quad (1)$$

abgeleitet, hierbei ist \vec{v}_i eine einzelne Richtungsmessung, dargestellt als Einheitsvektor.

$|R|$ ist ein Maß für den Regelungsgrad der Probe, und mit

$$x_R = \frac{1}{|R|} \sum x_i; \quad y_R = \frac{1}{|R|} \sum y_i; \quad z_R = \frac{1}{|R|} \sum z_i \quad (2)$$

(x in Nord-, y in Ostrichtung und z nach unten) ergibt sich der Azimut des Summenvektors.

$$A_R = \arctan \frac{y_R}{x_R} \quad (3)$$

und der Fallwinkel

$$\phi_R = \arcsin z_R \quad (4)$$

A_R und ϕ_R geben den Schwerpunkt der Probe an, dieser ist vergleichbar dem arithmetischen Mittel in der linearen Statistik.

Ein zweiter wichtiger Kennwert ist der Konzentrations-Parameter, dessen bester Schätzwert mit

$$\hat{k} = \frac{n-1}{n-R} \quad (5)$$

angegeben wird (FISCHER 1953, WATSON 1966). Er ist Maß für die Streuung um den Vektorschwerpunkt und gilt exakt nur für unimodale und zentrosymmetrische Verteilungen. Als Vertrauensmaß für die Lage des Schwerpunktsvektors wurde von FISCHER (1953) der Vertrauenskegel mit dem Öffnungswinkel

$$\theta = \arccos \left\{ 1 - \frac{n-R}{R} \left[\left(\frac{1}{P} \right)^{\frac{1}{n-1}} - 1 \right] \right\} \quad (6)$$

eingeführt (P ist ein Maß für die Irrtumsschwelle).

Mit diesen Kennwerten lassen sich nur Schwerpunkte und Regelungsgrade von Gefügen ermitteln. Kennwerte zur Beschreibung der Verteilungsform liefern erst Eigenwerte und -vektoren, die nach FARA & SCHEIDEGGER (1963) folgendermaßen ermittelt werden:

Sind $\{x_i, y_i, z_i; i = 1 \dots n\}$ die Achsenabschnitte von n Einheitsvektoren (tektonische Daten), so kann aus ihnen die Matrix

$$\underline{L} = \begin{bmatrix} x_i^2 & x_i y_i & x_i z_i \\ x_i y_i & y_i^2 & y_i z_i \\ x_i z_i & y_i z_i & z_i^2 \end{bmatrix} \quad (7)$$

gebildet werden, die Eigenwerte und -vektoren dieser Matrix lassen Aussagen über die Verteilungsform zu.

2. DIE STATISTISCHEN KENNWERTE

2.1 Die Abhängigkeit des Regelungsgrades von der Verteilung

Aus dem Summenvektor (1) einer Menge $V = \{\vec{v}_i\}$ von tektonischen Daten wurde von WALLBRECHER (1978) ein prozentualer Regelungsgrad (degree of preferred orientation)

$$R_{\%} = \frac{(2|R| - n) \cdot 100}{n} \quad (8)$$

abgeleitet, der speziell für achsiale Daten (Halbkreis-Verteilungen), wie sie ja in der Geologie fast ausschließlich vorkommen, Gültigkeit hat.

2.1.1 Der prozentuale Regelungsgrad und der sphärische Öffnungsgrad von Verteilungen mit nur einem Cluster

Für Gleichverteilungen innerhalb eines Kegels mit variablem Öffnungswinkel α gilt

$$R_{\%} = \cos^2 \alpha \cdot 100 \quad (\text{WALLBRECHER 1978}) \quad (9)$$

Aus (5), (8) und (9) ergibt sich für eine solche rein theoretische Verteilungsform ein Konzentrations-Parameter

$$k = 2 \frac{1 - \frac{1}{n}}{\sin^2 \alpha} \quad (10) \text{ bzw. für große Datenmengen } k \approx \frac{2}{\sin^2 \alpha} \quad (11)$$

Damit kann man nun für jede unimodale Verteilung einen Kleinkreis mit dem Öffnungswinkel

$$\alpha = \arcsin \sqrt{2 \frac{1 - \frac{1}{n}}{k}} \quad (12) \text{ bzw. } \alpha \approx \arcsin \sqrt{\frac{2}{k}} \quad (13)$$

berechnen (Abb. 1), der die Begrenzung einer gleichverteilten Punktwolke angibt, die die gleichen Kennwerte R und k besitzt, wie die getestete Verteilung und damit als Modell der Probe dienen kann.

Da α ein Maß für die flächenhafte Bedeckung der Halbkugel durch die Probe ist, soll es als "sphärischer Öffnungsgrad" bezeichnet werden. Ein Beispiel hierfür liefert Abb. 2.

Abb. 3 zeigt den Zusammenhang zwischen dem Sphärischen Öffnungsgrad und den Kurven der sphärischen Normalverteilung für verschiedene Konzentrations-Parameter, berechnet nach der aus der FISCHER-Verteilung abgeleiteten Dichtefunktion

$$F(\theta, \phi) = \frac{k}{4 \pi \sinh k} e^{k \cos \theta} \quad (14)$$

unter der Annahme, daß die Dichte-Verteilung zirkular um den Modalwert angeordnet ist und deshalb nicht von ϕ abhängt.

Berechnet man die Größe der Klasse mit den Grenzen $-\alpha$ und $+\alpha$ für einen Modalwert bei 0^0 nach

$$\text{Fläche } \theta_a, \theta_b = \frac{e^{-k \cos \theta_a} - e^{-k \cos \theta_b}}{2 \sinh k} \quad (\text{WATSON 1966}) \quad (15)$$

so zeigt sich, daß für Werte von $k \geq 4$ Öffnungsgrade existieren, die 69% bis ca. 63% der Gesamthäufigkeit enthalten (Abb. 4). Das bedeutet aber, daß dem sphärischen Öffnungsgrad für die sphärische Normalverteilung die gleiche Bedeutung zukommt, wie der Standardabweichung bei der linearen Normalverteilung, für die ja gilt, daß 68,27% der Gesamthäufigkeit in der Klasse $(x - \sigma) \dots (x + \sigma)$ liegen.

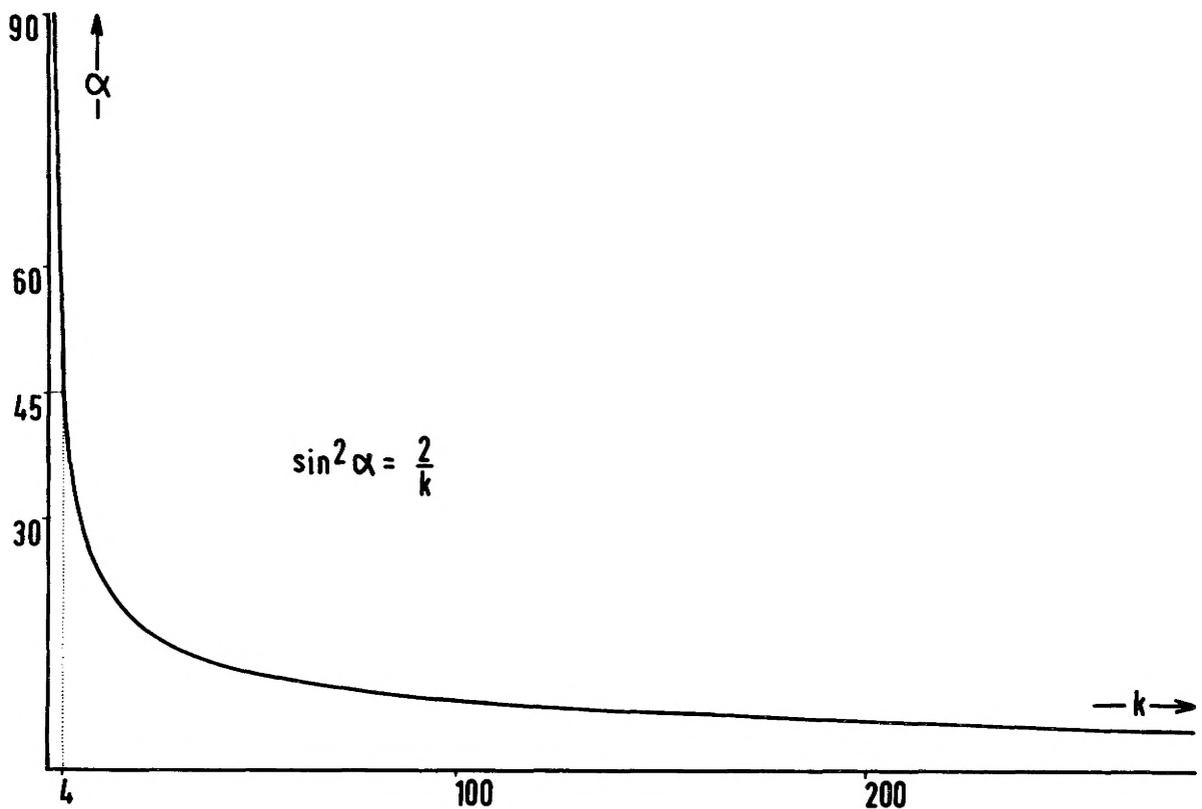


Abb. 1: Beziehung zwischen sphärischem Öffnungsgrad und Konzentrations-Parameter.

Abb. 2: Darstellung des sphärischen Öffnungsgrades einer unimodal verteilten Probe

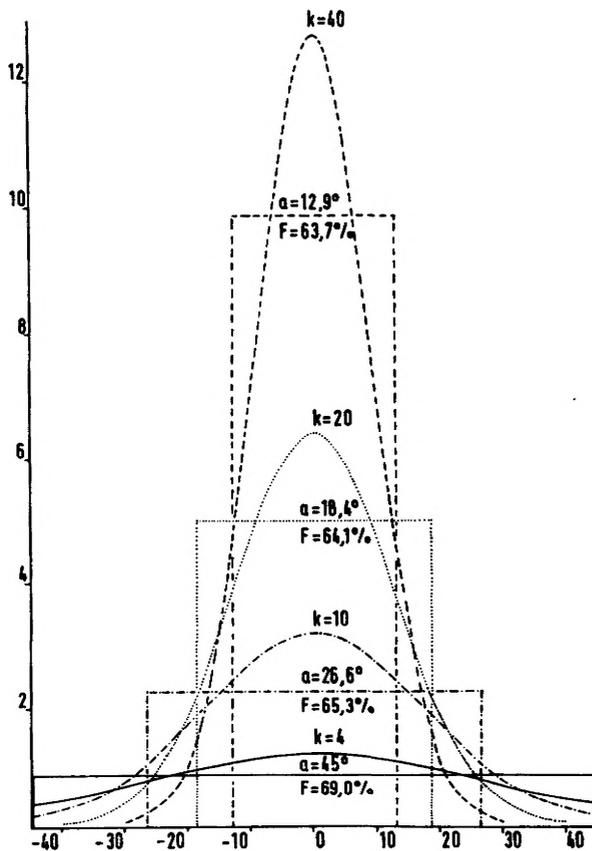
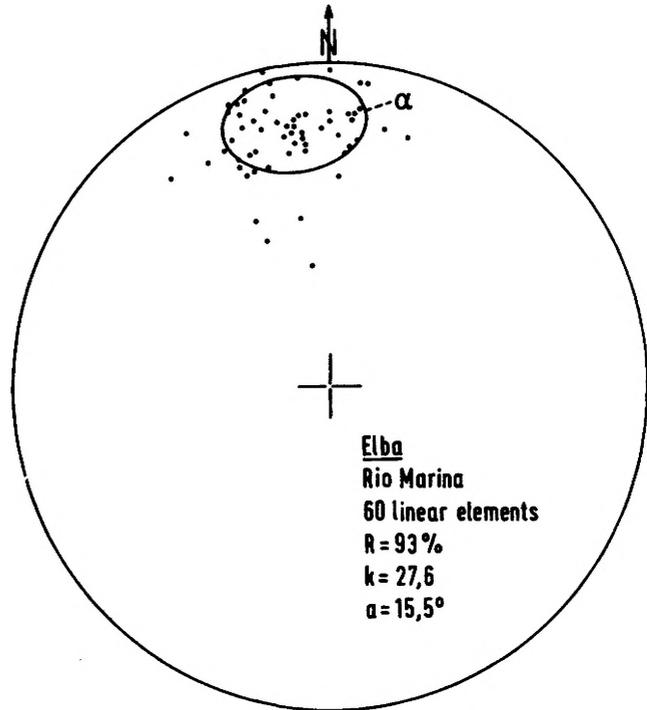


Abb. 3: Sphärische Normalverteilungen mit unterschiedlichen Konzentrationsparametern (k) und dazugehörige Gleichverteilungen mit den sphärischen Öffnungsgraden α ; F = prozentuale Häufigkeit innerhalb von $-\alpha$ und $+\alpha$ in bezug auf die Gesamthäufigkeit

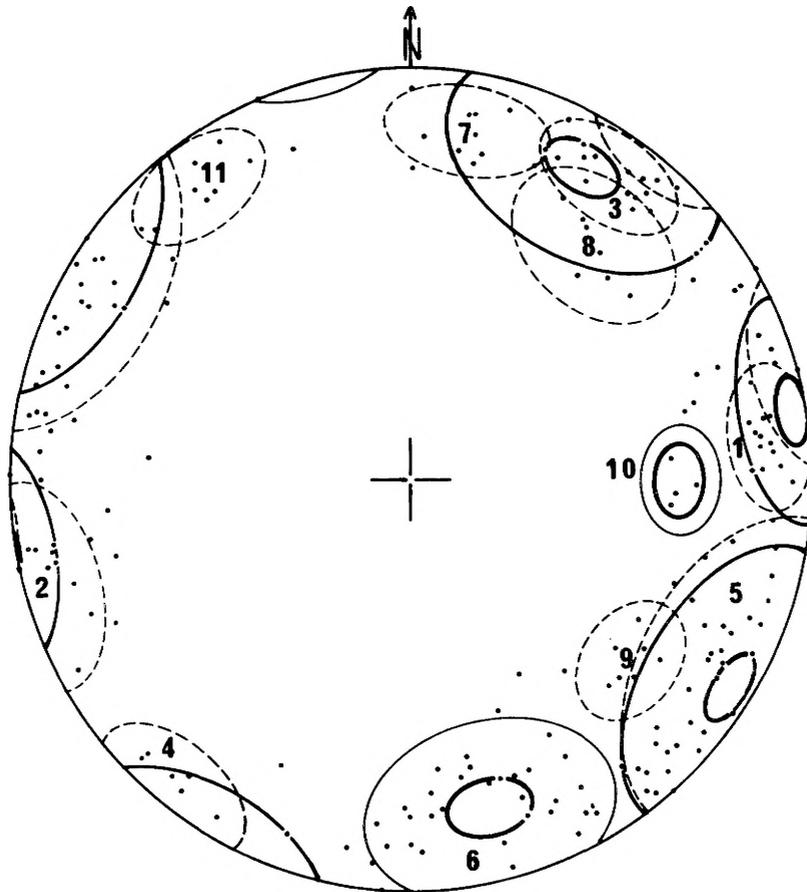


Abb. 4: 201 Lineare aus den zentralen Apuaner Alpen (Toskana). Clusterbildung für ein Trennmaß von drei Punkten/Einheitsfläche. Dargestellt sind die sphärischen Öffnungsgrade um die Vertrauenskegel der Clusterschwerpunkte. Aus sich überschneidenden Gruppen wurden "pooled groups" gebildet, die durchgezogenen Linien bezeichnen somit signifikant getrennte Gruppen. Die Aussagesicherheit beträgt 99%.

Mit dem sphärischen Öffnungsgrad - der um den Winkel des Vertrauenskegels zu vergrößern ist, da die Lage seines Mittelpunktes innerhalb dieses Kegels schwanken kann - läßt sich nun die signifikante Trennung der Gipfel zweier sphärischer Normalverteilungen überprüfen, die jede für sich mindestens 64% der Gesamthäufigkeit der Stichprobe enthalten sollen. Hierzu muß nur geprüft werden, ob sich die Kegel überschneiden, die aus den sphärischen Öffnungsgraden + Winkeln der Vertrauenskegel gebildet werden und die Gruppenschwerpunkte als Mittelpunkte haben. In Abb. 4 ist dies Verfahren noch einmal auf die Daten von Abb. 10 aus WALLBRECHER 1978 angewandt. Es zeigt sich, daß nach diesem Kriterium mehrere Obergruppen zu bilden sind, die wiederum ihre eigenen Schwerpunkte, Vertrauenskegel und sphärischen Öffnungsgrade besitzen.

2.1.2 Der prozentuale Regelungsgrad von Verteilungen mit zwei Clustern

Als Modell-Verteilung für diesen Fall werden zwei Cluster angenommen, die jedes für sich exakte Parallelorientierung aufweisen und jeweils gleichviel Vektoren enthalten sollen. Damit ist

$$R_1 = R_2 = \frac{N}{2}$$

Für die Vektorsumme $R = R_1 + R_2$ erhält man

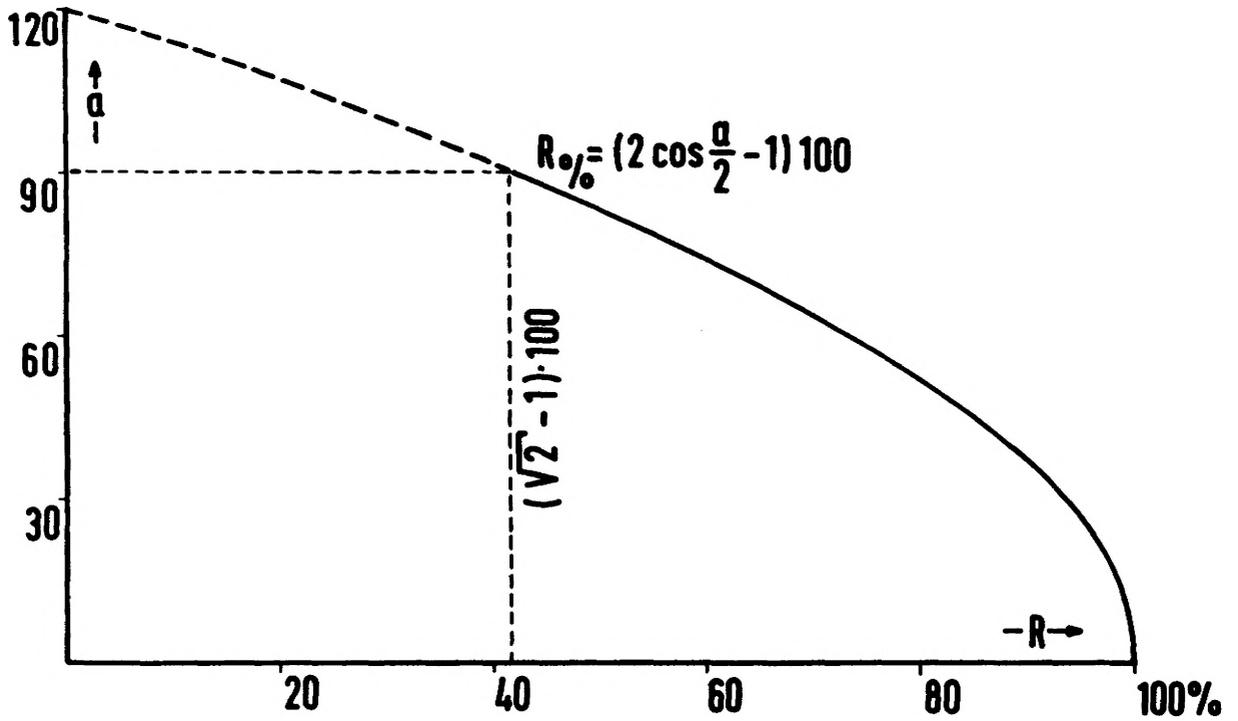


Abb. 5: Der prozentuale Regelungsgrad von Verteilungen mit zwei Clustern in Abhängigkeit von dem Winkel zwischen den Clustern

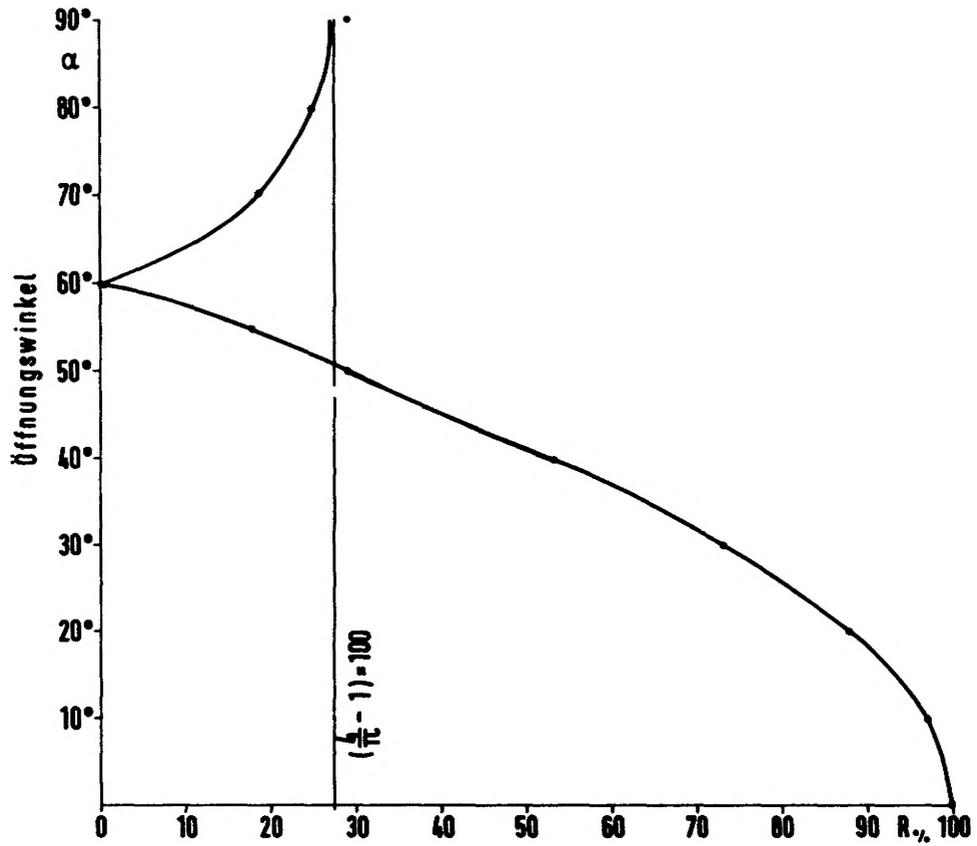


Abb. 6: Der prozentuale Regelungsgrad von Kleinkreisen in Abhängigkeit vom Öffnungswinkel

$$R = N \cos \frac{\alpha}{2} \quad (16)$$

wobei $\alpha = \angle (\vec{R}_1, \vec{R}_2)$ ist. Durch Einsetzen von (16) in (8) ergibt sich ein prozentualer Regelungsgrad von

$$R_{\%} = (2 \cos \frac{\alpha}{2} - 1) \cdot 100 \quad (\text{Abb. 5}) \quad (17)$$

Da die Halbkugel-Verteilung keine Winkel $\angle (\vec{R}_1, \vec{R}_2) > 90^\circ$ zuläßt, ergibt sich ein niedrigstmöglicher Regelungsgrad für einen Abstand der beiden Maxima von 90° von

$$R_{\%min} = (\sqrt{2} - 1) \cdot 100 \quad (18)$$

2.1.3 Der prozentuale Regelungsgrad von Kleinkreis-Verteilungen

Es wurden Gleichverteilungen auf Kleinkreisen mit verschiedenen Öffnungswinkeln untersucht. Das Ergebnis ist in Abb. 6 dargestellt. Es zeigt, daß der prozentuale Regelungsgrad bei einem Öffnungswinkel von 60° null erreicht; d.h. der Regelungsgrad einer Gleichverteilung auf einem 60° -Kleinkreis entspricht dem einer Gleichverteilung auf der gesamten Halbkugel. Zwischen 60° und 90° werden die Verteilungen einer Großkreis-Verteilung immer ähnlicher, und die Kurve steigt wieder an, bis sie den theoretischen Wert für den Regelungsgrad

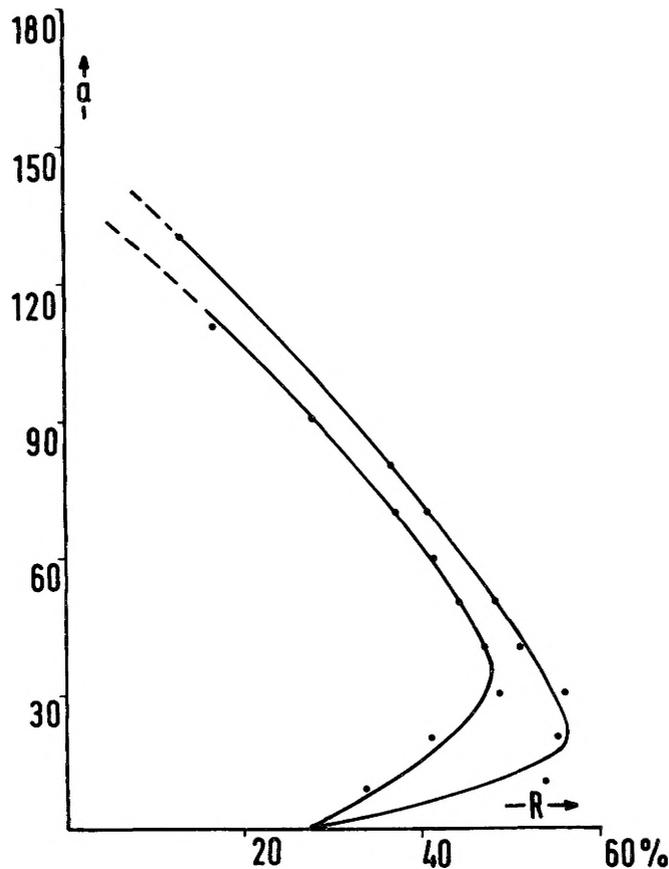


Abb. 7: Der Regelungsgrad von Gleichverteilungen innerhalb eines Kugelkeiles mit dem Öffnungswinkel α .

einer Gleichverteilung auf einem Großkreis erreicht, dieser beträgt 27,32% (Ableitung siehe unten).

2.1.4 Der prozentuale Regelungsgrad von Gleichverteilungen auf einem Großkreis

Um den theoretischen Wert des prozentualen Regelungsgrades einer zirkularen Gleichverteilung zu ermitteln, müssen wir von der Vektorsumme einer Gleichverteilung auf einem Halbkreis ausgehen. Gleichverteilung heißt

$$\frac{n_i}{d\alpha} = \text{const} \quad (19)$$

und für den Halbkreis gilt

$$\text{const} = \frac{N}{\pi} \quad (20)$$

Da die Vektorsumme einer zirkularen Verteilung

$$R = \sqrt{\left(\sum_{i=1}^N \cos \alpha_i\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N \sin \alpha_i\right)^2} \quad (21)$$

ist, ergibt sich

$$R = \sum_{i=1}^{180} \sin \alpha_i n_i \quad (22)$$

mit (19) und (20) wird daraus

$$R = \frac{N}{\pi} \int_0^{\pi} \sin \alpha \, d\alpha \quad (23)$$

oder

$$R = 2 \frac{N}{\pi}$$

Aus (8) und (23) ergibt sich damit für eine zirkulare Verteilung axialer Vektoren ein prozentualer Regelungsgrad

$$R_{\%} = \left(\frac{4}{\pi} - 1\right) \cdot 100 \approx 27,32 \quad (24)$$

Um zu untersuchen, wie der Regelungsgrad von der Streuung einer Verteilung um einen Großkreis abhängt, wurden als Modelle Gleichverteilungen in Kugelkeilen mit variablem Öffnungswinkel α berechnet (s. Abb. 13). Die Ergebnisse sind in Abb. 7 dargestellt. Bei der unteren Kurve wurde die Zahl der Vektoren konstant gehalten, bei der oberen Kurve wurde sie mit zunehmendem Winkel größer. Beide Kurven steigen von 0° bis 30° , beginnend bei 27,3%, zunächst an und fallen dann aber wieder kontinuierlich ab.

2.1.5 Der prozentuale Regelungsgrad von Teilgroßkreisen

Für diesen in der Tektonik sehr häufig realisierten Fall wurde als Modell eine Gleichverteilung auf einem Großkreis innerhalb eines veränderlichen Winkels α gewählt. Auch diesmal gilt (19), aus (20) wird aber

$$\text{const} = \frac{N}{\text{arc} \alpha} \quad (25)$$

Aus (19), (21) und (25) folgt

$$R = \frac{N}{\text{arc} \alpha} \sqrt{\left(\sum_{i=1}^{\alpha} \cos a_i da_i\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^{\alpha} \sin a_i da_i\right)^2} \quad (26)$$

und damit

$$R = \frac{N}{\text{arc} \alpha} \sqrt{\left(\int_0^{\alpha} \cos a \, da\right)^2 + \left(\int_0^{\alpha} \sin a \, da\right)^2} \quad (27)$$

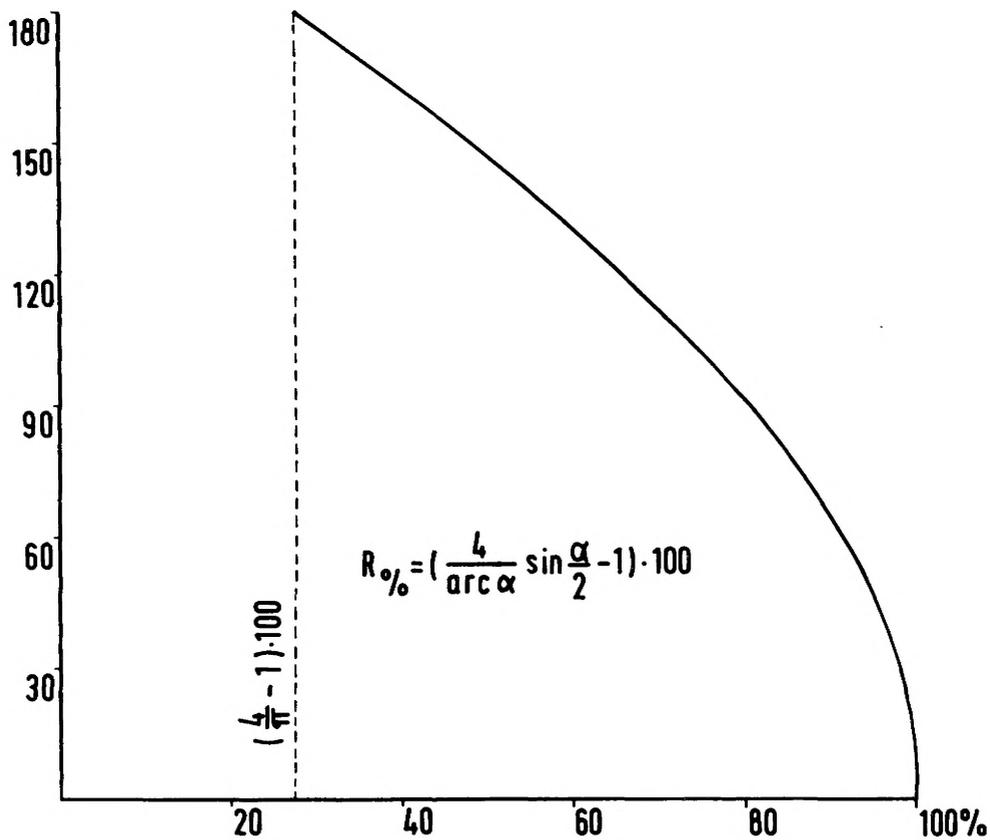


Abb. 8: Der prozentuale Regelungsgrad auf variablen Teilgroßkreisen

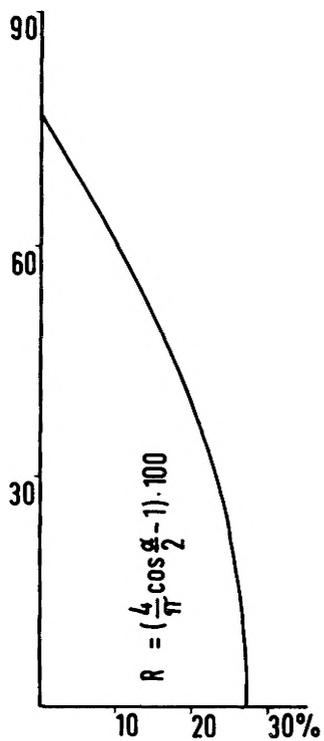


Abb. 9: Der prozentuale Regelungsgrad bei Verteilungen längs zweier Großkreise, die sich unter dem Winkel α schneiden

das ergibt aber

$$R = \frac{N}{\arccos \alpha} 2 \sin \frac{\alpha}{2} \quad (28)$$

Damit erhalten wir einen prozentualen Regelungsgrad für Teilgroßkreise mit der Größe α von

$$R_{\%} = \left(\frac{4}{\arccos \alpha} \sin \frac{\alpha}{2} - 1 \right) \cdot 100 \quad (\text{Abb. 8}) \quad (29)$$

4.1.4.3 Der prozentuale Regelungsgrad bei Verteilungen längs zweier Großkreise

Schneiden sich zwei Großkreise unter dem Winkel α , dann folgt aus (20) und (21)

$$R = 2 \frac{N}{\pi} \cos \frac{\alpha}{2} \quad (30)$$

und damit

$$R_{\%} = \frac{4}{\pi} \cos \frac{\alpha}{2} - 1 \cdot 100 \quad (\text{Abb. 9}) \quad (31)$$

somit ist ein Regelungsgrad von null Prozent bereits bei

$$\alpha = 2 \arccos \frac{\pi}{4} \approx 76,48^{\circ} \quad (32)$$

erreicht.

2.2 Die Abhängigkeit der Eigenwerte von der Verteilung

Da die Summe der drei Eigenwerte der Matrix \underline{L} (s. S.111) gleich der Anzahl der Daten der Probe ist, werden im folgenden zum Vergleich von verschiedenen Verteilungsformen nur die normierten Eigenwerte

$$\bar{\lambda}_i = \frac{\lambda_i}{N} ; \quad i = 1, 2, 3$$

verwandt. $\bar{\lambda}_1$, $\bar{\lambda}_2$, und $\bar{\lambda}_3$ sind nach steigender Größe geordnet.

2.2.1 Die Eigenwerte von Verteilungen mit nur einem Cluster

Bekanntlich ist bei Parallelorientierung der Vektoren

$$\bar{\lambda}_1 = \bar{\lambda}_2 = 0 \text{ und } \bar{\lambda}_3 = 1,$$

wobei das Maximum in $\vec{\lambda}_3$ liegt, und bei Gleichverteilung gilt

$$\bar{\lambda}_1 = \bar{\lambda}_2 = \bar{\lambda}_3 = \frac{1}{3}$$

Um die Abhängigkeit der Eigenwerte von der Streuung zu untersuchen, wurden als Modelle wieder Gleichverteilungen innerhalb von Kegelbegrenzungen mit unterschiedlichen Öffnungswinkeln simuliert. Das Ergebnis zeigt, daß die Eigenwerte den Kurven

$$\bar{\lambda}_1 = \bar{\lambda}_2 = \frac{\sin^2 \alpha}{3} \text{ und } \bar{\lambda}_3 = 1 - \frac{2}{3} \sin^2 \alpha \quad (33)$$

folgen (Abb. 10).

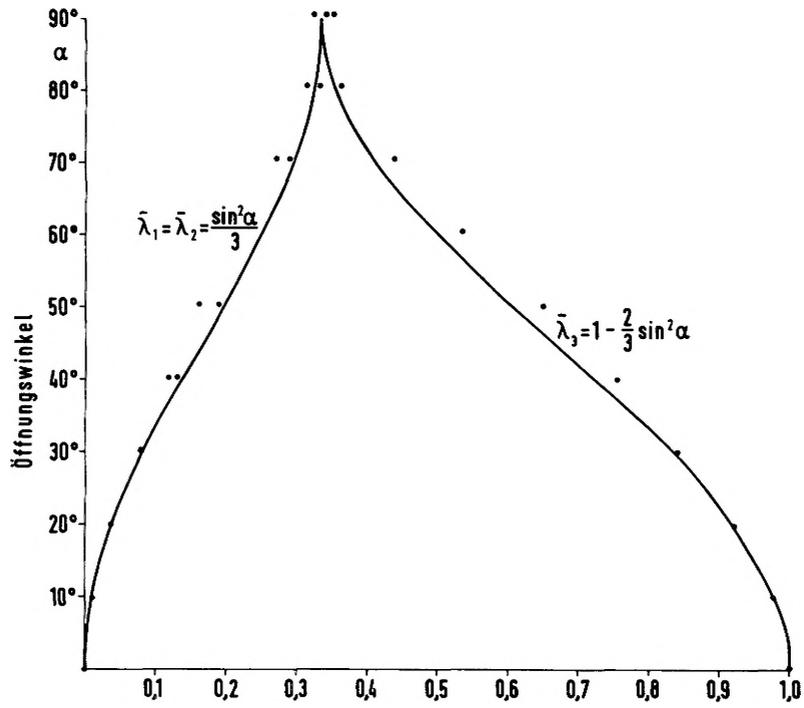


Abb. 10: Abhängigkeit der Eigenwerte vom Öffnungswinkel bei Gleichverteilungen innerhalb eines Kegels

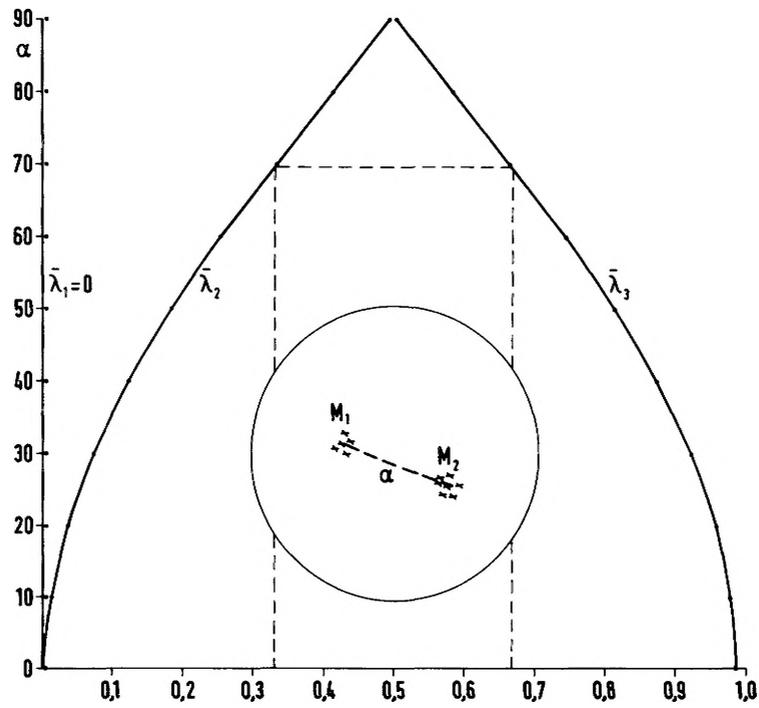


Abb. 11: Die Abhängigkeit der Eigenwerte von dem Winkel zwischen zwei Cluster-Schwerpunkten

2.2.2 Die Eigenwerte von Verteilungen mit zwei Clustern

Ist eine Verteilung bimodal und haben beide Modalwerte die gleiche Größe, so liegt $\vec{\lambda}_3$ in der Mitte zwischen den Maxima \vec{M}_1 und \vec{M}_2 . $\vec{\lambda}_3, \vec{\lambda}_2, \vec{M}_1$ und \vec{M}_2 liegen mithin auf einem Großkreis normal zu $\vec{\lambda}_1$, dessen Betrag bei sehr engen Clustern null wird. Die Kurven für die Abhängigkeit der Eigenwerte von dem Abstand zwischen den beiden Maxima sind in Abb. 11 dargestellt, sie zeigen, daß die Eigenwerte den Funktionen

$$\bar{\lambda}_1 = 0; \quad \bar{\lambda}_2 = \sin^2 \frac{\alpha}{2} \quad \text{und} \quad \bar{\lambda}_3 = \cos^2 \frac{\alpha}{2} \quad (34)$$

folgen.

2.2.3 Die Eigenwerte von Kleinkreis-Verteilungen

Bei den Tests der Kleinkreis-Verteilungen zeigte sich, daß jeweils zwei Eigenwerte einander gleich sind und damit die zwei Fälle

- 1) $\bar{\lambda}_1 = \bar{\lambda}_2$
- 2) $\bar{\lambda}_2 = \bar{\lambda}_3$

unterschieden werden müssen. Damit ergeben sich für die Eigenwerte von Kleinkreis-Verteilungen mit verschiedenen Öffnungswinkeln nur zwei Kurven (Abb. 12), die durch die Gleichungen

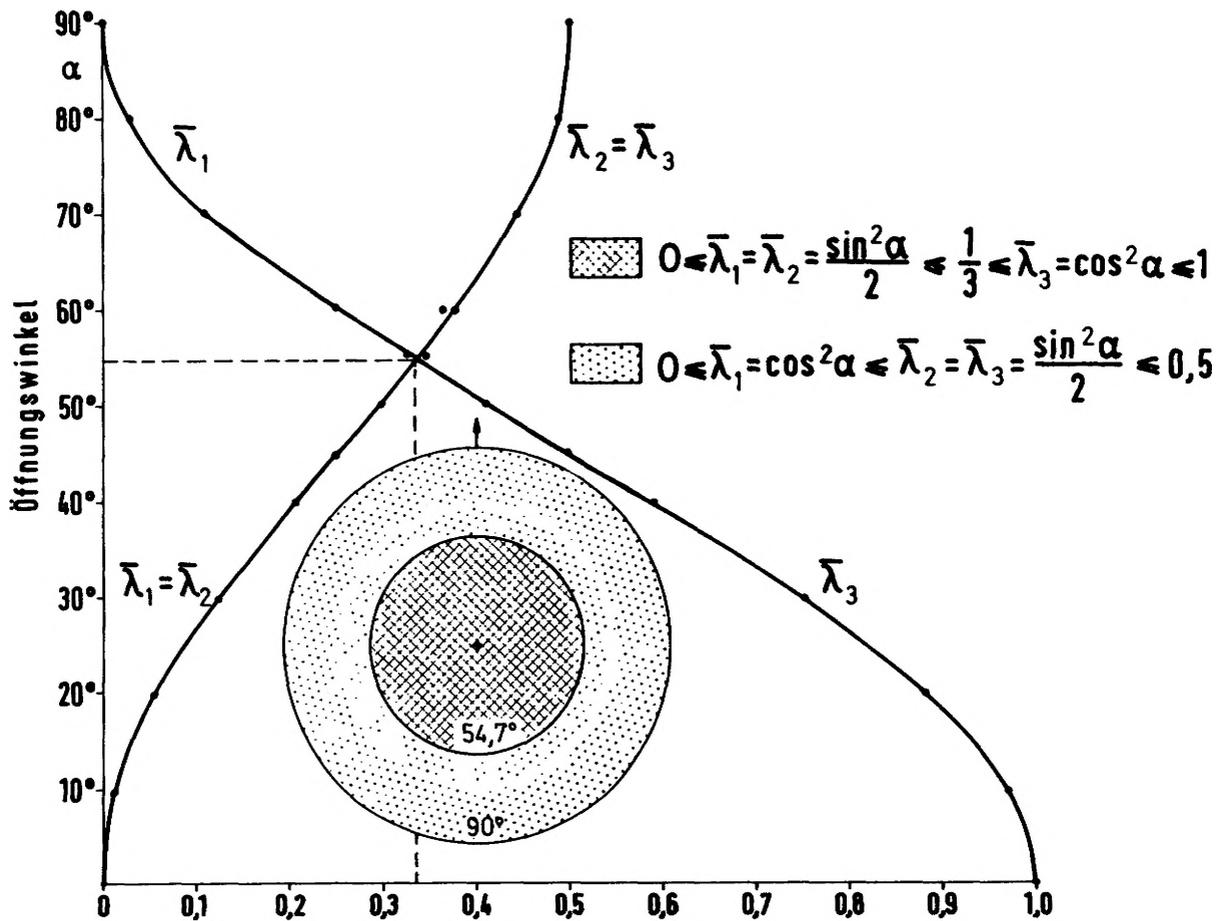


Abb. 12: Die Abhängigkeit der Eigenwerte von Kleinkreis-Verteilungen vom Öffnungswinkel.

$$\bar{\lambda}_{1; 2; 3} = \frac{\sin^2 \alpha}{2} \text{ und } \bar{\lambda}_{1; 3} = \cos^2 \alpha \quad (35)$$

beschrieben werden. Beide Kurven treffen sich bei

$$\bar{\lambda}_1 = \bar{\lambda}_2 = \bar{\lambda}_3 = \frac{1}{3}, \text{ was einem Winkel von } \alpha \approx 54,7^\circ \text{ entspricht.}$$

Dieser Winkel bildet damit den maximalen Öffnungswinkel, bis zu dem eine Kleinkreis-Verteilung, deren Identifizierung ja für die genetische Deutung von Gefügediagrammen, z.B. bei überprägten Gefügen, von großer Bedeutung ist, noch sicher aus den Eigenwerten erkannt werden kann, bei größeren Öffnungswinkeln werden die Verhältnisse der Eigenwerte bereits wieder denen von Großkreis-Verteilungen ähnlicher. Da auch der prozentuale Regelungsgrad von Kleinkreisen (Abb. 6) in der Nähe dieses Wertes ein Minimum hat, hilft auch er nicht weiter, um Kleinkreise mit größeren Öffnungswinkeln von angenäherten Großkreisverteilungen zu unterscheiden.

Für die Richtung der Eigenvektoren ergab sich, daß für die Öffnungswinkel

$$\alpha \leq \arccos \sqrt{\frac{1}{3}} \approx 54,7^\circ$$

$\vec{\lambda}_3$ die Rotationsachse ist, während für $\alpha \geq \arccos \sqrt{\frac{1}{3}}$
 $\vec{\lambda}_1$ zur Rotationsachse wird.

2.2.4 Die Eigenwerte von Gleichverteilungen um einen Großkreis

Für die Simulation einer reinen Gleichverteilung auf einem Großkreis ergaben sich die Werte

$$\bar{\lambda}_1 = 0; \bar{\lambda}_2 = \bar{\lambda}_3 = 0,5$$

Läßt man jedoch die Punktwolke innerhalb eines Winkels $\alpha = 10^\circ$ (Abb. 13) streuen, so nähert sich $\bar{\lambda}_2$ bereits dem Wert $\frac{1}{3}$ und $\bar{\lambda}_3$ dem Wert $\frac{2}{3}$. Vergrößert man α bis man schließlich bei $\alpha = 180^\circ$ die Gleichverteilung auf der Halbkugel erhält, so bleibt $\bar{\lambda}_2$ konstant $\frac{1}{3}$, während sich $\bar{\lambda}_1$ und $\bar{\lambda}_3$ kontinuierlich diesem Wert annähern (Abb. 13). Dem maximalen Wert von $\bar{\lambda}_3$ bei Winkeln zwischen 10° und 30° entsprechen auch maximale prozentuale Regelungsgrade bei den gleichen Winkeln (Abb. 7).

$\vec{\lambda}_3$ liegt immer in der Mitte der Verteilung und spannt mit $\vec{\lambda}_2$ die Symmetrieebene der Verteilung auf. $\vec{\lambda}_1$ ist der Pol dieser Ebene.

2.2.5 Die Eigenwerte von Verteilungen längs Teilgroßkreisen

Für die in Kap. 2.1.5 beschriebenen Verteilungen ergab sich ein Kurvenverlauf, der den Funktionen

$$\bar{\lambda}_1 = 0, \bar{\lambda}_2 = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} \text{ und } \bar{\lambda}_3 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\alpha}{2} \quad (36)$$

entsprechen dürfte (Abb. 14).

$\bar{\lambda}_3$ liegt in der Mitte der Verteilung, $\bar{\lambda}_2$ liegt ebenfalls auf dem Großkreis, dessen Normale von $\bar{\lambda}_1$ gebildet wird.

Die Gleichverteilungen auf Teilgroßkreisen, die hier simuliert wurden, werden in der Natur in dieser Form ebenso selten vorkommen, wie die Kegelverteilungen (s. Kap. 2.1.1). So wie jene Modelle für sphärische unimodale Verteilungen darstellten und mit dem "sphärischen Öffnungsgrad" einen anschaulichen Parameter für die Konzentration der Verteilung lieferten, können sie Modelle für unimodale zirkulare Verteilungen sein.

Ist $\bar{\lambda}_1$ annähernd null, d.h. liegt als Verteilungsmuster ein Großkreis vor, so kann aus (36) analog zum sphärischen Öffnungsgrad" der unimodalen sphärischen Verteilung für die zirkulare Verteilung ein "zirkularer Öffnungsgrad" (circular aperture)

$$\beta = 2 \arcsin \sqrt{2 \bar{\lambda}_2} \quad (37)$$

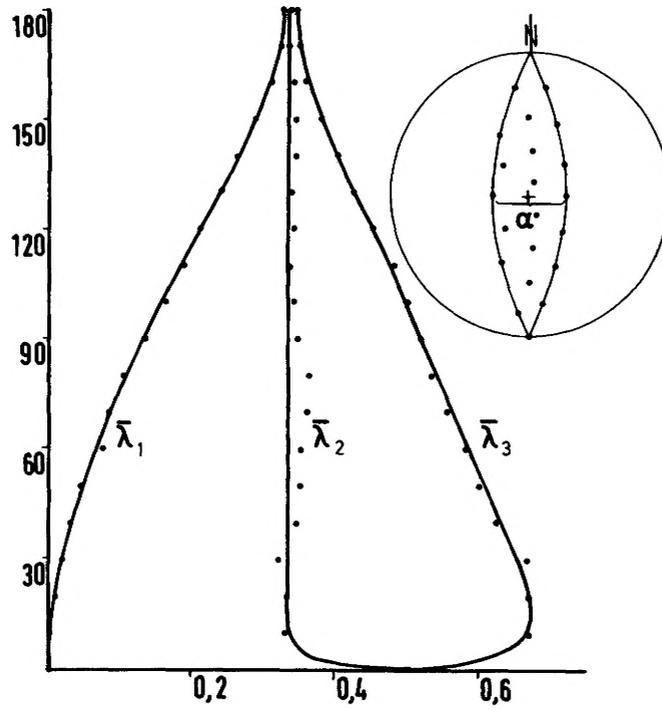


Abb. 13: Die Abhängigkeit der Eigenwerte vom Öffnungswinkel bei Verteilungen in einem Kugelkeil

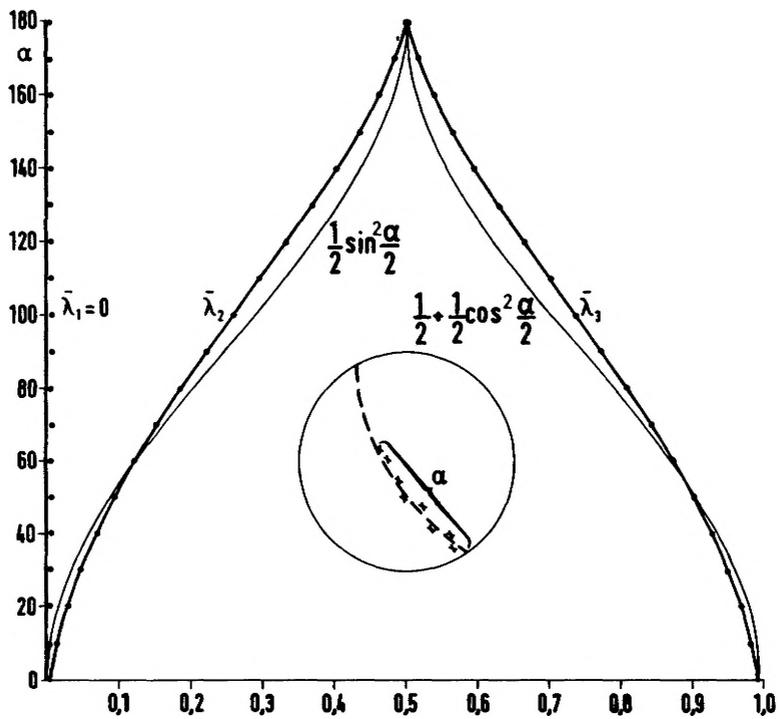


Abb. 14: Die Abhängigkeit der Eigenwerte einer Teilgroßkreisverteilung von der Größe des Teilgroßkreises

abgeleitet werden, der Werte zwischen null Grad für Parallelorientierung und 180 Grad für zirkulare Gleichverteilung annehmen kann. Der zirkulare Öffnungsgrad zeigt somit an, wie groß ein gleichverteilter Teilgroßkreis ist, der die gleichen Eigenwerte wie die Probe hat. Er liegt so, daß $\frac{\beta}{2}$ zu beiden Seiten des Modalwertes auf dem Großkreis abgetragen wird, der durch $\vec{\lambda}_3$ und $\vec{\lambda}_2$ geht.

4.2.6 Die Eigenwerte von Verteilungen längs zweier Großkreise

Variiert man den Winkel α , unter dem sich zwei Großkreise schneiden sollen, so resultiert aus Gleichverteilungen auf beiden Großkreisen eine Gesamtverteilung, deren Eigenwerte den Funktionen

$$\bar{\lambda}_1 = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\alpha}{2}, \quad \bar{\lambda}_2 = \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\alpha}{2} \quad \text{und} \quad \bar{\lambda}_3 = \frac{1}{2} \quad (38)$$

entspricht (Abb. 15).

$\vec{\lambda}_3$ liegt im Schnittpunkt der beiden Großkreise und spannt mit $\vec{\lambda}_2$ die winkelhalbierende Ebene zwischen beiden Großkreisen auf, deren Pol in $\vec{\lambda}_1$ liegt.

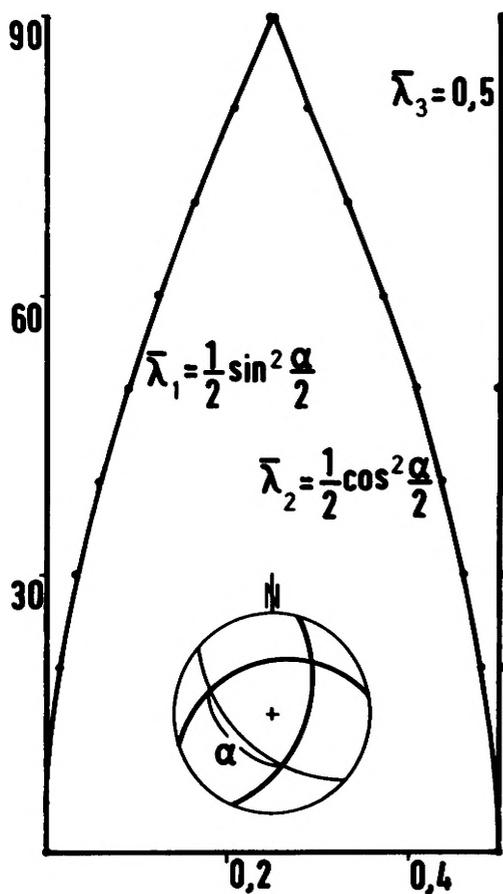


Abb. 15: Die Abhängigkeit der Eigenwerte von dem Winkel zwischen zwei Großkreisen.

LITERATURVERZEICHNIS

- BINGHAM, C. (1964): Distributions on a sphere and their projective plane.- Ph.D. dissertation Yale University, New Haven, Conn.
- BRAUTSCH, O. (1956): Quantitative Auswertung einfacher Gefügediagramme.- Heidelberger Beitr. Miner., 5, 210 - 226, Heidelberg
- DIMROTH, E. (1962): Untersuchungen zum Mechanismus von Blastesis und Syntexis in Phylliten und Hornfels des südwestlichen Fichtelgebirges, I. Die statistische Auswertung einfacher Gürteldiagramme.- Tschermaks Min. Petr. Mitt., 3. Folge, 8, 2, 248 - 274, Wien
- " (1963): Fortschritte der Gefügestatistik.- N. Jb. Min. Mh., 13, 186 - 192, Stuttgart
- FARA, H.D. & SCHEIDEGGER, A.E. (1963): An Eigenvalue Method for the statistical evaluation of fault plane solutions.- Seismol. Soc. Am. Bull., 53, 811 - 816, Oakland, Cal.
- FISHER, R.A. (1953): Dispersion on a sphere.- Proc. Roy. Soc. London, Ser. A, 217, 295 - 305, London
- IRVING, E. (1964): Paleomagnetism and its applications to geological and geophysical problems.- 399 S., (Wiley & Sons), New York
- KIRÁLY, L. (1969): Statistical analysis of fractures (orientation and density).- Geol. Rundschau, 59, 125 - 151, Stuttgart
- MARK, D.M. (1973): Analysis of axial orientation data, including till fabrics.- Geol. Soc. Am. Bull., 84, 4, 1369 - 1374, Boulder, Colo.
- SCHEIDEGGER, A.E. (1965): On the statistics of the orientation of bedding planes, grain axes, and similar sedimentological data.- U.S. Geol. Survey Prof. Paper, 525 C, C164 - C167, Washington, D.C.
- STEPHENS, M.A. (1964): The testing of unit vectors for randomness.- J. Am. Statist. Assoc., 59, 160 - 167, New York
- WALLBRECHER, E. (1978): Ein Cluster-Verfahren zur richtungsstatistischen Analyse tektonischer Daten.- Geol. Rundschau, 67, 3, 840 - 857, Stuttgart
- WATSON, G.S. (1956a): Analysis of dispersion on a sphere.- Roy. Astron. Monthly Notices Geophys. Suppl., 7, 4, 153 - 159, London
- " (1956b): A test of randomness of directions.- Roy. Astron. Soc. Monthly Notices Geophys. Suppl., 7, 4, 160 - 161, London
- " (1965): Equatorial distribution on a sphere.- Biometrika, 52, 193 - 201, Cambridge
- " (1966): The statistics of orientation data.- J. Geol., 74, 5, 786 - 797, Chicago
- WATSON, G.S. & IRVING, E. (1957): Statistical methods in rock magnetism.- Roy Astron. Soc. Monthly Notices Geophys. Suppl., 7, 289 - 300, London
- WOODCOCK, N.H. (1977): Specification of fabric shapes using an eigenvalue method.- Geol. Soc. Am. Bull., 88, 9, 1231 - 1236, Boulder, Colo.

BERLINER GEOWISSENSCHAFTLICHE ABHANDLUNGEN

Freie Universität Berlin – Technische Universität Berlin – Technische Fachhochschule Berlin

Bisher sind erschienen:

Reihe B

Heft 1: Joachim Steinbeck, Modellseismische Untersuchungen von Rayleighwellen unter besonderer Berücksichtigung einer Deckschicht von variabler Mächtigkeit. 128 S., 58 Abb., 1965. DM 25,-.

Heft 2: Peter Giese, Versuche einer Gliederung der Erdkruste im nördlichen Alpenvorland, in den Ostalpen und in Teilen der Westalpen mit Hilfe charakteristischer Refraktions-Laufzeit-Kurven sowie eine geologische Deutung. 218 S., 83 Abb., 1965. DM 40,-.

Heft 3: Joachim Meyer, Zur Modulation der erdmagnetischen Aktivität. 72 S., 26 Abb., 1973. DM 18,-.

Heft 4: Kurt Bram, Zum Aufbau der Kruste und des oberen Mantels im Bereich des westlichen Grabens des ostafrikanischen Grabensystems und im östlichen Zaire-Becken. Ergebnisse einer Untersuchung der Raumwellen von Nah-Erdbeben. 65 S., 32 Abb., 1975. DM 25,-.

Heft 5: Detlef Damaske, Der Weltzeitgang der erdmagnetischen Aktivität als magnetosphärischer Modulationseffekt. 75 S., 33 Abb., 1976. DM 20,-.

Heft 6: Michael Leppin, Modellversuche zur erdmagnetischen und magnetotellurischen Tiefensondierung mit Hilfe eines elektrolytischen Troges. 68 S., 39 Abb., 1977. DM 19,-.

Heft 7: Hussein El-Ali, Geothermische Modelle für ein Profil zwischen Südadria und Tyrrhenis. 51 S., 20 Abb., 1978. DM 18,-.

Hefte 1–6: Vormalis „Geophysikalische Abhandlungen“ des Instituts für Geophysikalische Wissenschaften der FU Berlin

VERLAG VON DIETRICH REIMER IN BERLIN

Berlin 45, Unter den Eichen 57

BERLINER GEOWISSENSCHAFTLICHE ABHANDLUNGEN

Freie Universität Berlin – Technische Universität Berlin – Technische Fachhochschule Berlin

Bisher sind erschienen:

Reihe A

Band 1 / Götz Knoche: Zur Stratigraphie und Petrographie paläozoischer Sedimente am Ostrand der Serra S. Bruno (Kalabrien, Süditalien). 67 S., 48 Abb., 3 Taf., 1977. DM 19,—.

Band 2 / Peter Eggert: Sedimentpetrographisch-stratigraphische Untersuchungen in den Unterkreide-Serien und dem Bolgenkonglomerat (Oberkreide) der Feuerstätter Decke im Allgäu und Voralberg, 167 S., 38 Abb., 18 Taf., 1977. DM 35,—.

Band 3 / Horst Grotjohann: Die Korrelation von Geochemie und Faziesdifferenzierung im erzhöflichen Muschelkalk (Mitteltrias) der Ostalpen. 70 S., 34 Abb., 5 Taf., 10 Tab., 1978.

Friedrich F. Helmdach: Nichtmarine Ostrakoden aus der spanischen Oberkreide. 8 S., 5 Abb., 1 Tafel, 1978. DM 23,—.

Band 4 / Christian Preller: Trend- und Spektralanalysen von Grundwasserstandsganglinien und klimatologischen Reihen zur Ermittlung der Grundwasserneubildung in drei Gebieten von Berlin (West). 84 S., 27 Abb., 22 Taf., 3 Tab., 1978. DM 19,—.

Band 5 / Mohamed Alwashe: Luftbild- und Satellitenbild-Interpretation des lithologischen und tektonischen Baus im Nördlichen Tibesti-Gebirge (Ehi Méché und Tirenno), Tschad. 110 S., 26 Abb., 31 Taf., 22 Tab., 8 Kart., 1978. DM 38,—.

Band 6 / Nigem Yusuf: Mikropaläontologische und geochemische Untersuchungen an Bohrkernen aus dem Roten Meer. 77 S., 23 Abb., 9 Tab., 1978. DM 19,—.

Band 7 / Heiner Krieger: Hydrogeologische Untersuchungen zur Grundwasserneubildung in der Bitburger Mulde (Kylltal). 109 S., 31 Abb., 16 Tab., 1 Kart., 1978. DM 24,—.

Band 8 / Werner Schwarzhans: Otolithen aus dem Unter-Pliozän von Südsizilien und der Toscana. 52 S., 4 Abb., 13 Taf., 1978.

Thomas Schlüter und Werner Schwarzhans: Eine Bonebed-Lagerstätte aus dem Wealden Süd-Tunesiens (Umgebung Ksar Krerachfa). 14 S., 8 Abb., 3 Taf., 1978. DM 24,—.

Band 9 / Thomas Schlüter: Zur Systematik und Palökologie harzkonservierter Arthropoda einer Taphozönose aus dem Cenomanium von NW-Frankreich. 150 S., 99 Abb., 13 Taf., 1978. DM 35,—.

Band 10 / Hans-Joachim Bauer: Der Münsterländer Kiessandzug, Geologie, Hydrologie, Hydrochemie und Wasserwirtschaft. 136 S., 90 Abb., 25 Tab., 1979. DM 28,—.

Band 11 / Peter Arndt: Zinngehalte in Schwermineralien aus thailändischen Zinnseifen (Beiträge zur Prospektionsmethodik und wirtschaftsgeologischen Analyse von Zinnseifen). 96 S., 11 Abb., 5 Taf., 39 Tab., 1979. DM 24,—.

Band 12 / Emanuel Pluhar: Die Geochemie von Monaziten und ihre Anwendung bei der Prospektion von Zinnerzen. 59 S., 14 Abb., 5 Taf., 19 Tab., 1979. DM 19,—.

Band 13 / Antonios Papakonstantinou: Die hydrogeologischen Verhältnisse im Raum der Ptolemais-Senke und des westlichen Vermiongebirges in Griechisch-Mazedonien. 79 S., 37 Abb., 15 Tab., 5 Anl., 1979. DM 26,—.

Band 14 / Bernd Lehmann: Schichtgebundene Sn-Lagerstätten in der Cordillera Real/Bolivien. 135 S., 70 Abb., 20 Tab., 6 Taf., 1 Kart., 1979. DM 30,—.

Band 15 / Heinz Burger et al.: Beiträge zur Geomathematik. 126 S., 1979. DM 28,—.

VERLAG VON DIETRICH REIMER IN BERLIN

Berlin 45, Unter den Eichen 57