

Die Identifikation von Umweltbelastungen aus regionalen Geochemiedaten – Möglichkeiten der multivariaten Datenauswertung

Von H. KÜRZL, C. REIMANN und F. WURZER*)

Mit 7 Abbildungen und 2 Tabellen

Zusammenfassung

Die statistische Analyse von Einzelementen aus regionalen geochemischen Untersuchungen ermöglicht die Ausweisung von Bereichen mit ungewöhnlichem geochemischen Verhalten (Elementmaxima und -minima als Ausreißer vom übrigen Gesamtdatenkollektiv). Die Gründe für ein derartiges Verhalten sind vielfältiger Natur. In den meisten Fällen weisen positive Extremwerte bei den umweltrelevanten Schwermetallen im Falle der geochemischen Basisaufnahme Österreichs auf bekannte Vererzungen und alte bergbauliche Aktivitäten hin. Dies ist in der Art der Probenahme bedingt. Detaillierte statistische Auswertungen ergeben jedoch die Möglichkeit auch Gebiete auszuweisen, in denen obige Erklärung nicht möglich ist, wie z. B. bei Vorliegen anthropogener Umweltbelastungen.

Zu einer näheren Qualifizierung können multivariate Auswertungsmethoden eingesetzt werden, deren Ergebnisse an einem Beispiel der Primärauswertung der regionalen Bachsedimentgeochemie von Österreich diskutiert werden. Im Rahmen dieses zur Rohstofferkundung geplanten Projektes stehen derzeit die einzigen regionalen Geochemiedaten Österreichs zur Verfügung. Insgesamt 30.000 Bachsedimentproben wurden auf bis zu 36 Elemente analysiert. Bei der multivariaten Auswertung dieser Daten setzt man Elementassoziationen, charakteristisch für Vererzungen, Lithologie oder Umweltbelastungen in Beziehung zu anderen Elementen, die das geochemische Umfeld definieren. Die Auflösung dieser Zusammenhänge mittels multivariater Methoden erlaubt eine nähere Eingrenzung der Ursache auf vererzungs- oder lithologiebedingte Einflüsse im Gegensatz zu einer möglichen Belastung der natürlichen Umwelt durch die Industrie. Hauptergebnis bei vorgestelltem Anwendungsbeispiel ist, daß eine beobachtete große, regionale Schwermetallanomalie nicht vererzungsbedingt ist, sondern durch den Einfluß der die Lithologie bestimmenden Elemente erklärt werden kann. Sofern nicht auch das Hauptelementspektrum durch Industrieemissionen beeinflusst ist, muß daher ein aus der geologischen Karte nicht erkennbarer, deutlicher Lithologiewechsel als Ursache der Anomalien angenommen werden.

Summary

In Austria, a regional geochemical stream-sediment survey, covering about 40,000 km² was just finished. More than 30.000, -80mesh stream sediment samples

*) Anschrift der Verfasser: Forschungsgesellschaft Joanneum, Sektion Rohstoffforschung/Leoben, Roseggerstraße 15, A-8700 Leoben.

have been analysed for up to 36 elements. The first statistical treatment of these data lead to the detection of many anomalies. Most high level heavy metal anomalies, however, are caused by known mineralizations. Detailed statistical and graphical data analysis allows the detection of additional low level anomalies. These additional anomalies will – in most cases – need some other explanation. Undetected, covered mineralizations, changes in lithology and environmental pollution will be the major sources of these anomalies. For a more detailed interpretation of such anomalies multivariate data analysis can be successfully applied. The analysis of inter-element relations and dependencies by multivariate methods allows to discriminate – and in many cases identify – the sources of anomalies.

In a case study, a major low level heavy metal anomaly found in a small geochemical subgroup of 178 samples has been investigated. Canonical correlation and multiple regression analysis were applied to the data to define the source of these anomalies. The anomalies (Zn, Ni, V, Mg) did occur in the neighbourhood of steel industries and of a magnesite mine, thus environmental pollution was presumed. As a result of this study, however, the anomaly could be explained by lithology, although there is no apparent change in lithology in the geological map.

Inhaltsverzeichnis

1. Problemstellung und Ziele	92
2. Datenanalyse in der Geochemie	93
3. Methoden und Datenmodell	94
4. Fallstudie Troiseckkristallin	96
5. Literatur	105

1. Problemstellung und Ziele

Die allgemeine Sensibilisierung gegenüber Umweltbelastungen, erkennbar in der wachsenden Zahl von Bürgerinitiativen, gesetzlichen Maßnahmen und der Vielzahl notwendiger Gutachten, zwingt den für Untersuchungen beigezogenen Wissenschaftler zu einer umfassenden statistisch belegbaren und möglichst objektivierbaren Beweisführung. Dies gestaltet sich bei geochemischen Fragestellungen in Österreich sehr schwierig, da hier mit diesem Teil der Umweltforschung großteils unbearbeitetes Neuland betreten wird und historische Vergleichsstudien mit gesicherten Meßdaten kaum verfügbar sind. Der nötige Aufwand, diesen Zustand zu beseitigen, wird allgemein stark unterschätzt, sodaß die in den meisten vergangenen Untersuchungen gesammelten Daten für eine statistisch belegbare Beweisführung nicht ausreichen.

Gerade in der Geochemie, einem wichtigen Teilgebiet der Umweltforschung, in dem das Verhalten chemischer Elemente in der natürlichen Umwelt analysiert werden soll, bedingen der methodische Fehler und die komplexen, bisher noch nicht ausreichend erforschten geochemischen Prozesse, eine ständige Unsicherheit in Beurteilung und Interpretation der Meßergebnisse (siehe auch den Beitrag von Reimann: „Externe Laborkontrolle für umweltbezogene Geochemieprojekte – Notwendigkeit oder übertriebener Aufwand“).

Bei einer ausschließlich univariaten Datenauswertung sind diese Probleme oft nicht einmal erkennbar. Damit ergeben sich aber auch leicht Fehlinterpretationen. In vorliegender Arbeit sollen die Vorteile der multivariaten statistischen Datenanalyse

aufgezeigt werden. Durch die gleichzeitige Betrachtung des Verhaltens vieler Elemente und ihrer gegenseitigen Abhängigkeiten, gelingt es die den Daten eigenen Zufälligkeiten weitgehend auszugleichen. Ziele der Bearbeitung sind sowohl die Charakterisierung geochemischer Prozesse als auch das Erkennen ungewöhnlichen Elementverhaltens unter bestmöglicher Ausschließung der Meßfehler- und Zufallskomponenten.

Die regionale geochemische Basisaufnahme (Bachsedimentgeochemie) stellt die bisher einzige, im größeren Rahmen durchgeführte geochemische Untersuchung in Österreich dar. Allerdings wurden die für Umweltstudien besonders wichtigen, stark besiedelten und teilweise industrialisierten Tal- und Beckenlandschaften – immerhin halb Österreich – aus dem ursprünglich eher rohstoffbezogenen methodischen Ansatz ausgeklammert. Im Rahmen dieser Basisaufnahme wurden über 30.000 Proben gezogen und auf bis zu 36 chemische Elemente analysiert. Es ist naheliegend anhand dieser Daten zu untersuchen ob es Hinweise auf anthropogene Umweltbelastungen gibt. Auch wenn beobachtbare Absolutwerte einzelner Schwermetalle, die in diesem Rahmen ausschließlich betrachtet werden sollen, größtenteils noch keine gefährlichen Werte überschritten haben, kann es von Nutzen sein, in fraglichen Gebieten die Verursacher der Schwermetallkonzentrationen festzustellen, um mögliche Gefährdungen frühzeitig zu erkennen und für die Zukunft auszuschließen.

Das generelle Ziel, das bei diesen Untersuchungen verfolgt wird, ist die Unterscheidung lokal bedingter Geschehen (z. B. Vererzungen, aber auch anthropogen bedingte Umweltbelastungen) vom regionalen geochemischen Untergrund und die Eingrenzung der Ursache. Dazu stehen uns derzeit nur ortsbezogene geochemische Multielementdaten zur Verfügung, die einer statistischen Momentaufnahme entsprechen. Sie bieten keine Möglichkeit, Vergleiche über die Zeit (entsprechend einem dynamischen Trend) durchzuführen, die einen direkten Hinweis auf eine steigende Umweltbelastung erlauben würden. Um die geochemische Basisaufnahme von Österreich, die einem Umweltstatus, zumindest für Teilbereiche des Bundesgebietes entspricht, für die oben erwähnte Zielsetzung nützen zu können, ist es nötig, eine umfangreiche Datenanalyse, basierend auf unterschiedlichen Formalmodellen durchzuführen, von der im Folgenden zwei besonders wichtige multivariate Methoden beschrieben werden.

2. Datenanalyse in der Geochemie

Geochemische Untersuchungen bestehen meist aus Probenahme, chemischer Analyse und Darstellung der Einzelelementwerte in geochemischen Karten bzw. Datenzusammenfassungen wie Histogramm, kumulativer Häufigkeit und Beschreibung durch Verteilungsparameter. Methodenentwicklungen während der letzten zehn Jahre und deren rasche programmäßige Verfügbarkeit haben zusätzlich die multivariate Datenanalyse zu einem integrierten Bestandteil jedes geochemischen Untersuchungsvorhabens werden lassen (HOWARTH, R. J. und SINDING-LARSEN, R. 1983).

Diese Notwendigkeit wird auch aus der Datenverfügbarkeit ersichtlich, wie sie für geochemische Untersuchungen zum Standard geworden ist. Meist sind große Datenkollektive (über 1000 Datenpunkte) mit mehrdimensionalem Charakter (30–40 und mehr Variable) zu bearbeiten. Diese Datenmengen benötigen eine computerunter-

stützte Datenbank mit Möglichkeiten zu einer intensiven statistischen, graphischen Datenanalyse, um Fehlinterpretationen zum Großteil ausschließen zu können.

Die Ausweisung von Einzelelementanomalien, basierend auf den Rohwerten, kann zwar erste Hinweise auf Abweichungen im Elementverhalten geben, die Ursachen sind damit aber in vielen Fällen keineswegs unmittelbar bestimmt. Hier hilft die gleichzeitige Betrachtung mehrerer Elemente oder Elementkombinationen untereinander, wie es in den multivariaten Methoden geschieht, wesentlich weiter. Das gemeinsame Verhaltensmuster kann typisch für den einen oder anderen natürlichen geochemischen Prozeß aber auch für exogene Einflüsse sein. Dies herauszufinden und so darzulegen, daß die Zusammenhänge klar und leicht erkennbar werden, ist Aufgabe der statistischen und graphischen Datenanalyse. Es ist üblich, Ergebnisse geochemischer Untersuchungen in Kartenwerken zu dokumentieren. Der Informationsinhalt sollte möglichst vielseitig benutzbar sein (Lagerstättensuche – aber auch für Umweltzwecke). Besonders auch aus diesem Grunde wird es als zweckmäßig erachtet, eine Datenanalyse der kartographischen Dokumentation voranzuschicken, um eine optimale Interpretierbarkeit für verschiedene Benutzerkreise zu erreichen.

3. Methoden und Datenmodell

Methoden der multivariaten Datenanalyse sind seit längerem bekannt und bereits oft erfolgreich verwendet worden. Durch den Einsatz von modernen Computersystemen wurde ihre Handhabbarkeit wesentlich erleichtert und ihre Verfügbarkeit enorm verbessert. Ein deutlicher Trend der letzten Jahre führt sowohl zu nicht parametrischen und graphischen als auch zu robusten parametrischen und resistenten Methoden. Auch die explorative Datenanalyse, sowohl im uni- wie auch multivariaten Fall, ist in den Vordergrund gerückt. All diese Methoden finden erfolgreich in vielen Anwendungsgebieten Platz und verdrängen klassische Statistiken (KÜRZL et al. 1985 a).

Jeder Auswertungsstrategie liegt ein vom Datentyp abhängiges Datenmodell zugrunde. Die geochemischen Meßwerte aus regionalen Bachsedimentuntersuchungen sind recht heterogen, sie setzen sich aus verschiedenen gewichteten Einflußfaktoren, die mit unterschiedlicher Zufälligkeit behaftet sind, zusammen. Für das Fallbeispiel aus der regionalen geochemischen Basisaufnahme des österreichischen Bundesgebietes wurde folgendes Datenmodell angenommen:

Datenmodell:

$$EL(\text{ges}) = EL(\text{lokal}) + EL(\text{regional}) + EL(\text{Umfeld}) + E(\text{Fehler})$$

EL(ges) = Absolutmeßwert (ppm) des jeweiligen chemischen Elementes

EL(lokal) = lokal bedingte Meßwertkomponente (Anomalien) verursacht z. B. durch:

- kleinräumig bedingte Faziesschwankungen in Lithologien
- Mineralisierungen, geochemische Höfe
- exogener Eintrag, anthropogen aus Luft (Industrie), Boden (Deponien), Wasser (Klärschlämme, Abwässer)

EL (regional) = regional bedingte Meßwertkomponente (Hintergrundbelastung) dominierend bedingt durch:

- geochemische Charakteristik von einzelnen Gesteinstypen oder Gesteinsassoziationen

EL (Umfeld) = umfeldbedingte Meßwertkomponente bedingt durch:

- chemisch-physikalisches Umfeld wie: pH, Eh, Temperatur, etc.

E (Fehler) = eine im Modell nicht weiter geteilte Fehlerkomponente, sie enthält: Fehler in Probenahme und Analyse sowie nicht weiter definierbare Zufallsfehler.

Dieses Datenmodell kann als typisch für geochemische Proben, aus dem sekundären Milieu stammend, angenommen werden. Erste Aufgabe der Datenanalyse ist es nun, den Einfluß des physikalisch-chemischen Umfeldes auf den jeweiligen Meßwert zu reduzieren, um eventuell dadurch bedingte Falschanomalien auszuschließen. Im nächsten Schritt kann dann versucht werden, die lokal bedingte Meßwertkomponente vom regionalen Hintergrund zu trennen. Um dies zu erreichen, werden in vorliegendem Beispiel als multivariate Verfahren die kanonische Korrelationsanalyse und die multiple Regressionsanalyse verwendet.

– Kanonische Korrelationsanalyse

Eine interessante Fragestellung in der Analyse geochemischer Daten ist es, wie sich Lagerstätten bzw. umweltspezifische Elemente (im allgemeinen Schwermetalle) in geochemischen Untergrundpopulationen verhalten. Dabei kann zwischen Stichproben unterschieden werden, die Anreicherungen von Schwermetallen führen, die mit den Schwankungen des allgemeinen geochemischen Umfeldes korrelieren und jenen, die davon abweichen. Das Formalmodell der kanonischen Korrelation wird wie folgt definiert:

$$\max \left\{ \text{CORR} \left(\sum_{i=1}^p a_i x_i, \sum_{j=1}^q b_j y_j \right) \right\}$$

$$a_1, \dots, a_p$$

$$b_1, \dots, b_q$$

d. h. es werden aus den Elementgruppen $X = (x_1, \dots, x_p)$ und $Y = (y_1, \dots, y_q)$ zwei Linearkombinationen mit geeigneten Gewichtungskoeffizienten a_i ($i = 1, \dots, p$) und b_j ($j = 1, \dots, q$) errechnet, sodaß deren Korrelation maximiert wird.

Die Auswahl der geeigneten Elementassoziationen erfolgt durch den Bearbeiter entsprechend dem Auswertungsziel der Analyse. So kann man z. B. eine umweltrelevante Assoziation von Schwermetallen gesteinspezifischen Elementen bzw. auch anderen Variablen, die das physikalisch-chemische Umfeld definieren, gegenüberstellen. Abweichend von der üblichen Berechnung der kanonischen Korrelation wurde im folgenden eine robuste Variante eingesetzt. Damit erreicht man wesentliche Vorteile in der Berechnung der Korrelation selbst, wie auch eine verbesserte Anomalienabtrennung (KARNEL 1985). Neben dieser Verbesserung des Formalmodells bietet die vorliegende Methode gegenüber Einzelelementbetrachtungen den

wesentlichen Vorteil, abweichende Stichproben unabhängig von ihren absoluten Elementmeßwerten erkennen zu können.

– Multiple Regressionsanalyse

Einen ähnlichen Zweck, jedoch auf einem gänzlich anderen Formalmodell basierend, verfolgt die multiple Regressionsanalyse. Sie hat in den letzten Jahren eine breite Anwendung bei geochemischen Fragestellungen gefunden (O. SELINUS, 1983). Es wird dabei die direkte Abhängigkeit eines Elementes (z. B. Schwermetall) zu den übrigen verfügbaren Elementen analysiert.

Das Formalmodell für die Regressionsanalyse läßt sich wie folgt darstellen:

$$y = \beta X + \epsilon$$

wobei

y den Vektor der Beobachtungen der als abhängig betrachteten Variablen darstellt und

X die Matrix der Beobachtungen der das Auftreten von y erklärenden Variablen ist.

β sind die Koeffizienten (Gewichtungsfaktoren) für die jeweiligen erklärenden Variablen, die das Modell (linear oder nichtlinear) optimieren.

ϵ repräsentiert die Fehlerkomponente aus Verfahren und Analyse sowie Zufallseinflüsse.

Die Regressionsanalyse, wie sie im Fallbeispiel eingesetzt ist, wurde ebenfalls dem geochemischen Datentyp durch die Berücksichtigung robuster statistischer Methoden angepaßt, wodurch die Verläßlichkeit der Aussage wesentlich erhöht werden konnte (DUTTER, R. 1983, ROUSSEEUW, P. 1984).

Die restliche Variabilität des untersuchten Elementes (Residualwerte), die durch das Modell nicht erklärt werden kann, ist als lokaler Einfluß zu interpretieren und kann entsprechend seinem Umfeld bewertet werden.

Neben diesen beiden erwähnten Methoden gibt es noch eine Fülle multivariater Verfahren, die ebenfalls je nach Problemstellung für die Interpretation geochemischer Untersuchungen eingesetzt werden können. Dazu ist zu erwähnen, daß es nicht eine einzelne Methode gibt, die sämtliche Fragestellungen zufriedenstellend erklärt. Eine entsprechende Antwort kann nur erreicht werden, wenn man dem Konzept der explorativen Datenanalyse folgt. Dabei nützt man den gesamten verfügbaren Methodenfächer (von uni- bis multivariat) aus, vergleicht die Ergebnisse und gelangt so zu einer individuellen, den jeweiligen Anforderungen entsprechenden Auswertung. Nur so kann eine optimale Interpretation gewährleistet werden.

4. Fallstudie Troiseckkristallin

Für die oben erwähnte geochemische Basisaufnahme des österreichischen Bundesgebietes wurde eine EDV-gestützte Primärauswertung für drei Teilbereiche (Niedere Tauern, Östliche Grauwackenzone, Gurktaler Alpen) durchgeführt (KÜRZL et al. 1985 b, c, d). Neben einer ausführlichen Dokumentation der univariaten Datenanalyse für die Gesamtdatenkollektive, wurden diese mittels multivariater Methoden auf regionale und lokale geochemische Gruppen analysiert. Für solche Teilbereiche

konnten jeweils die regionale geochemische Untergrundbelastung und lokale Abweichungen vererzungsindikativer Elemente herausgearbeitet werden.

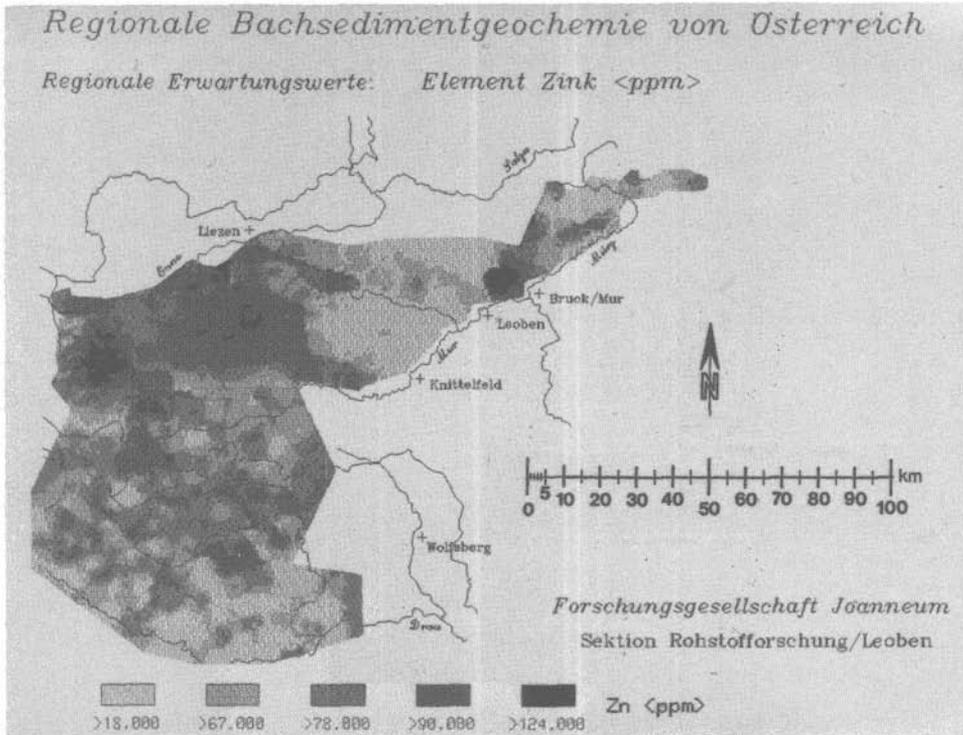


Abb. 1: Die regionalen Erwartungswerte des Elementes Zink (ppm) aus der Primärauswertung (Projektteil I, 1985) der geochemischen Basisaufnahme des Österreichischen Bundesgebietes.

Eine zusammenfassende Darstellung der Ergebnisse für die regionalen Erwartungswerte des Elementes Zink über sämtliche Teilbereiche aus dem ersten Teil der Primärauswertung zeigt Abb. 1. Neben der Untergrundvariabilität, die großteils eine Beziehung zu regionalen lithologischen Verhältnissen erlaubt, zeigen sich in einigen Gebieten positive Abweichungen, obwohl zur geostatistischen Berechnung der Erwartungswerte lokale positive Elementanomalien nicht miteinbezogen wurden. Diese Gebiete weisen teilweise auf größere bekannte Vererzungen bzw. ehemalige Bergbaue hin (z. B. Bereich Schladminger Tauern oder Walchen bei Öblarn). In solchen Bereichen überschneiden sich der geogene Einfluß auf die Umweltbelastung mit dem anthropogenen, der durch die ehemaligen bergmännischen Eingriffe und die Erzgewinnung (Halden) verursacht wurde. Der Umweltstatus ist hier sehr leicht erkennbar.

Andere Bereichsanomalien, wie z. B. in den Wölzer Glimmerschiefern, können als Fortsetzungen gering aufgeschlossener Vererzungen interpretiert werden bzw.

indizieren kleinräumige, bisher unbekannte Mineralisierungen. Da sie weit ab von jeglicher Industrie bzw. größeren Siedlungsgebieten auftreten, ist ein anthropogener Einfluß von vorneherein mit hoher Wahrscheinlichkeit auszuschließen.

Ein anderer Anomalientyp tritt nördlich des Murtales zwischen Leoben und Bruck/Mur im Bereich östlich und westlich des Lamingtales bis Oberdorf hin auf. Hier sind bisher keinerlei Vererzungen bekannt, die Nähe zu ausgedehnten Industriegebieten (Mur-Mürztal) bzw. zur Magnesitindustrie in Oberdorf ist auffällig. Eine direkte Erklärung dieses Phänomens ist bei der Betrachtung von Einzelelementen nicht ohne weiteres zu finden, sodaß dieser Bereich als Fallstudie ausgewählt wurde.

Es soll an Hand dieses Beispiels gezeigt werden, wie man vorher beschriebene Methoden zur Auswertung und Interpretation regionaler Geochemiedaten praktisch einsetzt bzw. die Ursache von abweichendem Elementverhalten damit näher eingegrenzt werden kann.

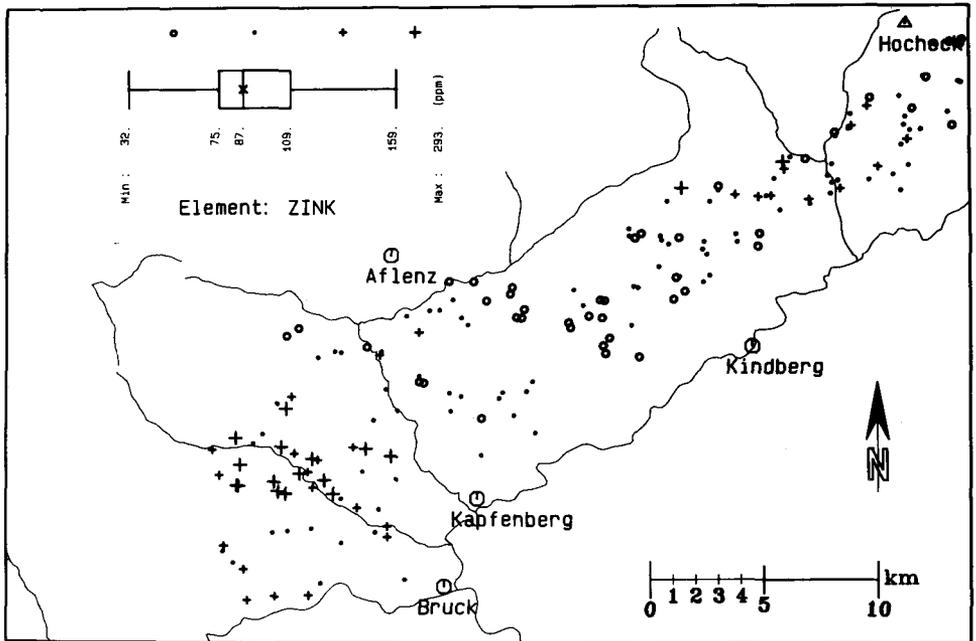


Abb. 2: Punktbezogene Elementverteilung Zink (ppm) in der regionalen geochemischen Untergruppe Troiseckkristallin (Klasseneinteilung nach resistenten Kenngrößen).

Vorliegende multivariate Datenanalyse baut auf der geochemischen Gruppenbildung aus der Primärauswertung auf (KÜRZL et al., 1985 c). Dabei wurden für das Gebiet nördlich des Mur-Mürztales zwei regionale Gruppen definiert. Die erste kann dem Einflußbereich der Grauwackenzone i. a., die zweite dem Troiseckkristallin mit seiner Umrahmung zugeordnet werden. Im Südteil letzterer Gruppe liegt auch die zu untersuchende Zinkanomalie, deren univariates Erscheinungsbild in Abb. 2 dokumentiert ist. Sie tritt markant mit einer streichenden Länge von ca.

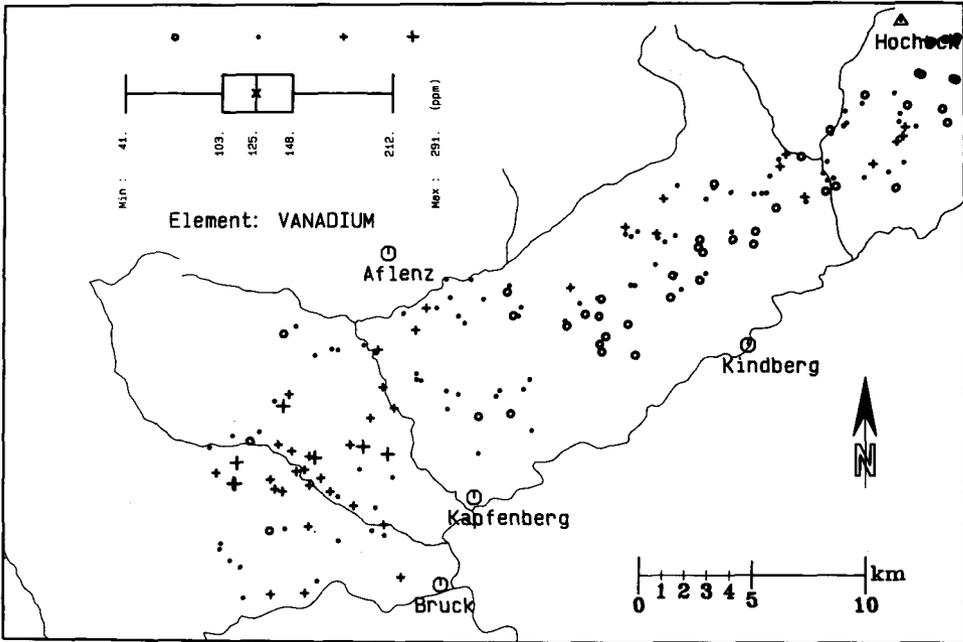


Abb. 3: Punktbezogene Elementverteilung Vanadium (ppm) in der regionalen geochemischen Untergruppe Troiseckkristallin (Klasseneinteilung nach resistenten Kenngrößen).

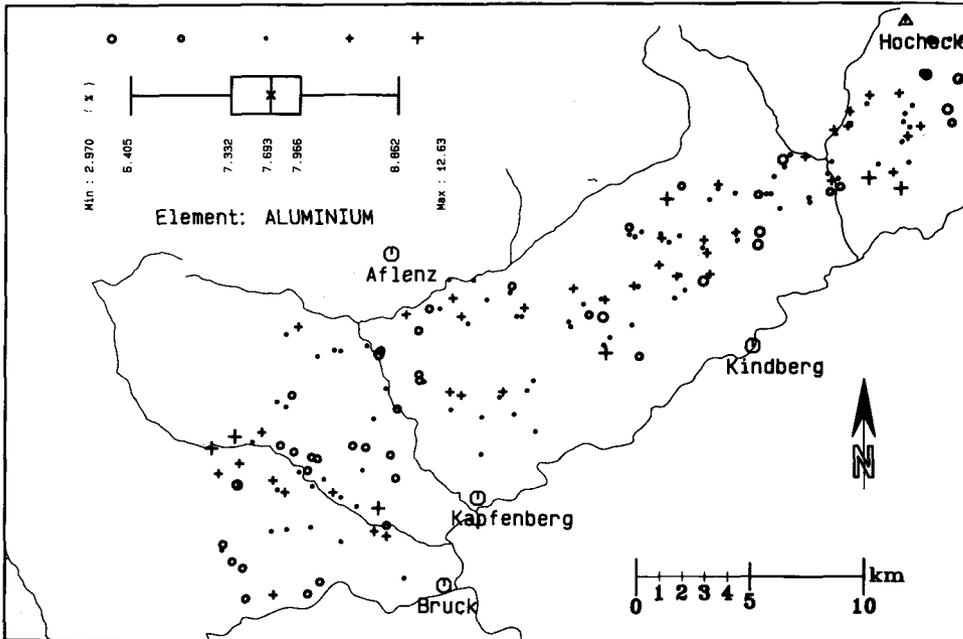


Abb. 4: Punktbezogene Elementverteilung Aluminium (%) in der regionalen geochemischen Untergruppe Troiseckkristallin (Klasseneinteilung nach resistenten Kenngrößen).

8 km im mittleren Abschnitt des Lamingtales hervor. Ein ähnliches regionales Muster zeigen auch andere Schwermetalle wie Cu, Ni und V. Die regionale Verteilung für letzteres Element zeigt Abb. 3, in der eine zur Zn-Anomalie fast identische V-Anomalie in eben beschriebenem Bereich zu erkennen ist. Gänzlich andere Erscheinungsmuster können bei vielen anderen Elementen beobachtet werden. So zeigt z. B. das Hauptelement Al in der geochemischen Untergruppe des Troiseckkristallins (Abb. 4) eine recht ähnliche Elementvariabilität im gesamten Gebiet. Lokale Häufungen von Elementanreicherungen wie -unterschüssen sind nicht zu beobachten.

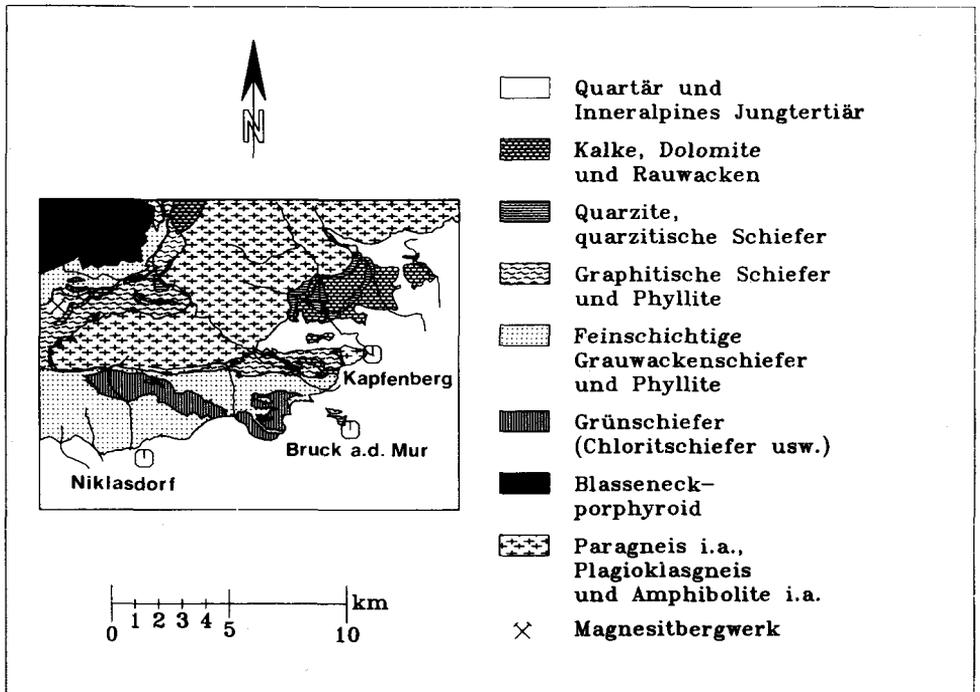


Abb. 5: Generalisierte Geologie des geochemischen Anomalienbereiches im Südwestteil des Troiseckkristallins und angrenzender Gebiete (nach I. STINY und F. CZERMAK, 1932; H. W. FLÜGEL und F. R. NEUBAUER, 1984).

Der erste Schritt in der Interpretation solcher Erscheinungsmuster ist der Vergleich mit der Geologie. Abb. 5 gibt für den südlichen Bereich des Untersuchungsgebietes die lithologischen Verhältnisse wieder. Der Großteil der Schwermetallanomalie liegt im Einzugsgebiet des Troiseckkristallins (Paragneise und Amphibolite), nur wenige Probenpunkte liegen in Grenzbereichen zu anderen Lithologien mit einem abweichenden geochemischen Erscheinungsbild.

Eine nähere Erklärung des geochemischen Prozesses im Anomalienbereich kann durch den Einsatz multivariater Methoden versucht werden. Dazu wurden in einem ersten Schritt in der kanonischen Korrelationsanalyse die verzerrungsindikativen

Tab. 1: Ergebnisse der kanonischen Korrelation für die geochemische Untergruppe Troiseckkristallin mit den kanonischen Variaten f (Cu, Zn) gegen f (Al, Ca, Fe, K, Mg, N, P, Ti) mit Korrelationsmatrix sowie 1. und 2. kanonischer Korrelation.

Kanonische Korrelation (robust)

Variablen in Gruppe 1: Anzahl = 2

Cu Zn

Variablen in Gruppe 2: Anzahl = 9

Al Ca Fe K Mg Mn Na P Ti

Korrelationsmatrix:

	Cu	Zn	Al	Ca	Fe	K	Mg	Mn	Na	P	Ti
Cu	1.000										
Zn	0.673	1.000									
Al	0.130	-0.183	1.000								
Ca	0.132	0.434	-0.521	1.000							
Fe	0.640	0.730	-0.103	0.436	1.000						
K	0.218	0.134	0.320	-0.294	-0.025	1.000					
Mg	0.488	0.782	-0.399	0.726	0.604	0.021	1.000				
Mn	0.432	0.540	-0.101	0.503	0.806	-0.197	0.448	1.000			
Na	0.493	0.468	-0.058	0.258	0.500	-0.019	0.303	0.460	1.000		
P	0.597	0.653	-0.029	0.431	0.851	0.204	0.525	0.688	0.412	1.000	
Ti	0.342	0.462	-0.126	0.398	0.860	-0.179	0.364	0.775	0.465	0.721	1.000

Kanonische Korrelationen:

0.917 0.514

1. Kanonische Korrelation: 0.917

Koeffizienten für die 1. Variablen­gruppe:

Cu Zn
0.398 0.688

Koeffizienten für die 2. Variablen­gruppe:

Al Ca Fe K Mg Mn Na P Ti
0.029 -0.353 0.633 -0.030 0.630 0.070 0.242 0.234 -0.474

2. Kanonische Korrelation: 0.514

Koeffizienten für die 1. Variablen­gruppe:

Cu Zn
1.293 -1.165

Koeffizienten für die 2. Variablen­gruppe:

Al Ca Fe K Mg Mn Na P Ti
0.414 -0.135 1.115 -0.157 -0.754 -0.196 0.348 0.291 -1.014

Elemente Cu und Zn den verfügbaren Haupt- und Begleitelementen, die den geochemischen Kontrast zwischen den Lithologien dominieren, gegenübergestellt. Mit einigen dieser Elemente (Fe, Mn) sollte es annähernd möglich sein, mangels anderer Variabler (pH, Eh, etc.) auch ein eventuell die Elementwerte beeinflussendes physikalisch-chemisches Umfeld reduzieren zu können. Das Ergebnis dieser Analyse ist in Tab. 1 angeführt. Zur Berechnung wurden sämtliche Daten (178 Proben) aus der Troiseckgruppe verwendet. Bereits in der Korrelationsmatrix sind einige sehr hohe Korrelationen zwischen Cu und Zn zu den Hintergrundelementen erkennbar. Das optimierte Korrelationsmodell zwischen beiden Variablengruppen gibt einen Koeffizienten von 0,917. Dies entspricht einer erfolgreichen Modellwahl. Dominierende Elemente mit positiven Koeffizienten sind Fe und Mg, gefolgt, aber wesentlich unbedeutender, von P und Na sowie mit negativen Koeffizienten, ebenfalls mit wesentlich geringerem Einfluß, Ca und Ti. Al, K und Mn tragen zu vorliegendem Modell kaum etwas bei. Die zweite kanonische Korrelation ist bereits wesentlich geringer und kann als Lösung vernachlässigt werden. Das Ergebnis dieser Analyse auf die regionalen Bedingungen übertragen zeigt Abb. 6. Die Punkte mit offenen Kreisen entsprechen mit einer den Daten zuzuordnenden Streubreite dem errechne-

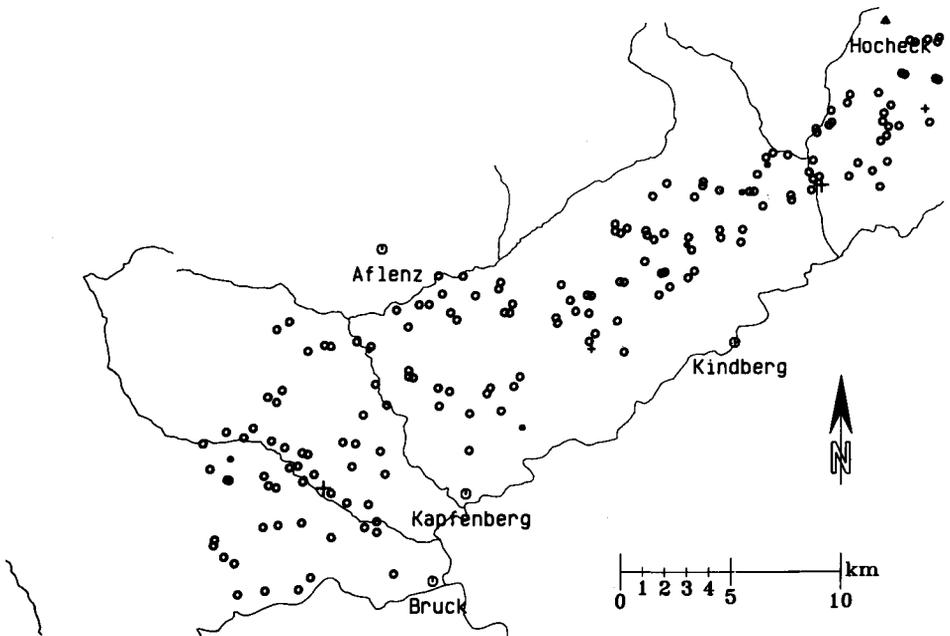


Abb. 6: Punktbezogene kartographische Darstellung der Ergebnisse der kanonischen Korrelationsanalyse $f(\text{Cu}, \text{Zn})$ gegen $f(\text{Al}, \text{Ca}, \text{Fe}, \text{K}, \text{Mg}, \text{Mn}, \text{Na}, \text{P}, \text{Ti})$. Die Klasseneinteilung bzw. Symbolwahl erfolgt nach dem Scatterdiagramm der kanonischen Variaten in Abb. 7.

ten Modell, wie es im Korrelationsdiagramm (Abb. 7) angeführt ist. Die vom Modell abweichenden Punkte für das Elementepaar Cu, Zn sind entsprechend ihrer Entfernung vom Modell nach gefüllten Kreisen, kleinen und großen Kreuzen abgestuft. Von der großen Schwermetallanomalie ist regional nichts mehr erkennbar. Ein einziger positiver Ausreißer weist auf ein sehr lokal bedingtes Geschehen (eventuell kleinräumige Mineralisierung) hin. Es konnte damit also gezeigt werden, daß es möglich ist, die Schwermetallanreicherungen mit den Elementen, die das geochemisch-lithologische Umfeld dominieren, zu erklären.

Eine großräumige Vererzung als Verursacher der univariat beobachteten Anomalien kann praktisch ausgeschlossen werden. Im Sinne der Erzprospektion handelte es sich hier um eine Falschanomalie. Teure Auffolgearbeiten können von vorneherein unterlassen werden.

Die kanonische Korrelation zeigt, daß sich die hohen Zinkwerte als Funktion der Elemente Fe und Mg sowie untergeordnet Ti und Ca erklären lassen. Die Element-

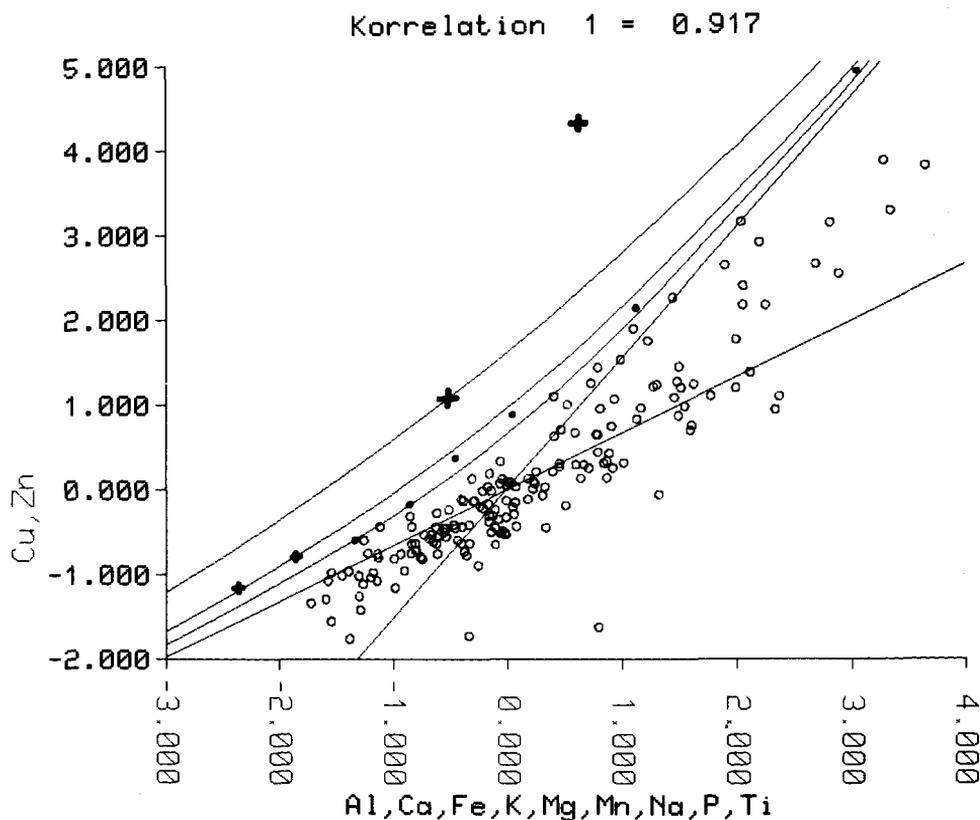


Abb. 7: Scatterdiagramm der kanonischen Variaten. Punktsymbolwahl:
 + möglicherweise durch Mineralisierung beeinflusst
 + geringe Indikationen auf Mineralisierungen
 o lithologie- bzw. umfeldbedingte Meßwerte

kombination Fe-Mg-Ca-Ti in Verbindung mit erhöhten Gehalten von V, Cu und Ni deutet auf basische Gesteinstypen, wie sie im Gebiet in den Paragneisen weitverbreitet sind, als mögliche Verursacher der Anomalie hin.

Der dominierende Beitrag von Mg zur Erklärung der Variabilität von Zn, die Möglichkeit des Eintrages von Mg aus der nahen Industrie und die noch zusätzlich

Tab. 2: Ergebnisse der Regressionsanalyse für den Anomalienbereich des Untersuchungsgebietes (58 Proben) für Mg als abhängige Variable zu f (Al, Ca, Fe, K, Mn, Na, P, Ti).

Data Set = Fallbeispiel Troiseck: Mg = f (Al, Ca, Fe, K, Mn, Na, P, Ti).

Number of cases = 56

Medians =

Al	Ca	Fe	K	Mn	Na	P	Ti	Mg
74365.38	29150.00	48000.01	18768.90	1370.00	24010.00	1290.00	7350.00	23450.00

Dispersions =

Al	Ca	Fe	K	Mn	Na	P	Ti	Mg
8051.02	11416.02	16012.08	3704.35	526.32	7168.37	341.00	4025.26	9636.90

Pearson correlation coefficients between the variables

Al	1.00								
Ca	-0.81	1.00							
Fe	0.09	-0.30	1.00						
K	0.87	-0.65	-0.13	1.00					
Mn	-0.09	-0.04	0.51	-0.25	1.00				
Na	0.03	-0.28	0.55	-0.26	0.30	1.00			
P	0.14	-0.27	0.81	0.05	0.27	0.33	1.00		
Ti	-0.02	-0.14	0.88	-0.24	0.40	0.45	0.72	1.00	
Mg	-0.73	0.88	-0.14	-0.55	-0.04	-0.25	-0.09	-0.10	1.00

Weighted least squares

Variable	Coefficient	Stand error	T-value
Al	0.07177	0.08579	0.83665
Ca	0.50299	0.03390	14.83795
Fe	0.49174	0.07193	6.83662
K	-0.14218	0.16904	-0.84110
Mn	-1.42882	0.41901	-3.41000
Na	-0.15181	0.07656	-1.98289
P	0.57679	1.99347	0.28934
Ti	-1.39840	0.20965	-6.67000
Constant	-2025.57422	5940.82227	-0.34096

Weighted sum of squares = 305440800.00000

Corresponding scale estimate = 2671.30542

Coefficient of determination (R squared) = 0.93988

There are 51 points with non-zero weight.

Average weight = 0.91071

gegebene Störung der Zn-Analysen an der ICP durch eine überlagernde Mg-Linie, legen es nahe, auch das Verhalten dieses Elementes näher zu analysieren. Dies kann durch die Betrachtung der direkten Abhängigkeit von Mg zu den restlichen Hauptelementen mittels der multiplen Regressionsanalyse erreicht werden. Für die Ausreißerpopulation im Südwestteil des Troiseckkristallins, die hier getrennt untersucht wurde, ergibt sich das in Tab. 2 zusammengefaßte Modell. Neben dem Median und der Streuung der Variablen sowie ihrer Korrelationen sind die Koeffizienten der Variablen für das Modell sowie ihre T-Werte (entsprechen in ihren Absolutwerten dem Einfluß des jeweiligen Elementes auf das Modell) und der erklärte Varianzanteil angeführt. Die erklärte Variabilität von Mg liegt bei 94%. Dies entspricht einer ausgezeichneten Modellanpassung und direkten Abhängigkeit von Mg zu den übrigen Elementen, wodurch sich ein zusätzlicher Eintrag von Mg alleine in die natürliche Umwelt ausschließen läßt. Erklärt wird die Mg-Variabilität durch die Elemente Ca, Fe und Ti. Der Verdacht, daß die beobachteten Anomalien lithologiebedingt sind, ist damit weiter erhärtet. Eine endgültige Abklärung im Gelände bleibt jedoch unumgänglich und sollte jeder Detailauswertung folgen.

Als Resultat dieser Untersuchungen ergibt sich also:

- (1) Die beobachtete große Zinkanomalie im Lamingtal ist – prospektionsbezogen – eine Falschanomalie; sie ist mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit nicht vererzungsbedingt.
- (2) Alle in diesem Bereich beobachteten Anomalien lassen sich nach derzeitigem Untersuchungsstand auf lithologische Einflüsse zurückführen.
- (3) Der ursprüngliche Verdacht auf anthropogene Einflüsse durch die in der näheren Umgebung angesiedelte Industrie konnte mit den Daten der Basisaufnahme – vor allem auch durch das Fehlen von Daten aus den Tallandschaften – nicht weiter eingegrenzt werden. Ist durch die Industrieemissionen nicht nur das Schwermetall-, sondern auch das Hauptelementspektrum (z. B. Ca, Fe, Ti) betroffen, so kann ein lithologischer Einfluß auch vorgetäuscht werden. Für eine endgültige Beurteilung wären jeweils genaue Angaben zur chemischen Zusammensetzung der Emissionen notwendig.
- (4) Der beobachtete große geochemische Unterschied zwischen den beiden bearbeiteten Bereichen des Troiseckkristallins bleibt untersuchungsbedürftig, da die geologische Karte keine eindeutigen Hinweise auf das häufigere Auftreten von basischen Gesteinstypen im Südwestteil gibt.
- (5) In diesem Fall wäre es zudem empfehlenswert, die hohen Zinkwerte im Gelände zu verifizieren, um analysenverfahrensbedingte Fehler mit Sicherheit ausschließen zu können.

4. Literaturverzeichnis

- DUTTER, R.: Computer Program BLINWDR für Robust and Bounded Influence Regression. – Res. Rep., 8, Inst. f. Statist., Techn. Univ. Graz 1983.
- HOWARTH, R. J. & SINDING-LARSEN, R.: Multivariate Analysis. [In:] G. J. S. GOVETT [Hrsg.]: Handbook of Exploration Geochemistry, Vol. 2, Kap. 6, Elsevier, Amsterdam–New York 1983.
- FLÜGEL, H. W. & NEUBAUER, F. R.: Geologische Karte der Steiermark, M 1 : 200.000. – Wien (Geol. Bundesanstalt) 1984.

- KARNEL, G.: Robuste Kovarianzmatrizen und kanonische Korrelation. – Unveröffentl. Diplomarbeit, Techn. Univ. Graz 1985.
- KÜRZL, H., DUTTER, R., PEER, H., REIMANN, C., VINZENZ, M., WASSERMANN, W. & WURZER, F.: Geochemische Basisaufnahme des Bundesgebietes: EDV-gestützte Primärauswertung der Teilprojekte KC6F/82, SC2c/F/82, StCld/82, TC4b/82: Datenanalyse für regionale geochemische Untersuchungen – eingesetzte statistische Methoden und Auswertungssystem. – Verträge Bundesmin. Wiss. Forsch., Bibl. der Geol. B.-A., Wiss. Archiv, Wien 1985 a.
- KÜRZL, H., DUTTER, R., PEER, H., REIMANN, C., VINZENZ, M., WASSERMANN, W. & WURZER, F.: Geochemische Basisaufnahme des Bundesgebietes: EDV-gestützte Primärauswertung der Teilprojekte KC6F/82, SC2c/F/82, StCld/82, TC4b/82: Primärauswertung des Gebietes Niedere Tauern Kristallin. – Verträge Bundesmin. Wiss. Forsch., Bibl. der Geol. B.-A., Wiss. Archiv, Wien 1985 b.
- KÜRZL, H., DUTTER, R., PEER, H., REIMANN, C., VINZENZ, M., WASSERMANN, W. & WURZER, F.: Geochemische Basisaufnahme des Bundesgebietes: EDV-gestützte Primärauswertung der Teilprojekte KC6F/82, SC2c/F/82, StCld/82, TC4b/82: Primärauswertung des Gebietes Östliche Grauwackenzone. – Verträge Bundesmin. Wiss. Forsch., Bibl. der Geol. B.-A., Wiss. Archiv, Wien 1985 c.
- KÜRZL, H., DUTTER, R., PEER, H., REIMANN, C., VINZENZ, M., WASSERMANN, W. & WURZER, F.: Geochemische Basisaufnahme des Bundesgebietes: EDV-gestützte Primärauswertung der Teilprojekte KC6F/82, SC2c/F/82, StCld/82, TC4b/82: Primärauswertung des Kärntner-steirischen Nockgebietes und Muralpen. – Verträge Bundesmin. Wiss. Forsch., Bibl. der Geol. B.-A., Wiss. Archiv, Wien 1985 d.
- ROUSSEUW, P.: Least Median of squares regression. – J. amer. statist. Assoc. 79, 871–880, 1984.
- SELINUS, O.: Regression Analysis Applied to Interpretation of Geochemical Data at the Geological Survey of Sweden. [In:] G. J. S. GOVETT [Hrsg.]: Handbook of Exploration Geochemistry, Vol. 2, Elsevier, Amsterdam–New York 1983.
- STINY, J. & CZERMAK, F.: Geologische Karte: Leoben und Bruck a. d. Mur, M 1 : 75.000. – Geol. Bundesanst., Wien 1932.

Bei der Schriftleitung eingelangt am 15. Juli 1986