

ÜLG-070 2019

IRIS-ONLINE

Weiterentwicklung und lagerstättenspezifische
Auswertung des Interaktiven Rohstoff-
Informationssystems

EXPOSEE

Zielsetzung des Projektes ist die Dateneinpflege, inhaltliche Adaption und Weiterentwicklung von IRIS Online. Hauptziel für das Projektjahr 2019 war die Vorbereitung der Aktualisierung der Informationsebene "Geochemie-Bachsedimente" mittels Anwendung spezieller Methoden der mathematischen Statistik für die multivariate Auswertung von Kompositionsdaten (Werkvertrag CSTAT/TU-Wien)

Piotr Lipiarski¹, Heinz Reitner¹, Peter Filzmoser², Theresa Filzmoser², Albert Schedl¹

¹ Geologische Bundesanstalt (GBA), Wien

² Forschungsgruppe Computational Statistics (CSTAT), Technische Universität Wien

iii & 12 Seiten, 13 Anhänge

Wien, Februar 2020

Inhalt

Zusammenfassung	1
Einleitung	1
1. Problemstellung & Motivation.....	3
2. Methodik.....	4
3. Arbeitsschritte.....	4
4. Ergebnisse	9
5. Diskussion und Ausblick.....	10
6. Literatur.....	10

Verzeichnis der Anhänge:

1. IRIS-Online: Statusübersicht 2019 Bachsedimentgeochemie
2. Datenauswahl bundesweite Bach- und Flusssedimentgeochemie - Feldliste und statistische Kennzahlen
3. Statistische Auswertungen der bundesweiten Bach- und Flusssedimentgeochemie - CSTAT/TU-Wien Bericht 2019
4. Quantile der clr-Koeffizienten der Hauptelemente
5. Flächenkarten der Hauptelemente: Vergleich der Absolutwerte mit den clr-Koeffizienten
6. Quantile der clr-Koeffizienten der Spurenelemente
7. Flächenkarten der Spurenelemente: Vergleich der Absolutwerte mit den clr-Koeffizienten
8. Robuste PCA für Kompositionsdaten der Hauptelemente: Säulendiagramme der Ladungsmatrizen
9. Robuste PCA für Kompositionsdaten der Hauptelemente: Quantile der Werte der Hauptkomponenten
10. Robuste PCA für Kompositionsdaten der Hauptelemente: Vergleich der Flächenkarten der Werte der Hauptkomponenten der robusten PCA mit den Flächenkarten der Werte der Hauptkomponenten der robusten PCA für Kompositionsdaten (pcaCoDa)
11. Robuste PCA für Kompositionsdaten der Spurenelemente: Säulendiagramme der Ladungsmatrizen
12. Robuste PCA für Kompositionsdaten der Spurenelemente: Quantile der Werte der Hauptkomponenten
13. Robuste PCA für Kompositionsdaten der Spurenelemente: Vergleich der Flächenkarten der Werte der Hauptkomponenten der robusten PCA mit den Flächenkarten der Werte der Hauptkomponenten der robusten PCA für Kompositionsdaten (pcaCoDa)

Projektleitung & EDV-Management (Datenbanken und GIS) :

Mag. Piotr Lipiarski

Weitere Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter im Projektjahr:

Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr. Peter Filzmoser, Statistik

Theresa Filzmoser, Statistik

Horst Heger, Datenbank, GIS

Dr. Herbert Pirkel, Geologie

Mag. Johannes Reischer, GIS, Services

cand. geol. Heinz Reitner, GIS, Datenbereitstellung und Datenauswertung

Dr. Albert Schedl, Geologie

Univ.-Prof. Dr. Leopold Weber, Geologie

Allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern sei sehr herzlich
für die gute Zusammenarbeit gedankt!

Zusammenfassung

Hauptziel der Arbeiten für das Projektjahr 2019 war die Vorbereitung der Aktualisierung der Informationsebene "Bundesweite Bach- und Flusssedimentgeochemie" für IRIS-Online mittels der Anwendung von speziellen Methoden der mathematischen Statistik für die multivariate Auswertung von Kompositionsdaten (Werkvertrag CSTAT/TU-Wien). Im Zuge der Auswertungen wurden die Geochemie-Daten transformiert, Verteilungskurven der transformierten Daten erstellt und robuste Hauptkomponentenanalysen mit den transformierten Daten durchgeführt. Die Auswertungsergebnisse liegen in Berichtsform sowie in Form von Diagrammen und Kartendarstellungen vor, zusätzlich wurden GIS-Datenebenen für die Darstellung der Auswertungen mittels Geographischen Informationssystemen erstellt. Die Ergebnisse der Kompositionsdatenanalyse stellen eine wesentliche Erweiterung im Hinblick auf die Interpretation der höherdimensionalen Kompositionsdaten der „Bachsediment-Geochemie“ in Aussicht und werden in Ergänzung zu den bislang verfügbaren Alternativen bereitgestellt. Mit der Erstellung der GIS-Datenebenen wurde die geplante Aufnahme dieser Ergebnisse in IRIS-Online bereits vorbereitet.

Einleitung

Rohstoffinformationssysteme sind für die Wissenschaft und die Wirtschaft unverzichtbar. Sie sollen es ermöglichen, einen raschen Überblick über die Verteilung von Rohstoffvorkommen nach tektonischen Einheiten, Lagerstättentyp, Wertstoffinhalt u. dgl. zu bieten. Daneben können diese Rohstoffinformationen auch mit anderen Informationslayern (flächendeckende Geochemie- und Geophysikdaten) synoptisch dargestellt werden.

Die gedruckte und im Jahr 1997 veröffentlichte „Metallogenetische Karte“ (Weber, 1997) war ein erster Markstein für eine moderne Rohstoffkarte des Bundesgebietes. Erstmals wurden die Rohstoffvorkommen, aufgeschlüsselt nach Lagerstättenform, Wertstoffinhalt, Größe und Raumlage auf einer speziell für diese Zwecke von F. Ebner neu konzipierten tektonischen Karte 1:500.000 dargestellt. Die Ergebnisse wurden zusätzlich in einem umfangreichen Handbuch der Lagerstätten der Erze, Industriemineralien und Energierohstoffe Österreichs zusammengefasst.

In den Folgejahren wurde in konsequenter Weiterentwicklung erstmals ein digitales Interaktives Rohstoff-Informationssystem IRIS entwickelt, welches auch detaillierte Abfragen nach Rohstoffvorkommen erlaubte. Im Gegensatz zur „statischen“ gedruckten Karte erlaubte diese CD-ROM-Version erstmals die gleichzeitige Darstellung von Geologie, Geochemie, Aerogeophysik und Rohstoffvorkommen (Weber et al., 2001). Im Jahre 2009 wurde schließlich ein adaptiertes System als Internet-Version freigeschaltet.

Grundlegende neue Erkenntnisse über den tektonischen Aufbau der Ostalpen mit bemerkenswerten Auswirkungen auf die Rohstoffführung insbesondere des präalpidischen Basements waren Grund genug, die gesamte tektonische Datenbasis und auch die gesamte Rohstoffdatenbank gründlich zu überarbeiten. In mehrjähriger Arbeit wurden von den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Fachausschusses für Lagerstättenforschung des Bergmännischen Verbandes Österreichs (FALF) sowie der Fachabteilung Rohstoffgeologie der Geologischen Bundesanstalt (GBA) unter der fachlichen Koordination von Prof. L. Weber die Daten aus dem „klassischen“ IRIS und dem bundesweiten Bergbau-/Haldenkataster der GBA zusammengeführt. Daneben wurde von R. Schuster (GBA) eine neue tektonische Karte im Maßstab 1:1.000.000 kompiliert, die die neuesten Erkenntnisse über den tektonischen Aufbau Österreichs beinhaltet.

Für IRIS Online wurde die Datenbankstruktur neu konzipiert. Es wurde auf Basis bestehender Strukturen versucht, das Informationssystem zu erweitern und nachhaltiger zu gestalten. Es wurden u.a. der Minres-Thesaurus der GBA (Mineralien und Rohstofflisten), INSPIRE Meldung und die Rohstoffebene der Geologischen Karte GK25 in das Modell integriert.

Die Erweiterung der Datenbasis um die Informationen aus dem „Bergbau-/Haldenkataster“ der GBA brachte als Ergebnis über 5.700 Rohstoffvorkommen mit umfangreichen Daten über die abgebauten Rohstoffe, Mineralogie,

Tektonik, Alter und die Bergbaugeschichte. Die Vorkommen wurden unter Beziehung unterschiedlicher Lagerstättenexperten in 208 metallogenetische Bezirke gegliedert. Als metallogenetischer Bezirk werden alle Rohstoffvorkommen zusammengefasst, die in einer klar definierbaren tektonischen Einheit und einer bestimmten stratigraphischen/faziellen Einheit zu liegen kommen, sich insbesondere aber durch gleiche Lagerstättenform und gleichen Wertstoffinhalt auszeichnen. Von solchen Vorkommen kann angenommen werden, dass sie kogenetisch sind (Weber et al., 2019). Diese Erkenntnisse sind auch für die unternehmensbezogene Lagerstättensuche von Interesse, zumal angenommen werden darf, dass die größte Höflichkeit wohl eher im Zentrum der Punktwolke eines kartenmäßig dargestellten metallogenetischen Bezirkes zu erwarten ist, und die Wahrscheinlichkeit einer Existenz größerer Rohstoffvorkommen nach außen hin abnimmt.

Außer den Ebenen der Lagerstätten und Vorkommen und der Bergbaureviergrenzen wurden auch weitere Informationsebenen in die Applikation integriert, die bereits als Services zu Verfügung standen (Geologie) bzw. für IRIS Online neu erstellt wurden (Bachsedimentgeochemie, Geophysik).

Die IRIS Online Applikation wurde mit Hilfe von ArcGIS Online erstellt. Diese von der Firma ESRI entwickelte Datenpublikationsplattform ermöglicht eine rasche Erstellung von Online GIS Applikationen auf Basis von bereits laufenden GIS Services. Der Einstieg in die Applikation erfolgt über die GBA Homepage (Abbildung 1.1). Dort ist auch die Hilfe in Form einer PDF Datei mit der Beschreibung der Grundfunktionalität der Applikation zu finden.

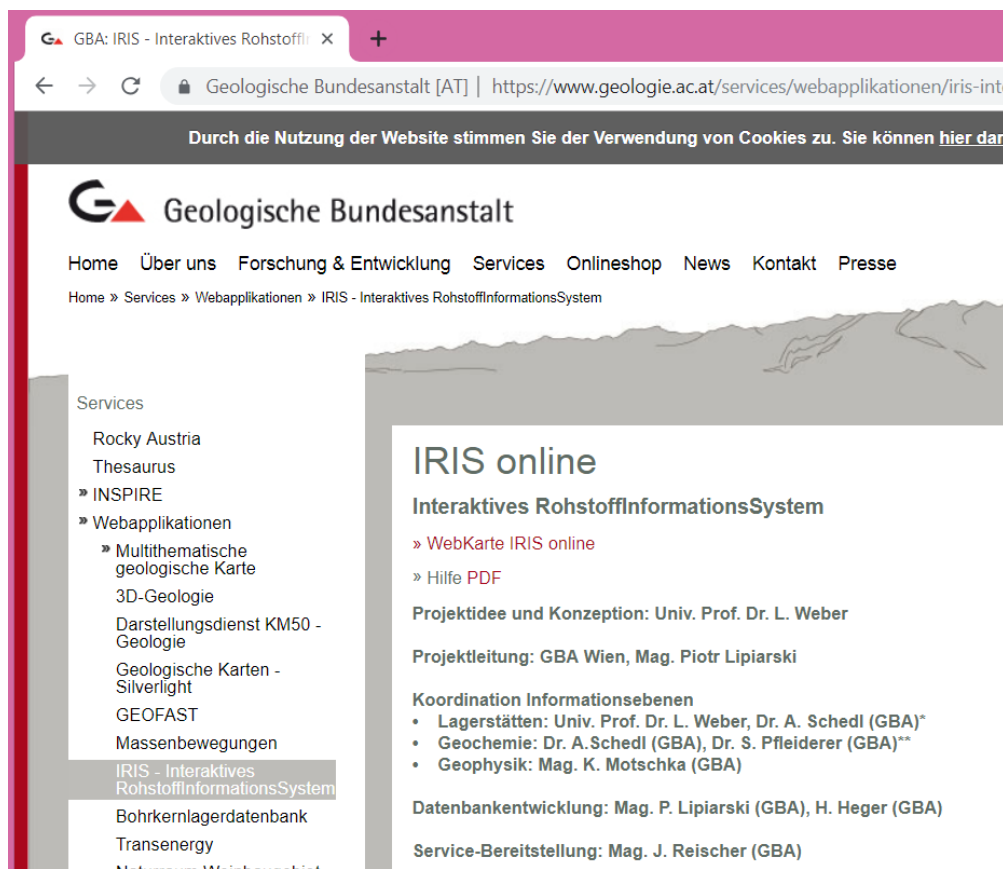


Abb. 1.1: Start der IRIS Online Applikation über die GBA Homepage.

(<https://www.geologie.ac.at/services/webapplikationen/iris-interaktives-rohstoffinformationssystem/>)

1. Problemstellung & Motivation

Seit dem Jahr 1978 wurde das Bundesgebiet systematisch geochemisch beprobt. Dabei wurden über 34.500 Proben von Bach- und Flusssedimenten entnommen und auf 35 Elemente analysiert. Die Ergebnisse sind in einer zusammenfassenden Abschlussdokumentation veröffentlicht worden (Pirkel et al., 2015).

IRIS-Online erlaubt, diese Ergebnisse der Bachsedimentgeochemie im Übersichtsmaßstab entweder flächenverrechnet (Abbildung 1.2) bzw. im Detailmaßstab als klassifizierte Punktsymboldarstellung zu visualisieren. Darüber hinaus besteht die Möglichkeit einer Darstellung der 99 % Percentile.

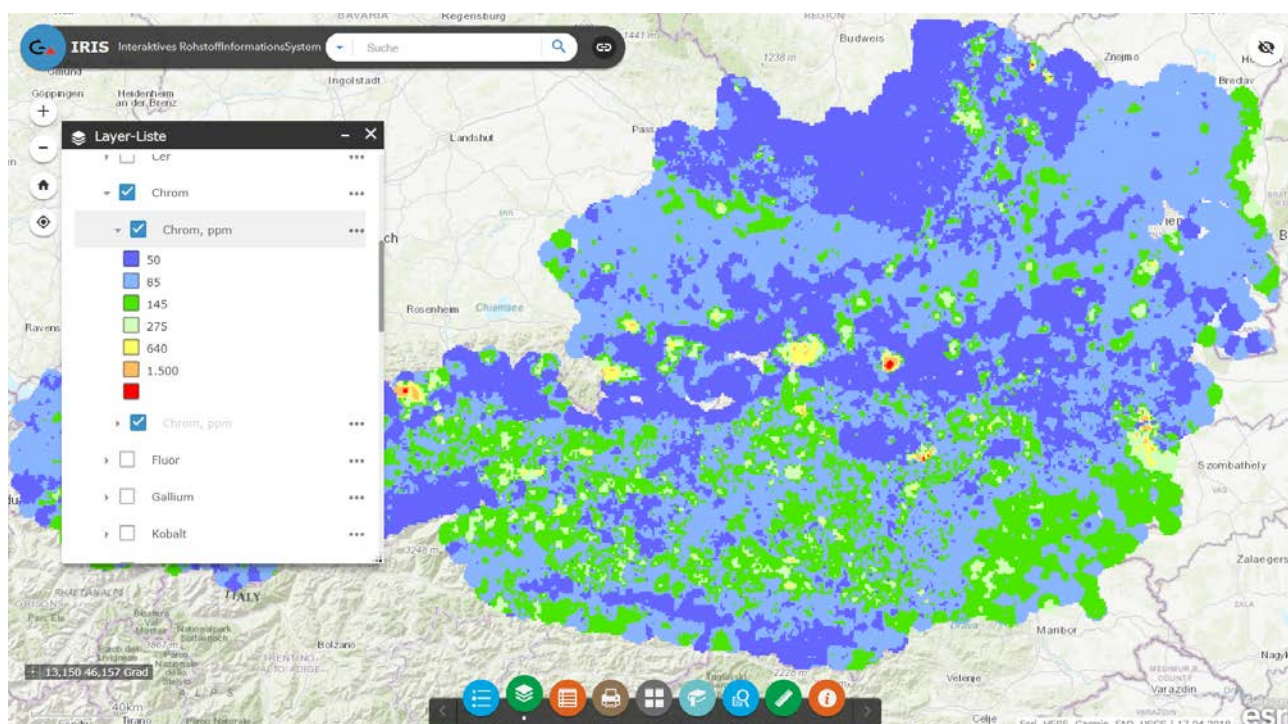


Abb. 1.2: Flächenverrechnete Darstellung des Elementes Chrom in der Applikation IRIS Online.

Zusätzlich werden zum Zeitpunkt der Berichtlegung die Ergebnisse einer multivariaten statistischen Auswertung der Haupt- und Spurenelemente in Form einer Hauptkomponentenanalyse in IRIS-Online bereitgestellt (Tabelle 1.1).

Tab. 1.1: Derzeitige Auswertungsebenen der Bachsedimentgeochemie Daten in IRIS Online Applikation.

GIS-Ebene	Maßstab
Bachsedimentgeochemie	
Bachsedimentgeochemie - Flächendarstellungen	bis 1:200.000
Bachsedimentgeochemie Punktdarstellung (36 Elemente)	1:200.000 - 1:50.000
Bachsedimentgeochemie Hauptkomponentenanalyse - Punktdarstellung	1:200.000 - 1:50.000
Bachsedimentgeochemie 99 % Percentile - Punktdarstellung	1:200.000 - 1:50.000

Die Daten geochemischer Analysen (Angaben in Gewichtsprozent und mg/kg bzw. ppm) werden in der Statistik als Kompositionsdaten betrachtet und können durch eine Kompositionsdatenanalyse mit speziellen, für diese Art von Daten entwickelten Methoden ausgewertet werden (Aitchison, 1986). Die Verhältnisse der Elementgehalte werden

dabei als relevante Information betrachtet, mit der Betrachtung der Verhältnisse wird ein wesentlicher Aspekt in der Ausprägung der Daten abgebildet (Pawlovsky-Glahn et al., 2015; Filzmoser et al., 2018). Die Kompositionsdaten können unter Anwendung geeigneter Transformationen auch mit den Methoden der multivariaten Statistik ausgewertet werden. Damit stellt diese Form der Datenanalyse für die Interpretation von höherdimensionalen Kompositionsdaten eine wesentliche Ergänzung zu den bislang verfügbaren Alternativen dar. Für die zugrundeliegenden mathematischen Methoden bzw. für deren Beweisführung und Diskussion sei an dieser Stelle auf die oben genannte Literatur bzw. auf Anhang 3 in diesem Bericht verwiesen. Ergänzend zu den oben angeführten bereits in IRIS-Online bereitgestellten Darstellungen der Bachsedimentanalysen mit den klassischen Methoden der Statistik wurde mit dem gegenständlichen Projekt eine ergänzende Darstellung mit Methoden für Kompositionsdaten erarbeitet. Mit der Durchführung dieser Auswertungen wurde als Projektauftragnehmer die Forschungsgruppe Computational Statistics der Technischen Universität Wien (CSTAT/TU-Wien) beauftragt.

2. Methodik

Für die Darstellung des Verhaltens der Elementgehalte in Bach- und Flusssedimenten wird mit der Verwendung von mathematischen Methoden für Kompositionsdaten der Fokus auf die relative Information gelegt. Es werden damit nicht die Konzentrationsdaten der einzelnen Elemente direkt ausgewertet bzw. dargestellt, sondern die Information, die in den Verhältnissen der Elemente zueinander enthalten ist. Im Sinne der Kompositionsdatenanalyse (Compositional Data Analysis – CoDa) wurde im gegenständlichen Projekt die geochemische Information in Form der centered-log-ratio (clr) Koeffizienten (Aitchison, 1986) für die Elemente ausgewertet bzw. dargestellt. Bei der clr-Transformation eines Elements werden alle anderen Elemente der Komposition (Zusammensetzung) einer Probe in Form des geometrischen Mittels mit einbezogen. Für die multivariaten statistischen Auswertungen wurden die geochemischen Analysendaten zuerst in isometric-log-ratio (ilr) Koordinaten (Egozcue et al., 2003) transformiert und in Folge diese transformierten Daten verwendet und ausgewertet (Filzmoser et al., 2018). Eine robuste Hauptkomponentenanalyse für Kompositionsdaten (Filzmoser et al., 2009; Templ et al., 2011) wurde für die ilr-transformierten Daten getrennt nach Haupt- und Spurenelementen durchgeführt. Zusätzlich wurden zum Vergleich auch robuste Hauptkomponentenanalysen für die absoluten Analysendaten mit den Methoden der klassischen Statistik durchgeführt (R Core Team, 2019), die absoluten Daten wurden dabei für die Berechnung in logarithmierter Form verwendet. Für die Darstellung und den Vergleich der Ergebnisse beider Methoden mit Hilfe von Geographischen Informationssystemen (GIS) wurden auf Basis einer Auswertung der Verteilungskurven der clr-Koeffizienten und der Werte der Hauptkomponenten (scores) jeweils Farbgebungskategorien, auf Basis der Quantil-Werte, festgelegt. Die gewählte Farbgebung wurde für die Kartendarstellung der Ergebnisse mittels GIS verwendet.

3. Arbeitsschritte

In gemeinsamer Abstimmung von GBA und CSTAT/TU-Wien wurde zu Projektbeginn der aktuelle Status der Bachsedimentgeochemie in IRIS-Online kommuniziert (Anhang 1) und die Projektziele, die Methodenauswahl und der Umfang der Auswertungen in gemeinsamen Besprechungen festgelegt. Im Anschluss wurden von der GBA folgende Arbeiten durchgeführt, die zur Vorbereitung der Auswertungen mit Methoden für Kompositionsdaten durch die Forschungsgruppe CSTAT/TU-Wien erforderlich waren:

Auswahl der Teildatensätze

Aus dem zentralen Datenbestand der bundesweiten Bach- und Flusssedimentgeochemie, der am Geodaten-Server der Geologischen Bundesanstalt aufliegt, wurden mittels SQL-Abfragen der IDs der Teildatensätze die Daten ausgewählt (Tabelle 3.1). Ausgewählt wurden somit die Daten des Geochemischen Atlas der Republik Österreich (Thalmann et al., 1989a und 1989b) und der sogenannten Bundesländerprojekte (Augustin-Gyurits & Holnsteiner, 1997; Augustin-Gyurits et al., 1998; Wimmer et al., 2002a und 2002b; Klein et al., 2005 und 2007; Schedl et al., 2008 und 2010; Pfliederer et al., 2010). Diese Auswahl beinhaltet Analysen der Siebfraktion < 180 µm der Proben der Bach- und Flusssedimentgeochemie.

Tab. 3.1: Ausgewählte Teildatenbestände der Siebfraktion < 180 µm für die Verwendung im Rahmen des Projektes.

ID	PROBEMEDIUM	NAME
8	Bachsediment/Korngrößenfraktion	Geochemischer Atlas der Republik Österreich
12	Bachsediment/Korngrößenfraktion	Umweltgeochemische Bach- und Flusssedimentbeprobung Niederösterreichs - Korngrößenfraktion < 180 µm
61	Bachsediment/Korngrößenfraktion	Umweltgeochemische Bach- und Flusssedimentbeprobung Oberösterreich
62	Bachsediment/Korngrößenfraktion	Umweltgeochemische Bach- und Flusssedimentbeprobung Salzburg -
63	Bachsediment/Korngrößenfraktion	Umweltgeochemische Bach- und Flusssedimentbeprobung Tirol
161	Bachsediment/Korngrößenfraktion	Umweltgeochemische Bach- und Flusssedimentbeprobung Vorarlberg - Korngrößenfraktion < 180 µm
163	Bachsediment/Korngrößenfraktion	Umweltgeochemische Bach- und Flusssedimentbeprobung Kärnten - Korngrößenfraktion < 180 µm
165	Bachsediment/Korngrößenfraktion	Umweltgeochemische Bach- und Flusssedimentbeprobung Burgenland - Korngrößenfraktion < 180 µm
168	Bachsediment/Korngrößenfraktion	Umweltgeochemische Bach- und Flusssedimentbeprobung Steiermark - Korngrößenfraktion < 180 µm
197	Bachsediment/Korngrößenfraktion	Umweltgeochemische Untersuchung von Bachsedimenten zur Charakterisierung geogen bedingter Hintergrundwerte im Stadtgebiet von Wien < 180 µm

Darstellung einer Datenübersicht zu Bestimmungsgrenzen und fehlenden Werten

Anschließend wurde eine Zusammenstellung der unterschiedlichen Bestimmungsgrenzen für die Haupt- und Spurenelemente der einzelnen Teildatensätze an CSTAT/TU-Wien übermittelt (Tabelle 3.2).

Tab. 3.2: Vergleich der Bestimmungsgrenzen oder der kleinsten gemessenen Konzentrationen (Spurenelemente in ppm), nb = Element wurde nicht gemessen (aus: Pirkl et al., 2015).

	„Geochemischer Atlas“	Nieder-österreich	Ober-österreich	Salzburg	Tirol	Vorarlberg	Burgenland	Kärnten	Steiermark	Wien
Si	nb	0,094 %	0,55 %	0,33 %	0,1 %	1,07 %	9,1 %	0,44 %	0,22 %	11,5 %
Ti	< 0,05 %	0,015 %	0,015 %	0,002 %	< 0,01 %	0,01 %	0,13 %	0,01 %	0,009 %	0,18 %
Al	< 0,05 %	0,053 %	0,11 %	0,08 %	0,1 %	0,32 %	1,3 %	0,1 %	0,21 %	3,33 %
Fe	< 0,01 %	0,09 %	0,09 %	0,12 %	0,07 %	0,16 %	1,2 %	0,08 %	0,04 %	1,47 %
Mg	< 0,05 %	0,18 %	0,2 %	0,39 %	0,39 %	0,19 %	0,34 %	0,68 %	0,37 %	0,78 %
Mn	< 0,015 %	0,002 %	0,005 %	0,077 %	< 0,01 %	0,006 %	0,02 %	0,007 %	0,007 %	0,07 %
Ca	< 0,01 %	0,54 %	0,48 %	0,16 %	0,3 %	0,55 %	0,3 %	0,28 %	0,15 %	4,29 %
Na	< 0,1 %	0,022 %	0,004 %	0,02 %	< 0,02 %	0,01 %	0,2 %	< 0,01 %	0,02 %	0,1 %
K	< 0,05 %	0,02 %	0,013 %	0,018 %	0,02 %	0,1 %	0,44 %	0,02 %	0,03 %	0,68 %
P	< 0,05 %	0,01 %	0,006 %	0,004 %	< 0,01 %	0,005 %	0,03 %	< 0,004 %	0,004 %	0,039 %
Ag	< 0,02	< 0,05	0,026	0,01	< 0,05	< 0,05	< 0,05	< 0,05	< 0,05	< 0,05
As	< 2	0,1	1	1	< 1	1	< 1	1	< 1	3
Ba	< 10	5	5	10	< 10	15	69	15	< 10	207
Be	< 1	< 0,05	0,08	0,1	< 0,3	< 0,3	0,5	< 0,3	< 0,3	0,6
Cd	nb	< 0,05	0,1	0,05	< 0,1	< 0,1	< 0,1	< 0,1	< 0,1	0,1
Ce	< 10	13	2,12	0,22	1	2,2	18	1,5	< 1	22
Cl	nb	nb	16	50	< 50	50	< 50	< 50	< 50	38
Co	< 3	0,5	0,7	0,5	0,7	0,8	3,1	0,7	0,6	6
Cr	< 10	7	2	4	< 4	4	26	5	< 4	38
Cu	< 3	0,5	1	0,5	1	1,5	6	1	< 1	21
F	nb	< 150	50	150	< 150	102	251	< 150	< 150	263
Ga	< 3	0,5	2	4	< 4	4	< 4	< 4	< 4	8
Hg	nb	< 0,01	0,008	0,01	< 0,01	0,01	0,02	< 0,01	< 0,01	0,04
La	< 10	< 1	1	0,49	< 1	1,2	9	< 1	< 1	11
Li	nb	nb	1,27	0,99	< 4	4,3	9	< 4	< 4	19
Mo	< 0,1	< 0,5	0,1	0,5	< 0,5	< 0,5	< 0,5	< 0,5	< 0,5	< 0,5
Nb	< 5	0,5	2	4	< 4	4	< 4	< 4	< 4	6
Ni	< 5	6	2	4	< 4	4	10	< 4	< 4	26
Pb	< 3	7	5	4	< 4	15	12	17	< 6	31
Rb	< 10	8	4	5	6	11	27	5	< 5	45
S	nb	< 50	138	100	< 100	100	< 100	< 100	< 100	473
Sb	< 2	0,025	0,35	0,5	< 0,5	< 0,5	< 0,5	< 0,5	< 0,5	0,6
Sc	< 1	0,25	0,12	0,01	< 0,5	< 0,5	3,2	< 0,5	< 0,5	4
Se	nb	0,025	0,08	0,05	< 0,05	< 0,05	< 0,05	< 0,05	< 0,05	0,19
Sn	< 1	0,4	0,4	0,5	< 0,5	< 0,5	0,9	< 0,5	< 0,5	1,9
Sr	< 10	58	39	40	39	60	56	23	< 19	212
Th	< 10	3	2	4	< 4	< 4	< 4	< 4	< 4	< 4
U	< 5	0,5	0,38	0,01	< 0,4	0,8	< 0,4	0,7	< 0,4	1
V	< 10	0,5	9	5	7	9	29	5	< 4	38
W	< 1	0,5	0,1	0,5	< 0,5	< 0,5	< 0,5	< 0,5	< 0,5	0,6
Y	< 10	6	5	4	< 4	4	10	< 4	< 4	8
Zn	< 5	6	13	5	< 5	11	32	11	< 6	71
Zr	< 10	18	10	22	11	11	57	20	15	74

Der ausgewählte Datenbestand wurde in Folge getrennt nach Haupt- und Spurenelementen hinsichtlich des Auftretens von Unterschreitungen der Bestimmungsgrenzen und von fehlenden Werten untersucht und eine Übersicht zur Anzahl dieser Datensätze erstellt (Tabellen 3.3 und 3.4).

Tab. 3.3: Anzahl und Anteil an Hauptelement-Datensätzen mit Messwerten unter der Bestimmungsgrenze oder mit fehlenden Messwerten (nicht bestimmt – nb).

Anzahl Datensätze für Elementgehalt	"<" Bestimmungsgrenze	">=" Bestimmungsgrenze	"nb"	N gesamt	"<" Anteil in %	">=" Anteil in %	"nb" Anteil in %
Al_proz1	29	34051	344	34424	0,08	98,92	1,00
Ca_proz1	2	34360	62	34424	0,01	99,81	0,18
Fe_proz1	8	34354	62	34424	0,02	99,80	0,18
K_proz1	43	34007	374	34424	0,12	98,79	1,09
Mg_proz1	36	34326	62	34424	0,10	99,72	0,18
Mn_proz1	259	34102	63	34424	0,75	99,06	0,18
Na_proz1	218	34144	62	34424	0,63	99,19	0,18
P_proz1	1244	33117	63	34424	3,61	96,20	0,18
Si_proz1	0	4734	29690	34424	0,00	13,75	86,25
Ti_proz1	124	34275	25	34424	0,36	99,57	0,07

Ersatz der Datenwerte unter der Bestimmungsgrenze

In Absprache mit CSTAT-TU wurden die Datenwerte unter den Bestimmungsgrenzen mittels SQL-Abfragen durch die Hälfte des Betrages des Bestimmungsgrenzen-Wertes, jeweils spezifisch getrennt für Teildatensätze und Elemente, ersetzt.

Export der Daten

Der ausgewählte und bearbeitete Datenbestand wurde aus dem Datenbankformat in das Datenformat der Statistiksoftware und -programmierungsumgebung „R“ (R Core Team, 2019) exportiert.

Liste der Datenfelder und Berechnung der statistischen Kennwerte für Haupt- und Spurenelemente

Mittels „R“ wurde eine Liste der Datenfelder erstellt und statistische Kennzahlen der Haupt- und Spurenelemente für den Datenbestand berechnet (siehe Anhang 2).

Transfer der Daten und der Metadatendokumentation

Abschließend wurden die Daten und Metadatenbeschreibungen an CSTAT/TU-Wien in digitaler Form für die weiteren Auswertungen übermittelt.

In Folge wurden die Auswertungen der Daten mit mathematischen Methoden für Kompositionsdaten von der Forschungsgruppe CSTAT der Technischen Universität Wien durchgeführt. Mit Hilfe der oben genannten speziellen statistischen Methoden für Kompositionsdaten wurde der Datenbestand von CSTAT/TU-Wien multivariat ausgewertet. Der vollständige Bericht zu den Methoden, Arbeitsschritten und Ergebnissen dieser statistischen Auswertungen wurde in einer gemeinsamen Besprechung präsentiert und liegt mit den Anhängen 3 bis 13 diesem Bericht bei.

Re-Import der Ergebnisse in ein Geographisches Informationssystem

Die Ergebnisse der Auswertungen für Kompositionsdaten wurden von CSTAT-/TU-Wien im Datenformat „R“ an die GBA übermittelt. Anschließend wurden an der GBA die Ergebnisse vom Datenformat „R“ in ein Geographisches Informationssystem importiert und stehen damit als GIS-Datenebenen („Layer“) für die Bereitstellung in IRIS-Online zur Verfügung.

Tab. 3.4: Anzahl und Anteil an Spurenelement-Datensätzen mit Messwerten unter der Bestimmungsgrenze, Zahlenwert „0“ oder mit fehlenden Messwerten (nicht bestimmt – nb).

Anzahl Datensätze für Elementgehalt	"<" Bestimmungsgrenze	">=" Bestimmungsgrenze	"0" als Zahlenwert	"nb"	N gesamt	"<" Anteil in %	">=" Anteil in %	"0" in %	"nb" Anteil in %
Ag_ppm1	1189	33087	0	148	34424	3,5	96,1	0,0	0,4
As_ppm1	15067	19324	0	33	34424	43,8	56,1	0,0	0,1
Ba_ppm1	136	34210	1	77	34424	0,4	99,4	0,0	0,2
Be_ppm1	640	33633	0	151	34424	1,9	97,7	0,0	0,4
Ce_ppm1	22	34341	1	60	34424	0,1	99,8	0,0	0,2
Cl_ppm1	708	2863	0	30853	34424	2,1	8,3	0,0	89,6
Co_ppm1	147	34215	0	62	34424	0,4	99,4	0,0	0,2
Cr_ppm1	274	34042	0	108	34424	0,8	98,9	0,0	0,3
Cu_ppm1	278	34121	0	25	34424	0,8	99,1	0,0	0,1
F_ppm1	864	3868	0	29692	34424	2,5	11,2	0,0	86,3
Ga_ppm1	563	33710	1	150	34424	1,6	97,9	0,0	0,4
Hg_ppm1	184	4549	0	29691	34424	0,5	13,2	0,0	86,3
La_ppm1	196	34168	0	60	34424	0,6	99,3	0,0	0,2
Li_ppm1	107	3464	0	30853	34424	0,3	10,1	0,0	89,6
Mo_ppm1	1232	33045	0	147	34424	3,6	96,0	0,0	0,4
Nb_ppm1	1130	33183	1	110	34424	3,3	96,4	0,0	0,3
Ni_ppm1	353	34009	0	62	34424	1,0	98,8	0,0	0,2
Pb_ppm1	19	34256	0	149	34424	0,1	99,5	0,0	0,4
Rb_ppm1	106	33991	0	327	34424	0,3	98,7	0,0	0,9
S_ppm1	352	4382	0	29690	34424	1,0	12,7	0,0	86,2
Sb_ppm1	27993	6430	1	0	34424	81,3	18,7	0,0	0,0
Sc_ppm1	54	34308	0	62	34424	0,2	99,7	0,0	0,2
Se_ppm1	307	4427	0	29690	34424	0,9	12,9	0,0	86,2
Sn_ppm1	970	33307	0	147	34424	2,8	96,8	0,0	0,4
Sr_ppm1	26	34336	0	62	34424	0,1	99,7	0,0	0,2
Th_ppm1	12608	21487	2	327	34424	36,6	62,4	0,0	0,9
U_ppm1	21859	12241	0	324	34424	63,5	35,6	0,0	0,9
V_ppm1	106	34258	0	60	34424	0,3	99,5	0,0	0,2
W_ppm1	18493	15607	0	324	34424	53,7	45,3	0,0	0,9
Y_ppm1	1024	33073	0	327	34424	3,0	96,1	0,0	0,9
Zn_ppm1	115	34283	0	26	34424	0,3	99,6	0,0	0,1
Zr_ppm1	86	34011	0	327	34424	0,2	98,8	0,0	0,9

4. Ergebnisse

Die Ergebnisse der Auswertungen der Forschungsgruppe CSTAT-TU wurden in Form eines digital übermittelten Berichtes samt mehreren Beilagen zusammengestellt (Anhänge 3 bis 13).

Um die Verteilung der clr-transformierten Daten in Flächenkarten darstellen zu können, wurden anhand von Verteilungskurven (cumulative probability plots – CP plots), Brüche bzw. markante Veränderungen in den Verteilungen (Quantile) ermittelt, die die Charakteristik der Datenverteilung der clr-Koeffizienten reflektieren (Anhänge 4 und 6).

Folgende Quantile wurden bei Betrachtung der Verteilungen der clr-Koeffizienten der Haupt- und Spurenelemente als Kategoriegrenzen ausgewählt:

0 0,001 0,01 0,05 0,25 0,5 0,75 0,9 0,95 0,99 0,999 1

Für das Hauptelement Eisen (Fe) wurden auf Grund der unterschiedlichen Verteilungskurve (Anhang 4) davon abweichend folgende Quantile ausgewählt:

0 0,001 0,005 0,01 0,05 0,25 0,5 0,75 0,9 0,995 0,999 1

Diese Quantil-Bereiche werden in den Flächenkarten durch abgestufte unterschiedliche Farben dargestellt (Anhänge 5 und 7). Im Vergleich zu den in IRIS-Online bisher bereits vorliegenden Karten der absoluten Information resultieren diese Kartendarstellungen der relativen Information bei vielen Elementen in sehr unterschiedlichen Flächenkarten.

Für die Daten der Hauptelemente wurden für folgende Elementgehalte bzw. clr-Koeffizienten Flächenkarten erstellt (Anhang 5):

Aluminium (Al), Calcium (Ca), Eisen (Fe), Kalium (K), Magnesium (Mg), Mangan (Mn), Natrium (Na), Phosphor (P) und Titan (Ti).

Für die Daten der Elementgehalte von Silizium (Si) konnte auf Grund der großen Anzahl fehlender Werte (vgl. Tabelle 3.3) keine Flächenkarte erstellt werden.

Für die Daten der Spurenelemente wurden in einem ersten Schritt für folgende Elementgehalte bzw. clr-Koeffizienten Flächenkarten erstellt (Anhang 7):

Silber (Ag), Arsen (As), Barium (Ba), Beryllium (Be), Cer (Ce), Kobalt (Co), Chrom (Cr), Kupfer (Cu), Gallium (Ga), Lanthan (La), Molybdän (Mo), Niob (Nb), Nickel (Ni), Blei (Pb), Rubidium (Rb), Antimon (Sb), Scandium (Sc), Zinn (Sn), Strontium (Sr), Thorium (Th), Uran (U), Vanadium (V), Wolfram (W), Yttrium (Y), Zink (Zn) und Zirkonium (Zr).

Für die Elementgehalte der Spurenelemente Chlor (Cl), Fluor (F), Quecksilber (Hg), Lithium (Li), Schwefel (S) und Selen (Se) konnten auf Grund der großen Anzahl fehlender Werte (vgl. Tabelle 3.4) keine Flächenkarten erstellt werden.

Nachfolgend wurden in einem zweiten Bearbeitungsschritt auch die Elemente Arsen (As), Antimon (Sb), Uran (U) und Wolfram (W) für die Erstellung der Flächenkarten entfernt, da bei diesen vier Elementgehalten die Anzahl an Werten unter der Bestimmungsgrenze zu groß war (vgl. Tabelle 3.4).

Auch bei der Hauptkomponentenanalyse (principal component analysis - PCA) werden große Unterschiede im Ergebnis zwischen der PCA mit log-transformierten Daten und der PCA mit Daten nach einer ilr-Transformation ersichtlich. Nachdem in dem Datensatz die Wahrscheinlichkeit des Auftretens von Ausreißern besteht, wurde in beiden Fällen eine robuste Form der Hauptkomponentenanalyse verwendet (Filzmoser et al., 2009). Die als Ergebnis der Hauptkomponentenanalyse resultierenden Ladungen (loadings) und Werte (scores) der Hauptkomponenten wurden mittels Biplot-Diagrammen (Gabriel, 1971) dargestellt (Anhang 3), die für Kompositionsdaten adaptiert wurden (Aitchison & Greenacre, 2002). Zusätzlich wurden für die Interpretation die Hauptkomponenten-Ladungen mittels Säulendiagrammen dargestellt (Anhänge 8 und 11) und die Hauptkomponenten-Werte mittels Flächenkarten (Anhänge 10 und 13). Für diese Flächenkarten wurden wieder Farbabstufungen mit den Quantil-Werten auf Basis der Verteilungskurven der Hauptkomponenten-Werte gewählt. Für die Werte der Hauptkomponenten der Haupt- und

Spurenelemente konnten dabei auf Grund ähnlicher Verteilungskurven (Anhänge 9 und 12) folgende einheitliche Quantile herangezogen werden:

0 0,001 0,01 0,05 0,25 0,5 0,75 0,9 0,95 0,99 0,999 1

Wie bei der Erstellung der oben angeführten Flächenkarten der Elementgehalte bzw. clr-Koeffizienten wurden auch für die Hauptkomponentenanalysen nur jene Haupt- und Spurenelemente herangezogen, deren Datenqualität hinsichtlich der Anzahl an fehlenden Werten bzw. der Anzahl an Werten unterhalb der Bestimmungsgrenzen den mathematischen Anforderungen für die multivariate Auswertung entsprechen.

Liste der Hauptelemente die für die Hauptkomponentenanalyse verwendet wurden:

Aluminium (Al), Calcium (Ca), Eisen (Fe), Kalium (K), Magnesium (Mg), Mangan (Mn), Natrium (Na), Phosphor (P) und Titan (Ti).

Die Analysendaten für Silizium (Si) wurden auf Grund der großen Anzahl fehlender Werte (nb) nicht verwendet (vgl. Tabelle 3.3).

Liste der Spurenelemente die für die Hauptkomponentenanalyse verwendet wurden:

Silber (Ag), Barium (Ba), Beryllium (Be), Cer (Ce), Kobalt (Co), Chrom (Cr), Kupfer (Cu), Gallium (Ga), Lanthan (La), Molybdän (Mo), Niob (Nb), Nickel (Ni), Blei (Pb), Rubidium (Rb), Scandium (Sc), Zinn (Sn), Strontium (Sr), Thorium (Th), Vanadium (V), Yttrium (Y), Zink (Zn) und Zirkonium (Zr).

Folgende Spurenelemente konnten nicht für die Hauptkomponentenanalyse verwendet werden:

Arsen (As), Chlor (Cl), Fluor (F), Quecksilber (Hg), Lithium (Li), Schwefel (S), Antimon (Sb), Selen (Se), Uran (U) und Wolfram (W). Auch hier wurde wieder eine zu große Anzahl an fehlenden Werten (nb) bzw. an Werten unter den Bestimmungsgrenzen festgestellt (vgl. Tabelle 3.4).

5. Diskussion und Ausblick

Als Ergebnis der Auswertung der Bach- und Flusssedimentanalysen mit speziellen Methoden für Kompositionsdaten wurden neue Kartendarstellungen generiert, die von den bisher in IRIS-Online vorliegenden Kartendarstellungen teilweise stark abweichen. Die Ergebnisse des Projektjahres sollen in einer weiteren Projektphase mit Geologen und Lagerstättenexperten gemeinsam diskutiert werden. Für das Projektjahr 2020 wird ein Treffen zwischen dem Projektteam der GBA und Experten der Montanuniversität Leoben (MUL) und des Bergmännischen Verbandes Österreichs (BVÖ) geplant. Die neuen Auswertungen und deren Auswirkungen auf das Verständnis der in den Bach- und Flusssedimenten enthaltenen Elementverteilungen im Hinblick auf die rohstoffgeologische Interpretation sollen dabei einen Schwerpunkt bilden. In Folge werden die Flächendarstellungen der clr-Koeffizienten und der Hauptkomponentenanalysen für Kompositionsdaten der Haupt- und Spurenelemente in die IRIS-Online Applikation aufgenommen werden.

6. Literatur

- Aitchison, J. (1986): *The Statistical Analysis of Compositional Data*. – Monographs on Statistics and Applied Probability. 416 S., (Neuaufgabe 2003 mit zusätzlichem Inhalt, The Blackburn Press), Chapman & Hall Ltd., London (UK).
- Aitchison, J. & Greenacre, M. (2002): *Biplots of compositional data*. - *Journal of the Royal Statistical Society / C (Applied Statistics)* **51/4**, S. 375–392, John Wiley & Sons, Chichester (UK).
- Augustin-Gyurits, K. & Holnsteiner, R. (1997): *Umweltgeochemische Untersuchung der Bach- und Flußsedimente Niederösterreichs*. – Unveröff. Ber. BVFA Arsenal, Bund/Bundesländer-Rohstoffprojekt N-U-015-F/94, 60 S., 5 Beil.-Bde., Wien (AT).

- Augustin-Gyurits, K., Holnsteiner, R., Pirkl, H. & Neinavaie, H. (1998): Umweltgeochemie der Flußsedimente Oberösterreichs. – Unveröff. Ber. ÖFPZ Arsenal, 50 S., Wien (AT).
- Egozcue, J. J., Pawlowsky-Glahn, V., Mateu-Figueras, G. & Barceló-Vidal, C. (2003): Isometric logratio transformations for compositional data analysis. – *Mathematical Geology* **35**, S. 279–300, Springer, New York (US).
- Filzmoser, P., Hron, K. & Reimann, C. (2009): Principal component analysis of compositional data with outliers. *Environmetrics*, **20**, S. 621-632, John Wiley & Sons, Chichester (UK).
- Filzmoser, P., Hron, K. & Templ, M. (2018): Applied compositional data analysis: with worked examples in R.- xvii+280 S., Springer, Cham (CH).
- Gabriel, K. R. (1971): The biplot graphic display of matrices with application to principal component analysis.- *Biometrika* **58**, S. 453–467, Oxford Univ. Press, Oxford (UK).
- Klein, P., Pirkl, H., Neinavaie, H., Schedl, A. & Atzenhofer, B. (2005): Umweltgeochemische Untersuchung der Bach- und Fluss-Sedimente Vorarlbergs auf Haupt- und Spurenelemente zur Erfassung und Beurteilung geogener und anthropogener Schadstoffbelastungen („Umweltgeochemie Vorarlbergs“). – Unveröff. Endber. Geol. B.-A., Bund/Bundesländer-Rohstoffprojekt VA-19, 97 S., Wien (AT).
- Klein, P., Pirkl, H., Fröschl, H., Schedl, A. & Wimmer, B. (2007): Abschluss der umweltgeochemischen Untersuchung der Bach- und Fluss-Sedimente Burgenlands auf Haupt- und Spurenelemente zur Erfassung und Beurteilung geogener und anthropogener Schadstoffbelastungen (Sedimentfraktion < 40 µm und Gesamtdokumentation). – Unveröff. Endber. Geol. B.-A., Bund/Bundesländer-Rohstoffprojekt B-C-017/2007, 90 S., Wien (AT).
- Lipiarski, P., Weber, L., Schedl, A., Heger, H. & Reischer, J. (2019): IRIS Online – Interaktives Rohstoffinformationssystem für Österreich. - In: Griesmeier, Gerit E.U., Iglseder, Christoph: Arbeitstagung 2019 der Geologischen Bundesanstalt: Geologie des Kartenblattes GK25 Radenthein-Ost: Murau 24.-27. Juni 2019. – S. 179-189, Verlag der Geologischen Bundesanstalt (GBA), Wien (AT).
- Pawlowsky-Glahn, V., Egozcue, J.J. & Tolosana-Delgado, R. (2015): Modeling and Analysis of Compositional Data, *Statistics in Practice*, 247 S., John Wiley & Sons, Chichester (UK).
- Pfleiderer, S., Schedl, A., Neinavaie, H. & Pirkl, H. (2010): Umweltgeochemische Untersuchung von Bachsedimenten, Gesteinen, Böden und Grundwasser zur Charakterisierung geogen bedingter Hintergrundwerte im Stadtgebiet Wien „Umweltgeochemie Stadtgebiet Wien“. – Unveröff. Ber. Geol. B.-A., Bund-Bundesländer Rohstoffprojekt W-C-026/2008-10, 57 S., 4 Beil., Wien (AT).
- Pirkl, H., Schedl, A. & Pfeleiderer, S. (Hrsg.) (2015): Geochemischer Atlas von Österreich - Bundesweite Bach- und Flusssedimentgeochemie (1978-2010). – Arch. F. Lagerst.forsch. Geol. B.-A. **28**, 288 S., Ill., Geol. B.-A., Wien (AT).
- R Core Team (2019): R: A Language and Environment for Statistical Computing. R Foundation for Statistical Computing, Wien (AT).
- Schedl, A., Pirkl, H., Pfeleiderer, S., Lipiarski, P., Neinavaie, N. & Atzenhofer, B. (2008): Umweltgeochemische Untersuchung der Bach- und Flusssedimente Kärntens auf Haupt- und Spurenelemente zur Erfassung und Beurteilung geogener und anthropogener Schadstoffbelastungen („Umweltgeochemie Kärnten“) – Auswertung und Interpretation. – Unveröff. Ber. Geol. B.-A., Endber. 2008, Bund/Bundesländer-Rohstoffprojekt KC-30, 68 S., Wien.
- Schedl, A., Pirkl, H., Neinavaie, H., Pfeleiderer, S., Lipiarski, P., Hobiger, G., Benold, Ch., Haslinger, E., Atzenhofer, B. & Mauracher, J. (2010): Umweltgeochemische Untersuchung der Bach- und Flusssedimente Steiermarks auf Haupt- und Spurenelemente zur Erfassung und Beurteilung geogener und anthropogener Schadstoffbelastungen („Umweltgeochemie Steiermark“). – Unveröff. Ber. Geol. B.-A., Endber. 2010, Bund/Bundesländer-Rohstoffprojekt St-C-076, 53 S., Wien (AT).

- Seiberl, W. (1991): Aeromagnetische Karte der Republik Österreich 1:1,000.000 (Isoanomalien der Totalintensität Epoche 1977.7). - Geol. B.-A., Wien (AT).
- Templ, M., Hron, K. & Filzmoser, P. (2011): robCompositions: an R-package for robust statistical analysis of compositional data. John Wiley and Sons, Chichester (UK).
- Thalmann, F., Schermann, O., Schroll, E. & Hausberger, G. (1989a): Geochemischer Atlas der Republik Österreich 1:1,000.000 – Böhmisches Massiv und Zentralzone der Ostalpen (Bachsedimente < 0,18 mm) (Atlasteil). – 36 S., Geol. B.-A., Wien (AT).
- Thalmann, F., Schermann, O., Schroll, E. & Hausberger, G. (1989b): Geochemischer Atlas der Republik Österreich 1:1,000.000 – Böhmisches Massiv und Zentralzone der Ostalpen (Bachsedimente < 0,18 mm) (Textteil). – 141 S., Geol. B.-A., Wien (AT).
- Weber, L. (1997): Die neue „Metallogenetische Karte von Österreich 1:500.000 unter Einbeziehung der Industriemineralien und Energierohstoffe“. - Berg- u. hüttenm. Mh. **142**, S. 420–424, Springer, Wien (AT).
- Weber, L. (1997): Mineralrohstoffe als Basis für die Wirtschaft – Die neue metallogenetische Karte Österreichs. - In: Österr. Akad. Wiss. (Hrsg.): Lese-Buch, S. 217–219, Verl. ÖAW, Wien (AT).
- Weber, L. (Hrsg.) (1997): Handbuch der Lagerstätten der Erze, Industriemineralien und Energierohstoffe Österreichs. Erläuterungen zur Metallogenetischen Karte von Österreich 1:500.000, Wien. - Arch. f. Lagerst.forsch. Geol. B.-A. **19**, 607 S., Wien (AT).
- Weber, L., Ebner, F., Hausberger, G. & Davis, J. (2001): The Austrian Computer Based Information System IRIS. - Proceedings, International Association of Mathematical Geology, Cancun (MX).
- Weber, L., Ebner, F. & Hausberger, G. (2002): „IRIS“ – das Interaktive Rohstoffinformationssystem von Österreich. – In: PANGEO Austria, Erdwissenschaften in Österreich, Salzburg: Österreichische Geologische Gesellschaft, S. 187–188, Wien (AT).
- Weber, L., Ebner, F. & Hausberger, G. (2002): The Interactive Raw Material Information System („IRIS“) of Austria—the computer based Metallogenetic Map of Austria. - Slovak Geological Magazine **8** (2002), S. 89–99, Bratislava (SK).
- Weber, L.; Schedl, A.; Lipiarski, P. (2018): IRIS Online New (Interactive Raw Materials Information System), an example for a Worldwide unique National Raw Materials Information System.- 25th World Mining Congress, Astana (KZ).
- Weber, L., Schedl, A. & Lipiarski, P. (2019): IRIS Online (Interaktives RohstoffInformationssystem), ein Beispiel für ein weltweit einzigartiges digitales Rohstoff-Informationssystem. - Berg- u. Hüttenm. Mh. **164**, S. 56-66, Springer, Wien (AT).
- Wimmer, B., Augustin-Gyurits, K. & Pirkl, H. (2002a): Umweltgeochemische Untersuchungen der Bach- und Flusssedimente Salzburgs auf Haupt- und Spurenelemente zur Erfassung und Beurteilung geogener und anthropogener Schadstoffbelastung. – Unveröff. Ber. ARC Seibersdorf, 148 S., 1 Beil. (Geochemischer Atlas des Bundeslandes Salzburg), Seibersdorf (AT).
- Wimmer, B., Augustin-Gyurits, K. & Pirkl, H. (2002b): Umweltgeochemische Untersuchungen der Bach- und Flusssedimente Tirols auf Haupt- und Spurenelemente zur Erfassung und Beurteilung geogener und anthropogener Schadstoffbelastung. – Unveröff. Ber. ARC Seibersdorf, 157 S., Seibersdorf (AT).



BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG, WISSENSCHAFT & FORSCHUNG

GEOLOGISCHE BUNDESANSTALT

FA ROHSTOFFGEOLOGIE

Titel

IRIS-Online: Statusübersicht 2019 Bachsedimentgeochemie

Projekt

ÜLG-070 2019 IRIS-Online

Sachbearbeiter

H. Reitner

Seiten

11

Datum

Feb. 2020

Datenbank



Geologische Bundesanstalt
Neulinggasse 38,
A-1030 Wien

Beilage Nr.

Anhang 1

Nur für den Dienstgebrauch

IRIS online

Interaktives RohstoffInformationssystem

» [WebKarte IRIS online](#)

» [Hilfe PDF](#)

Projektidee und Konzeption: Univ. Prof. Dr. L. Weber

Projektleitung: GBA Wien, Mag. Piotr Lipiarski

Koordination Informationsebenen

- Lagerstätten: Univ. Prof. Dr. L. Weber, Dr. A. Schedl (GBA)*
- Geochemie: Dr. A. Schedl (GBA), Dr. S. Pfeleiderer (GBA)**
- Geophysik: Mag. K. Motschka (GBA)

Datenbankentwicklung: Mag. P. Lipiarski (GBA), H. Heger (GBA)

Service-Bereitstellung: Mag. J. Reischer (GBA)

IRIS Online – österreichweite Karten und Informationen über:

- Lagerstätten
- Bergbaureviere
- Bachsedimentgeochemie
- Tektonische Deckensysteme
- Geologische Basiskarten
- Metamorphose-Ereignisse
- Aerogeophysik

IRIS Online

- Lagerstätten
- Bergbaureviere
- **Bachsedimentgeochemie**
- Tektonische Deckensysteme
- Geologische Basiskarten
- Metamorphoseereignisse
- Aerogeophysik

IRIS Online

- **Bachsedimentgeochemie**

Geochemischer Atlas von Österreich – Bundesweite Bach- und Flusssedimentgeochemie (1978–2010)

Pirkl, H., Schedl, A. & Pfeleiderer, S. (2015)



Geochem. Atlas

**Böhmische Masse
und
Zentralzone**

**Analytik der
Probenanteile
< 0, 18 mm
(≤ Feinsand)**

09.01.2019

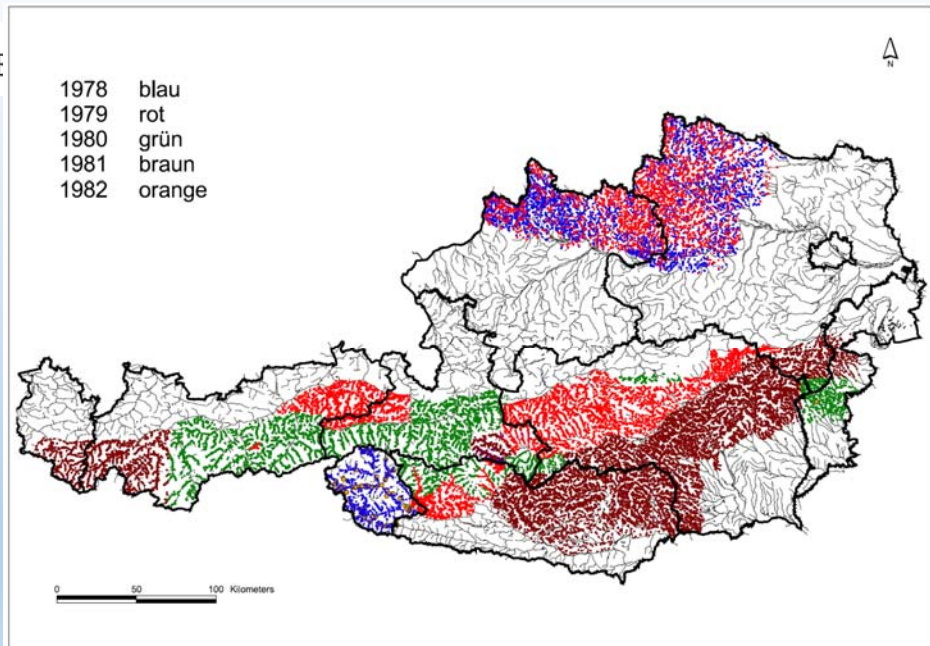


Abb. 3.
Bach- und Flusssedimentgeochemie Böhmische Masse und Zentralzone, Zeitablauf nach Probenahmejahren.

Geochem. Atlas

**Bundesländer-
projekte**

**Analytik der
Probenanteile
< 0, 18 mm
und zusätzlich
< 0,04 mm
(≤ Grobschluff,
exkl. Oö, Szb & T)**

09.01.2019

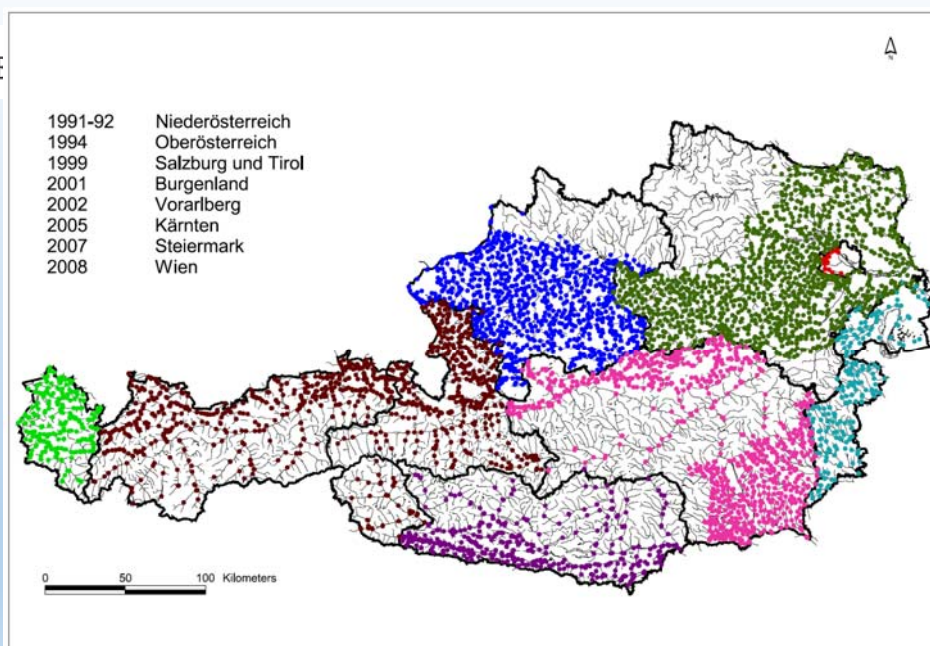


Abb. 4.
Bach- und Flusssedimentgeochemie Bundesländerprojekte, Zeitablauf nach Probenahmejahren.

IRIS Online

• **Bachsedimentgeochemie (< 0,18 mm)**



- Interpolierte Rasterkarten der Elementgehalte (exkl. Ag, Sb, U, W)
(getrennt nach Haupt- und Spurenelementen, Angabe von Wertebereichen)
- Punktkarten der Elementgehalte
(getrennt nach Haupt- und Spurenelementen, Angabe von Wertebereichen)
- Punktkarten der Werte (scores) der Hauptkomponenten 1 - 9
- Punktkarten der 99 % Perzentile ausgewählter Hauptelemente und der Spurenelemente
- Grafische Darstellung der Ladungen der Hauptkomponenten 1 - 5

Hauptelemente [%]

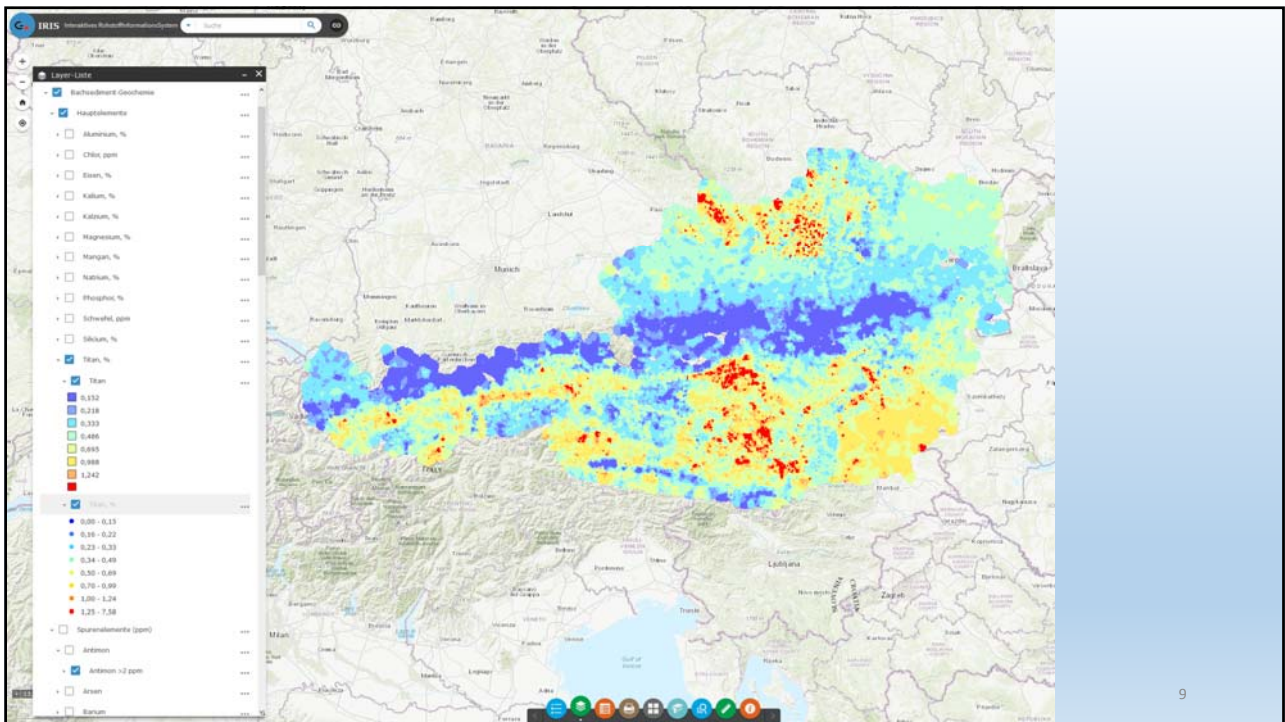
Aluminium
Chlor
Eisen
Kalium
Kalzium
Magnesium
Mangan
Natrium
Phosphor
Schwefel
Silizium
Titan

Spurenelemente [ppm]

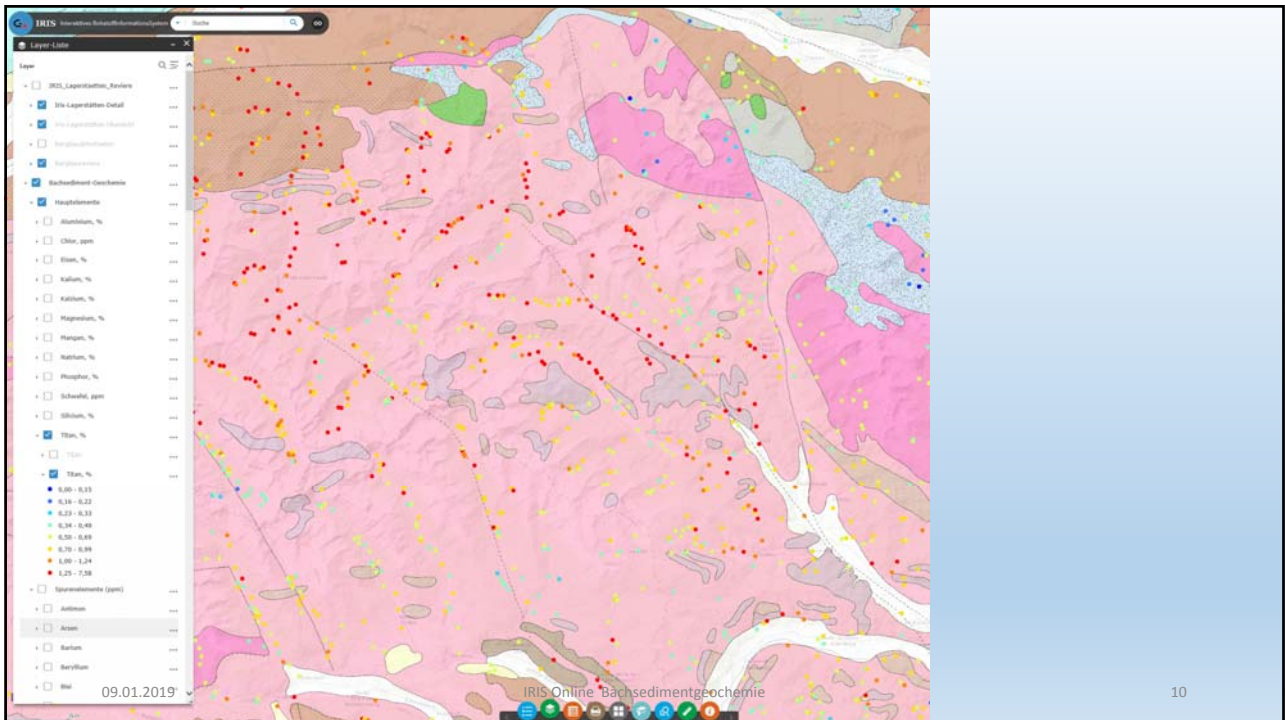
Antimon
Arsen
Barium
Beryllium
Blei
Cer
Chrom
Fluor
Gallium
Kobalt
Kupfer
Lanthan
Lithium

Molybdän
Nickel
Niob
Quecksilber
Rubidium
Scandium
Selen
Silber
Strontium
Thorium
Uran
Vanadium
Wolfram
Yttrium
Zink

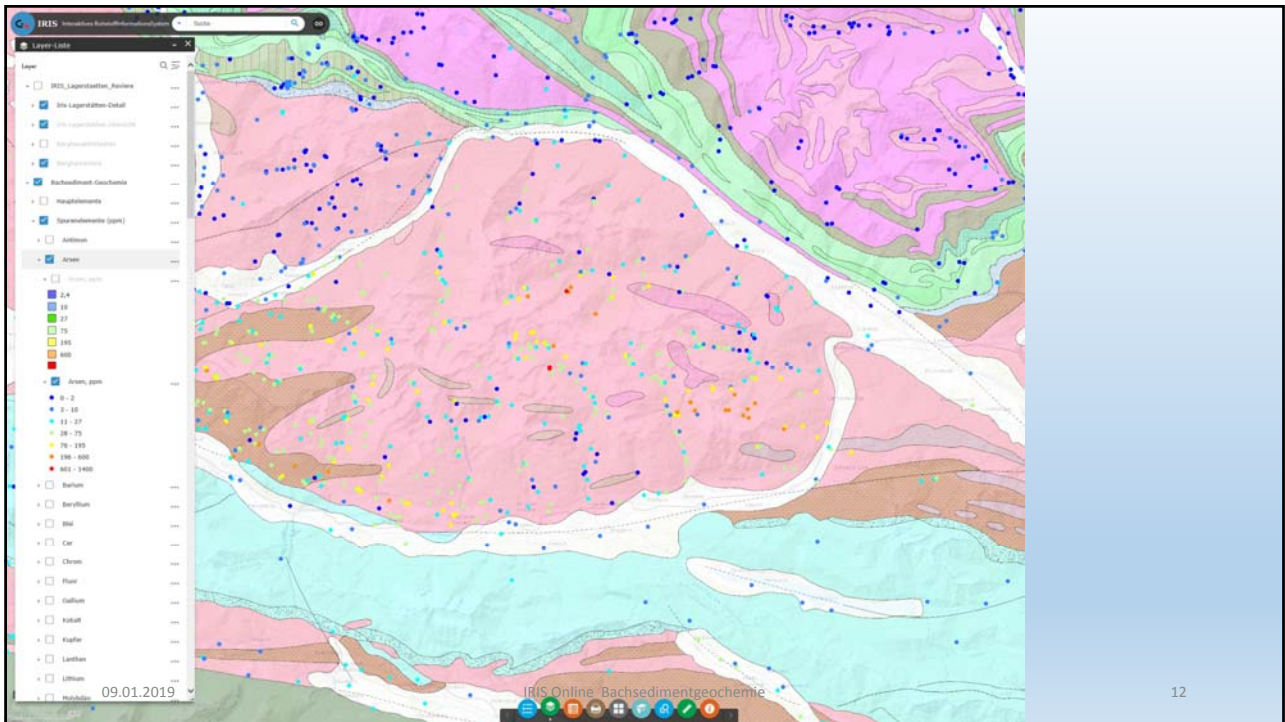
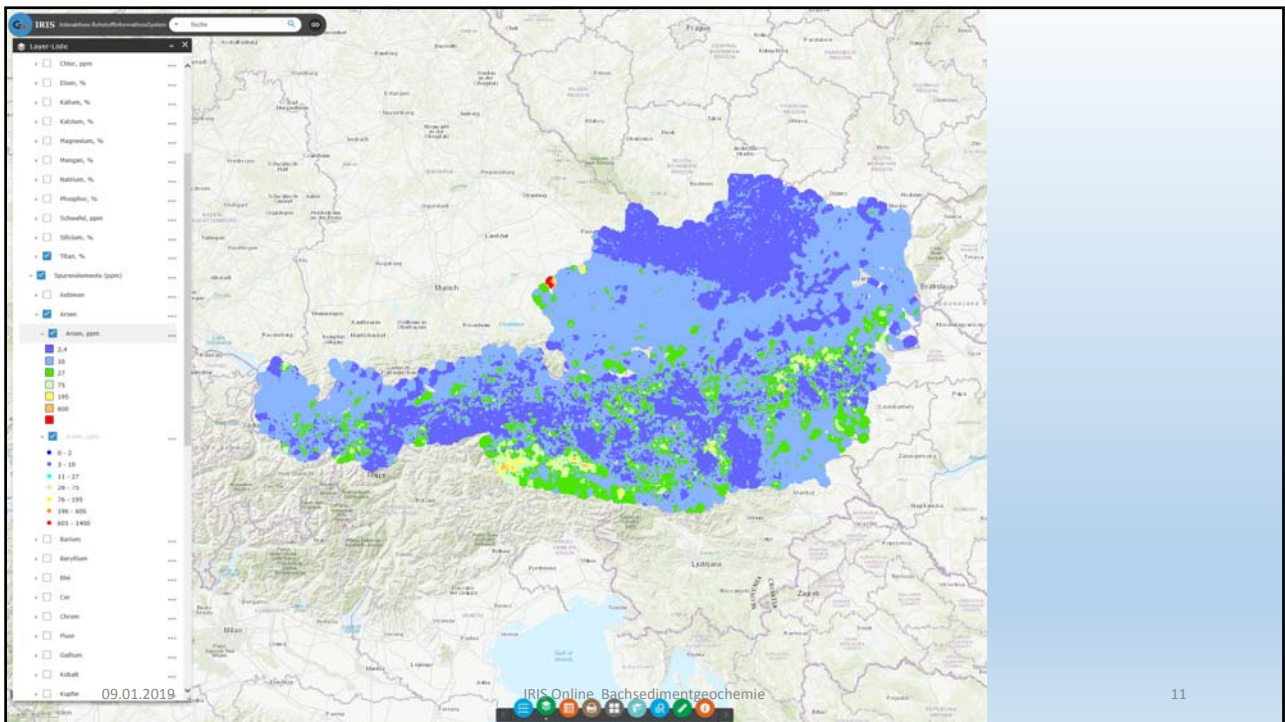
Zinn
Zirkonium



9



10



IRIS Online

• **Bachsedimentgeochemie (< 0,18 mm)**

- Interpolierte Rasterkarten der Elementgehalte (exkl. Ag, Sb, U, W) (getrennt nach Haupt- und Spurenelementen, Angabe von Wertebereichen)
- Punktkarten der Elementgehalte (getrennt nach Haupt- und Spurenelementen, Angabe von Wertebereichen)
- ➔ • Punktkarten der Werte (scores) der Hauptkomponenten 1 – 9 (Angabe von Wertebereichen)
- Punktkarten der 99 % Perzentile ausgewählter Hauptelemente und der Spurenelemente
- Grafische Darstellung der Ladungen der Hauptkomponenten 1 - 5

Hauptelemente [%]

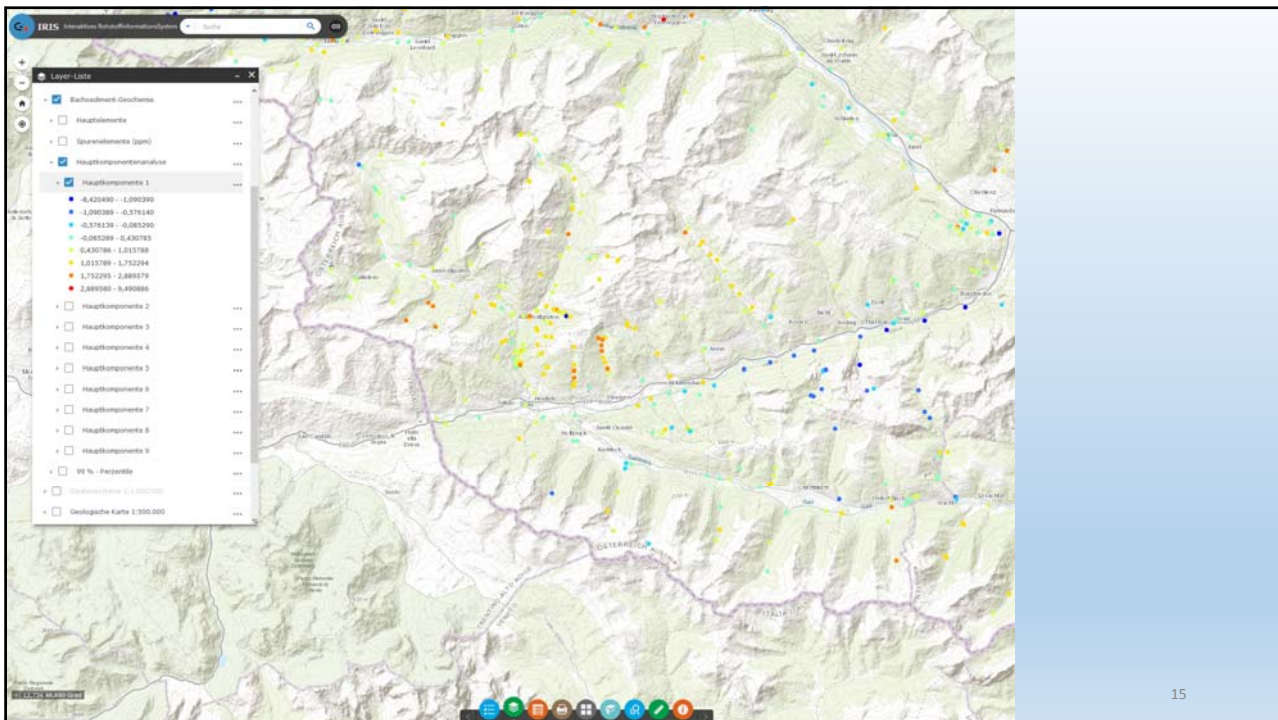
Aluminium
Chlor
Eisen
Kalium
Kalzium
Magnesium
Mangan
Natrium
Phosphor
Schwefel
Silizium
Titan

Spurenelemente [ppm]

Antimon
Arsen
Barium
Beryllium
Blei
Cer
Chrom
Fluor
Gallium
Kobalt
Kupfer
Lanthan
Lithium

Molybdän
Nickel
Niob
Quecksilber
Rubidium
Scandium
Selen
Silber
Strontium
Thorium
Uran
Vanadium
Wolfram
Yttrium
Zink

Zinn
Zirkonium



15

IRIS Online

• **Bachsedimentgeochemie (< 0,18 mm)**

- Interpolierte Rasterkarten der Elementgehalte (exkl. Ag, Sb, U, W) (getrennt nach Haupt- und Spurenelementen, Angabe von Wertebereichen)
- Punktkarten der Elementgehalte (getrennt nach Haupt- und Spurenelementen, Angabe von Wertebereichen)
- Punktkarten der Werte (scores) der Hauptkomponenten 1 - 9
- ➔ • Punktkarten der 99 % Perzentile ausgewählter Hauptelemente und der Spurenelemente
- Grafische Darstellung der Ladungen der Hauptkomponenten 1- 5

Hauptelemente [%]

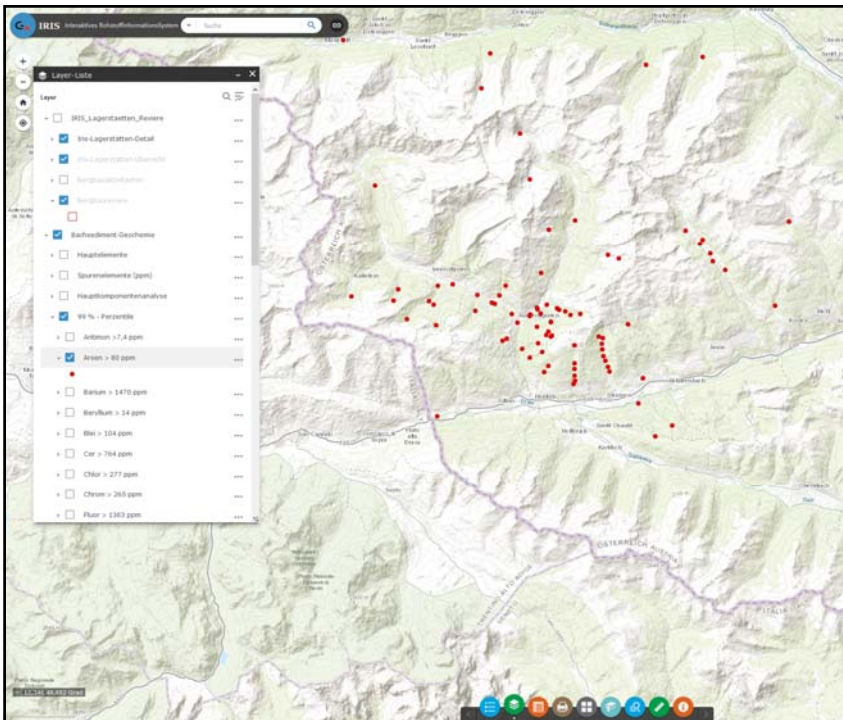
Aluminium
Chlor
Eisen
Kalium
Kalzium
Magnesium
Mangan
Natrium
Phosphor
Schwefel
Silizium
Titan

Spurenelemente [ppm]

Antimon
Arsen
Barium
Beryllium
Blei
Cer
Chrom
Fluor
Gallium
Kobalt
Kupfer
Lanthan
Lithium

Molybdän
Nickel
Niob
Quecksilber
Rubidium
Scandium
Selen
Silber
Strontium
Thorium
Uran
Vanadium
Wolfram
Yttrium
Zink

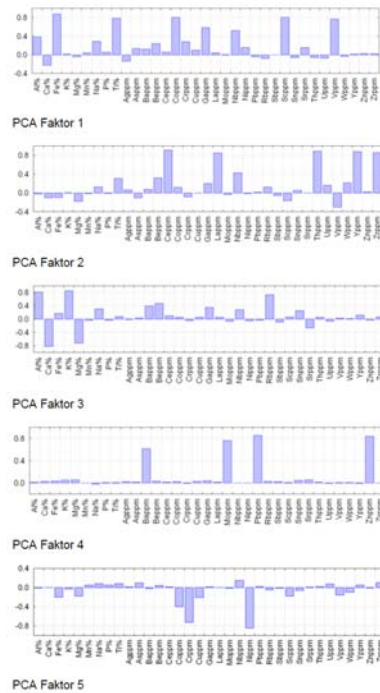
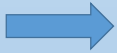
Zinn
Zirconium

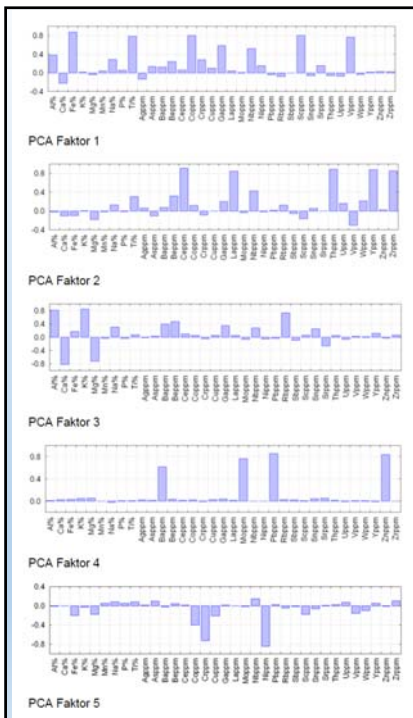


IRIS Online

- **Bachsedimentgeochemie (< 0,18 mm)**

- Interpolierte Rasterkarten der Elementgehalte (exkl. Ag, Sb, U, W) (getrennt nach Haupt- und Spurenelementen, Angabe von Wertebereichen)
- Punktkarten der Elementgehalte (getrennt nach Haupt- und Spurenelementen, Angabe von Wertebereichen)
- Punktkarten der Werte (scores) der Hauptkomponenten 1 - 9
- Punktkarten der 99 % Perzentile der Spurenelemente
- Grafische Darstellung der Ladungen der Hauptkomponenten 1 - 5





Faktor 1: Fe, (Na), P, Ti, Co, V, Sc, Ga, Nb – Amphibolite in praktisch allen Einheiten des zentralalpiner Kristallins; Metabasite in der Tauernschieferhülle, der Quarzphyllit-Einheiten, der Grauwackenzone, der Gurktaler Einheit und des Grazer Paläozoikums.

Faktor 2: Ce, La, Zr, Nb, Th, Y – Granite und Grobgnaisseisen der Böhmischer Masse

Faktor 3: Al, K, Rb, (Ba), (Be) – K-reiche Glimmerschiefer, Phyllite und Gneise

Faktor 4: Ba, Pb, Zn, Mo – Blei-/Zinkmineralisationen (geogen) und technogene Belastungen in Ager, Traun, Traisen und Gewässern im Süden von Wien

Faktor 5: Co, Cr, (Cu), Ni – basische und ultrabasische Serien mit höheren Ni-/Cr-Konzentrationen; klastische Serien (Kalkalpen), in deren Liefergebiet basische und ultrabasische Gesteine verbreitet waren; technogene Belastungen in Bereichen mit metallverarbeitenden Betrieben (z.B. Ybbs, südliches Wiener Becken)

21

IRIS Online

- Lagerstätten
- Bergbaureviere
- **Bachsedimentgeochemie**
- Tektonische Deckensysteme
- Geologische Basiskarten
- Metamorphoseereignisse
- Aerogeophysik

Neu (mit CODA!?)





BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG, WISSENSCHAFT & FORSCHUNG

GEOLOGISCHE BUNDESANSTALT

FA ROHSTOFFGEOLOGIE

Titel

**Datenauswahl bundesweite Bach- und Flusssedimentgeochemie –
Feldliste und statistische Kennzahlen**

Projekt

ÜLG-070 2019 IRIS-Online

Sachbearbeiter

H. Reitner

Seiten

7

Datum

Feb. 2020

Datenbank



Geologische Bundesanstalt
Neulinggasse 38,
A-1030 Wien

Beilage Nr.

Anhang 2

Nur für den Dienstgebrauch

Datenauswahl Bach- und Flusssedimentgeochemie IRIS-Online: Feldliste

```
'data.frame':  34424 obs. of  46 variables:
 $ PUNKT_ID: int  156 157 158 159 160 161 162 163 164 165 ...
 $ META_ID : int   8  8  8  8  8  8  8  8  8  8 ...
 $ EASTING : num  15.4 15.4 15.4 15.4 15.4 ...
 $ NORTHING: num  48.5 48.2 47.6 47.5 48.8 ...
 $ Al_proz1: num   5.26 6.38 8.99 7.7 6.91 ...
 $ Ca_proz1: num   1.36 1.11 0.2 1.78 0.97 1.93 0.67 1.07 3.34 3.94 ...
 $ Fe_proz1: num   3.5 2.33 2.91 3.33 2.23 5.14 3.57 2.71 5.75 3.29 ...
 $ K_proz1 : num   1.34 1.48 3.29 1.22 2.26 1.94 1.59 2.44 0.94 1.93 ...
 $ Mg_proz1: num   1.08 0.73 0.44 1.1 0.44 1.73 0.59 0.53 1.97 1.27 ...
 $ Mn_proz1: num   0.173 0.057 0.083 0.096 0.294 0.109 0.095 0.074 ...
 $ Na_proz1: num   1.55 0.95 0.44 1.52 1.74 2.35 0.9 1.6 2.45 1.76 ...
 $ P_proz1 : num   0.052 0.053 0.073 0.068 0.025 0.101 0.057 0.056 0.097 ...
 $ Si_proz1: num   NA NA NA NA NA NA NA NA NA NA ...
 $ Ti_proz1: num   0.691 0.311 0.353 0.557 0.371 0.688 0.798 0.357 0.762 ...
 $ Ag_ppm1 : num   0.13 0.11 0.06 0.05 0.1 0.12 0.07 0.1 0.1 0.08 ...
 $ As_ppm1 : num    1  1 10  4  1 40  1  1 16  1 ...
 $ Ba_ppm1 : num  477 256 653 315 578 600 290 602 880 381 ...
 $ Be_ppm1 : num    5  1  4  3  1  5  3  2  4  3 ...
 $ Ce_ppm1 : num  258 146 110  70  82  80  98  91 107  88 ...
 $ Cl_ppm1 : num   NA NA NA NA NA NA NA NA NA NA ...
 $ Co_ppm1 : num   16 11  9 12 10 23 16  9 24  9 ...
 $ Cr_ppm1 : num   47 58 39 51 26 120 65 22 94 66 ...
 $ Cu_ppm1 : num   20 14 17 15  5 34 16  7 22 14 ...
 $ F_ppm1  : num   NA NA NA NA NA NA NA NA NA NA ...
 $ Ga_ppm1 : num   16 12 10 21 17 29 24 21 30 22 ...
 $ Hg_ppm1 : num   NA NA NA NA NA NA NA NA NA NA ...
 $ La_ppm1 : num   99 76 49 36 38 39 49 38 52 96 ...
 $ Li_ppm1 : num   NA NA NA NA NA NA NA NA NA NA ...
 $ Mo_ppm1 : num   0.67 0.63 0.66 0.68 0.44 1.3 0.6 0.47 0.68 0.67 ...
```

```
$ Nb_ppm1 : num  2.5 11 29 15 11 7 23 20 10 6 ...
$ Ni_ppm1 : num  35 26 36 21 21 45 20 16 41 32 ...
$ Pb_ppm1 : num  26 15 10 20 25 30 35 21 20 15 ...
$ Rb_ppm1 : num  67 51 154 44 76 77 53 82 47 65 ...
$ S_ppm1  : num  NA NA NA NA NA NA NA NA NA NA ...
$ Sb_ppm1 : num  1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
$ Sc_ppm1 : num  11 10 8 21 7 22 15 12 30 11 ...
$ Se_ppm1 : num  NA NA NA NA NA NA NA NA NA NA ...
$ Sn_ppm1 : num  1.8 3.2 3.9 1.8 6.4 3.5 4.2 2.2 4 2.2 ...
$ Sr_ppm1 : num  145 152 46 185 203 274 155 153 341 354 ...
$ Th_ppm1 : num  103 31 5 25 21 5 5 32 5 21 ...
$ U_ppm1  : num  12 2.5 8 2.5 2.5 2.5 5 6 5 2.5 ...
$ V_ppm1  : num  85 93 45 103 47 174 98 75 145 80 ...
$ W_ppm1  : num  27 0.5 9 16 0.5 2 0.5 11 0.5 0.5 ...
$ Y_ppm1  : num  76 36 70 51 42 35 26 50 35 40 ...
$ Zn_ppm1 : num  95 88 47 57 137 117 25 77 93 76 ...
$ Zr_ppm1 : num  277 363 497 229 300 269 534 383 540 162 ...
```

Datenauswahl Bach- und Flusssedimentgeochemie IRIS-Online: Statistische Kennzahlen

PUNKT_ID	META_ID	EASTING	NORTHING	Al_proz1
Min. : 156	Min. : 8.00	Min. : 9.536	Min. :46.42	Min. : 0.025
1st Qu.: 8762	1st Qu.: 8.00	1st Qu.:13.183	1st Qu.:47.04	1st Qu.: 7.200
Median :17366	Median : 8.00	Median :14.309	Median :47.31	Median : 8.530
Mean :17504	Mean : 18.95	Mean :14.021	Mean :47.50	Mean : 8.345
3rd Qu.:25971	3rd Qu.: 8.00	3rd Qu.:15.134	3rd Qu.:47.91	3rd Qu.: 9.830
Max. :35598	Max. :197.00	Max. :17.096	Max. :49.01	Max. :20.480
				NA's :344
Ca_proz1	Fe_proz1	K_proz1	Mg_proz1	Mn_proz1
Min. : 0.005	Min. : 0.005	Min. :0.0133	Min. : 0.025	Min. :0.00190
1st Qu.: 0.740	1st Qu.: 2.420	1st Qu.:1.6500	1st Qu.: 0.770	1st Qu.:0.05732
Median : 1.460	Median : 3.520	Median :2.1900	Median : 1.170	Median :0.08100
Mean : 3.046	Mean : 3.605	Mean :2.2254	Mean : 1.593	Mean :0.09059
3rd Qu.: 2.860	3rd Qu.: 4.640	3rd Qu.:2.7700	3rd Qu.: 1.700	3rd Qu.:0.11100
Max. :42.340	Max. :29.137	Max. :7.1100	Max. :20.840	Max. :2.77617
NA's :62	NA's :62	NA's :374	NA's :62	NA's :63

Na_proz1	P_proz1	Si_proz1	Ti_proz1	Ag_ppm1
Min. :0.00371	Min. :0.00218	Min. : 0.093	Min. :0.001798	Min. : 0.00948
1st Qu.:0.92738	1st Qu.:0.07600	1st Qu.:14.432	1st Qu.:0.332423	1st Qu.: 0.05000
Median :1.37000	Median :0.10100	Median :24.352	Median :0.486000	Median : 0.08000
Mean :1.41467	Mean :0.11136	Mean :21.637	Mean :0.562133	Mean : 0.11784
3rd Qu.:1.86000	3rd Qu.:0.13300	3rd Qu.:29.773	3rd Qu.:0.695000	3rd Qu.: 0.12304
Max. :5.04000	Max. :1.44448	Max. :39.364	Max. :7.582000	Max. :28.00000
NA's :62	NA's :63	NA's :29690	NA's :25	NA's :148

As_ppm1	Ba_ppm1	Be_ppm1	Ce_ppm1	Cl_ppm1
Min. : 0.050	Min. : 0.0	Min. : 0.07994	Min. : 0.0	Min. : 16.00
1st Qu.: 1.000	1st Qu.: 330.0	1st Qu.: 2.07948	1st Qu.: 66.0	1st Qu.: 50.00
Median : 3.000	Median : 460.0	Median : 4.00000	Median : 90.0	Median : 64.00
Mean : 7.565	Mean : 506.5	Mean : 4.02878	Mean : 126.4	Mean : 77.92
3rd Qu.: 6.500	3rd Qu.: 630.0	3rd Qu.: 5.00000	3rd Qu.: 129.0	3rd Qu.:103.00
Max. :1400.000	Max. :19264.0	Max. :30.00000	Max. :3590.0	Max. :593.00
NA's :33	NA's :77	NA's :151	NA's :60	NA's :30853

Co_ppm1	Cr_ppm1	Cu_ppm1	F_ppm1	Ga_ppm1
Min. : 0.499	Min. : 2.00	Min. : 0.499	Min. : 25.0	Min. : 0.00
1st Qu.: 10.000	1st Qu.: 40.00	1st Qu.: 12.000	1st Qu.: 203.8	1st Qu.:14.00
Median : 14.000	Median : 64.00	Median : 19.000	Median : 389.0	Median :20.00
Mean : 15.234	Mean : 72.55	Mean : 23.004	Mean : 432.0	Mean :19.81
3rd Qu.: 19.000	3rd Qu.: 88.00	3rd Qu.: 27.000	3rd Qu.: 627.0	3rd Qu.:25.00
Max. :226.000	Max. :3614.00	Max. :6400.000	Max. :16302.0	Max. :91.00
NA's :62	NA's :108	NA's :25	NA's :29692	NA's :150

Hg_ppm1	La_ppm1	Li_ppm1	Mo_ppm1	Nb_ppm1
Min. :0.005	Min. : 0.499	Min. : 0.99	Min. : 0.050	Min. : 0.00
1st Qu.:0.028	1st Qu.: 33.000	1st Qu.: 17.73	1st Qu.: 0.530	1st Qu.: 13.00
Median :0.050	Median : 47.000	Median : 26.70	Median : 0.690	Median : 19.00
Mean :0.097	Mean : 68.049	Mean : 28.80	Mean : 0.912	Mean : 21.82
3rd Qu.:0.090	3rd Qu.: 69.000	3rd Qu.: 37.18	3rd Qu.: 0.970	3rd Qu.: 27.00
Max. :8.671	Max. :6732.000	Max. :117.00	Max. :542.080	Max. :243.00
NA's :29691	NA's :60	NA's :30853	NA's :147	NA's :110

Ni_ppm1	Pb_ppm1	Rb_ppm1	S_ppm1	Sb_ppm1
Min. : 2.00	Min. : 1.50	Min. : 2.50	Min. : 13.0	Min. : 0.000
1st Qu.: 21.00	1st Qu.: 20.00	1st Qu.: 62.00	1st Qu.: 167.0	1st Qu.: 1.000
Median : 30.00	Median : 27.00	Median : 88.00	Median : 367.0	Median : 1.000
Mean : 34.08	Mean : 32.59	Mean : 91.97	Mean : 603.3	Mean : 1.309
3rd Qu.: 40.00	3rd Qu.: 36.00	3rd Qu.:116.00	3rd Qu.: 664.0	3rd Qu.: 1.000
Max. :2471.00	Max. :11662.00	Max. :597.00	Max. :110365.0	Max. :180.000
NA's :62	NA's :149	NA's :327	NA's :29690	

Sc_ppm1	Se_ppm1	Sn_ppm1	Sr_ppm1	Th_ppm1
Min. : 0.099	Min. : 0.025	Min. : 0.250	Min. : 5.0	Min. : 0.00
1st Qu.: 8.000	1st Qu.: 0.100	1st Qu.: 2.200	1st Qu.: 128.0	1st Qu.: 5.00
Median :13.000	Median : 0.167	Median : 3.200	Median : 183.0	Median : 12.00
Mean :13.589	Mean : 0.251	Mean : 3.739	Mean : 193.8	Mean : 21.46
3rd Qu.:18.000	3rd Qu.: 0.286	3rd Qu.: 4.400	3rd Qu.: 231.0	3rd Qu.: 22.00
Max. :77.000	Max. :22.100	Max. :285.000	Max. :8695.0	Max. :1919.00
NA's :62	NA's :29690	NA's :147	NA's :62	NA's :327

U_ppm1	V_ppm1	W_ppm1	Y_ppm1	Zn_ppm1
Min. : 0.099	Min. : 0.50	Min. : 0.0954	Min. : 2.0	Min. : 2.5
1st Qu.: 2.500	1st Qu.: 57.00	1st Qu.: 0.5000	1st Qu.: 23.0	1st Qu.: 61.0
Median : 2.500	Median : 93.00	Median : 0.5000	Median : 34.0	Median : 79.0
Mean : 4.061	Mean : 95.97	Mean : 3.9973	Mean : 48.7	Mean : 90.4
3rd Qu.: 3.000	3rd Qu.:127.00	3rd Qu.: 4.0000	3rd Qu.: 51.0	3rd Qu.: 100.0
Max. :172.000	Max. :927.00	Max. :2693.0000	Max. :2055.0	Max. :25468.0
NA's :324	NA's :60	NA's :324	NA's :327	NA's :26

Zr_ppm1

Min. : 5.0

1st Qu.: 187.0

Median : 251.0

Mean : 389.4

3rd Qu.: 342.0

Max. :9820.0

NA's :327



BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG, WISSENSCHAFT & FORSCHUNG

GEOLOGISCHE BUNDESANSTALT

FA ROHSTOFFGEOLOGIE

Titel

**Statistische Auswertungen der bundesweiten Bach- und
Flusssedimentgeochemie – CSTAT/TU Wien - Bericht**

Projekt

ÜLG-070 2019 IRIS-Online

Sachbearbeiter

Th. Filzmoser &
P. Filzmoser

Seiten

30

Datum

Sept. 2019

Datenbank



Geologische Bundesanstalt
Neulinggasse 38,
A-1030 Wien

Beilage Nr.

Anhang 3

Nur für den Dienstgebrauch

Statistische Auswertungen der bundesweiten Bach- und Flusssedimentgeochemie

Bericht

Die Arbeiten erfolgten im Auftrag der Geologischen Bundesanstalt,
Aktenzahl AZ 47/1, vom 30. Jänner 2019

Theresa Filzmoser, Technische Universität Wien

*Univ.-Prof. Dr. Peter Filzmoser, Institute of Statistics & Mathematical
Methods in Economics, Technische Universität Wien*

26 September 2019

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
1.1	<i>IRIS online</i>	3
1.2	Aufgabenstellung	6
2	Methodik	7
2.1	Zentrierte log-Verhältnis Transformation (centered logratio (clr) transformation)	7
2.1.1	Formale Definition	7
2.2	Isometrische log-Verhältnis Transformation (isometric logratio (ilr) transformation)	8
2.3	Hauptkomponentenanalyse	9
3	Resultate	10
3.1	CP-Plots der clr-Koeffizienten	10
3.2	Flächenkarten der clr-Koeffizienten	11
3.2.1	Auswirkung schlechter Datenqualität auf clr-Karten	12
3.3	Flächenkarten der geometrischen Mittel	14
3.4	Hauptkomponentenanalyse	15
3.4.1	Biplots	17
3.4.2	Säulendiagramme der Ladungsmatrizen (<i>loadings</i>)	20
3.5	CP-Plots der PCA-scores	22
3.6	Flächenkarten der PCA-scores	23
4	Zusammenfassung	24
5	Anhang	25
5.1	my.qpplot.das()	25
5.2	my.SmoothLegend()	26
5.3	Digitale Datenlieferung	28
	Literatur	30

1 Einleitung

Das Projekt "Auswertungen Bach- und Flusssedimentgeochemie", ausgehend von der Geologischen Bundesanstalt (GBA), befasst sich mit der Analyse von Bach- und Flusssedimenten und deren Darstellung in einem online Kartensystem (*IRIS online (Interaktives RohstoffInformationssystem)*). Die Daten wurden über lange Zeit hinweg an verschiedenen Orten in Österreich gesammelt und zusammengeführt, siehe [Pirkl et al., 2015].

1.1 IRIS online

Die interaktiven Karten findet man auf der Homepage der GBA unter

<https://www.geologie.ac.at/services/webapplikationen/iris-interaktives-rohstoffinformationssystem>.

In der Layer-Liste kann man unterschiedliche thematische Ebenen auswählen, die in der Karte angezeigt werden. Wählt man z.B. in der Ebene *Bachsediment-Geochemie* die Ebene *Hauptelemente* und dort das Element Aluminium aus, so werden die Vorkommnisse von Aluminium über den Kartenausschnitt interpoliert und in den entsprechenden Farben dargestellt.

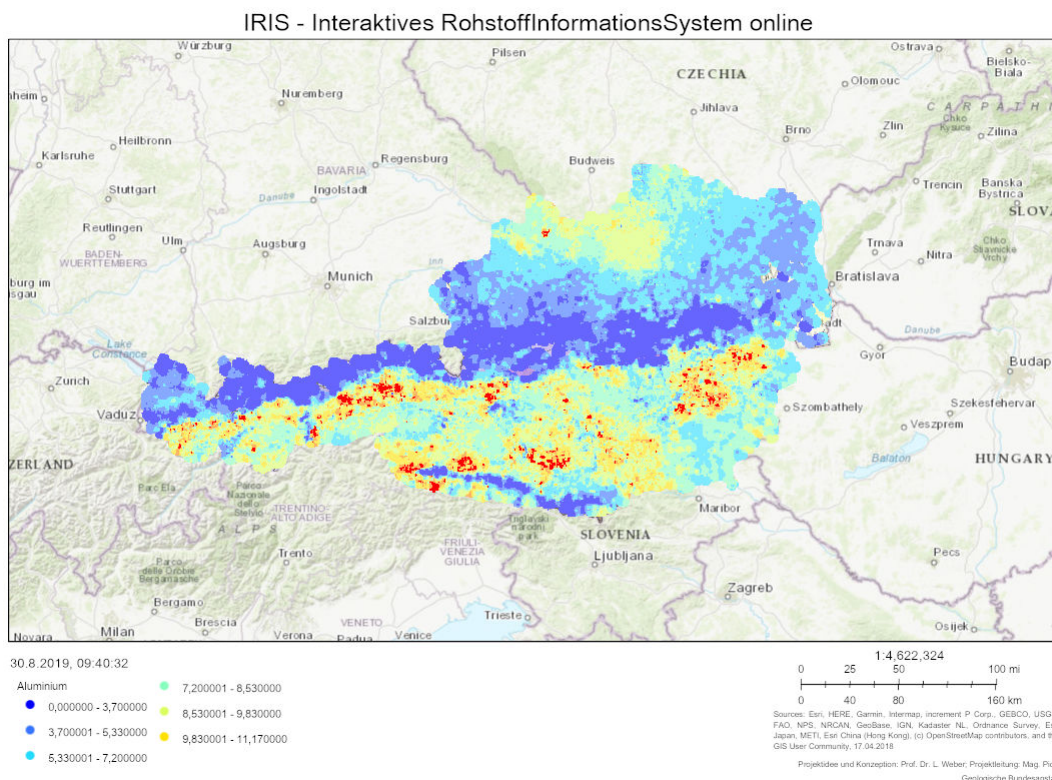


Abbildung 1: Vorkommnisse von Aluminium über die Fläche von Österreich interpoliert

Zoomt man weiter in die Karte hinein, so werden die einzelnen Lagerstätten mittels farbigem Punkt dargestellt, wobei die Farbe wieder der gefundenen Menge von Aluminium (in Prozent) entspricht.

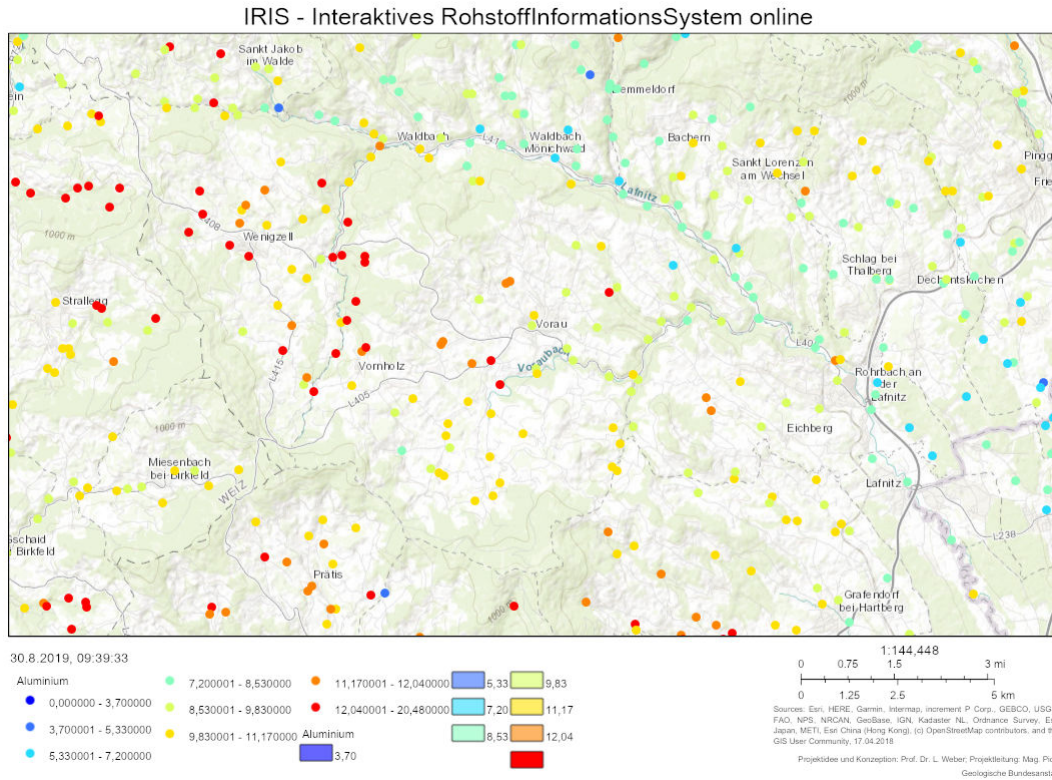


Abbildung 2: Vorkommnisse von Aluminium in einem Kartenausschnitt

In der Layer-Liste kann man unter *Bachsediment-Geochemie* auch die Ebene *Hauptkomponentenanalyse* auswählen. Zoomt man nun in die Karte hinein, werden die *scores* (Werte der Hauptkomponenten) der ausgewählten Hauptkomponenten angezeigt.

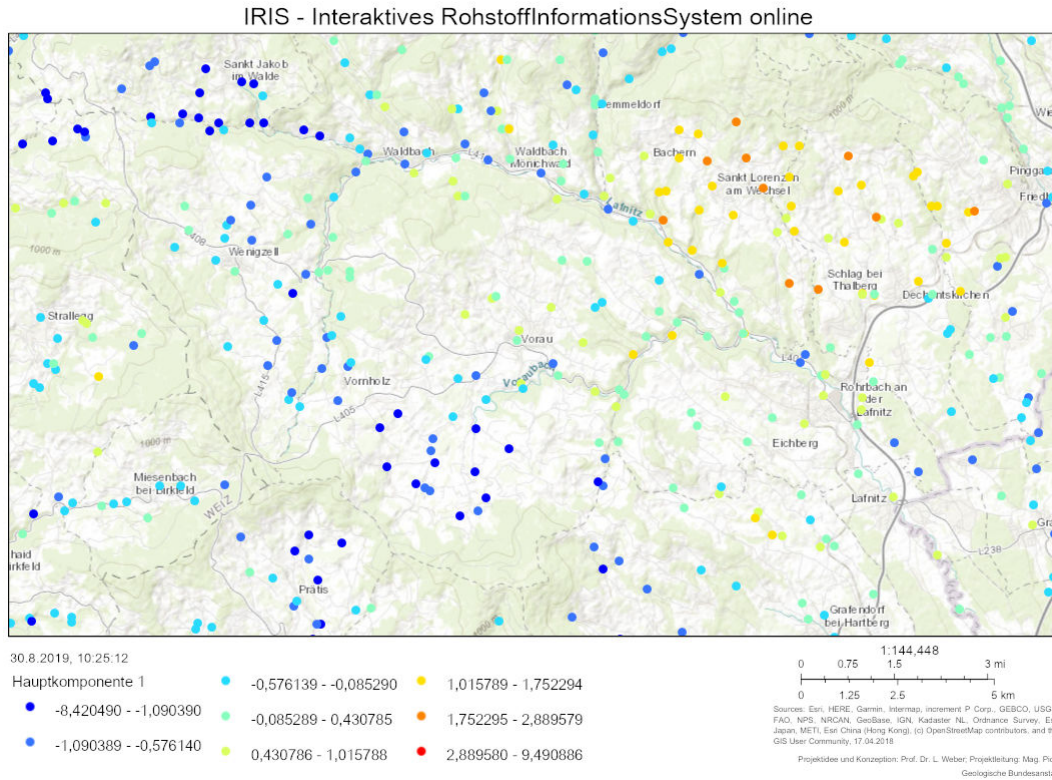


Abbildung 3: scores der 1. Hauptkomponente in einem Kartenausschnitt

In einer Attributtabelle kann man sich die Werte der Attribute (Spalten) der Themen anzeigen lassen.

OBJECTID	IRIS-ID	SHAPE	IRIS_ID	GBA_BETR_DAUER	PRAEHIST	ROEMERZEITLI	FRUEHMITTELA	MITTELALTER	JH15	JH16	JH17
18	149	149		777-14. Jhdt, später nur für Heilzwecke verwendet.	0	0	1	1	0	0	0
46	45	45		1147-heute	0	0	1	1	1	1	1
112	403	403		präh., (seit ?1000 v., seit M. 6. Jh.v.Chr. - M. 1. Jh.n.Chr.) seit 1123, seit 1185-1989	1	1	1	1	1	1	1

38 Features 0 ausgewählt

Abbildung 4: Attributtabelle

Zusätzlich gibt es eine Legende zu den derzeit sichtbaren Themen, die Möglichkeit, den derzeitigen Kartenausschnitt als Bild zu speichern, verschiedene Grundkarten bzw. Topographien, uvm.

Eine genauere Übersicht über die einzelnen Funktionen von *IRIS online* findet man in einem Helpfile auf den Homepage, siehe [Weber and Lipiarski, 2019].

1.2 Aufgabenstellung

Bisher wurden für *IRIS online* nur absolute Werte verwendet. Nun sollen auch Karten für relative Werte durch Methoden für Compositional Data (CoDa) erstellt werden. Für die relativen Werte sind sinnvolle Quantile zur Farbabstufung in der Karte zu finden. Schließlich wird noch, zur bereits existierenden Hauptkomponentenanalyse der absoluten Werte, eine Hauptkomponentenanalyse für CoDa gemacht. Alle verwendeten Methoden sollen für *IRIS online* dokumentiert und erklärt werden.

2 Methodik

Bei Compositional Data Analysis betrachtet man - anstatt der absoluten Werte, die uns nur liefern, ob, in diesem Fall, die Konzentration eines Elements in der Probe hoch oder niedrig ist - die Relationen zwischen den einzelnen Variablen, also in diesem Fall zwischen den verschiedenen Elementen.

Gerade bei der Analyse chemischer Daten spielt Compositional Data Analysis eine wichtige Rolle: So ist etwa die Menge an Aluminium in einem Stein nicht so wichtig wie die Element-Zusammensetzung (also die Komponenten) im Stein. Um jedoch einen tieferen Einblick in die Zusammensetzung des Steines zu bekommen, ist es von Interesse die Konzentration von Aluminium im Stein im Vergleich zur Konzentration der anderen Elemente im Stein zu wissen.

2.1 Zentrierte log-Verhältnis Transformation (centered logratio (clr) transformation)

Eine Methode, um von absoluten auf relative Werte zu kommen, ist die zentrierte log-Verhältnis Transformation (clr-Transformation). Dabei ist zu beachten, dass man die Haupt- und Spurenelemente als separate Kompositionen betrachten muss. Die Ergebnisse wären sonst aufgrund der großen Mengenunterschiede der Haupt- und Spurenelemente (gemessen in Prozent und Parts per million, jeweils) nicht aussagekräftig.

2.1.1 Formale Definition

Seien die Variablen als $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_D)^T$ bezeichnet. Dann kann man die relative Information von x_1 ausdrücken als

$$\ln \frac{x_1}{x_2}, \ln \frac{x_1}{x_3}, \dots, \ln \frac{x_1}{x_D} \quad .$$

Nimmt man nun noch das Mittel dieser paarweisen log-Verhältnisse, erhält man

$$y_1 = \frac{1}{D} \left(\ln \frac{x_1}{x_2}, \ln \frac{x_1}{x_3}, \dots, \ln \frac{x_1}{x_D} \right) = \ln \frac{x_1}{\sqrt[D]{\prod_{i=1}^D x_i}} \quad ,$$

wobei y_1 als zentrierter log-Verhältnis Koeffizient (centered logratio (clr) coefficient) bezeichnet wird und $\sqrt[D]{\prod_{i=1}^D x_i}$ dem geometrischen Mittel \bar{x}_{geom} entspricht.

Nun kann man aber auch die relativen Informationen der anderen Variablen ausdrücken und man erhält alle relevanten paarweisen log-Verhältnisse als

$$\ln \frac{x_1}{x_2}, \dots, \ln \frac{x_1}{x_D}, \ln \frac{x_2}{x_3}, \dots, \ln \frac{x_2}{x_D}, \dots, \ln \frac{x_{D-1}}{x_D} \quad .$$

Daraus ergeben sich die clr-Koeffizienten

$$\mathbf{y} = \text{clr}(\mathbf{x}) = (y_1, \dots, y_D)^T = \left(\ln \frac{x_1}{\sqrt[D]{\prod_{i=1}^D x_i}}, \dots, \ln \frac{x_D}{\sqrt[D]{\prod_{i=1}^D x_i}} \right)^T.$$

Aufgrund der Logarithmengesetze erhalten wir, dass

$$y_1 + y_2 + \dots + y_D = 0,$$

was bedeutet, dass die Koeffizienten y_i , $i = 1, \dots, D$ linear abhängig sind.

In R wurde für die Berechnung der clr-Koeffizienten die Funktion `cenLR()` aus dem Paket `robCompositions` verwendet.

2.2 Isometrische log-Verhältnis Transformation (isometric logratio (ilr) transformation)

Aufgrund möglicher Ausreißer in den Daten, wird auf die Compositional Data in weiterer Folge robuste Hauptkomponentenanalyse angewandt. Dazu wird anstatt der Varianz-Kovarianzmatrix ein robuster Schätzer, in diesem Fall der MCD-Schätzer (Minimum Covariance Determinant), verwendet [Rousseeuw and van Driessen, 1999]. Da der MCD-Schätzer jedoch lineare Unabhängigkeit der Variablen fordert, kann er für clr-Koeffizienten nicht verwendet werden. Aus diesem Grund wird hierbei eine andere Transformation der Daten, die ilr-Transformation, verwendet. Die sogenannten ilr-Koordinaten bilden dann eine Orthonormalbasis in der Hyperebene der clr-Koeffizienten, wobei es für die Bildung dieser Orthonormalbasis unendlich viele verschiedene Möglichkeiten gibt [Filzmoser et al., 2018].

Die Wahl einer bestimmten Basis ergibt

$$\text{ilr}(\mathbf{x}) = \mathbf{z} = (z_1, \dots, z_{D-1})^T$$

mit

$$z_j = \sqrt{\frac{D-1}{D-j+1}} \ln \frac{x_j}{\sqrt[D-j]{\prod_{k=j+1}^D x_k}} \quad \text{für } j = 1, \dots, D-1,$$

siehe [Fišerová and Hron, 2011].

Die erste Koordinate z_1 wird als Pivot gewählt und ist proportional zum clr-Koeffizienten y_1 ,

$$z_1 = \sqrt{\frac{D-1}{D}} \ln \frac{x_1}{\sqrt[D-1]{\prod_{k=2}^D x_k}} = \sqrt{\frac{1}{D(D-1)}} \left(\ln \frac{x_1}{x_2}, \ln \frac{x_1}{x_3}, \dots, \ln \frac{x_1}{x_D} \right) = \sqrt{\frac{1}{D(D-1)}} y_1.$$

2.3 Hauptkomponentenanalyse

Sei nun X eine Datenmatrix mit n Beobachtungen (Zeilen) der D kompositionellen Anteile (Spalten). Dann wird die ilr-Transformation auf jede Zeile von X angewendet, und es ergibt sich die Matrix Z der Dimension $n \times (D - 1)$ der ilr-Koordinaten. Um robuste Hauptkomponenten zu erhalten wird zuerst die Kovarianzmatrix \mathbf{C}_{MCD} der Koordinaten Z mit dem MCD-Schätzer bestimmt.

Die Ladungsmatrix (*loadings*) erhält man durch Eigenwertzerlegung dieser Kovarianzmatrix,

$$\mathbf{C}_{MCD} = \mathbf{W}_{MCD} \mathbf{D}_{MCD} \mathbf{W}_{MCD}^T ,$$

wobei \mathbf{W}_{MCD} die Matrix der Eigenvektoren, also die Ladungsmatrix, und \mathbf{D}_{MCD} eine Diagonalmatrix mit den Eigenwerten ist.

Die Werte der Hauptkomponenten (*scores*) erhält man, indem man zuerst die Matrix \mathbf{Z} der ilr-Koeffizienten spaltenweise robust mit der MCD Lokationsschätzung zentriert, wir schreiben dann \mathbf{Z}_{MCD} . Die *scores* sind dann

$$\mathbf{Z}_{MCD}^* = \mathbf{Z}_{MCD} \mathbf{W}_{MCD} .$$

Die *loadings* der Hauptkomponentenanalyse werden wieder zu clr-Koeffizienten transformiert, da sich die restlichen Koeffizienten z_j , $j = 2, \dots, D - 1$ in einem Orthonormalraum von clr-Koeffizienten befinden und die Interpretation sonst schwierig wäre. Die *scores* müssen nicht mehr transformiert werden, da sie, wenn sie Singularwerten ungleich Null entsprechen, in ilr und clr gleich sind [Filzmoser et al., 2018].

3 Resultate

3.1 CP-Plots der clr-Koeffizienten

Um die Verteilung der clr-Koeffizienten zu sehen, wurden CP-Plots (cumulative probability plots - Diagramme der kumulierten Wahrscheinlichkeit) erstellt. Dabei wird die y-Achse auf Wahrscheinlichkeiten der Standardnormalverteilung anstatt Quantile skaliert und auf der x-Achse werden die clr-Koeffizienten aufgetragen. Das dadurch entstandene Diagramm ist bis auf die Skalierung genau gleich wie das Quantil-Quantil-Diagramm (QQ-plot) [Reimann et al., 2008]. Zusätzlich wurden in die CP-Plots noch bestimmte Quantile mittels vertikaler Linien eingezeichnet. Die Werte in den dadurch entstehenden Intervallen werden auch farbleich voneinander unterschieden. In R wurde dafür die Funktion `my.qpplot.das()`, eine leicht veränderte Version der Funktion `qpplot.das()` aus dem Paket `StatDA` verwendet, siehe Anhang.

In Abbildung 5 sieht man den CP-Plot für die clr-Werte von Aluminium.

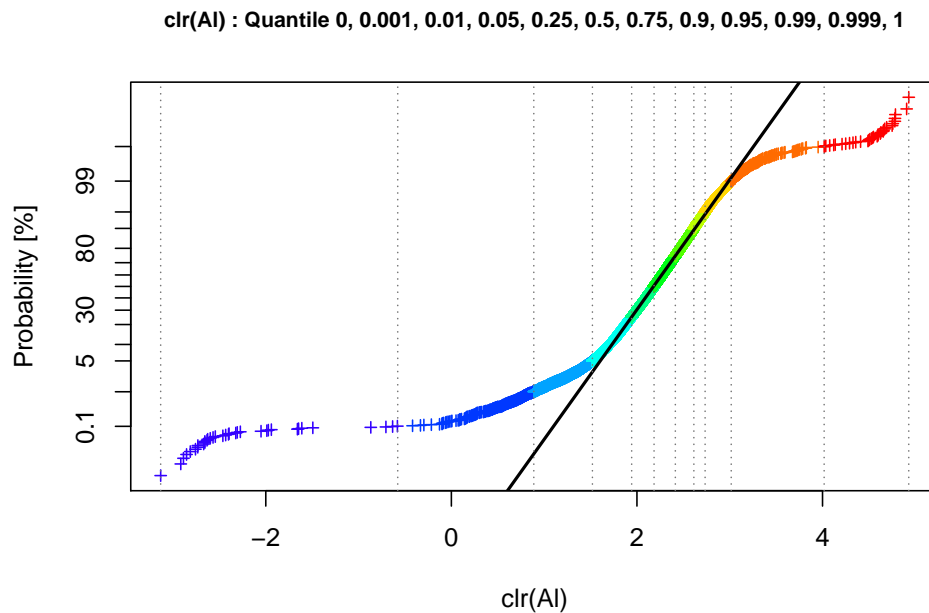


Abbildung 5: Verteilung der clr-Werte von Aluminium

Die Quantile entsprechend der vertikalen Linien für die clr-Werte der Elemente wurden so gewählt, dass Besonderheiten, wie Brüche oder starke Veränderungen in der Verteilung, ersichtlich sind. Die dadurch definierten unterschiedlichen Farben werden auch später in den Karten so verwendet. So will man zum Beispiel die Tails der Verteilung, die nur aus einem kleinen Anteil der Daten bestehen, später auch in der Karte grafisch sichtbar machen, da dies auf geologische Besonderheiten hinweisen könnte. Deshalb wurden auch nicht für alle Elemente dieselben Quantile gewählt.

3.2 Flächenkarten der clr-Koeffizienten

Für die Flächenkarten wurden die clr-Werte der einzelnen Elemente jeweils über die Fläche von Österreich interpoliert und anhand der Quantile eingefärbt. Als Interpolationsmethode wurde die R Funktion `mba.surf()` aus dem Paket `MBA` gewählt, die spline-Interpolation durchführt, siehe [Lee et al., 1997]. Dadurch entsteht eine durchgehende Struktur der Daten. Zusätzlich wurden zum Vergleich Flächenkarten für die absoluten Werte nach demselben Prinzip mit denselben Quantilen erstellt. Für Details über das Erstellen von Flächenkarten, siehe [Reimann et al., 2008].

In R wurde für das Erstellen der Flächenkarten die Funktion `my.SmoothLegend()`, eine leichte Abwandlung der Funktion `SmoothLegend()` aus dem Paket `StatDA` verwendet. Der R Code ist im Anhang.

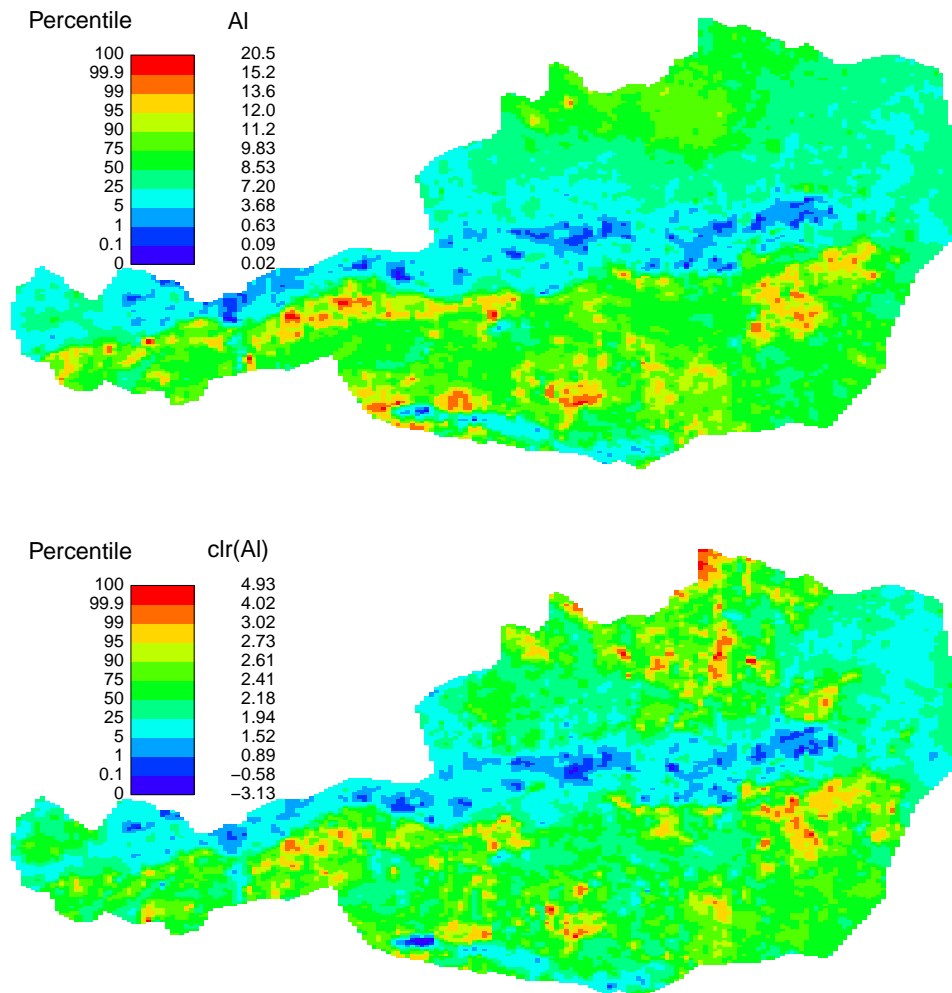


Abbildung 6: Flächenkarten der absoluten Werte (oben) und der clr-Werte (unten) für Aluminium

Um die Karte der clr-Koeffizienten zu interpretieren, vergleicht man die Werte mit dem geometrischen Mittel. Liegt der Wert weit unter dem geometrischen Mittel, ist die Variable (in diesem Fall Aluminium) in der Komposition *unterrepräsentiert*. Dies entspricht dann der Farbe Blau. Liegt der Wert weit über dem geometrischen Mittel, ist die Variable, also Aluminium, *dominant* in der Komposition, was der Farbe Rot entspricht.

Betrachtet man die Flächenkarten der absoluten und relativen Werte für Aluminium, kann man Unterschiede in der Struktur erkennen. In der Gegend von Brand-Nagelberg (Bezirk Gmünd, Niederösterreich) zum Beispiel ist Aluminium dominant gegenüber dem mittleren Verhalten der Elemente in der Komposition, obwohl der absolute Wert nicht herausragend hoch ist.

3.2.1 Auswirkung schlechter Datenqualität auf clr-Karten

Wir wollen nun noch wissen, ob sich schlechte Datenqualität auf die clr-Karten auswirkt. Sieht man sich Histogramme der Spurenelemente Arsen (As), Antimon (Sb), Uran (U), und Wolfram (W) an, erkennt man, dass sie einen Peak circa bei Null haben. Dies beruht auf folgendem Problem: Da manche Elemente schwieriger zu messen sind als andere, gibt es unterschiedliche Nachweisgrenzen. Durch die ständige Verbesserung der Messinstrumente sind auch diese Nachweisgrenzen über die Jahre hinweg gesunken. Doch wie geht man mit Proben vor, in denen manche Elemente nicht nachgewiesen werden können? In den vorliegenden Daten wurde dann der Wert immer auf die Hälfte der Nachweisgrenze gesetzt. Dadurch entstehen bei Elementen, die schwerer nachweisbar sind, viele ähnliche Werte.

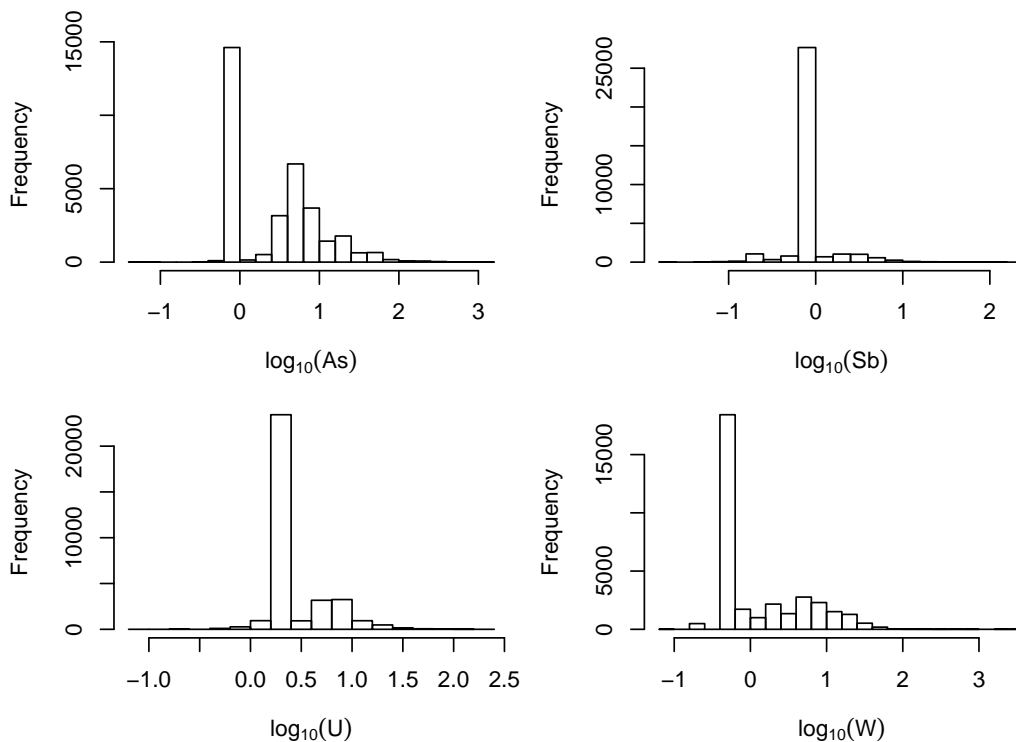


Abbildung 7: Histogramme problematischer Spurenelemente

Da man dadurch keine MCD-Kovarianzmatrix berechnen kann, muss man diese Variablen für robuste Hauptkomponentenanalyse aus dem Datensatz entfernen. Nun wollen wir aber noch wissen, ob und wie stark sich diese Variablen auf die clr-Karten auswirken. Dafür plotten wir die Flächenkarte der clr-Werte für Barium (Ba) einmal mit und einmal ohne diesen vier Elementen.

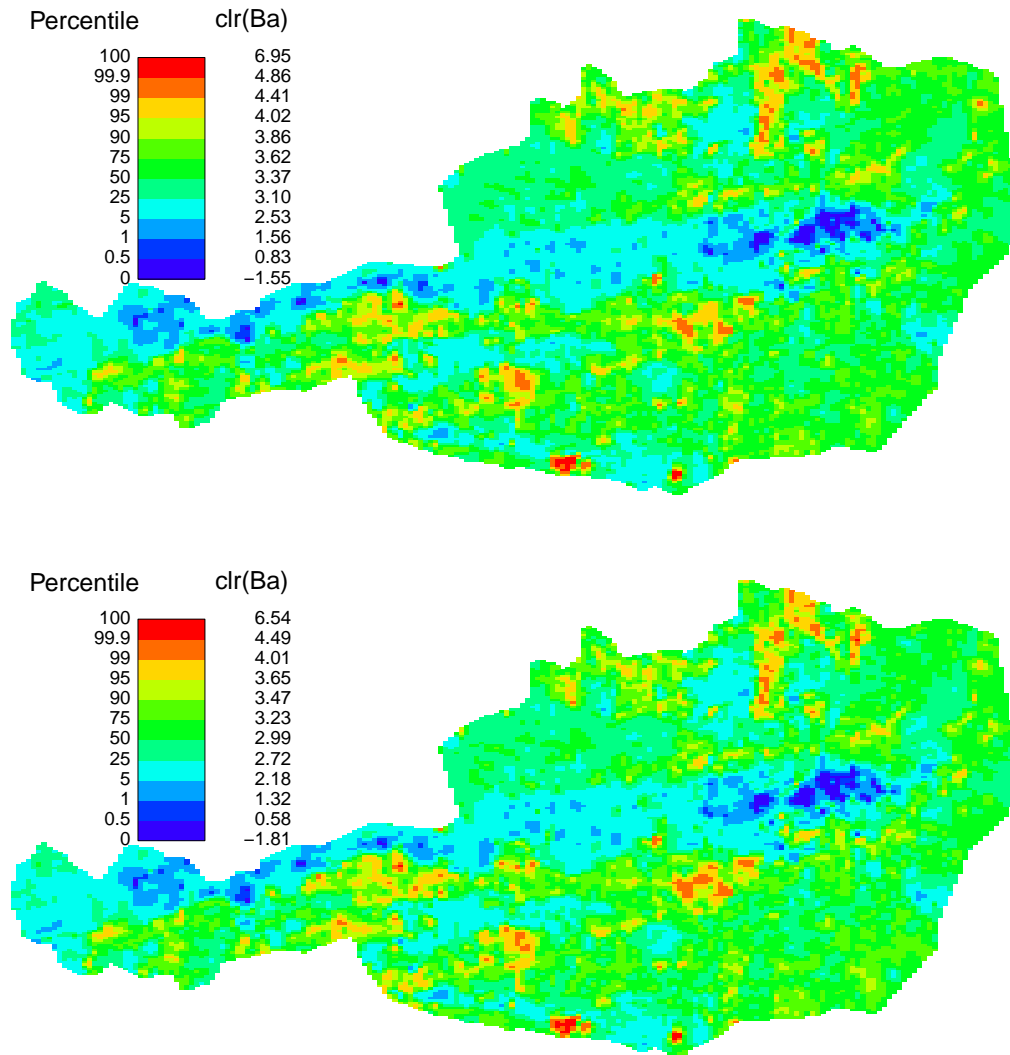


Abbildung 8: Flächenkarten für clr(Ba) mit (oben) und ohne (unten) problematischen Spurenelementen

Wie in den obigen Karten zu sehen, gibt es kaum strukturelle Unterschiede. Arsen, Antimon, Uran, und Wolfram wurden trotzdem ganz aus dem Datensatz entfernt, da es bei solch schlechter Qualität der Daten wenig Sinn macht, Flächenkarten für diese vier Elemente zu erstellen. Dies sind auch die einzigen Elemente mit schlechter Datenqualität.

3.3 Flächenkarten der geometrischen Mittel

Seien y_1 als die clr-Koeffizienten der Hauptelemente und y_2 als die clr-Koeffizienten der Spurenelemente (bereits ohne As, Sb, U, und W) bezeichnet. Dann sind die geometrischen Mittel der beiden Kompositionen $\bar{y}_{1_{geom}}$ und $\bar{y}_{2_{geom}}$, jeweils. Da wir die clr-Koeffizienten der einzelnen Elemente immer mit dem geometrischen Mittel vergleichen, ist es von Interesse, auch dieses zu plotten. So bekommt man einen Überblick über die Grundstruktur der Daten.

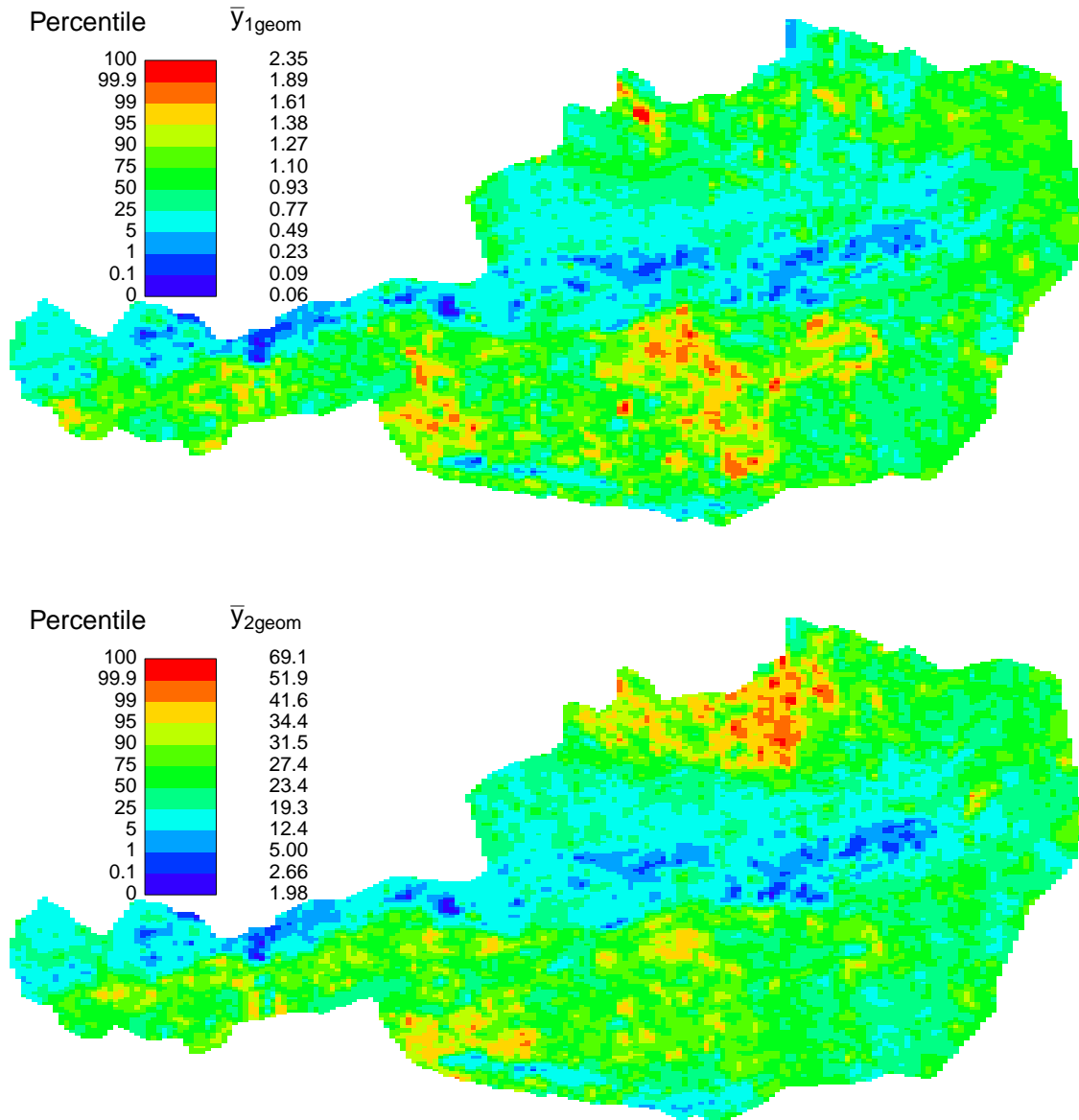


Abbildung 9: Flächenkarten der geometrischen Mittel der Hauptelemente (oben) und Spurenelemente (unten)

3.4 Hauptkomponentenanalyse

Wie oben bereits erwähnt, wurde für die Hauptkomponentenanalyse (*PCA*) der *clr*-Koeffizienten ein robuster Ansatz gewählt. Um einen Vergleich zur *PCA* von absoluten Werten zu haben, wurde auch diese (robust) durchgeführt (in R: `pcaCoDa()` aus `robCompositions()` und `princomp()` aus `stats`, jeweils).

Da die absoluten Werte der Haupt- und Spurenelemente sehr schief verteilt sind, wurden sie für die Hauptkomponentenanalyse \log_{10} -transformiert. Die Schiefe der Daten sieht man bei den Hauptelementen am deutlichsten bei Mangan (Mn).

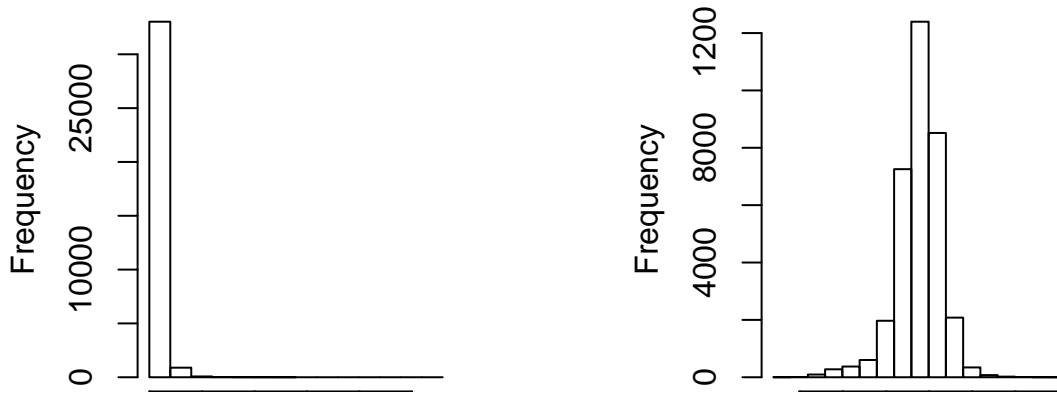


Abbildung 10: Histogramme Vergleich: Mangan vs. $\log(\text{Mangan})$

Die Anzahl der relevanten Hauptkomponenten wird meistens dadurch bestimmt, wie viele Komponenten benötigt werden, um etwa 80% der erklärten Varianz abzudecken. In R wird dieser Wert durch eine `summary()` des PCA-Objektes ausgegeben. `summary()` gibt zusätzlich zur Summe der erklärten Varianz (*cumulative proportion*) noch die Standardabweichung (*standard deviation*) und die erklärte Varianz (*proportion of variance*) der einzelnen Hauptkomponenten aus.

	Comp.1	Comp.2	Comp.3	Comp.4	Comp.5
Standard deviation	1.85	1.50	1.01	0.83	0.75
Proportion of Variance	0.38	0.25	0.11	0.08	0.06
Cumulative Proportion	0.38	0.63	0.74	0.82	0.88

Tabelle 1: Erklärte Varianz der Hauptkomponenten der \log -transformierten Hauptelemente

Um die absoluten Werte der \log -transformierten Hauptelemente zu beschreiben, wären also 4 Hauptkomponenten hinreichend.

	Comp.1	Comp.2	Comp.3	Comp.4	Comp.5
Standard deviation	2.48	1.72	1.43	1.27	1.13
Proportion of Variance	0.28	0.13	0.09	0.07	0.06
Cumulative Proportion	0.28	0.41	0.51	0.58	0.64

	Comp.6	Comp.7	Comp.8	Comp.9	Comp.10
Standard deviation	1.03	0.95	0.90	0.87	0.81
Proportion of Variance	0.05	0.04	0.04	0.04	0.03
Cumulative Proportion	0.68	0.73	0.76	0.80	0.83

Tabelle 2: Erklärte Varianz der Hauptkomponenten der log-transformierten Spurenelemente

Für die absoluten Werte der log-transformierten Spurenelemente benötigt man etwa 9 oder 10 Hauptkomponenten.

	Comp.1	Comp.2	Comp.3	Comp.4	Comp.5
Standard deviation	0.95	0.54	0.44	0.39	0.33
Proportion of Variance	0.51	0.17	0.11	0.08	0.06
Cumulative Proportion	0.51	0.68	0.79	0.87	0.93

Tabelle 3: Erklärte Varianz der Hauptkomponenten der clr-transformierten Hauptelemente

Bei den clr-transformierten Werten der Hauptelemente wäre man mit 4 Hauptkomponenten schon bei etwa 87% der erklärten Varianz.

	Comp.1	Comp.2	Comp.3	Comp.4	Comp.5
Standard deviation	0.97	0.83	0.70	0.57	0.54
Proportion of Variance	0.22	0.16	0.11	0.07	0.07
Cumulative Proportion	0.22	0.38	0.49	0.56	0.63

	Comp.6	Comp.7	Comp.8	Comp.9	Comp.10
Standard deviation	0.47	0.45	0.42	0.42	0.39
Proportion of Variance	0.05	0.05	0.04	0.04	0.04
Cumulative Proportion	0.68	0.73	0.77	0.81	0.85

Tabelle 4: Erklärte Varianz der Hauptkomponenten der clr-transformierten Spurenelemente

Die clr-transformierten Werte der Spurenelemente wären mit 9 Hauptkomponenten hinreichend erklärt.

3.4.1 Biplots

Eine gute Möglichkeit, Variablen und Beobachtungen in einem Plot darzustellen, bieten Biplots. Das “Bi” steht in diesem Fall nicht für die Dimension 2, sondern eben für die Darstellung von Variablen und Beobachtungen in einem Plot. Dabei werden nur die ersten zwei Hauptkomponenten dargestellt. Es wird also angenommen, dass diese zur schematischen Darstellung der Daten genügen [Filzmoser et al., 2018].

Der Kosinus des Biplots ist im absoluten und CoDa Fall etwas unterschiedlich zu verstehen: Während der Winkel der Pfeile zweier Variablen bei absoluten Werten die Korrelation ebendieser anzeigt, $\cos(90^\circ) = \text{unkorreliert}$, hängt die Beziehung zweier Variablen bei CoDa von der Diastanz der Pfeilspitzen ab (je näher beieinander, desto mehr stehen sie in Beziehung zueinander). Der Einfluss der Variablen auf die Hauptkomponenten ist in beiden Fällen gleich zu interpretieren.

In den Biplots kommt es bei logarithmierten Daten zu dem besonderen Effekt, dass alle Variablen “in eine Richtung” ausgerichtet sind, sich also nur auf einer Hälfte des Kreises befinden. Zum Vergleich sieht man unterhalb einen Biplot für PCA ohne und einen Biplot für PCA mit \log_{10} -Transformation (beide nicht robust).

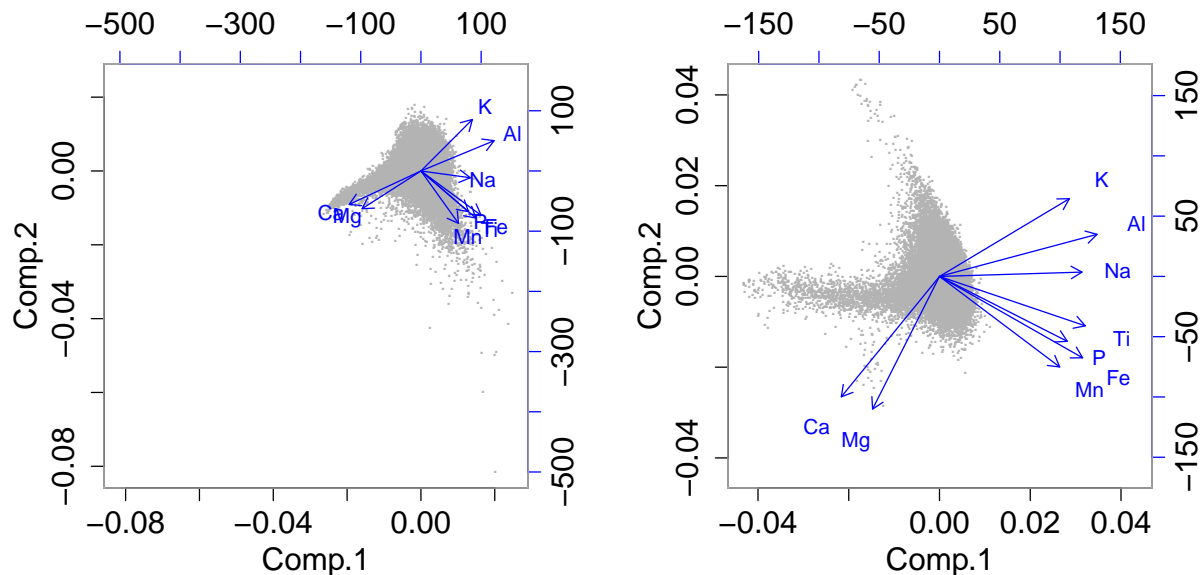


Abbildung 11: Biplots Vergleich: PCA (links) vs. PCA log-transformierter Daten (rechts)

Es stellt sich nun noch die Frage, ob und wie sich die Biplots der Hauptkomponentenanalyse von absoluten Werten und der Hauptkomponentenanalyse von Compositional Data unterscheiden. Dies wird zuerst für die Hauptelemente untersucht.

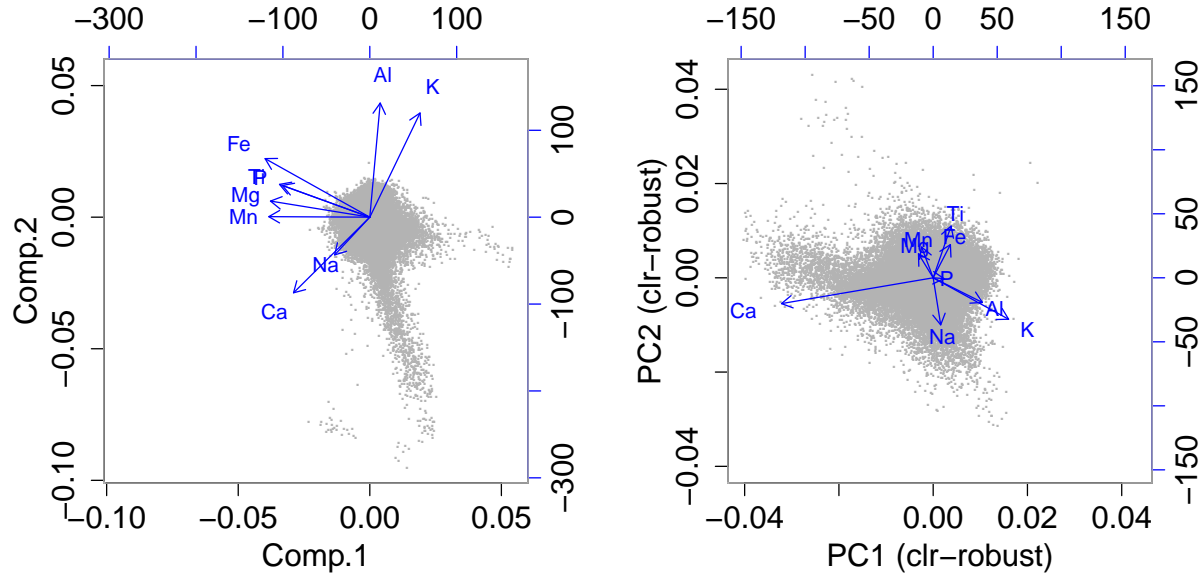


Abbildung 12: Biplots für die log-transformierten Werte (links) und für die clr-Koeffizienten (rechts) der Hauptelemente

Offensichtlich hat Kalzium (Ca) in der ersten Hauptkomponente der clr-transformierten Daten einen stark negativen und in der zweiten Hauptkomponente kaum einen Einfluss. Bei den logarithmierten, absoluten Daten hat Kalzium auf beide Hauptkomponenten etwa gleich viel negativen Einfluss. Große Unterschiede merkt man zum Beispiel auch bei Kalium (K). Während es bei den logarithmierten, absoluten Daten stark positiven Einfluss auf die zweite Hauptkomponente hat, ist dieser Einfluss bei den clr-transformierten Daten negativ. Bei den absoluten Werten sind Kalzium (Ca) und Natrium (Na) stark korreliert, während die Beziehung der beiden clr-transformierten Variablen zueinander schwach ist.

Nun zu den Biplots der Spurenelemente.

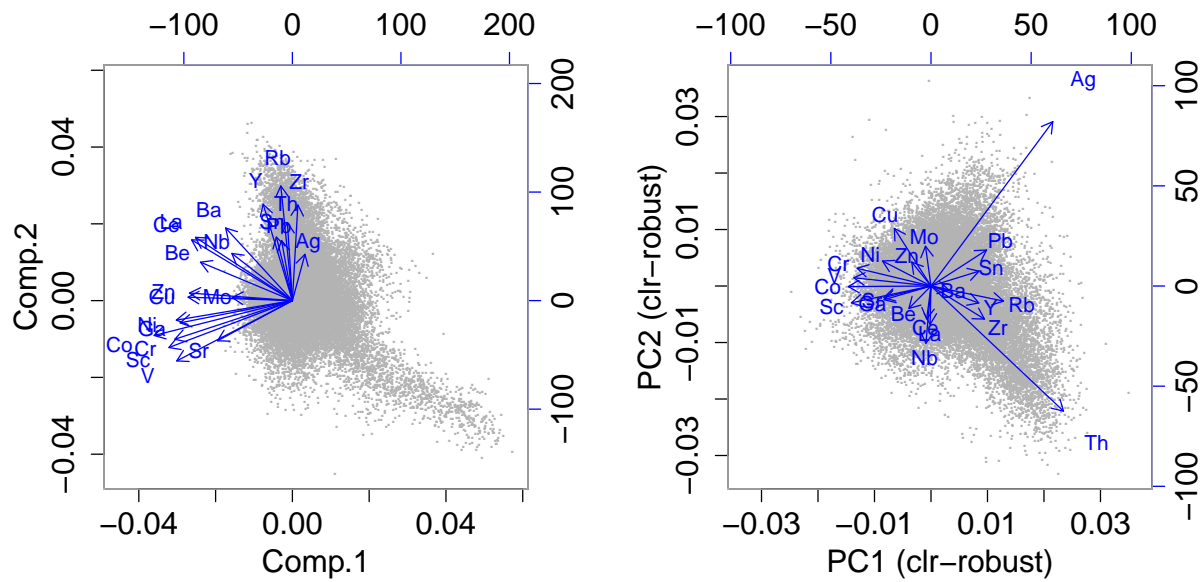


Abbildung 13: Biplots für die log-transformierten Werte (links) und für die clr-Koeffizienten (rechts) der Spurenelemente

Auch hier sieht man wieder deutliche Unterschiede beim Einfluss der Variablen auf die Hauptkomponenten. Während zum Beispiel Thorium (Th) bei den absoluten Werten etwas positiven Einfluss auf die zweite Hauptkomponente hat, ist dieser für Compositional Data stark negativ. Auch sind im absoluten Fall Silber (Ag) und Thorium (Th) stark korreliert, die Beziehung der beiden Variablen zueinander für CoDa ist allerdings schwach.

3.4.2 Säulendiagramme der Ladungsmatrizen (*loadings*)

Den Einfluss der einzelnen Elemente auf die Hauptkomponenten, der in den Biplots für die ersten beiden Hauptkomponenten bereits ersichtlich war, sieht man in Säulendiagrammen der *loadings* auch ganz deutlich. Der Einfachheit halber werden hier nur die *loadings* der ersten vier Hauptkomponenten abgebildet.

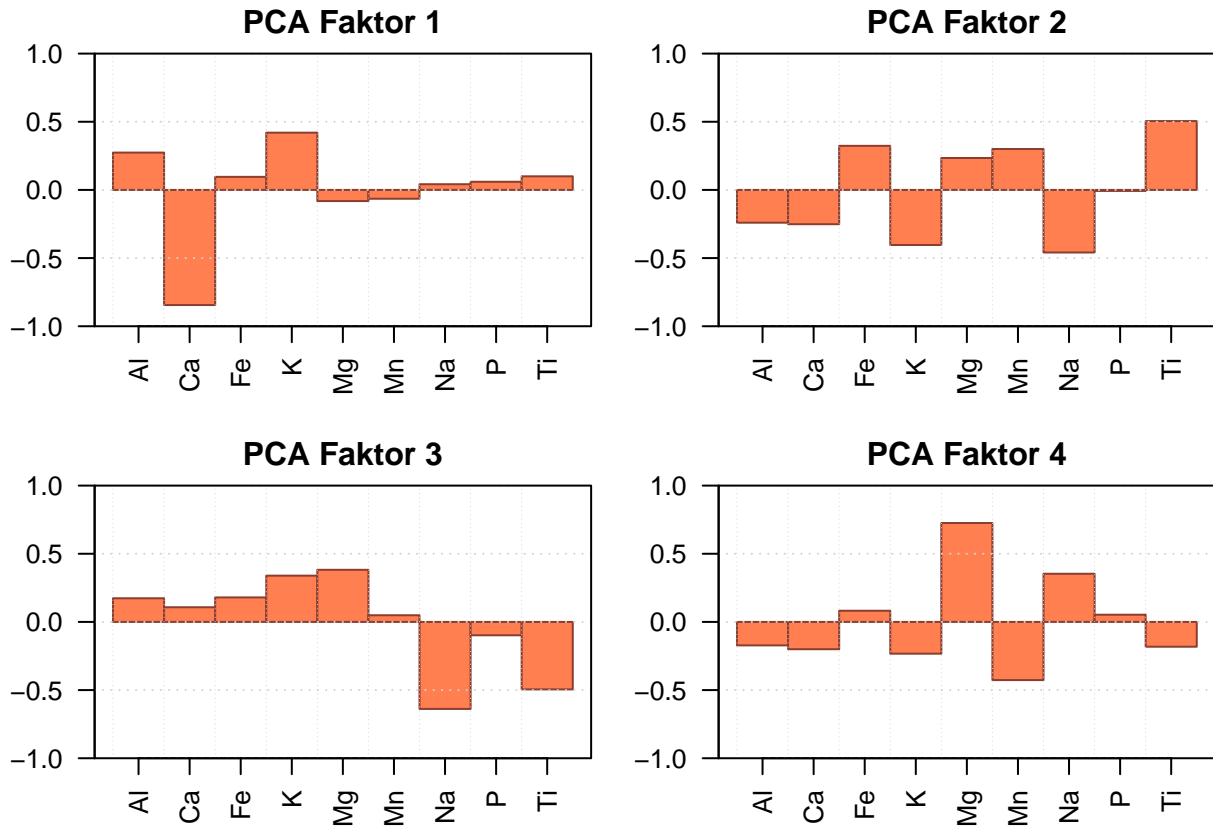


Abbildung 14: PCA *loadings* für clr-transformierte Hauptelemente

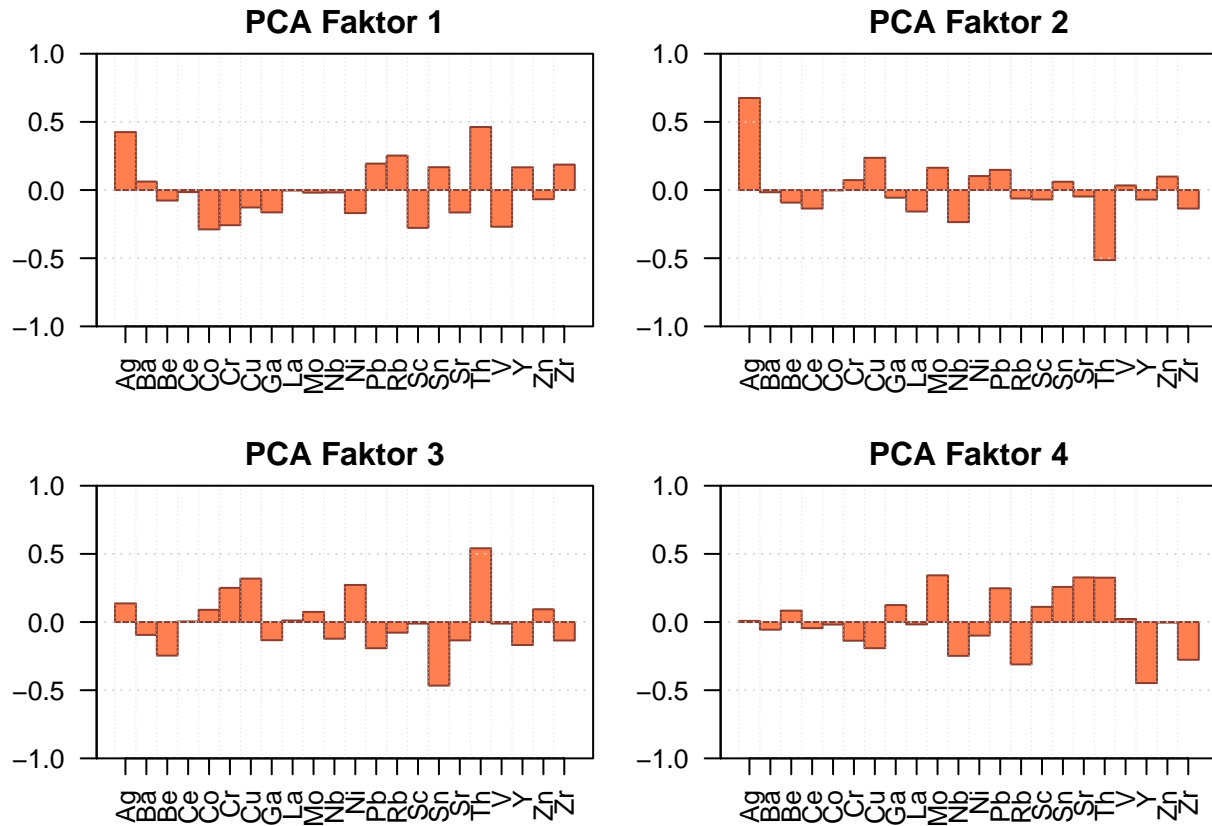


Abbildung 15: PCA *loadings* für clr-transformierte Spurenelemente

3.5 CP-Plots der PCA-scores

Möchte man Flächenkarten der Werte der Hauptkomponenten erstellen, braucht man für die Farbabstufung wieder sinnvolle Quantile. Dafür wurden wieder CP-Plots erstellt. In der untenstehenden Grafik sieht man den CP-Plot der ersten Hauptkomponente der clr-transformierten Hauptelemente.

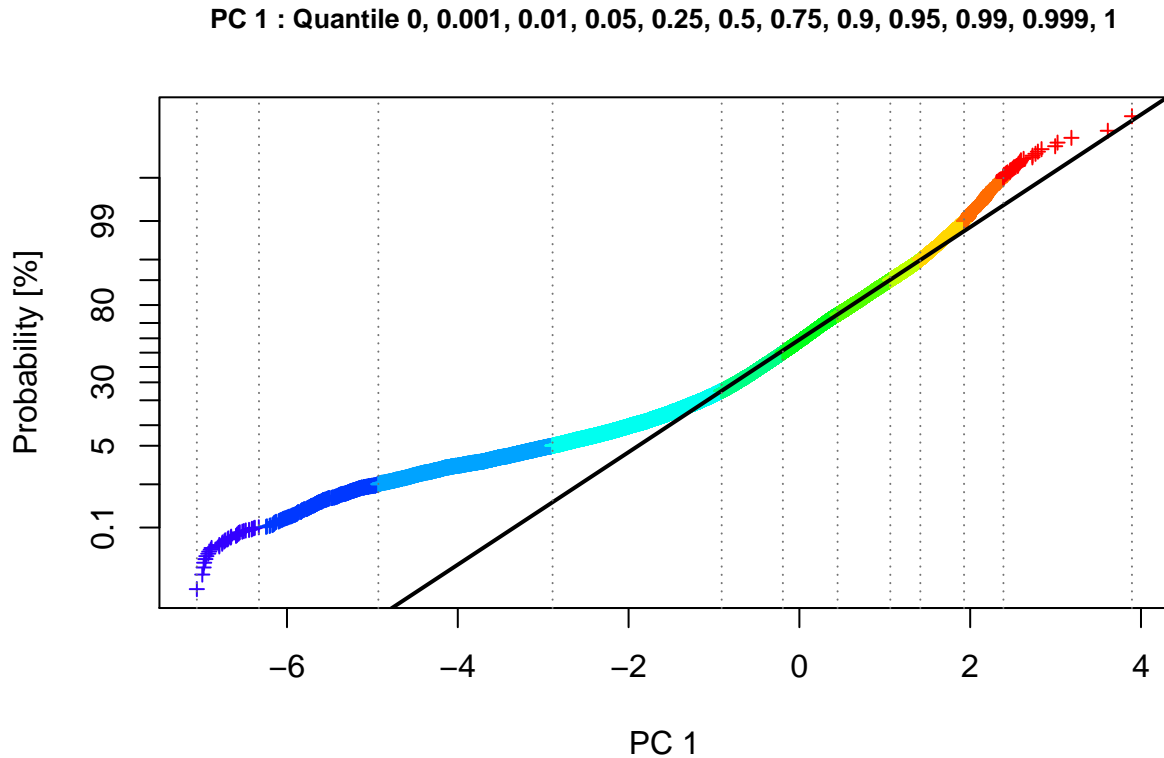


Abbildung 16: Verteilung der 1. Hauptkomponente für die clr-transformierten Hauptelemente

In diesem Fall konnten für alle Hauptkomponenten der clr-transformierten Haupt- und Spurenelemente dieselben Quantile genommen werden, da sich keine der Verteilungen stark von den anderen unterschieden hat.

Die Quantile sind somit 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1.

3.6 Flächenkarten der PCA-scores

Wie bereits vorher für die clr-Koeffizienten, wurden auch Flächenkarten für die *scores* der Hauptkomponentenanalyse erstellt. Abbildung 17 zeigt den Unterschied in der Struktur der ersten Hauptkomponente der PCA von absoluten Werten und der ersten Hauptkomponente der PCA von clr-Koeffizienten.

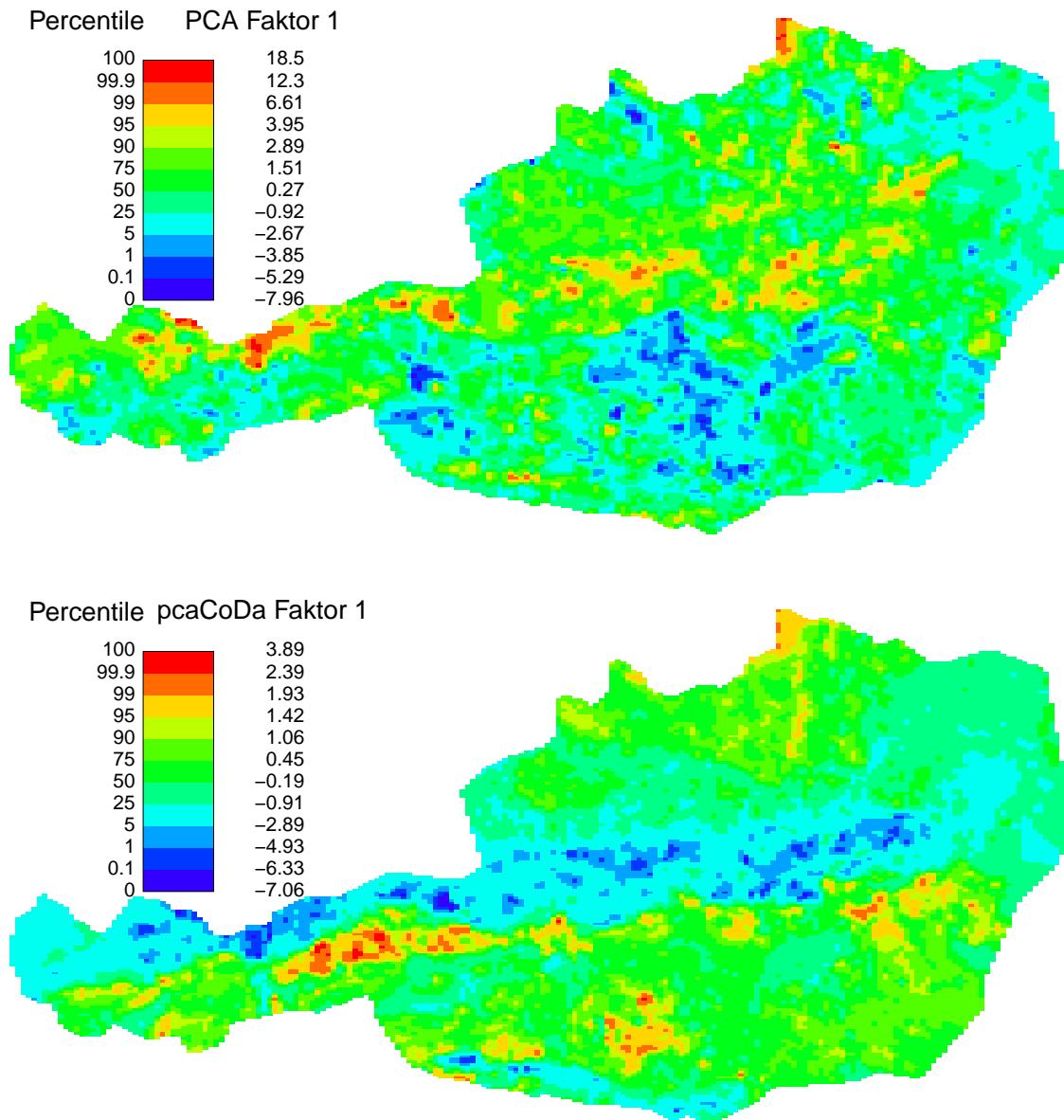


Abbildung 17: Flächenkarte der PCA-scores für log-transformierte Werte (oben) und clr-Koeffizienten (unten)

4 Zusammenfassung

Bei der Kartierung der Element-Vorkommen in Bach- und Flusssedimenten wurde hier der Fokus auf die relative Information gelegt. Es wurden also nicht die Konzentrationsdaten der einzelnen Elemente direkt kartiert, sondern die Information, die in den Verhältnissen der Elemente zueinander enthalten ist. Im Sinne von Compositional Data Analysis ist das somit die Information der centered logratio (clr) Koeffizienten für die Elemente.

Um die Information möglichst gut in Flächenkarten darstellen zu können, wurden anhand von CP-Plots Brüche (Quantile) ermittelt, die die Besonderheiten der clr-Koeffizienten reflektieren. Diese Brüche werden in den Flächenkarten durch unterschiedliche Farben dargestellt.

Im Vergleich zur absoluten Information resultiert diese relative Information bei vielen Elementen in sehr unterschiedlichen Flächenkarten. Tatsächlich fließen bei den clr Karten alle anderen Elemente der Komposition (in Form des geometrischen Mittels) ein, und man somit von der Kartierung multivariater Information sprechen, im Unterschied zu rein univariater Information bei den absoluten Werten.

Auch bei der Hauptkomponentenanalyse (PCA) zeigt sich ein großer Unterschied zwischen log-transformierten Daten und Daten nach einer ilr-Transformation. Nachdem hier viele ungewöhnliche Werte vorliegen (ev. verursacht durch Werte unter der Nachweisgrenze), wurde robuste PCA verwendet. Die resultierenden *loadings* und *scores* wurden mittels Biplot verglichen, es wurden aber auch zur Erleichterung bei der Interpretation die *loadings* mit Balkendiagrammen dargestellt, und die *scores* mit Flächenkarten, wobei wieder auf geeignete Quantile Wert gelegt wurde.

Zusammenfassend kann man sagen, dass die kompositionelle Sicht neue interessante Einblicke geben kann.

5 Anhang

5.1 my.qpplot.das()

```
my.qpplot.das <-
function (x, qdist = qnorm, probs = NULL, logx = FALSE, cex.lab = 1,
        xlab = NULL, ylab = "Probability [%]", line = TRUE, lwd = 2,
        pch = 3, logfinetick = c(10), logfinelab = c(10), cex = 0.7,
        xlim = NULL, ylim = NULL, gridy = TRUE, add.plot = FALSE,
        col = 1, ...)
{
  DOTARGS <- as.list(substitute(list(...)))[-1]
  DOTARGS <- paste(names(DOTARGS), DOTARGS, sep = "=", collapse = ", ")
  x <- sort(x)
  QNAME <- deparse(substitute(qdist))
  qdist <- match.fun(qdist)
  y <- qdist(ppoints(length(x)), ...)
  if (is.null(probs)) {
    probs <- c(0.01, 0.05, seq(0.1, 0.9, by = 0.1), 0.95,
              0.99)
    if (length(x) >= 500)
      probs <- c(0.001, probs, 0.999)
  }
  qprobs <- qdist(probs, ...)
  if (!add.plot) {
    if (is.null(ylim))
      plot(x, y, axes = FALSE, type = "n", ylim = range(c(y,
        qprobs)), xlab = xlab, ylab = ylab, cex.lab = cex.lab,
        xlim = xlim)
    else plot(x, y, axes = FALSE, type = "n", ylim = ylim,
      xlab = xlab, ylab = ylab, cex.lab = cex.lab, xlim = xlim)
    box()
  }
  if (gridy) {
    abline(h = qprobs, lty = 3, col = gray(0.5))
  }
  if (logx) {
    axis(1, at = log10(alog <- sort(c((10^(-50:50)) %*%
      t(logfinelab))))), labels = alog)
    # abline(v = log10(sort(c((10^(-50:50)) %*% t(logfinetick))))),
    #       lty = 3, col = gray(0.5))
  }
  else {
```

```

    axis(1)
    # abline(v = axTicks(1), lty = 3, col = gray(0.5))
  }
  axis(2, at = qprobs, labels = 100 * probs)
  points(x, y, pch = pch, cex = cex, col = col)
  if (line) {
    xl <- quantile(x, c(0.25, 0.75))
    yl <- qdist(c(0.25, 0.75), ...)
    slope <- diff(yl)/diff(xl)
    int <- yl[1] - slope * xl[1]
    abline(int, slope, col = 1, lwd = lwd)
  }
}

```

5.2 my.SmoothLegend()

```

my.SmoothLegend <-
function (X, Y, z, resol = 200, type = "percentile", whichcol = "gray",
  qtiles = c(0, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 1), borders = NULL,
  leg.xpos.min = 780000, leg.xpos.max = 8e+05, leg.ypos.min = 7760000,
  leg.ypos.max = 7870000, leg.title = "mg/kg", leg.title.cex = 0.7,
  leg.numb.cex = 0.7, leg.round = 2, leg.wid = 4, leg.numb.xshift = 70000,
  leg.perc.xshift = 40000, leg.perc.yshift = 20000, tit.xshift = 35000)
{
  f <- diff(range(X))/diff(range(Y))
  z.spl <- mba.surf(cbind(X, Y, z), no.X = resol, no.Y = resol,
    n = 1, m = f, extend = TRUE)
  if (is.null(borders)) {
    whichdraw <- matrix(as.vector(z.spl$xyz.est$z), ncol = resol)
  }
  else {
    bord <- get(eval(borders))
    in.poly = polygrid(z.spl$xyz.est$x, z.spl$xyz.est$y,
      borders = cbind(bord@coords[,1], bord@coords[,2]),
      vec.inout = TRUE)
    in.poly$vec.inout[!in.poly$vec.inout] <- NA
    whichdraw = matrix(as.vector(z.spl$xyz.est$z) * in.poly$vec.inout,
      ncol = resol)
  }
  if (type == "contin")
    qtiles = seq(from = 0, to = 1, by = 0.01)
  im.br = quantile(whichdraw[!is.na(whichdraw)], qtiles)
  if (whichcol == "gray")

```

```

    im.col = gray(seq(from = 0.1, to = 0.9, length = length(im.br) -
1))
else if (whichcol == "rainbow")
    im.col = rev(rainbow(length(im.br) - 1, start = 0, end = 0.7))
else if (whichcol == "rainbow.trunc")
    im.col = rev(rainbow(length(im.br) - 1, start = 0, end = 0.4))
else if (whichcol == "rainbow.inv")
    im.col = rainbow(length(im.br) - 1, start = 0, end = 0.7)
else if (whichcol == "terrain")
    im.col = terrain.colors(length(im.br) - 1)
else if (whichcol == "topo")
    im.col = topo.colors(length(im.br) - 1)
else stop("Your color scheme is not defined here!")
image(z.spl$xyz.est$x, z.spl$xyz.est$y, whichdraw, breaks = im.br,
col = im.col, add = TRUE)
if (type == "percentile") {
    lqperc = length(qtiles)
    selquan = qtiles * 100
}
else {
    lqperc = 5
    selquan = c(0, 25, 50, 75, 100)
}
#im.br = quantile(10^z, selquan/100)
im.br = quantile(z, selquan/100)
lqsel = length(qtiles)
leg.ypos = seq(from = leg.ypos.min, to = leg.ypos.max, length = lqsel)
rect(rep(leg.xpos.min, lqsel - 1), leg.ypos[1:(lqsel - 1)],
rep(leg.xpos.max, lqsel - 1), leg.ypos[2:(lqsel)], col = im.col,
border = FALSE)
rect(leg.xpos.min, leg.ypos[1], leg.xpos.max, leg.ypos[lqsel],
border = 1)
leg.ypos = seq(from = leg.ypos.min, to = leg.ypos.max, length = lqperc)
text(rep(leg.xpos.min, 8), leg.ypos, selquan, pos = 2,
cex = leg.numb.cex)
text(rep(leg.xpos.max + leg.numb.xshift, 8), leg.ypos,
roundpretty(im.br, leg.round), pos = 2, cex = leg.numb.cex)
text(leg.xpos.min - leg.perc.xshift, leg.ypos.max + leg.perc.yshift,
"Percentile", cex = leg.title.cex)
text(leg.xpos.max + tit.xshift, leg.ypos.max + leg.perc.yshift,
leg.title, cex = leg.title.cex)
invisible()
}

```

5.3 Digitale Datenlieferung

Die digitale Datenlieferung beinhaltet folgende Dateien:

- *clr-hauptelemente.csv*: Koordinaten der clr-Koeffizienten der Hauptelemente
- *clr-hauptelemente.rda*: Koordinaten der clr-Koeffizienten der Hauptelemente
- *clr-hauptelemente-pca-loadings.csv*: PCA loadings für clr-transformierte Hauptelemente
- *clr-hauptelemente-pca-loadings.rda*: PCA loadings für clr-transformierte Hauptelemente
- *clr-hauptelemente-pca-scores.csv*: Koordinaten der PCA scores für clr-transformierte Hauptelemente
- *clr-hauptelemente-pca-scores.rda*: Koordinaten der PCA scores für clr-transformierte Hauptelemente
- *clr-spurenelemente.csv*: Koordinaten der clr-Koeffizienten der Spurenelemente (ohne As, Sb, U, W)
- *clr-spurenelemente.rda*: Koordinaten der clr-Koeffizienten der Spurenelemente (ohne As, Sb, U, W)
- *clr-spurenelemente-pca-loadings.csv*: PCA loadings für clr-transformierte Spurenelemente
- *clr-spurenelemente-pca-loadings.rda*: PCA loadings für clr-transformierte Spurenelemente
- *clr-spurenelemente-pca-scores.csv*: Koordinaten der PCA scores für clr-transformierte Spurenelemente
- *clr-spurenelemente-pca-scores.rda*: Koordinaten der PCA scores für clr-transformierte Spurenelemente
- *Flaechenkarten_geom.pdf*: Flächenkarten der geometrischen Mittel für Haupt- und Spurenelemente (ohne As, Sb, U, W)
- *Flaechenkarten_Hauptelemente_absVSCoDa.pdf*: Flächenkarten der absoluten Werte der Hauptelemente vs. Flächenkarten der clr-transformierten Hauptelemente
- *Flaechenkarten_Hauptelemente_PCA_absVSCoDa.pdf*: Flächenkarten der Hauptkomponenten für robuste PCA der log-transformierten Hauptelemente vs. Flächenkarten der Hauptkomponenten für robuste PCA der clr-transformierten Hauptelemente
- *Flaechenkarten_Spurenelemente_absVSCoDa.pdf*: Flächenkarten der absoluten Werte der Spurenelemente vs. Flächenkarten der clr-transformierten Spurenelemente (mit As, Sb, U, W)
- *Flaechenkarten_Spurenelemente_absVSCoDa_excluded.pdf*: Flächenkarten der absoluten Werte der Spurenelemente vs. Flächenkarten der clr-transformierten Spurenelemente (ohne As, Sb, U, W)
- *Flaechenkarten_Spurenelemente_inclVSexcl.pdf*: Flächenkarten der clr-Koeffizienten mit vs. Flächenkarten der clr-Koeffizienten ohne As, Sb, U, W
- *Flaechenkarten_Spurenelemente_PCA_absVSCoDa.pdf*: Flächenkarten der Hauptkomponenten für robuste PCA der log-transformierten Spurenelemente vs. Flächenkarten der Hauptkomponenten für robuste PCA der clr-transformierten Spurenelemente (ohne As, Sb, U, W)
- *gba_iris_system.R*: verwendeter R-Code
- *hauptelemente-pca-loadings.csv*: PCA loadings der Hauptelemente
- *hauptelemente-pca-loadings.rda*: PCA loadings der Hauptelemente
- *hauptelemente-pca-scores.csv*: Koordinaten der PCA scores für Hauptelemente

- *hauptelemente-pca-scores.rda*: Koordinaten der PCA scores für Hauptelemente
- *IRIS_180_TU_subst.rda*: ursprüngliche Daten
- *IRIS_2019_CoDa_Bericht.pdf*: Bericht über die Ergebnisse
- *my.qpplot.das.R*: eigene Funktion, wird in *gba_iris_system.R* verwendet
- *my.SmoothLegend.R*: eigene Funktion, wird in *gba_iris_system.R* verwendet
- *PCA_Faktoren_Hauptelemente.pdf*: PCA loadings der clr-transformierten Hauptelemente
- *PCA_Faktoren_Spurenelemente.pdf*: PCA loadings der clr-transformierten Spurenelemente (ohne As, Sb, U, W)
- *Quantile_Hauptelemente.pdf*: QP-Plots der clr-transformierten Hauptelemente
- *Quantile_Hauptelemente_PCA.pdf*: QP-Plots der Hauptkomponenten für clr-transformierte Hauptelemente
- *Quantile_Spurenelemente.pdf*: QP-Plots der clr-transformierten Spurenelemente (mit As, Sb, U, W)
- *Quantile_Spurenelemente_excluded.pdf*: QP-Plots der clr-transformierten Spurenelemente (ohne As, Sb, U, W)
- *Quantile_Spurenelemente_PCA.pdf*: QP-Plots der Hauptkomponenten für clr-transformierte Spurenelemente (ohne As, Sb, U, W)
- *spurenelemente-pca-loadings.csv*: PCA loadings der Spurenelemente
- *spurenelemente-pca-loadings.rda*: PCA loadings der Spurenelemente
- *spurenelemente-pca-scores.csv*: Koordinaten der PCA scores für Spurenelemente
- *spurenelemente-pca-scores.rda*: Koordinaten der PCA scores für Spurenelemente

Literatur

- P. Filzmoser, K. Hron, and M. Templ. *Applied Compositional Data Analysis. With Worked Examples in R*. Springer Series in Statistics, Cham, Switzerland, 2018. ISBN 978-3-319-96422-5.
- E. Fišerová and K. Hron. On interpretation of orthonormal coordinates for compositional data. *Mathematical Geosciences*, 43(4):455–468, 2011.
- S. Lee, G. Wolberg, and S.Y. Shin. Scattered data interpolation with multilevel B-splines. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 3(3):228–244, 1997.
- H. Pirkl, A. Schedl, and S. Pfeiderer (Hrsg.). *Geochemischer Atlas von Österreich – Bundesweite Bach- und Flusssedimentgeochemie (1978–2010)*. Archiv für Lagerstättenforschung, Band 28, Wien, 2015. ISBN 978-3-85316-084-8.
- C. Reimann, P. Filzmoser, R.G. Garrett, and R. Dutter. *Statistical Data Analysis Explained: Applied Environmental Statistics with R*. Wiley, Chichester, 2008.
- P.J. Rousseeuw and K. van Driessen. A Fast Algorithm for the Minimum Covariance Determinant Estimator. *Technometrics*, 41(3):212–223, 1999.
- L. Weber and P. Lipiarski. Interaktives Rohstoffinformationssystem. <https://www.geologie.ac.at/services/webapplikationen/iris-interaktives-rohstoffinformationssystem>, 2019. [Online; Stand 30. August 2019].



BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG, WISSENSCHAFT & FORSCHUNG

GEOLOGISCHE BUNDESANSTALT

FA ROHSTOFFGEOLOGIE

Titel

Quantile der cl_r -Koeffizienten der Hauptelemente

Projekt

ÜLG-070 2019 IRIS-Online

Sachbearbeiter

Th. Filzmoser &
P. Filzmoser

Seiten

9

Datum

Sept. 2019

Datenbank



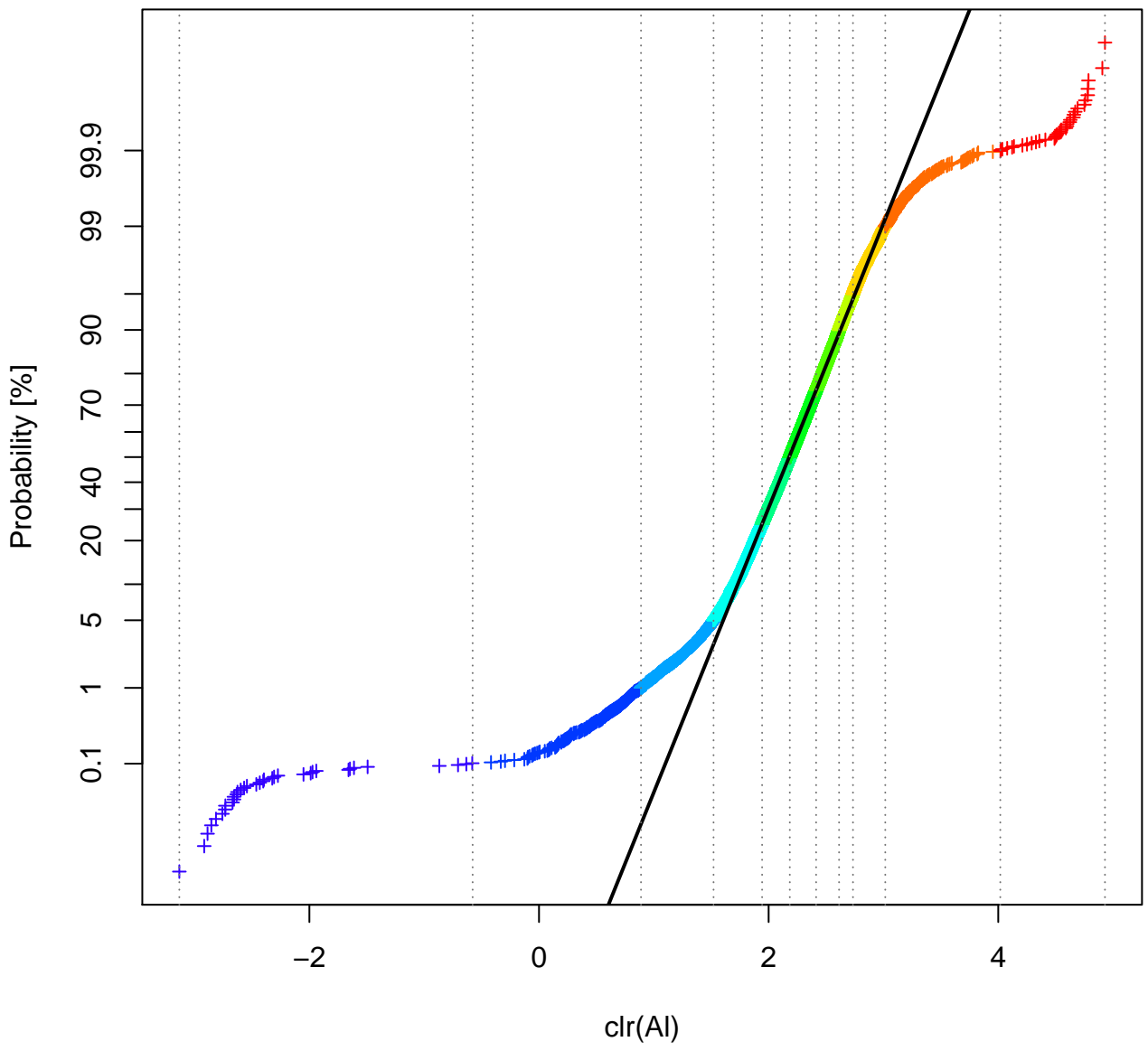
Geologische Bundesanstalt
Neulinggasse 38,
A-1030 Wien

Beilage Nr.

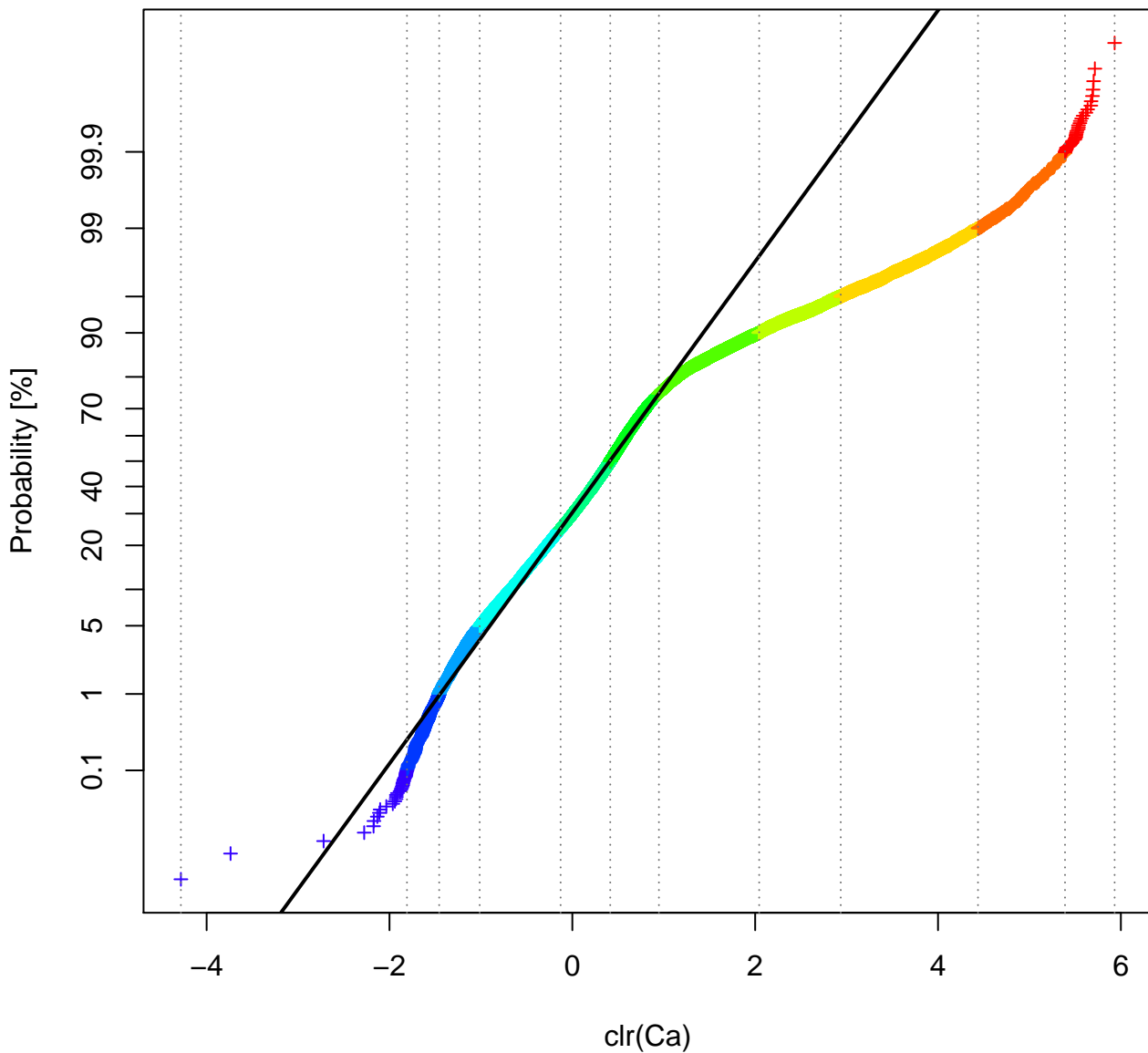
Anhang 4

Nur für den Dienstgebrauch

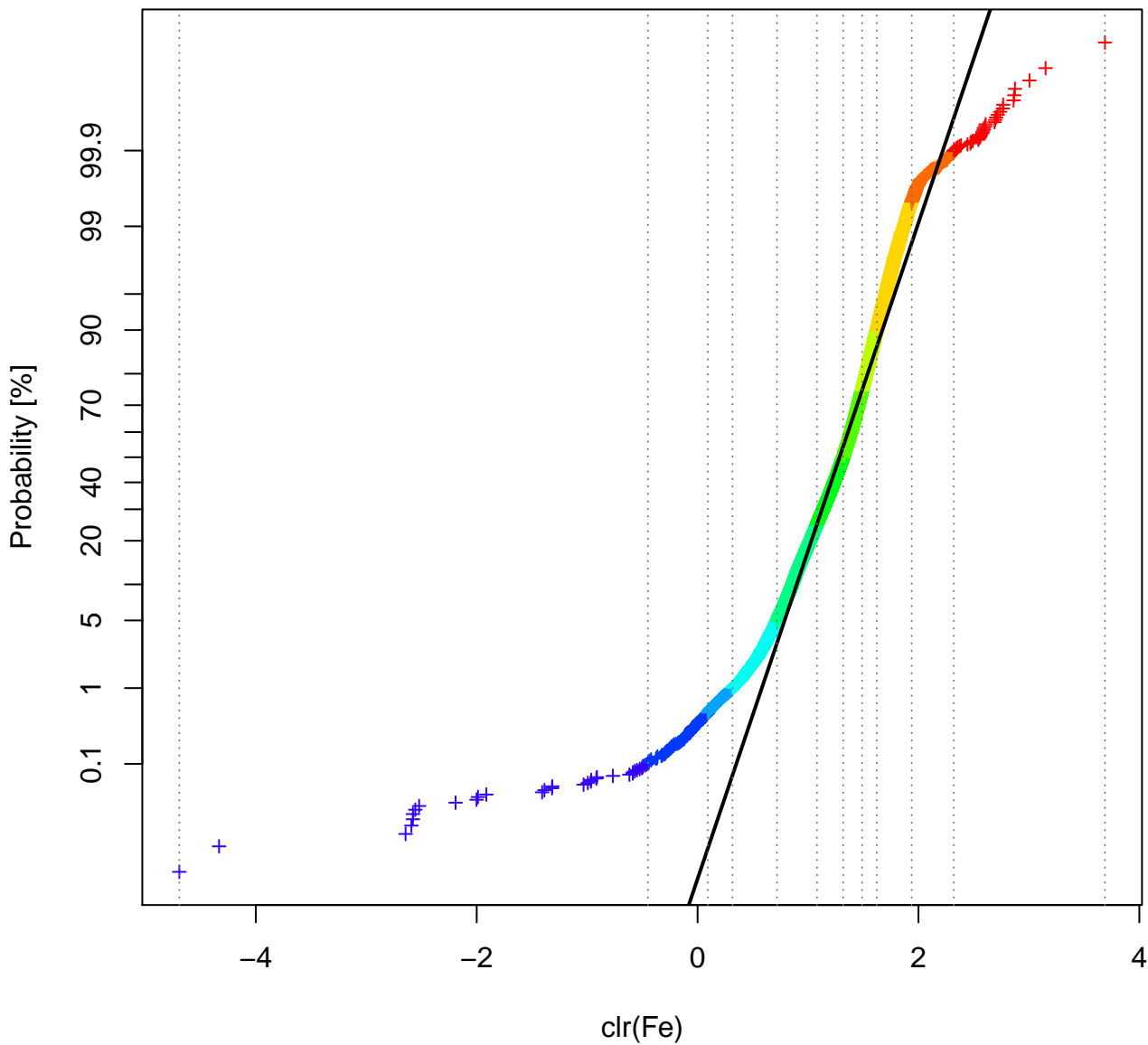
clr(AI) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



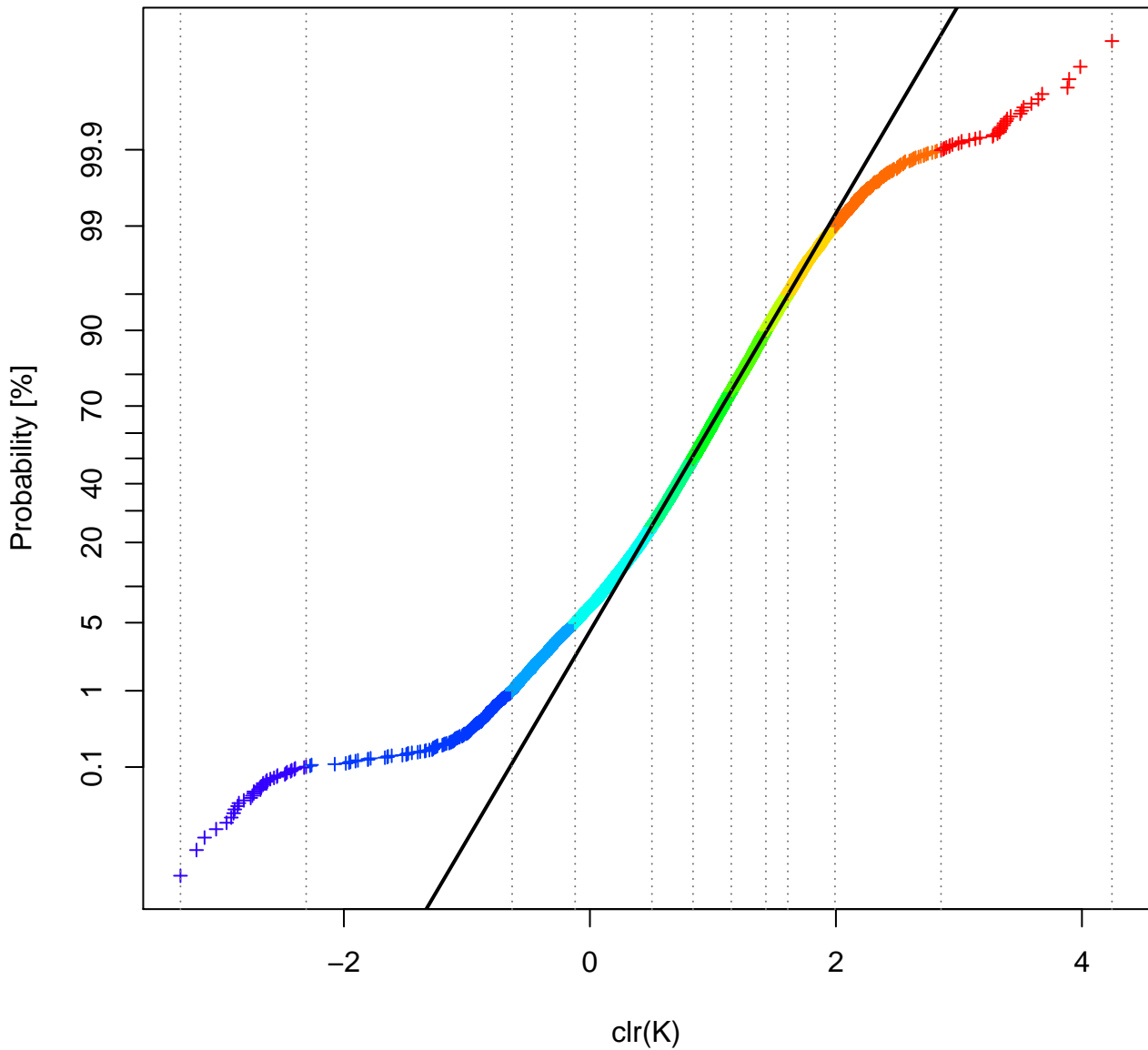
clr(Ca) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



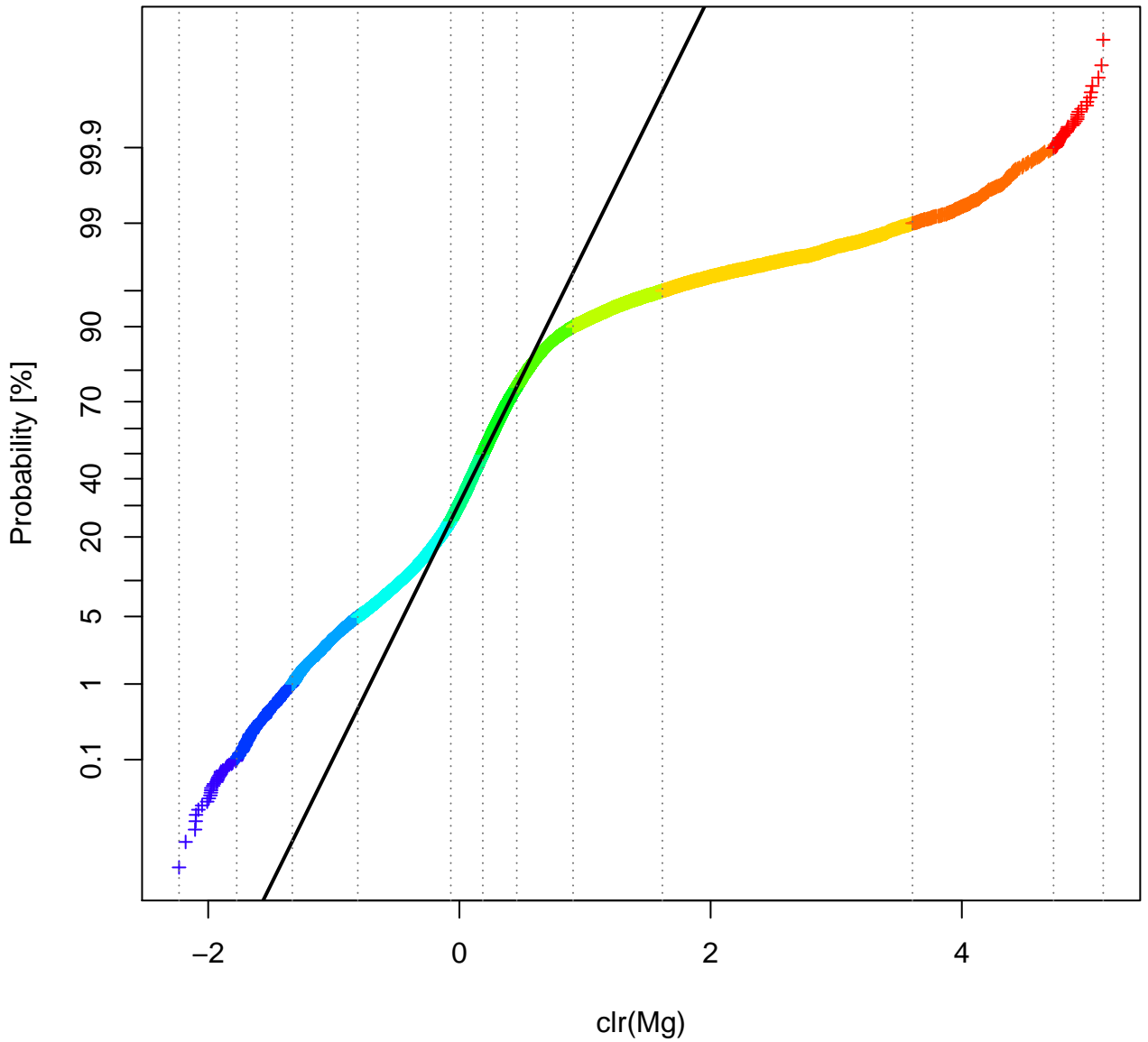
clr(Fe) : Quantile 0, 0.001, 0.005, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.995, 0.999, 1



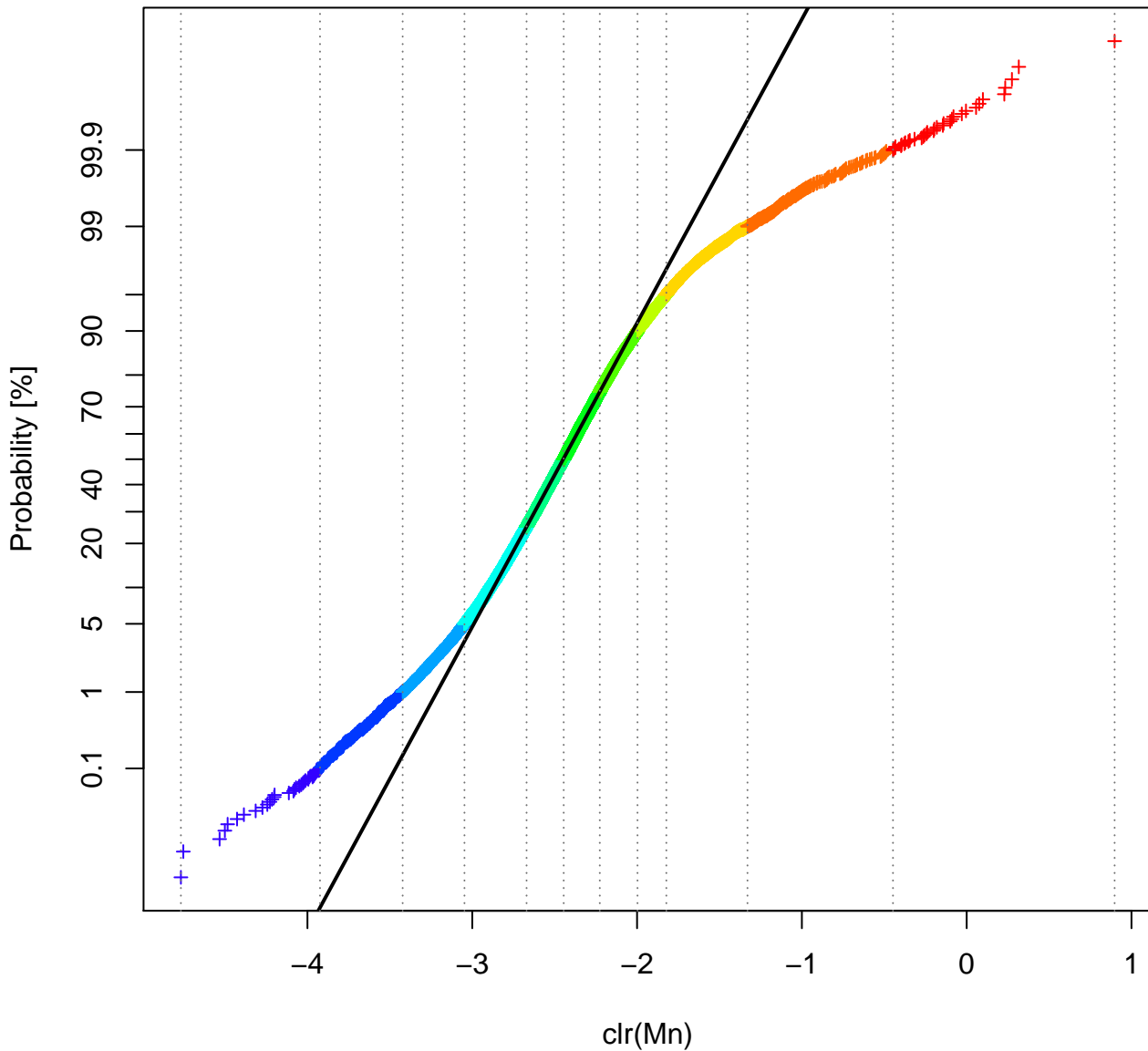
clr(K) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



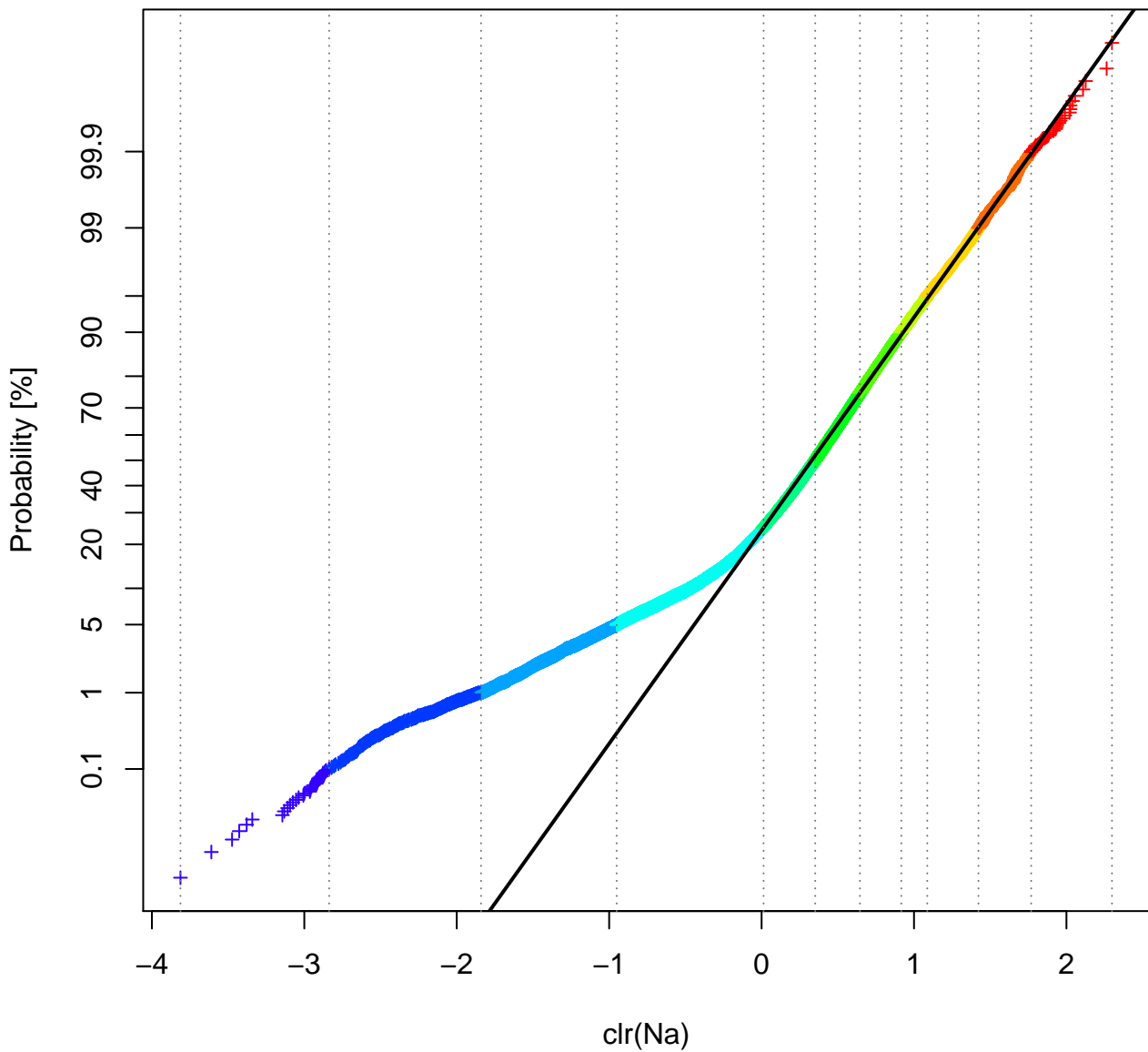
clr(Mg) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



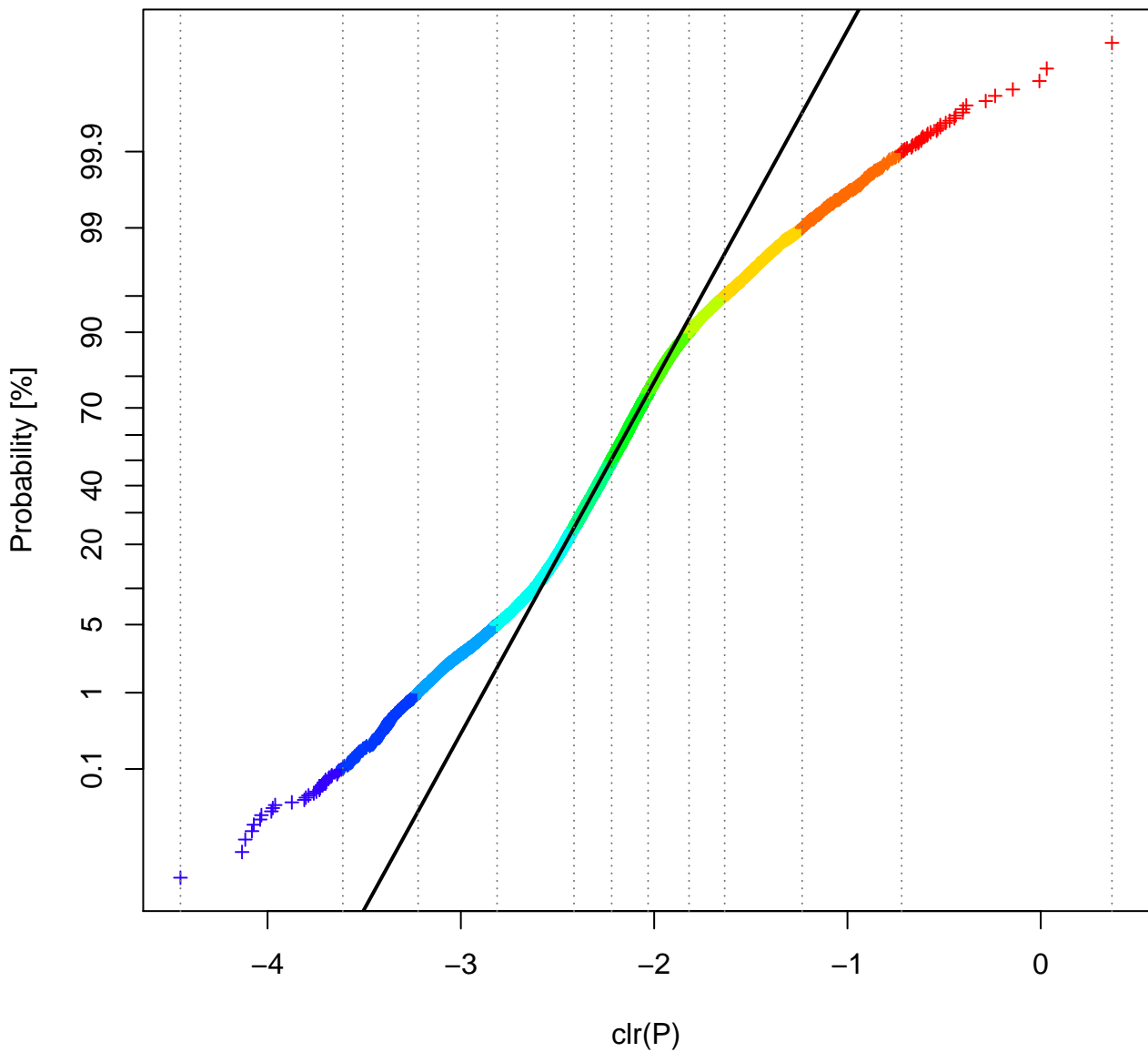
clr(Mn) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



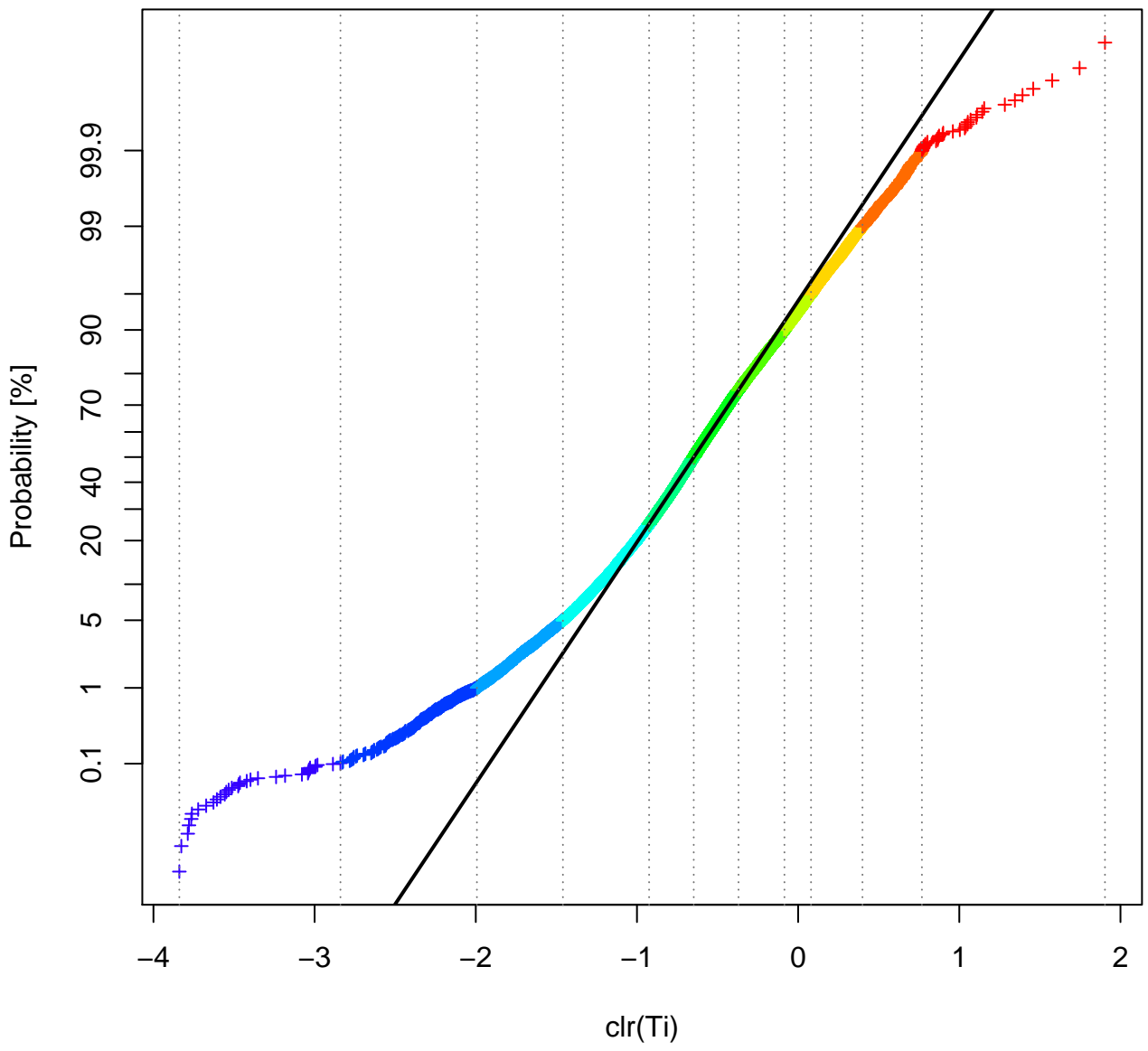
clr(Na) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



clr(P) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



clr(Ti) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1





BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG, WISSENSCHAFT & FORSCHUNG

GEOLOGISCHE BUNDESANSTALT

FA ROHSTOFFGEOLOGIE

Titel

Flächenkarten der Hauptelemente: Vergleich der Absolutwerte mit den cl_r -Koeffizienten

Projekt

ÜLG-070 2019 IRIS-Online

Sachbearbeiter

Th. Filzmoser &
P. Filzmoser

Seiten

9

Datum

Sept. 2019

Datenbank

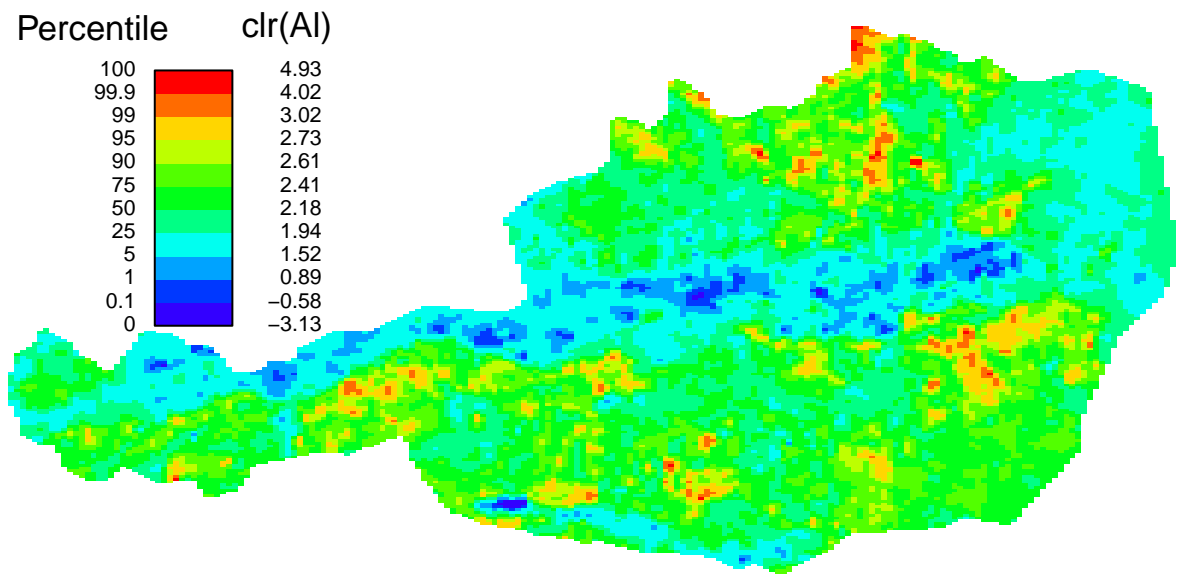
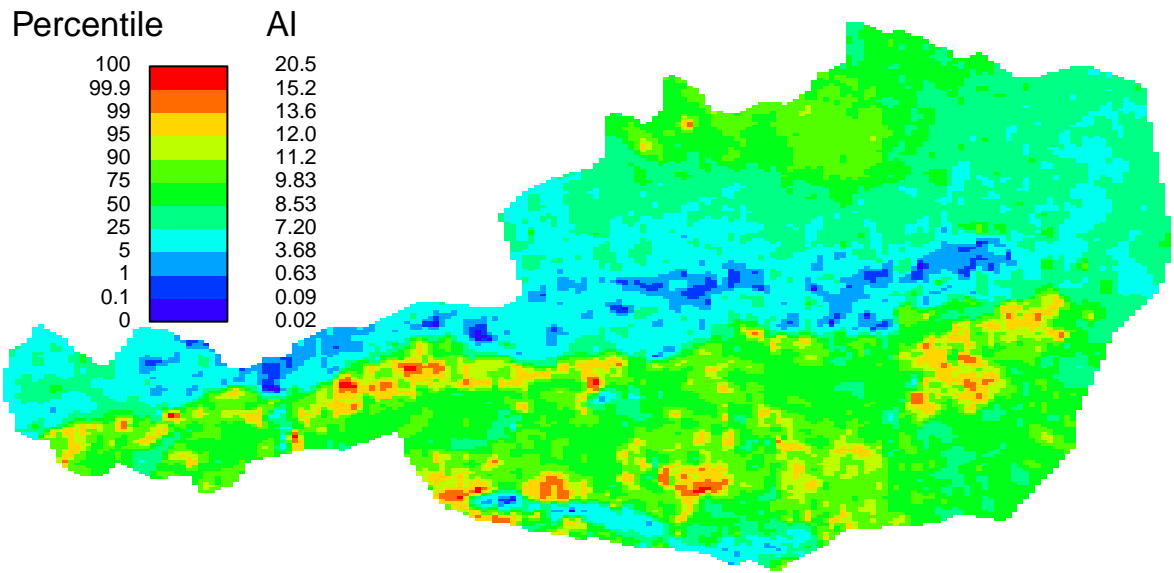


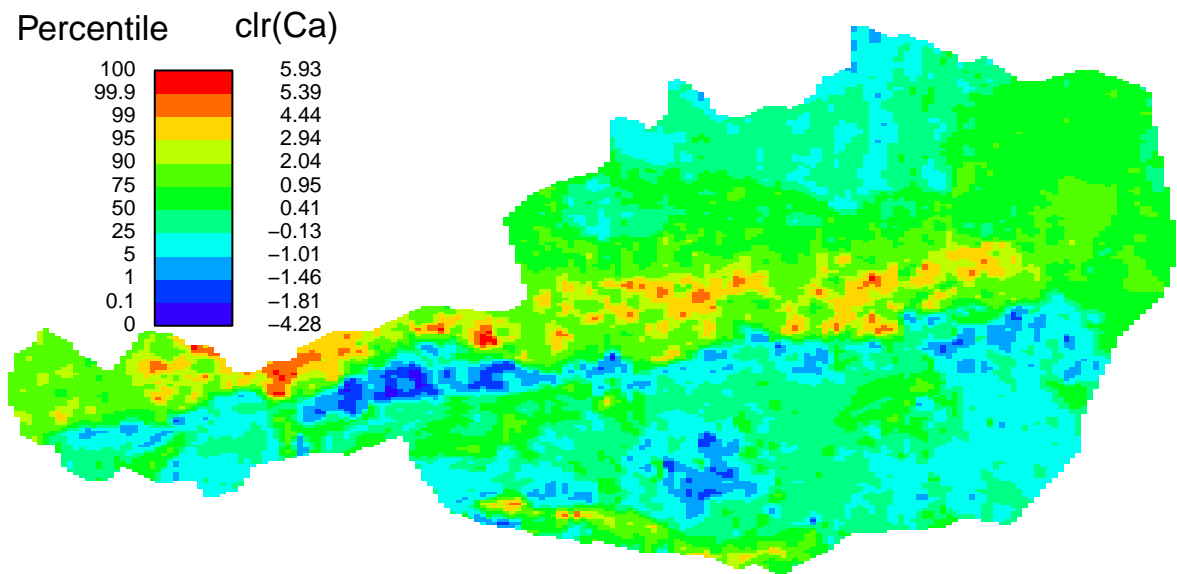
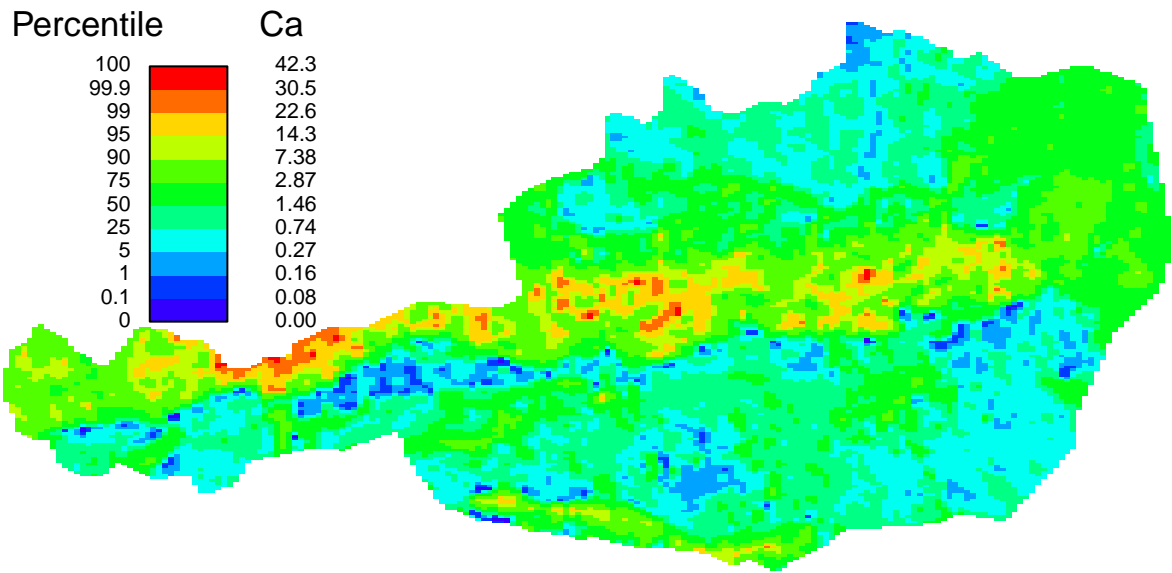
Geologische Bundesanstalt
Neulinggasse 38,
A-1030 Wien

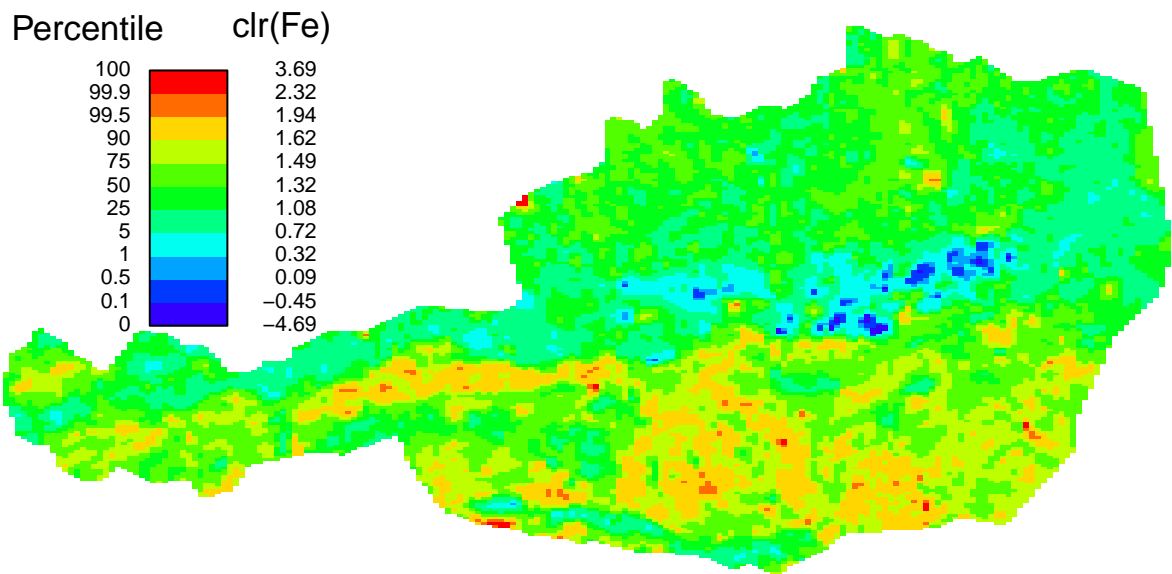
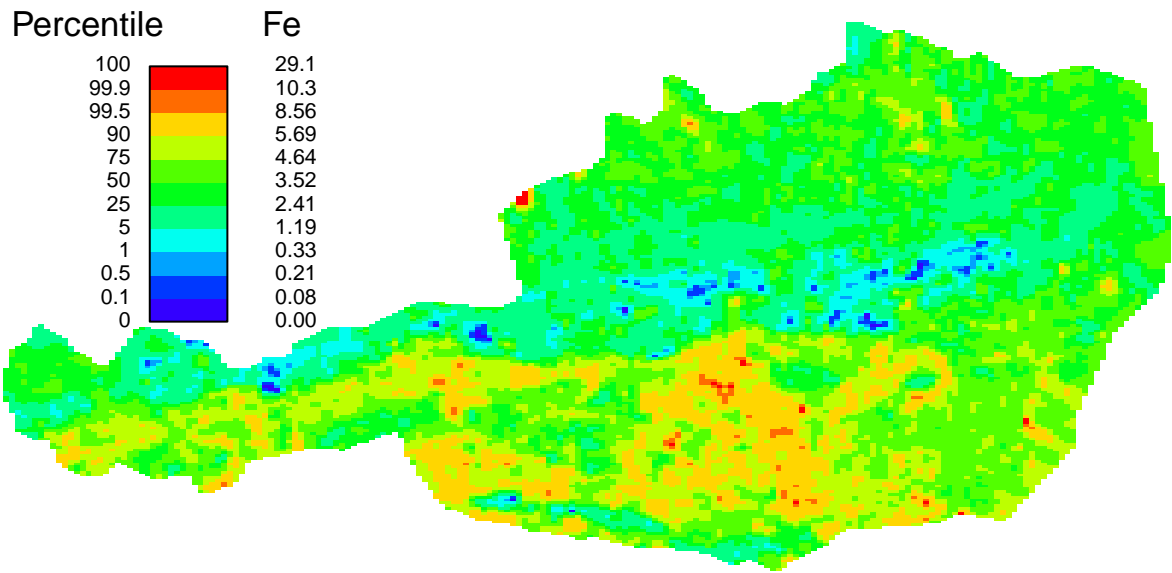
Beilage Nr.

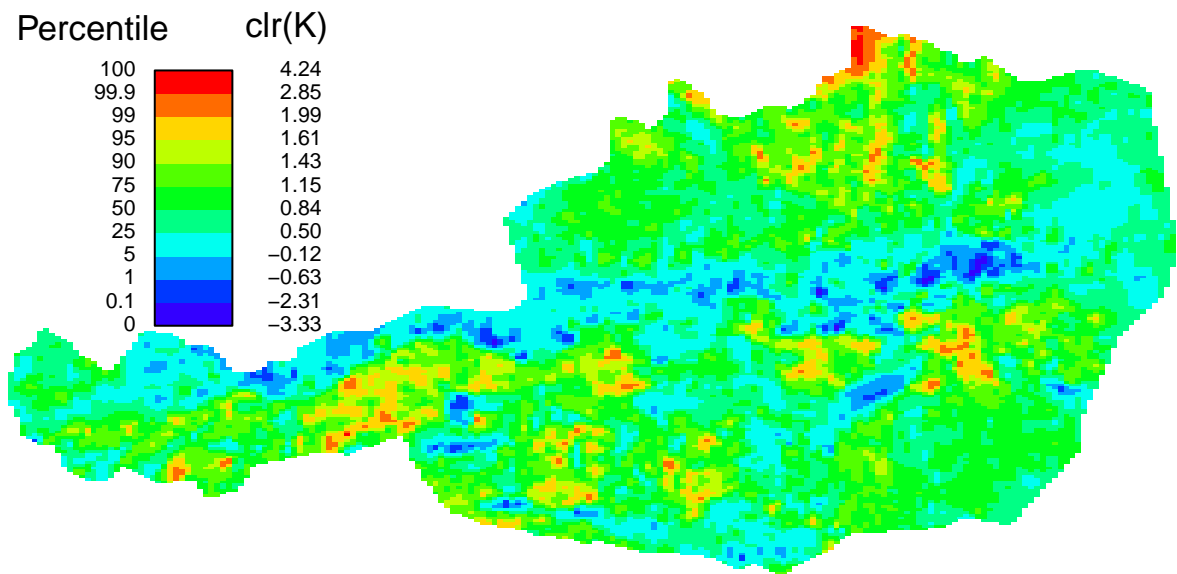
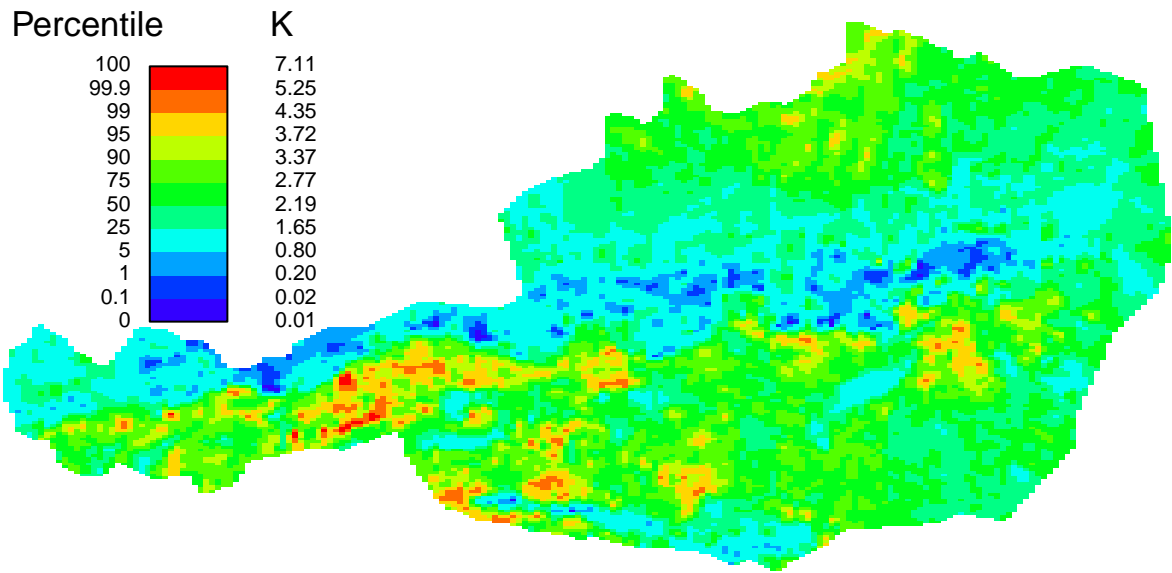
Anhang 5

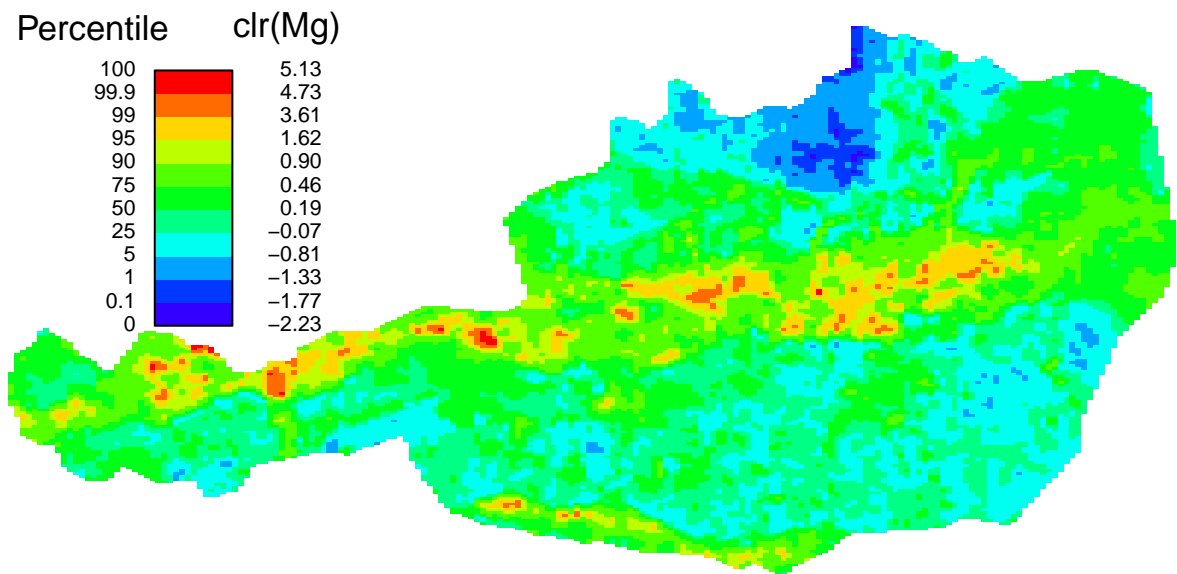
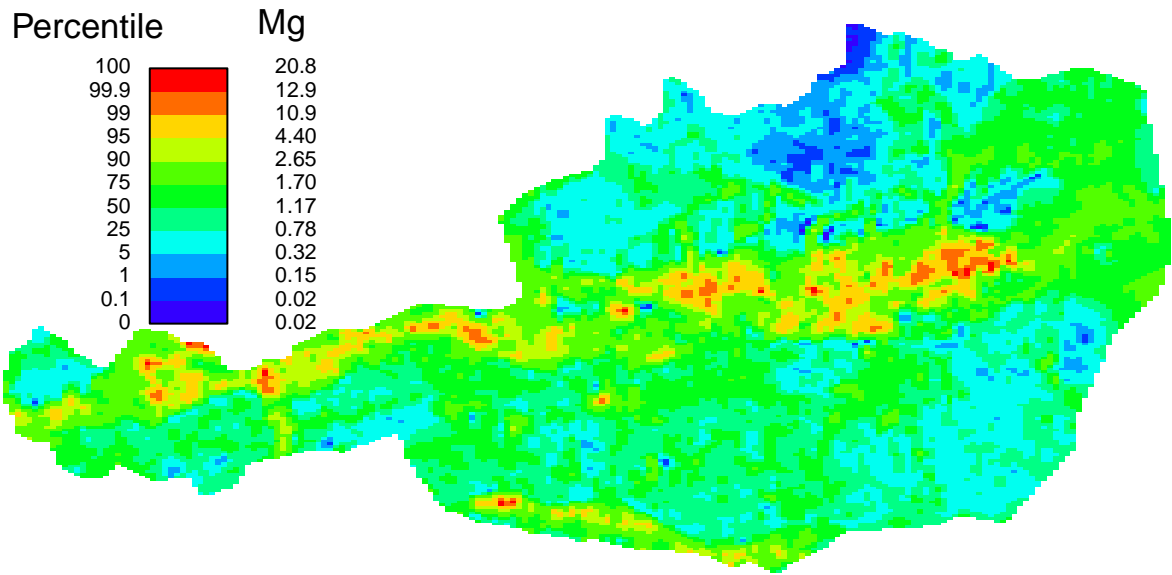
Nur für den Dienstgebrauch

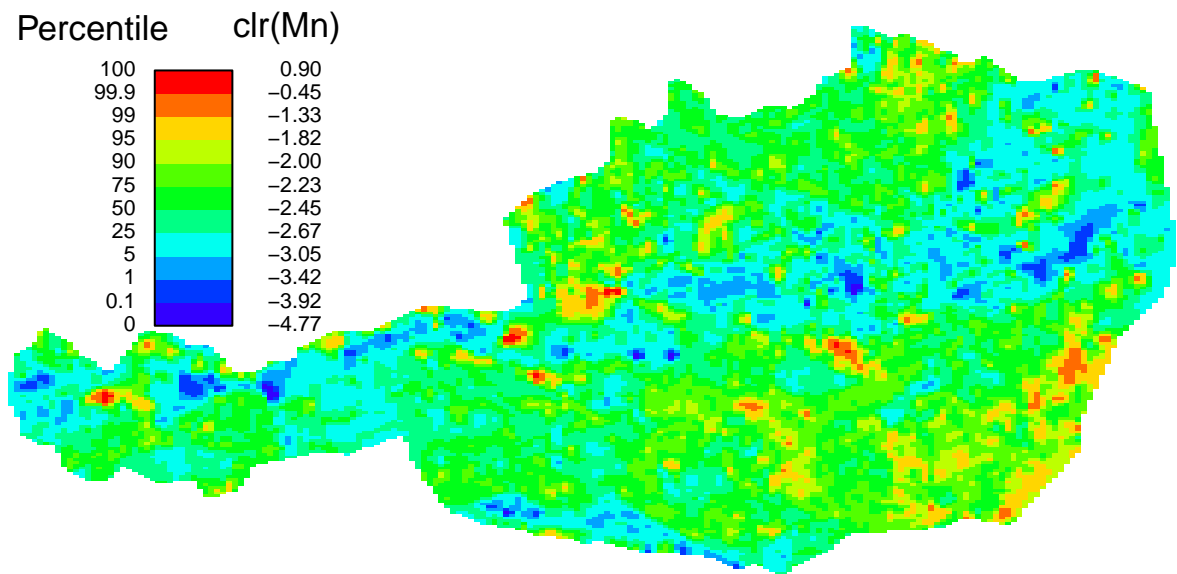
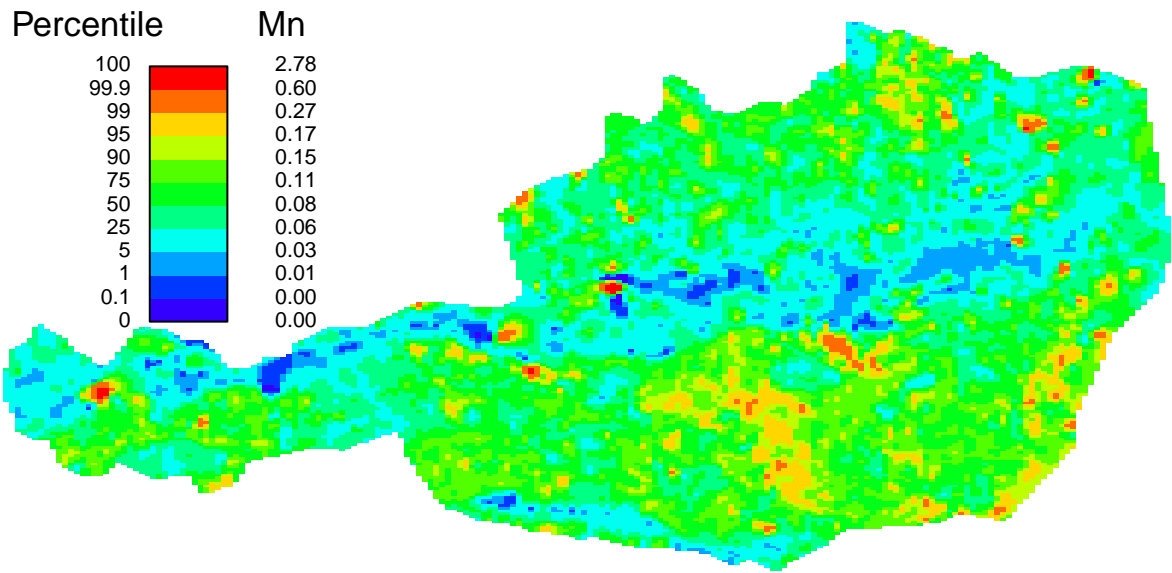


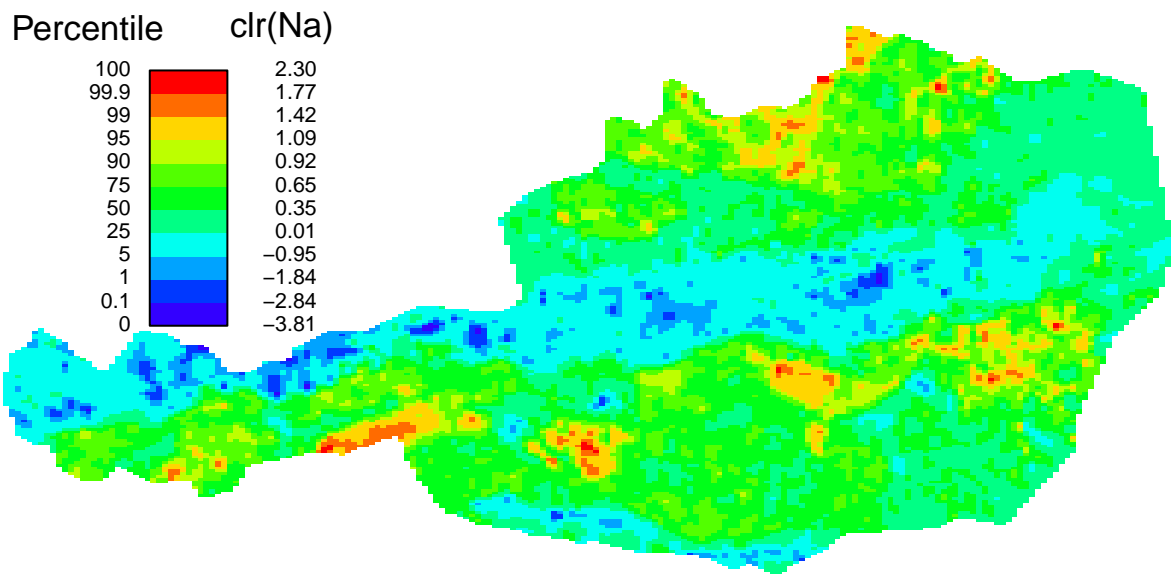
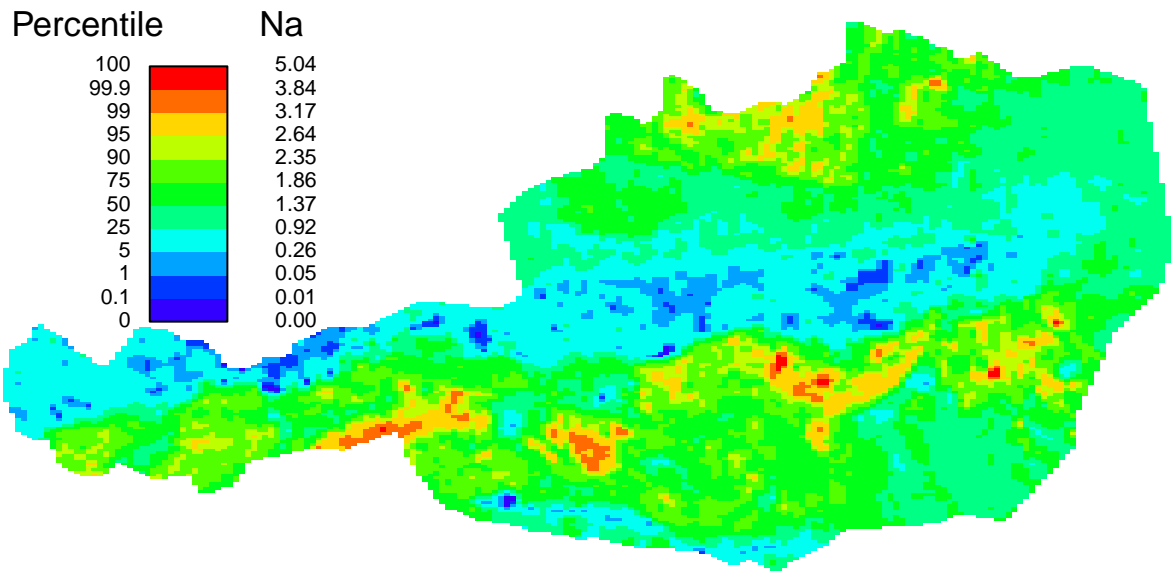


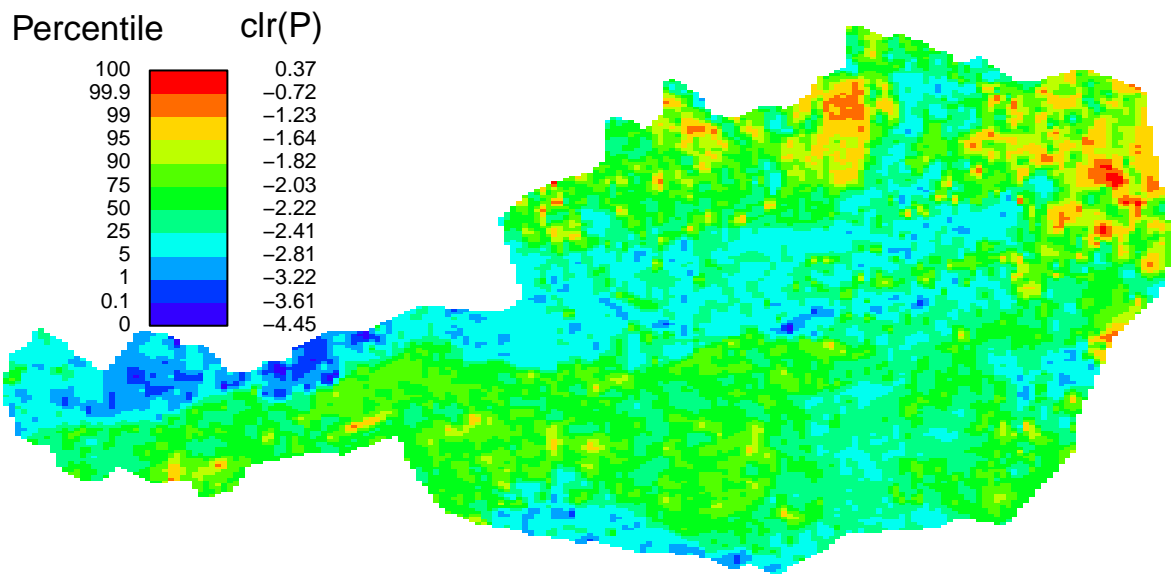
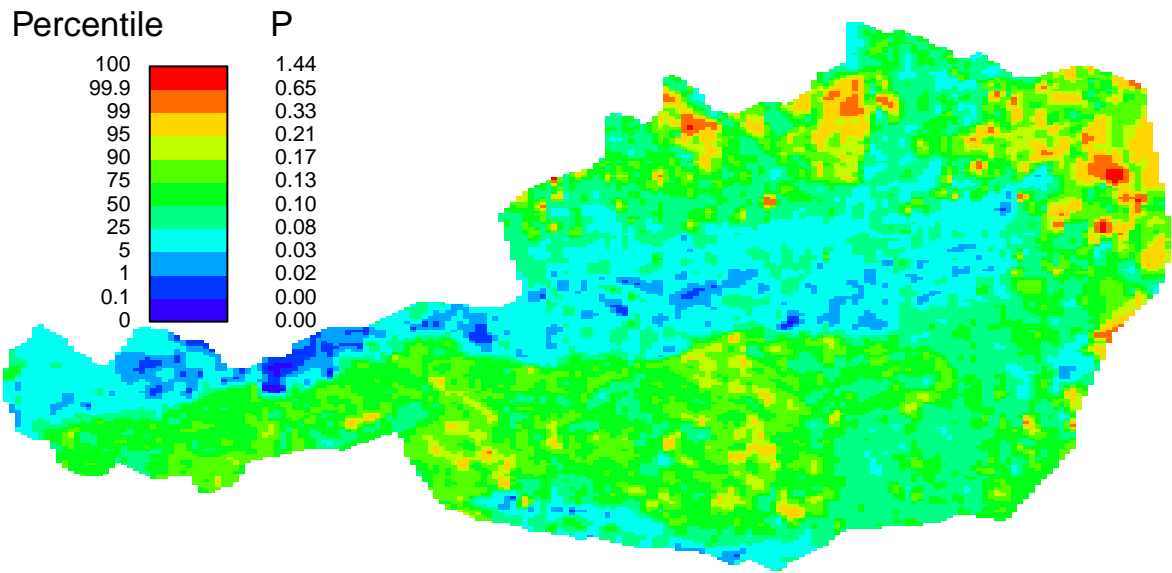


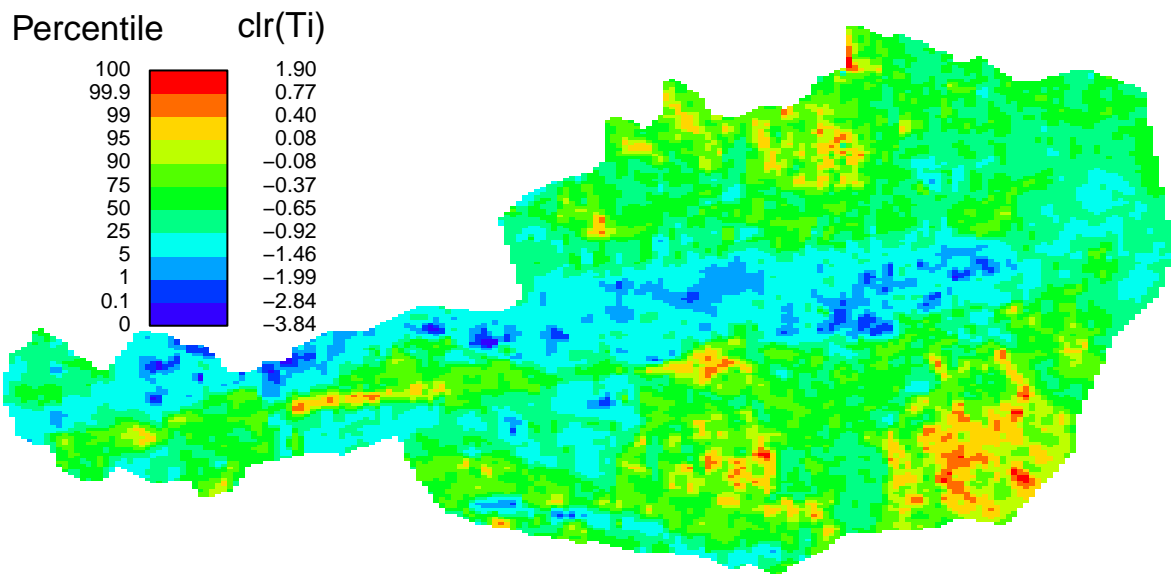
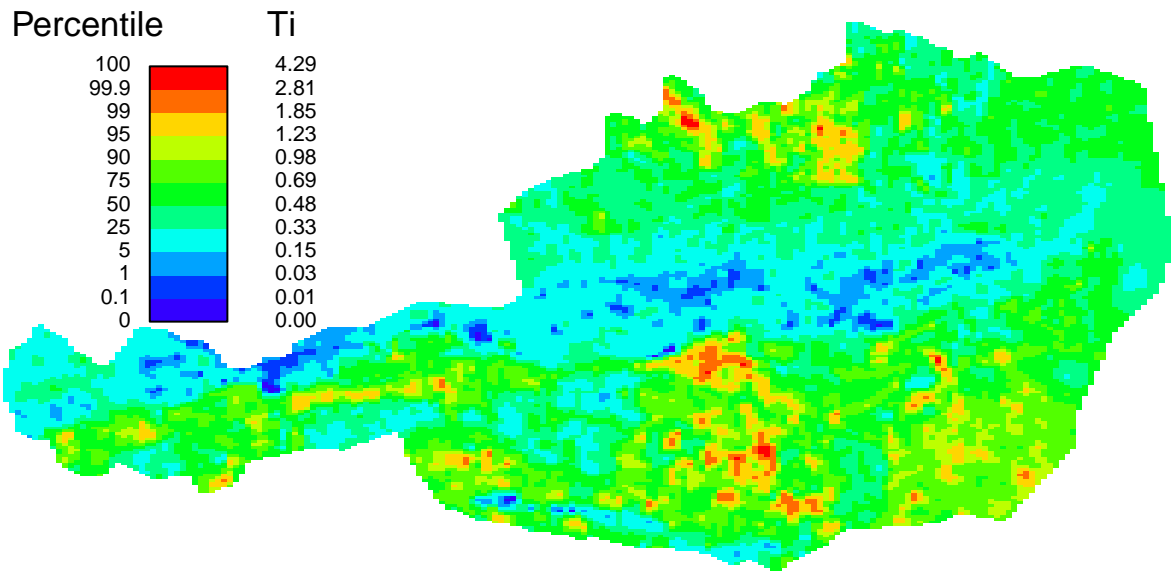














BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG, WISSENSCHAFT & FORSCHUNG

GEOLOGISCHE BUNDESANSTALT

FA ROHSTOFFGEOLOGIE

Titel

Quantile der cl_r -Koeffizienten der Spurenelemente

Projekt

ÜLG-070 2019 IRIS-Online

Sachbearbeiter

Th. Filzmoser &
P. Filzmoser

Seiten

22

Datum

Sept. 2019

Datenbank



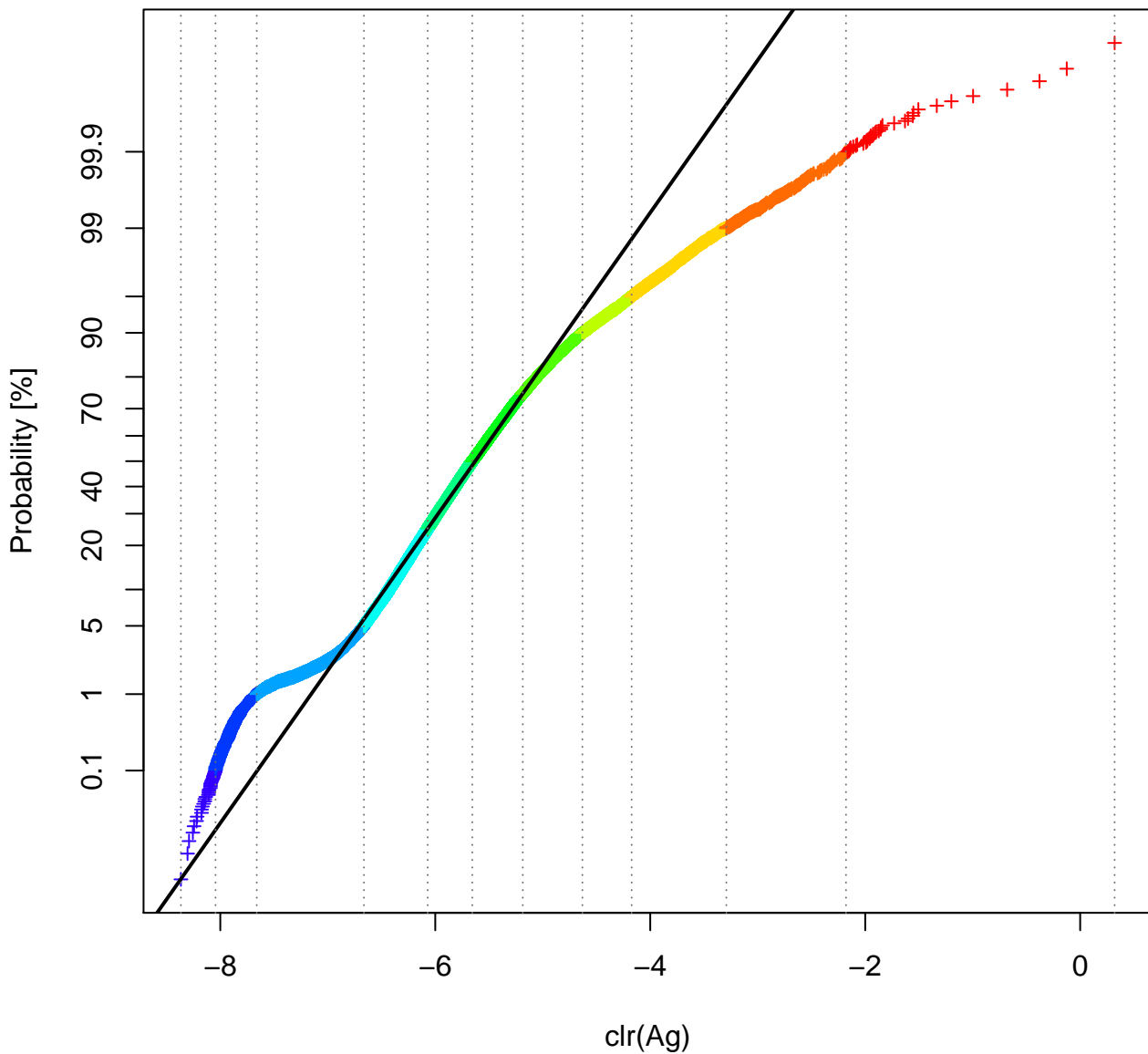
Geologische Bundesanstalt
Neulinggasse 38,
A-1030 Wien

Beilage Nr.

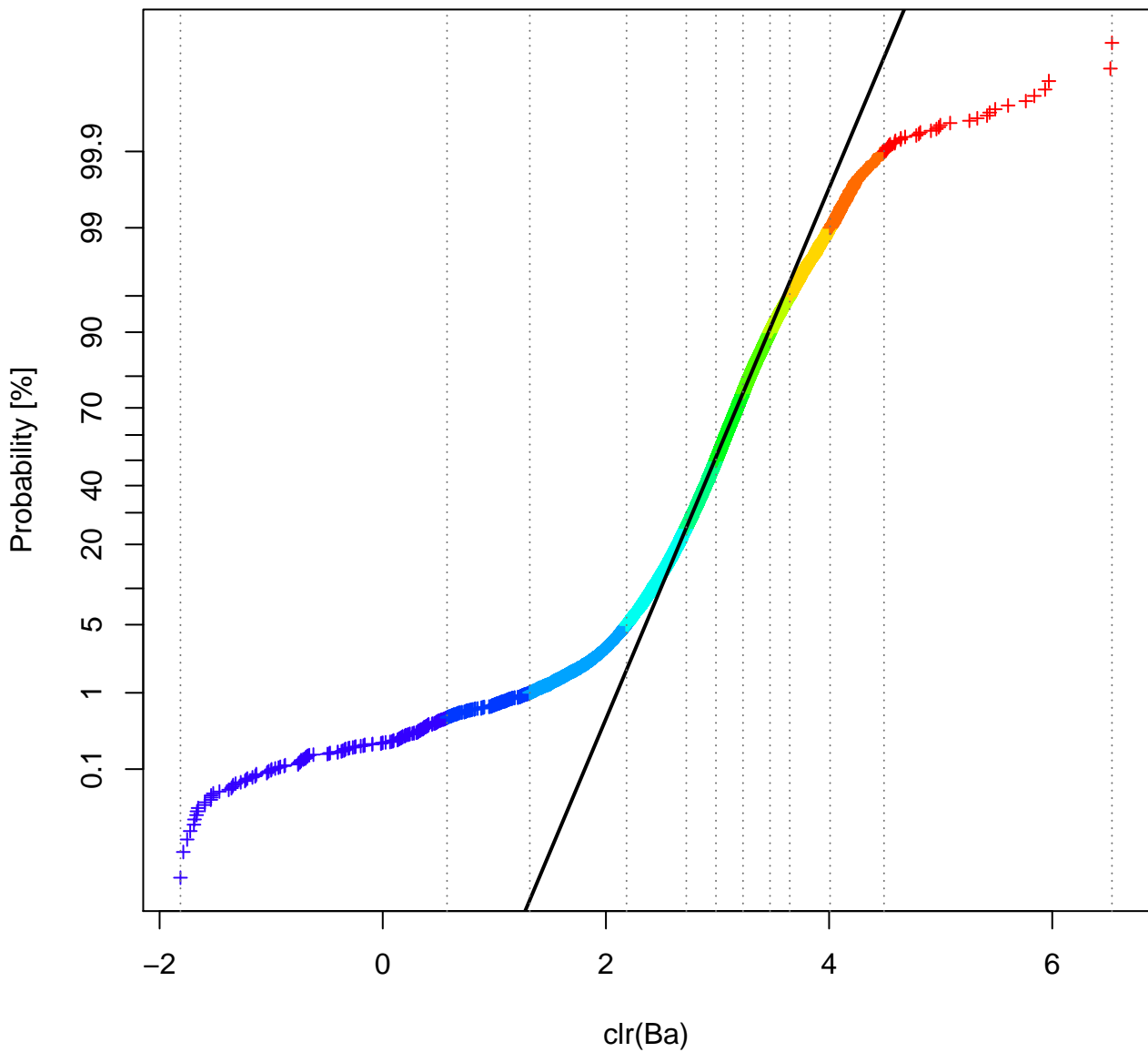
Anhang 6

Nur für den Dienstgebrauch

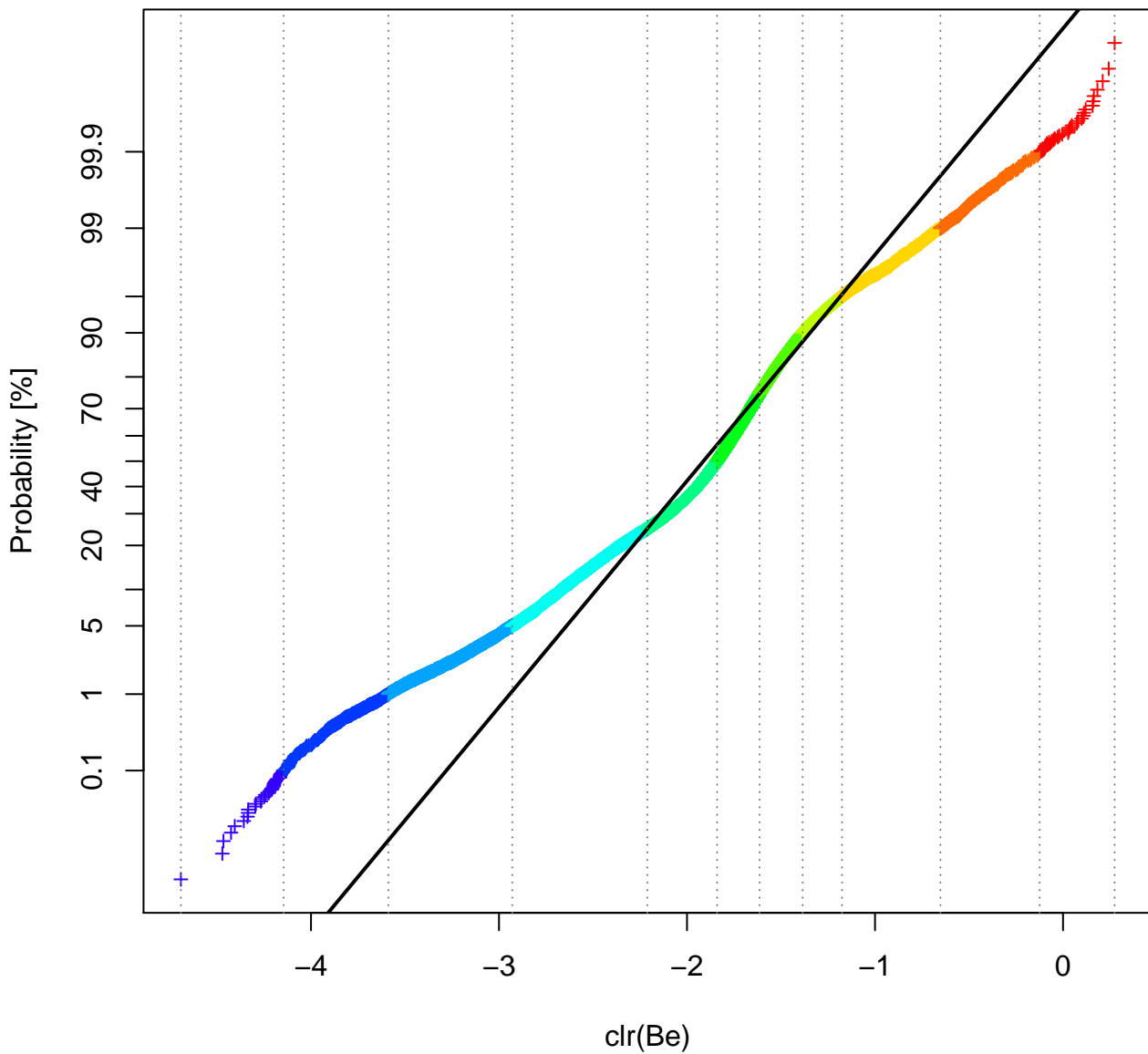
clr(Ag) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



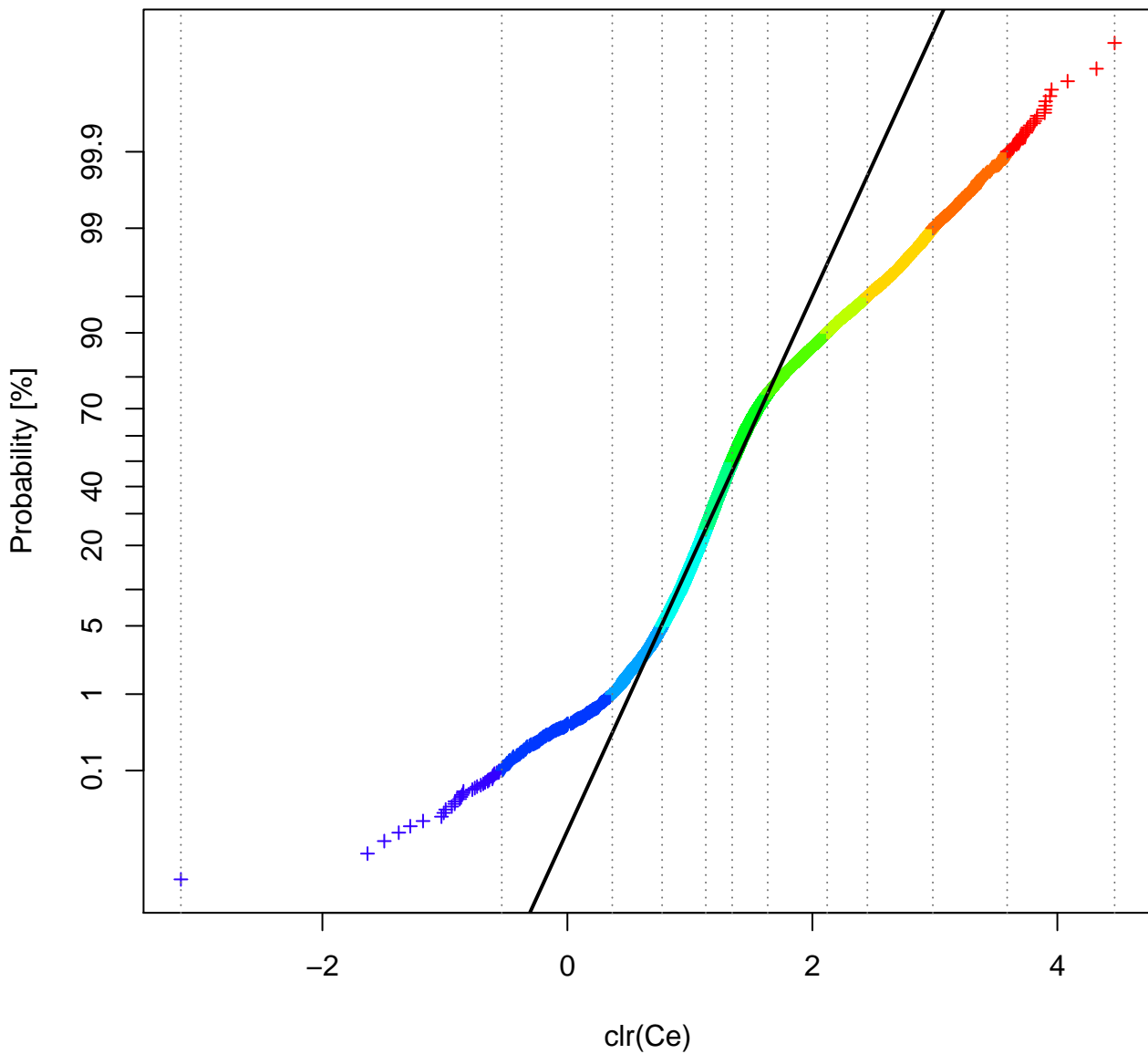
clr(Ba) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



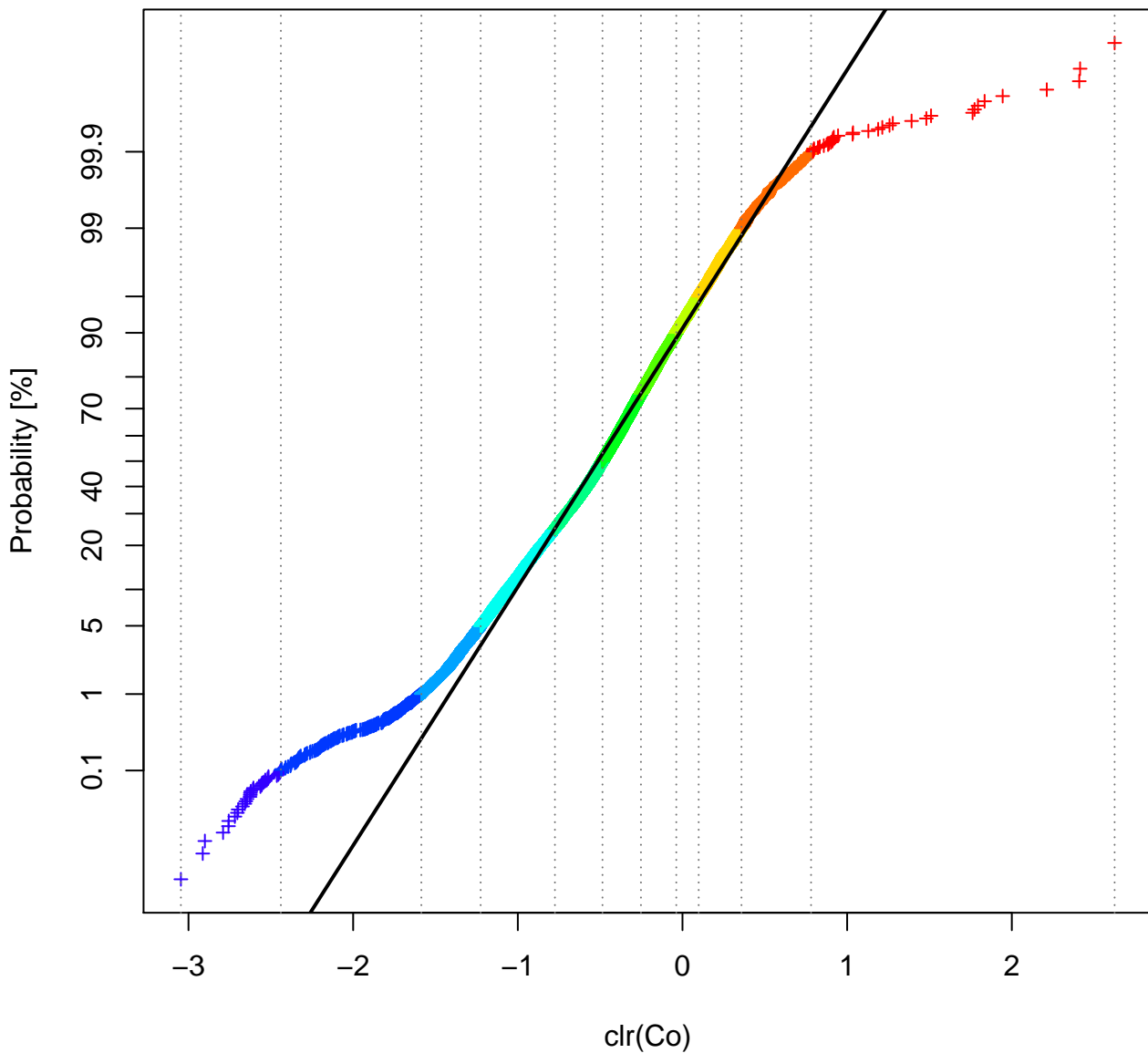
clr(Be) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



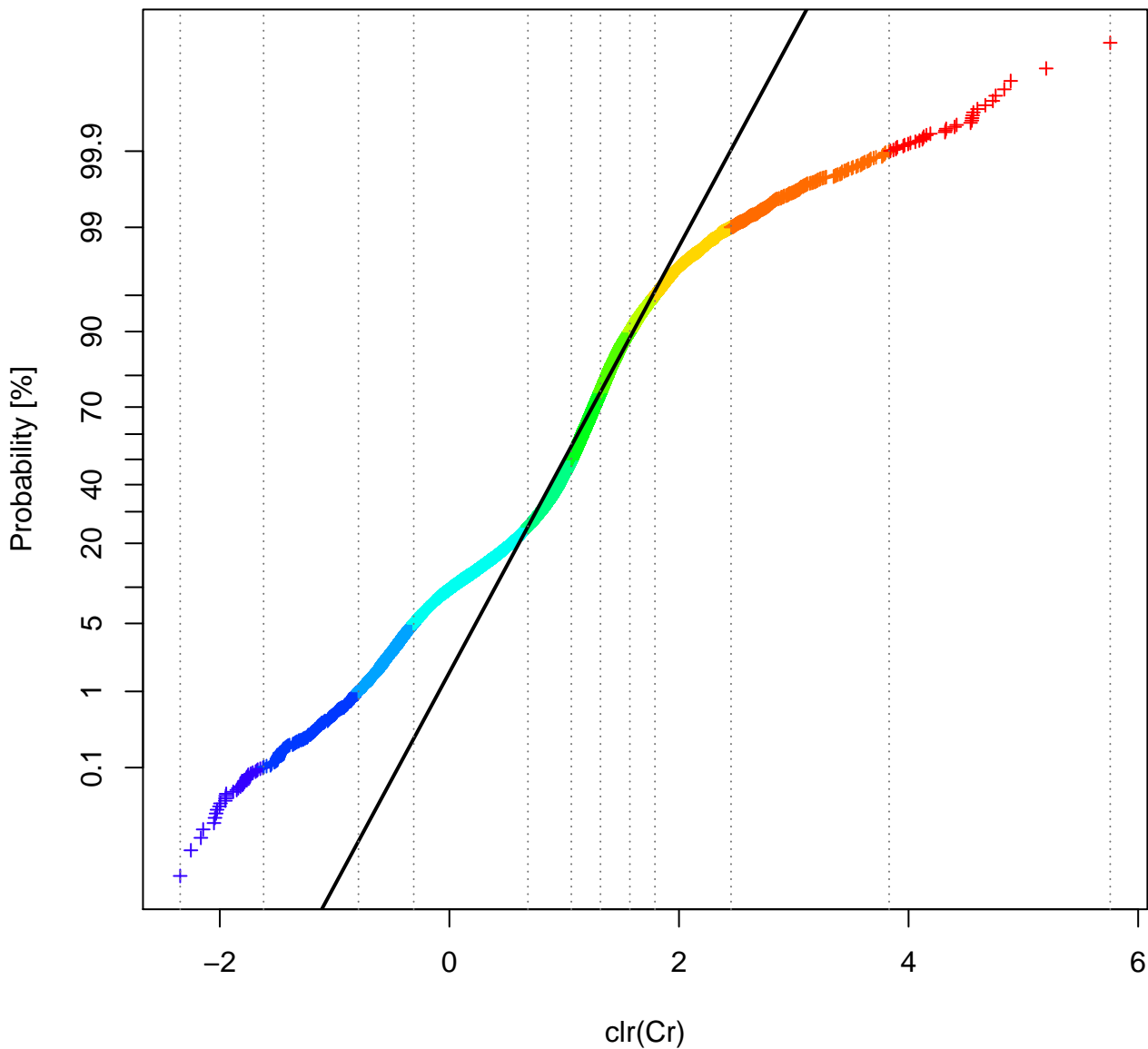
clr(Ce) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



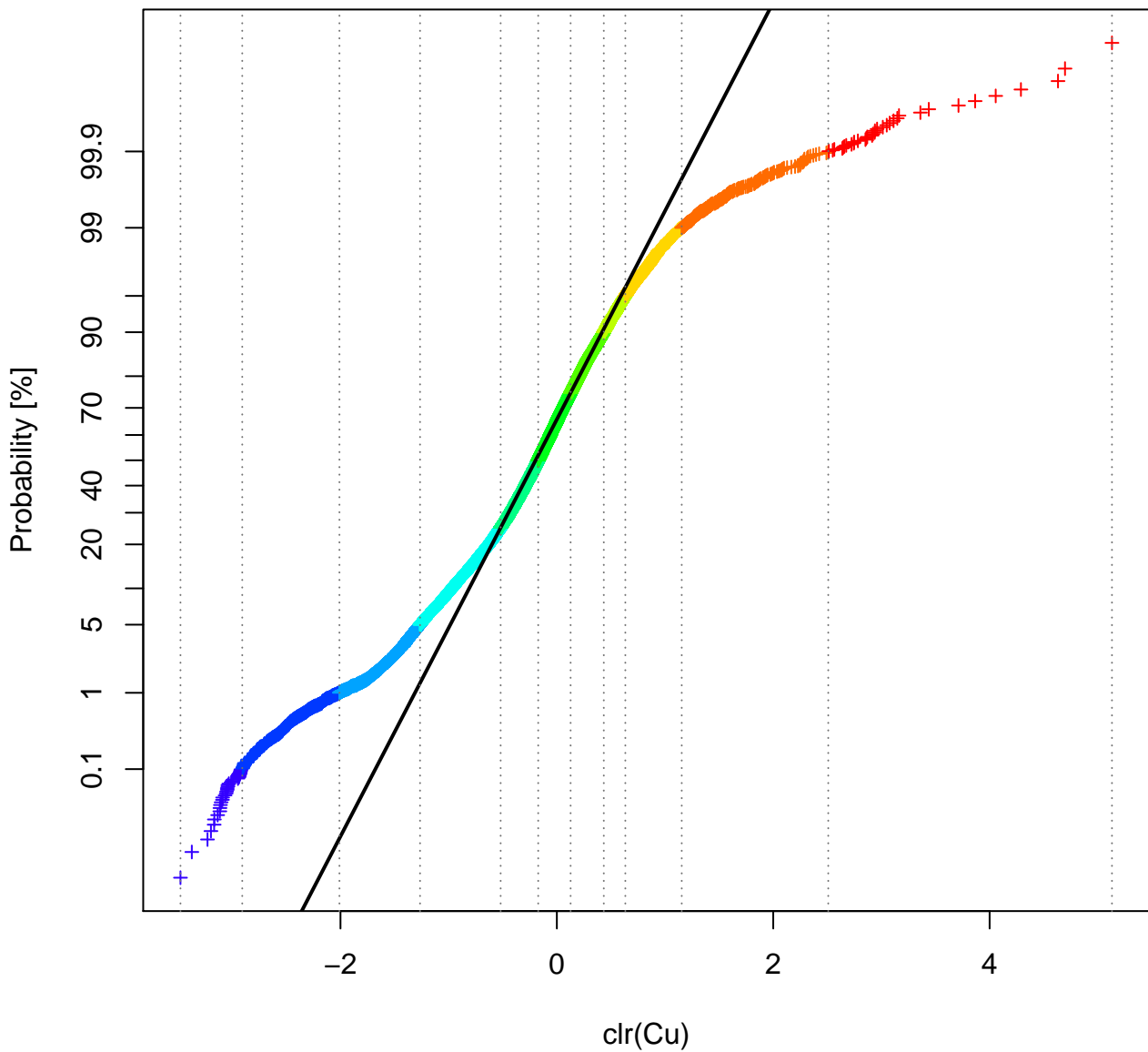
clr(Co) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



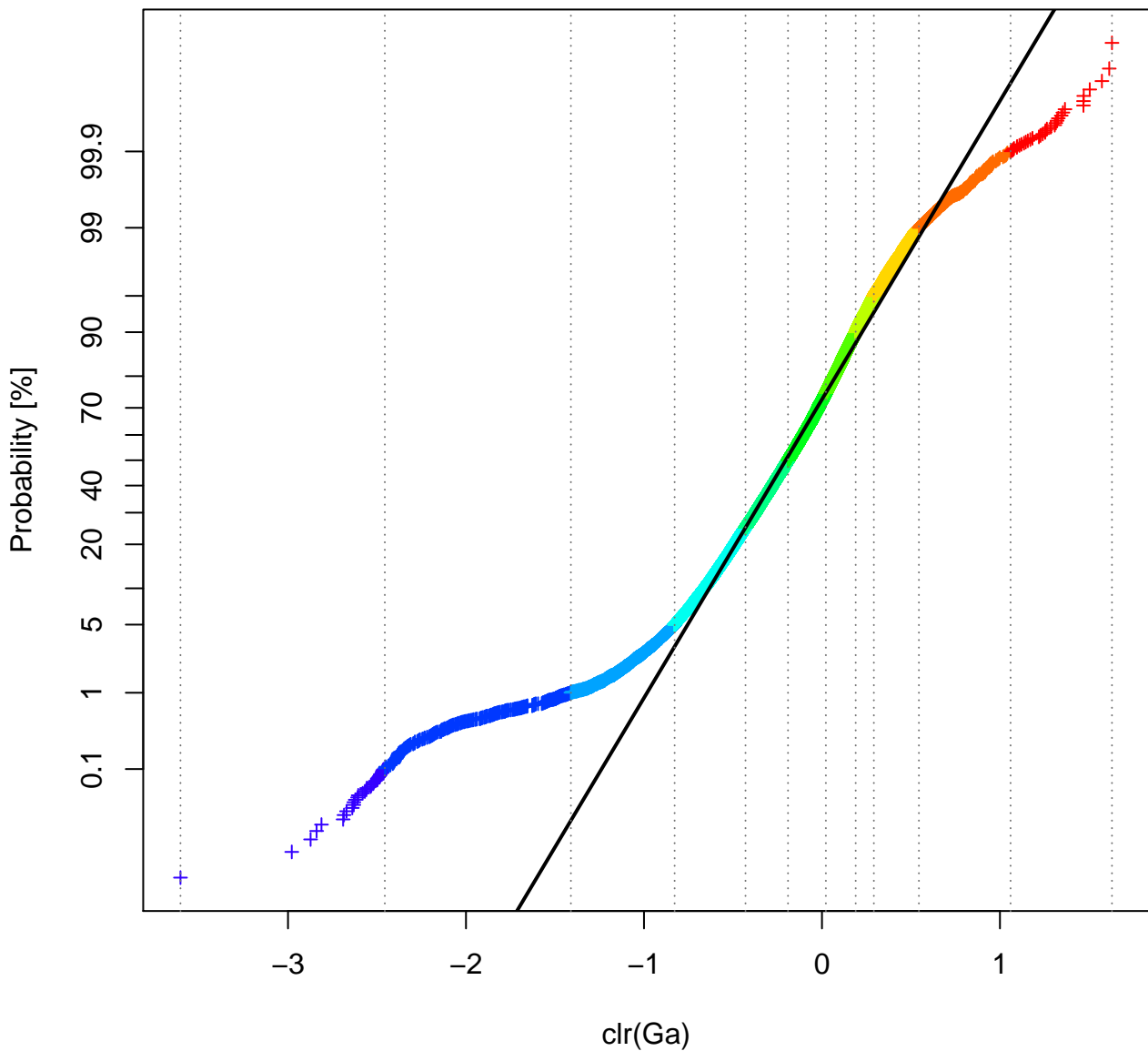
clr(Cr) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



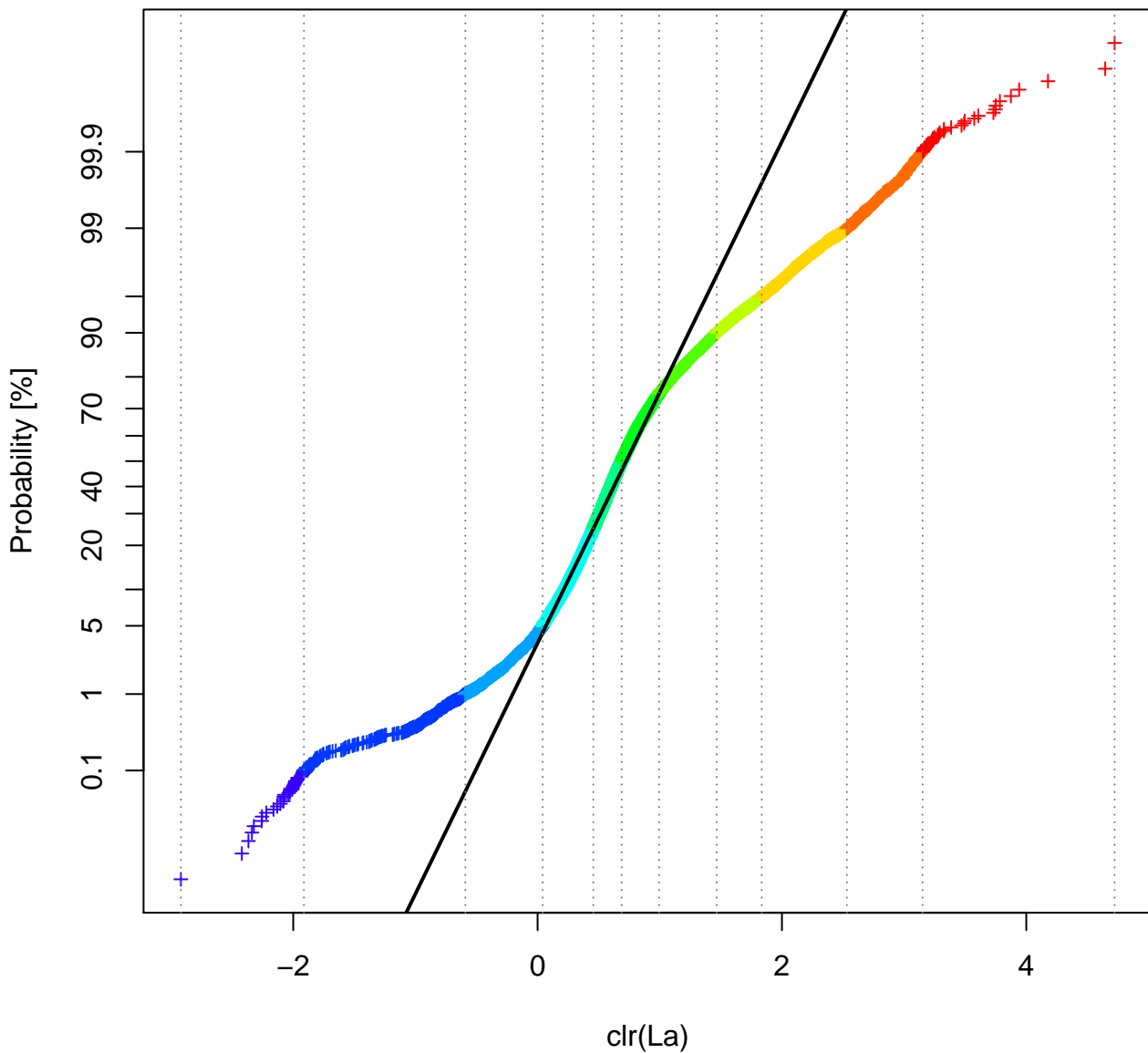
clr(Cu) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



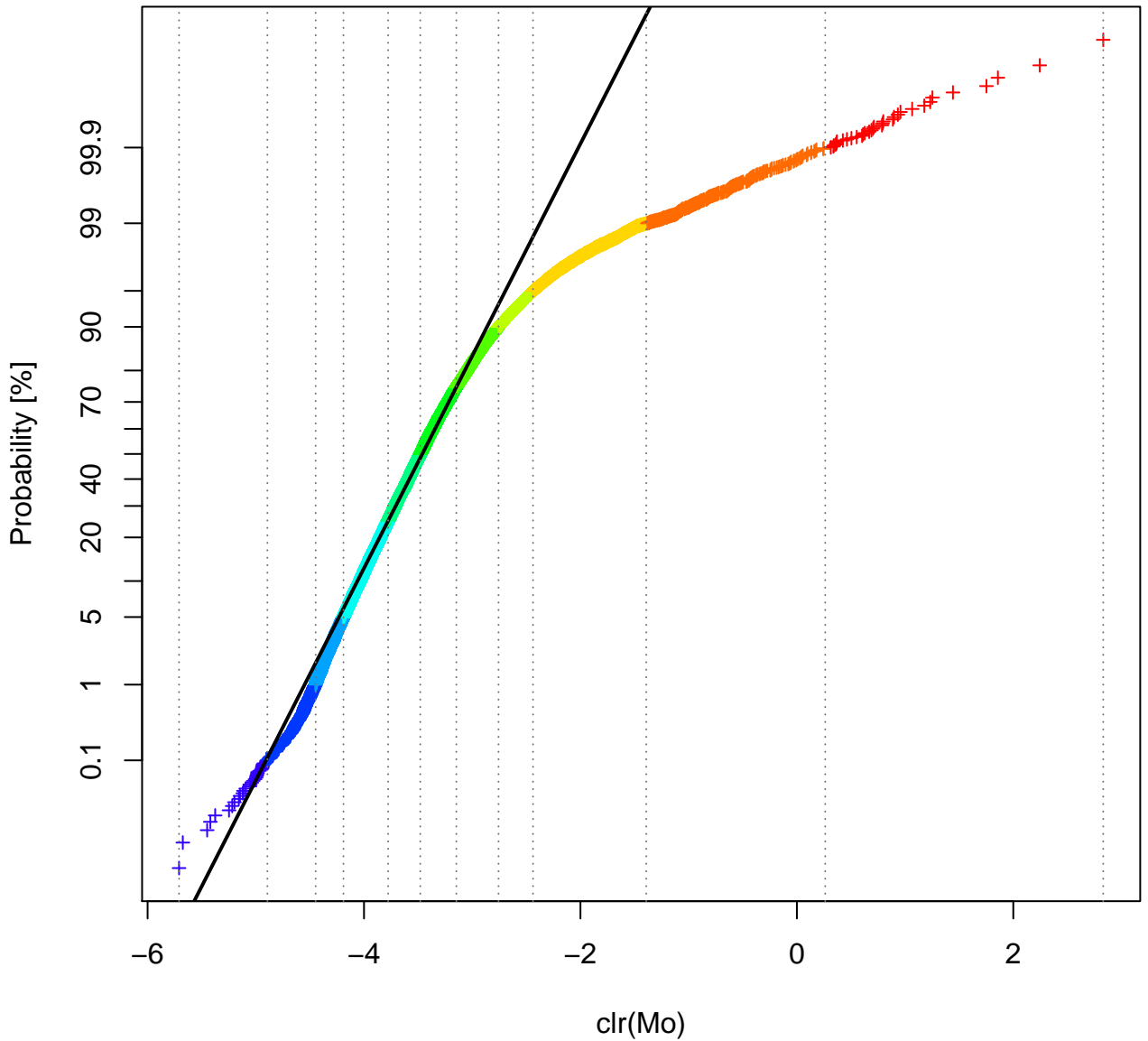
clr(Ga) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



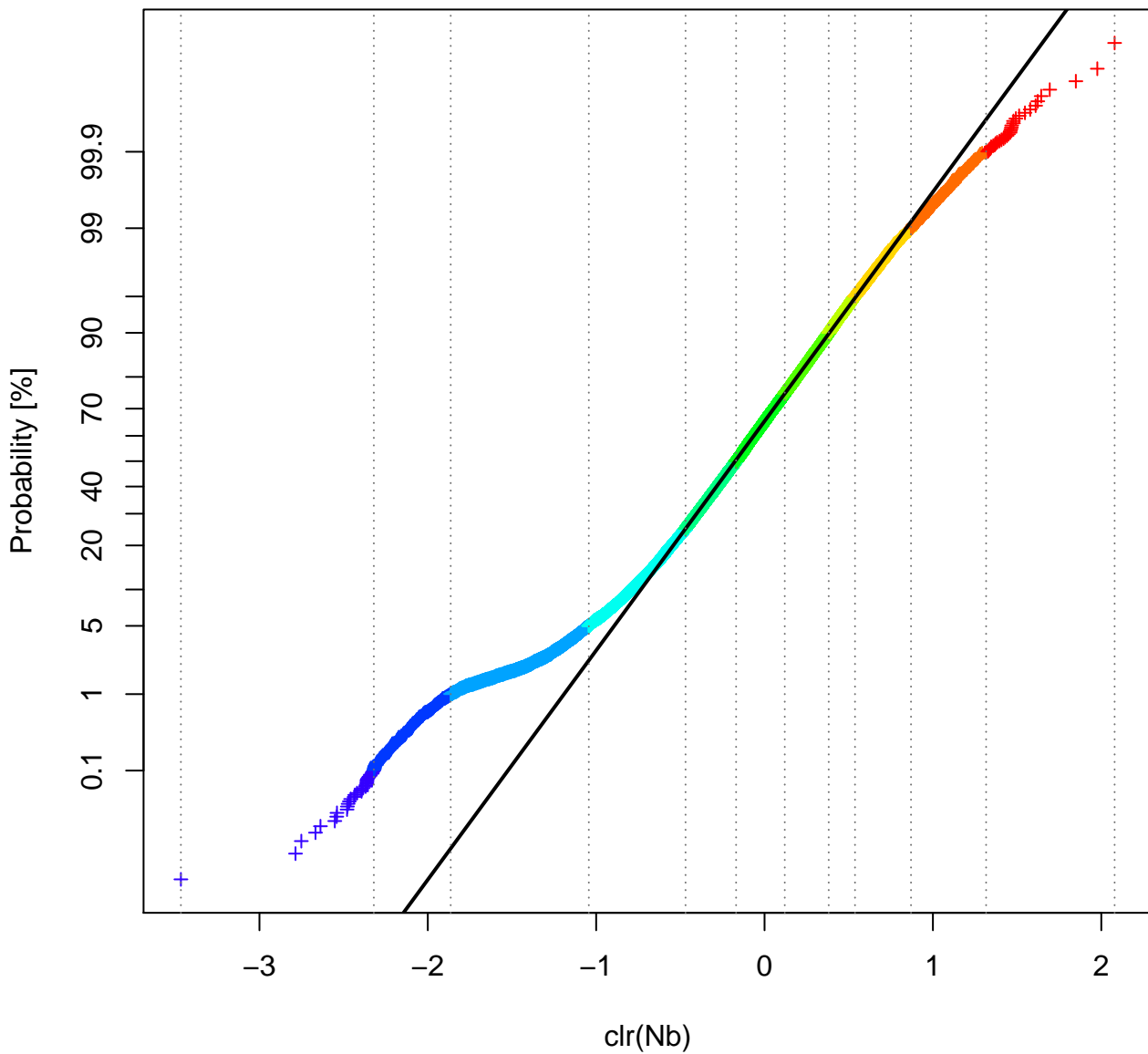
clr(La) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



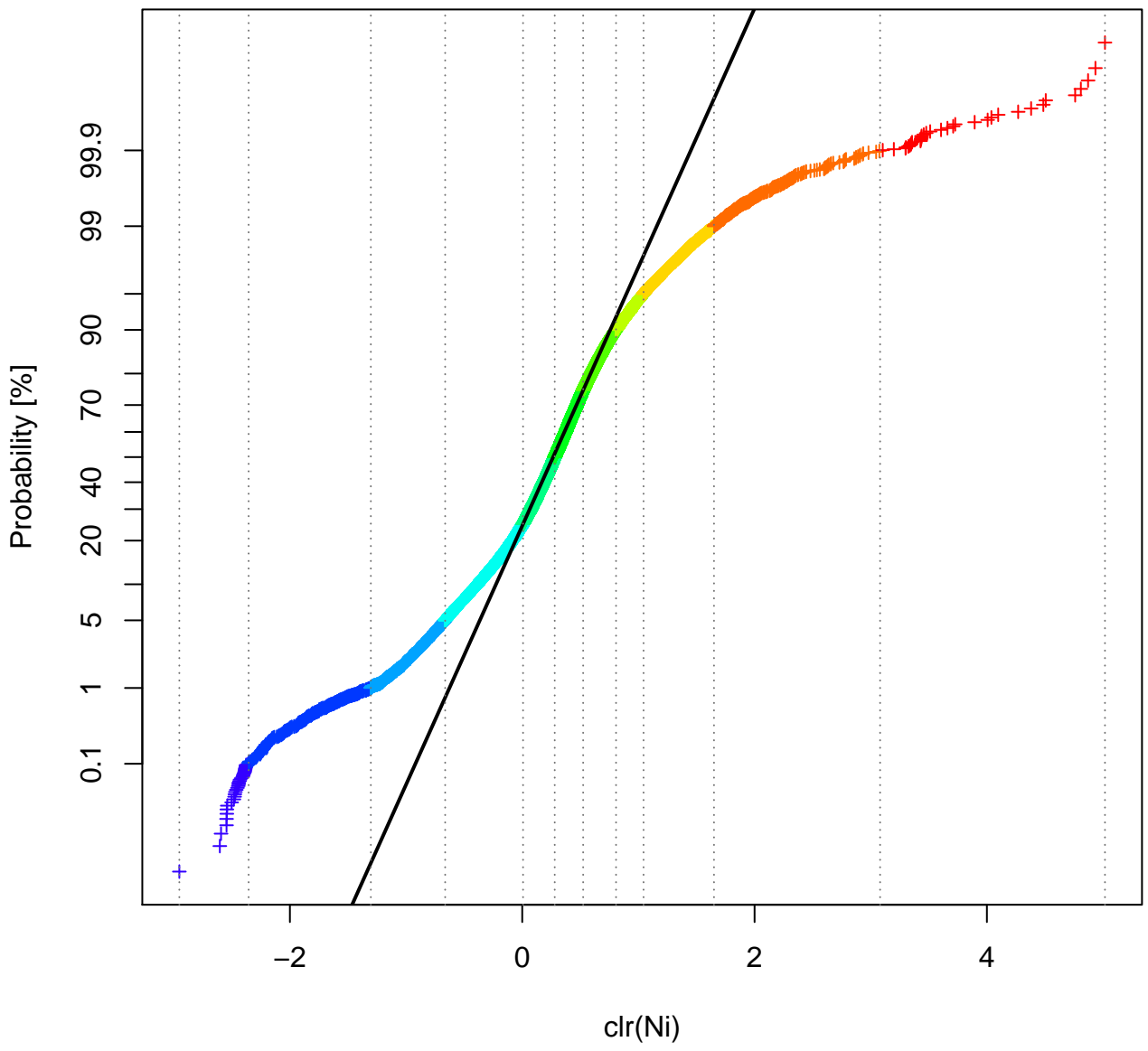
clr(Mo) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



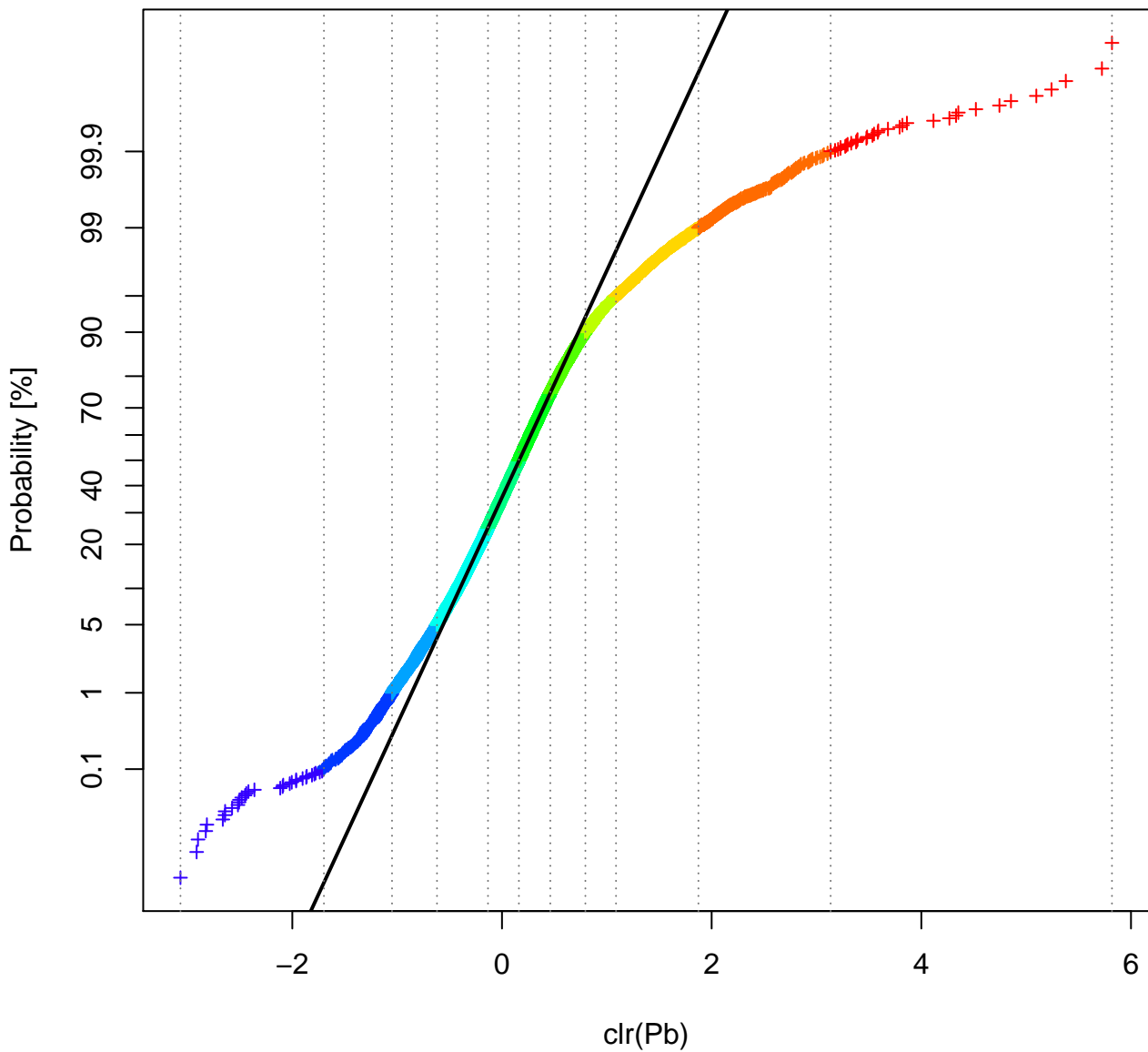
clr(Nb) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



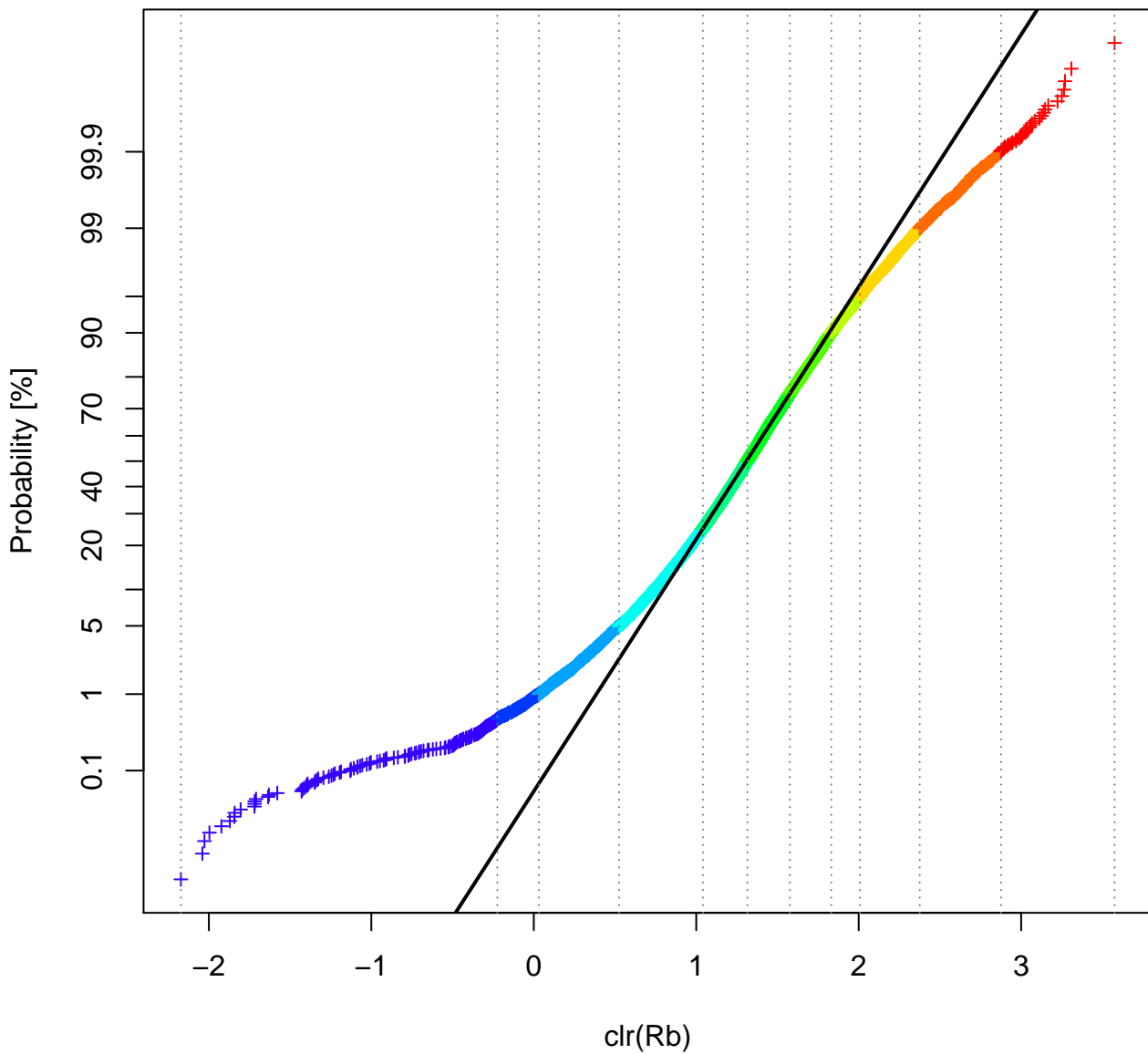
clr(Ni) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



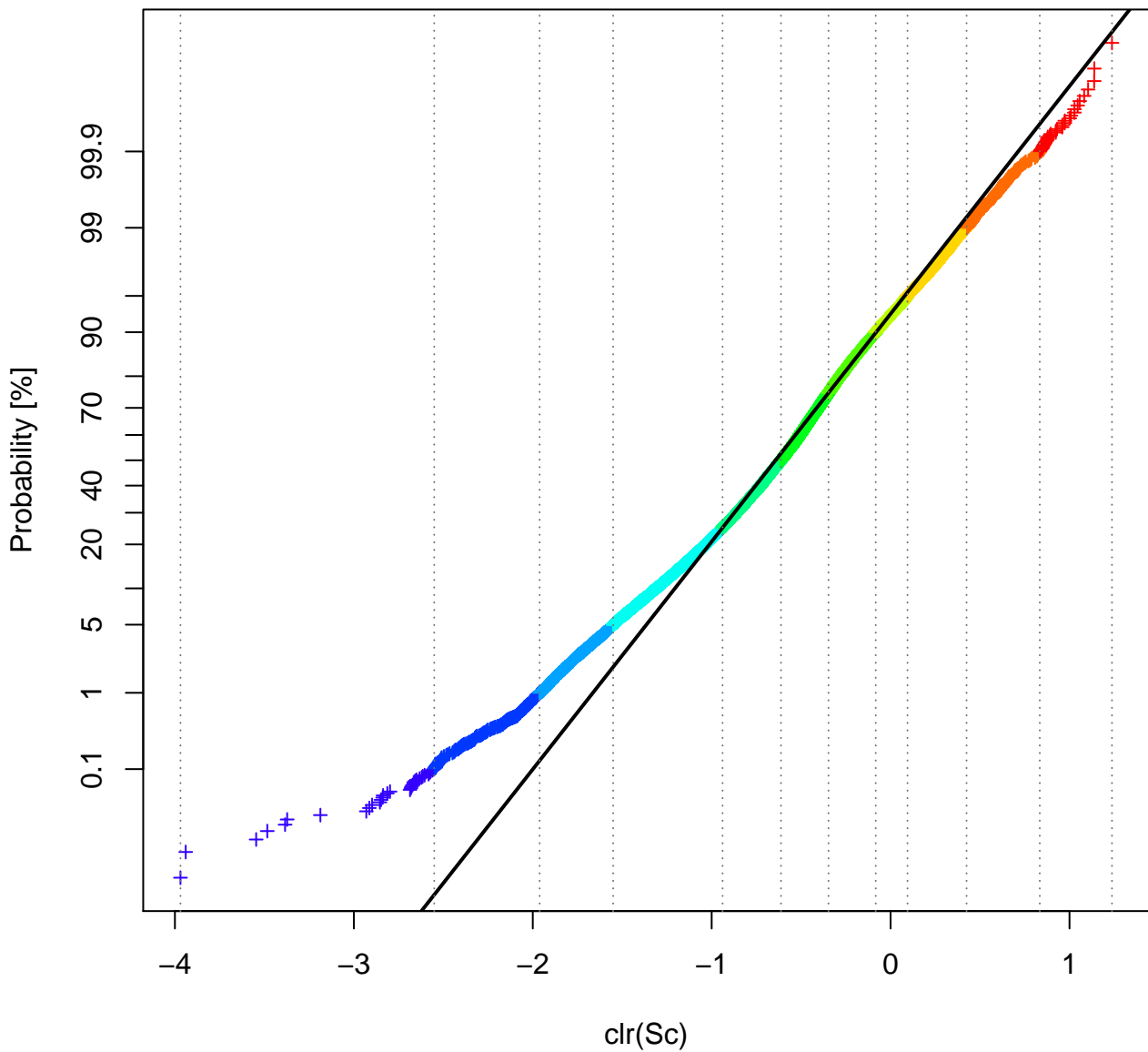
clr(Pb) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



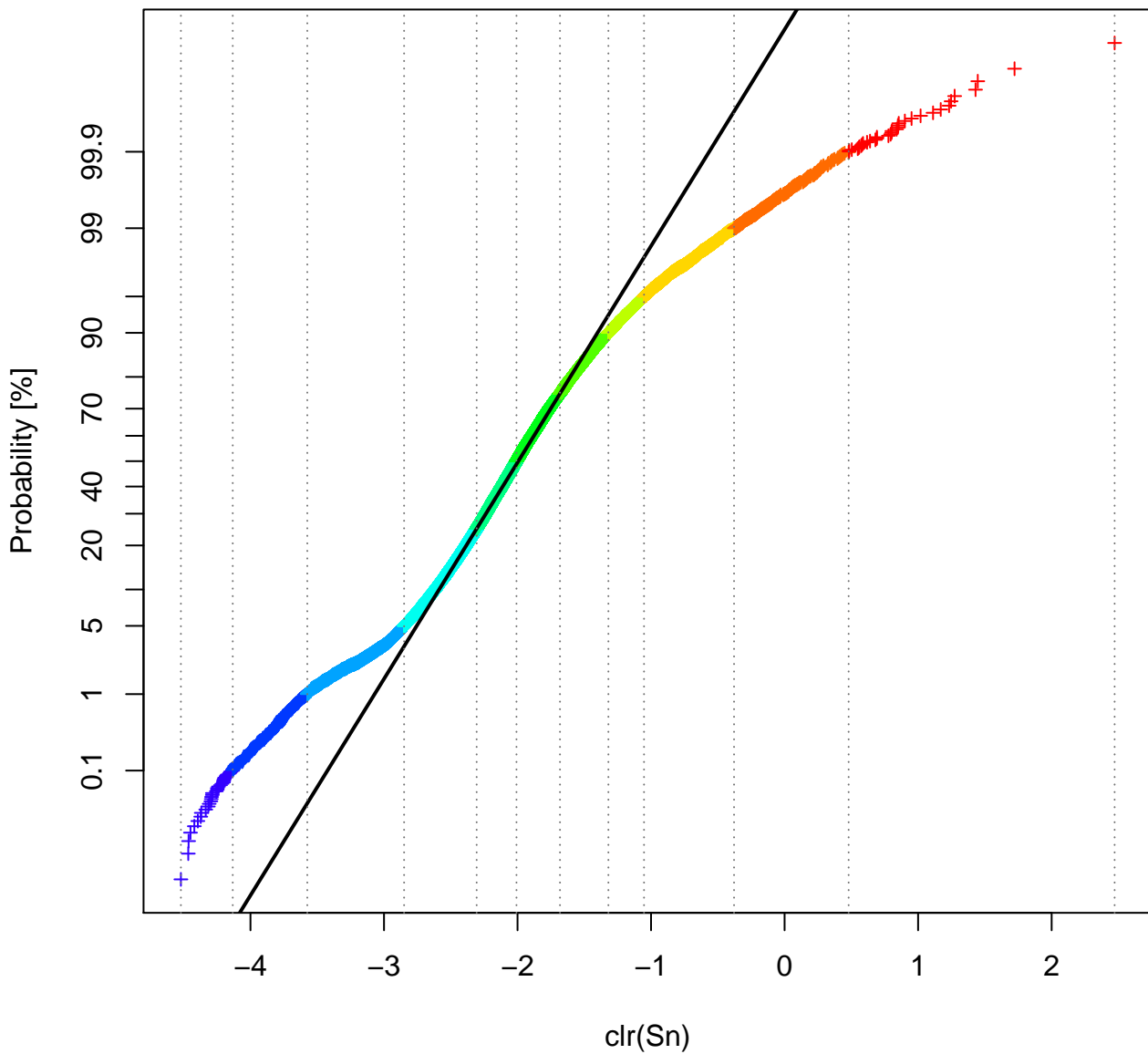
clr(Rb) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



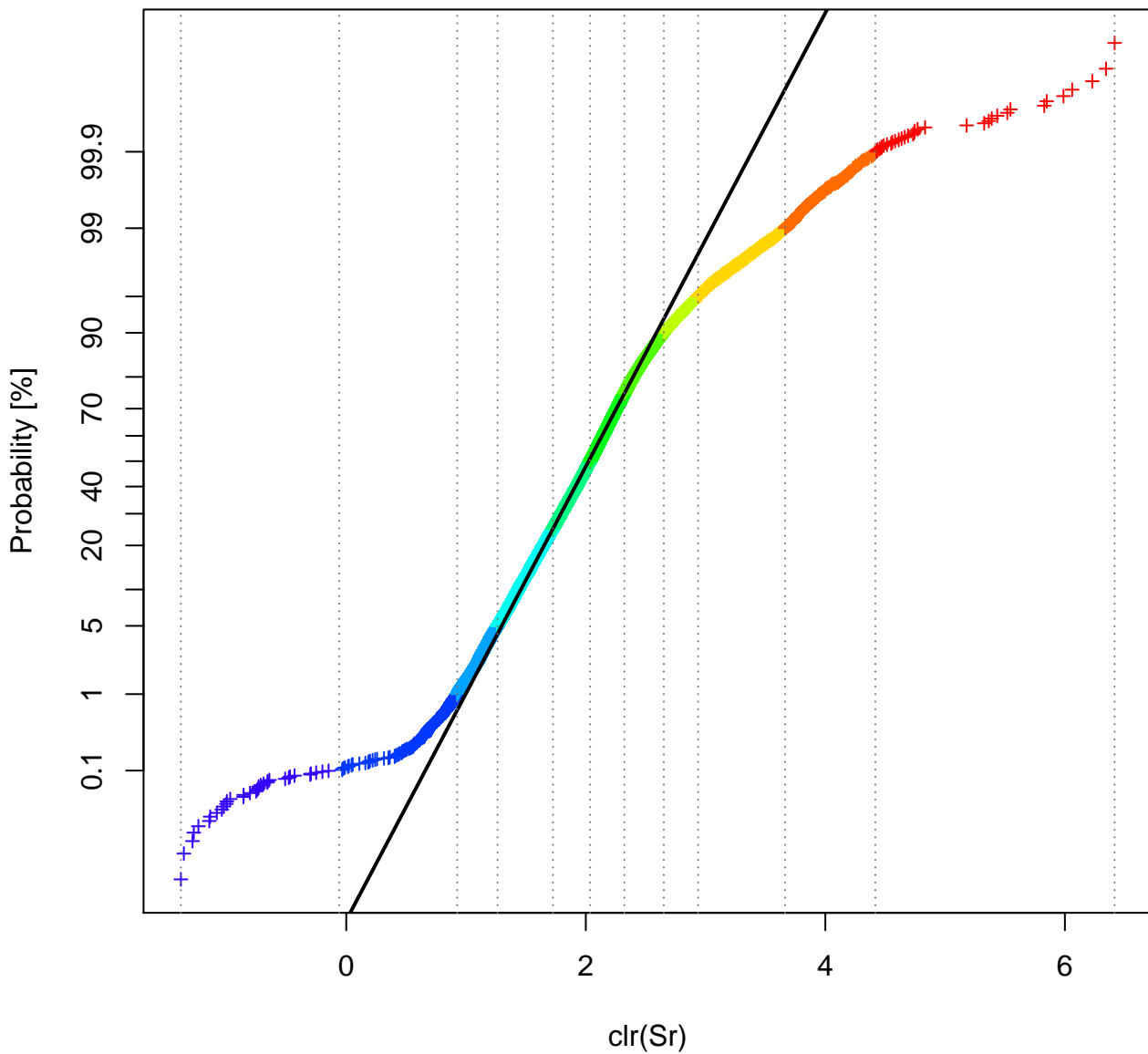
clr(Sc) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



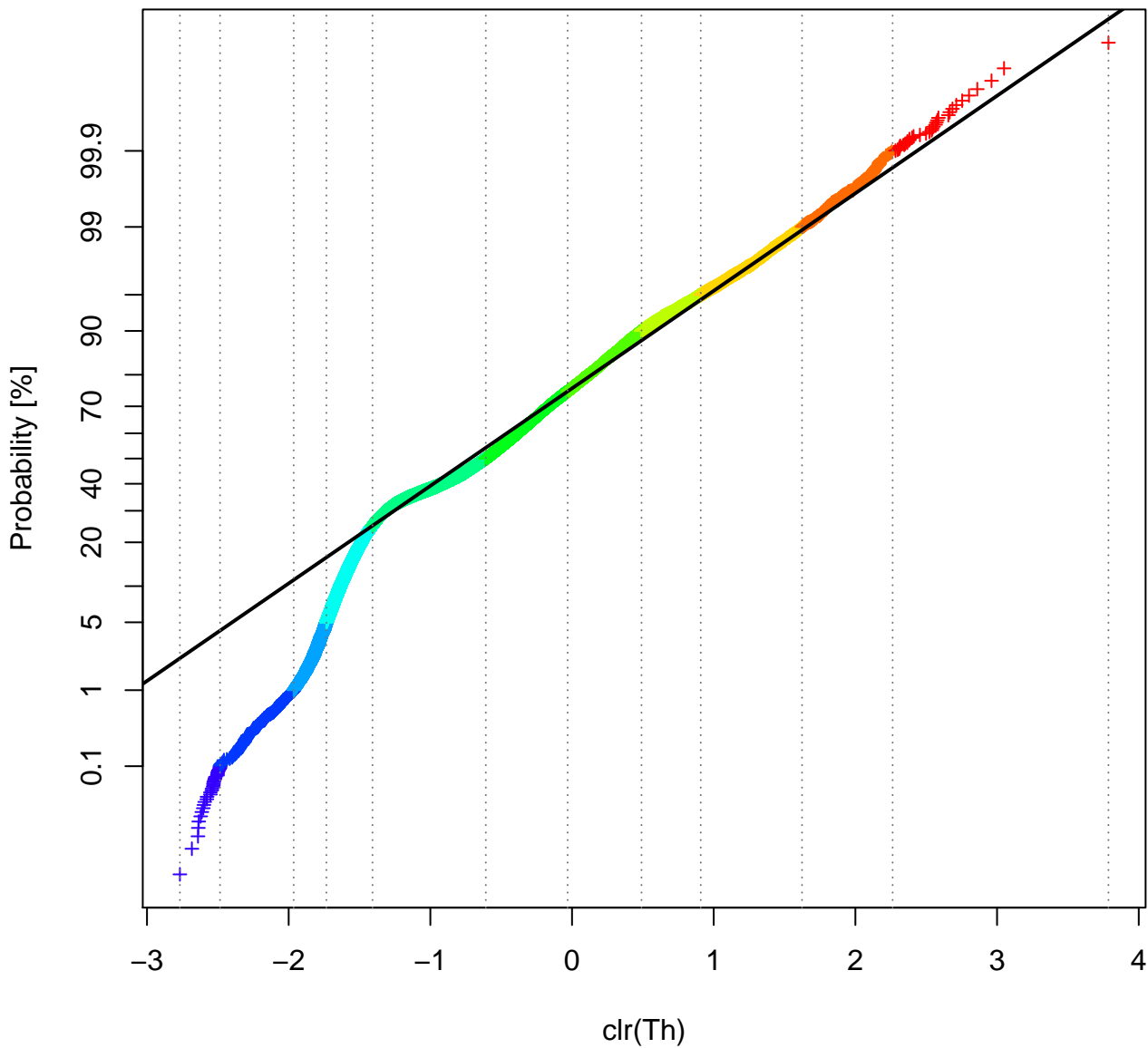
clr(Sn) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



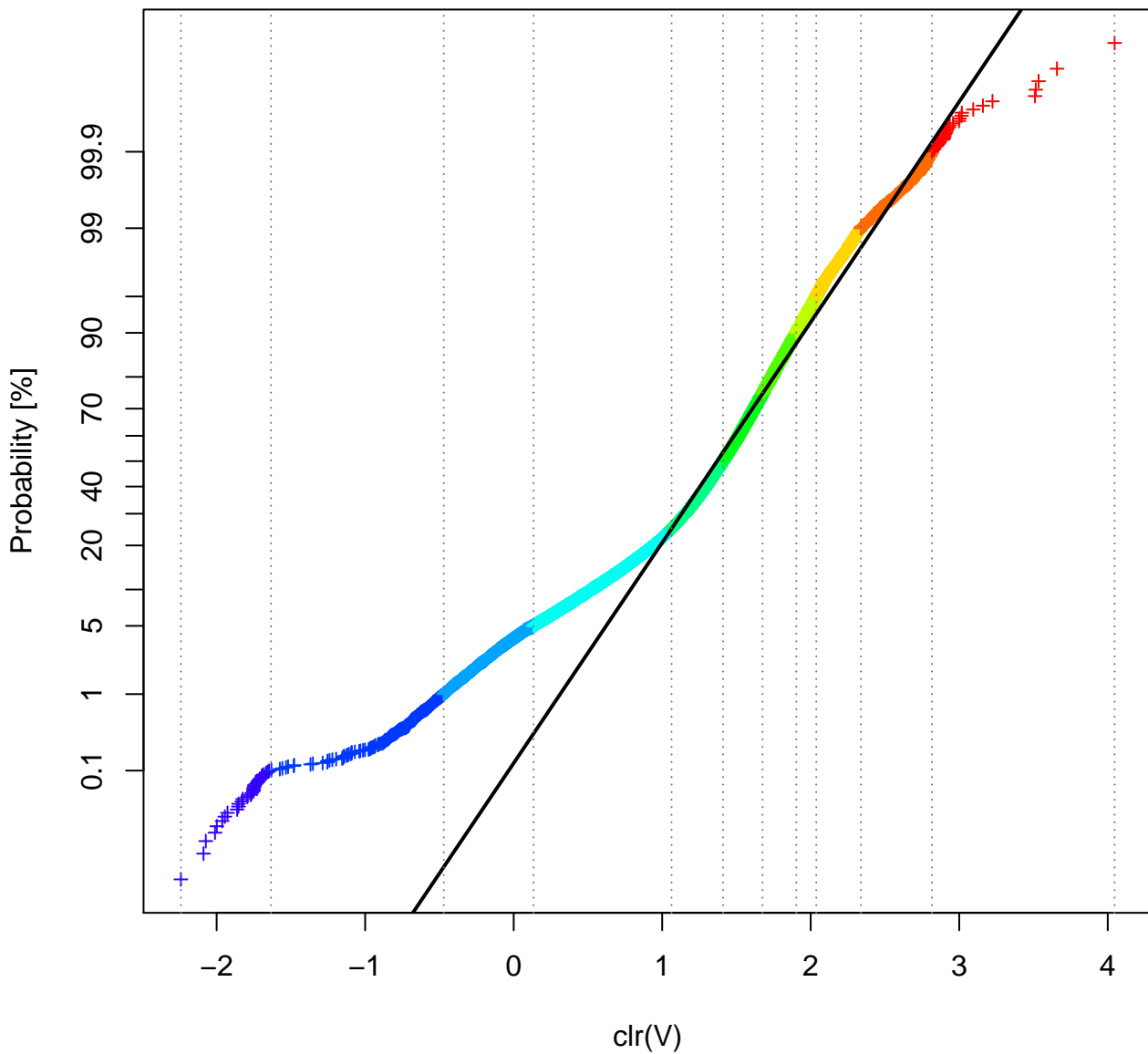
clr(Sr) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



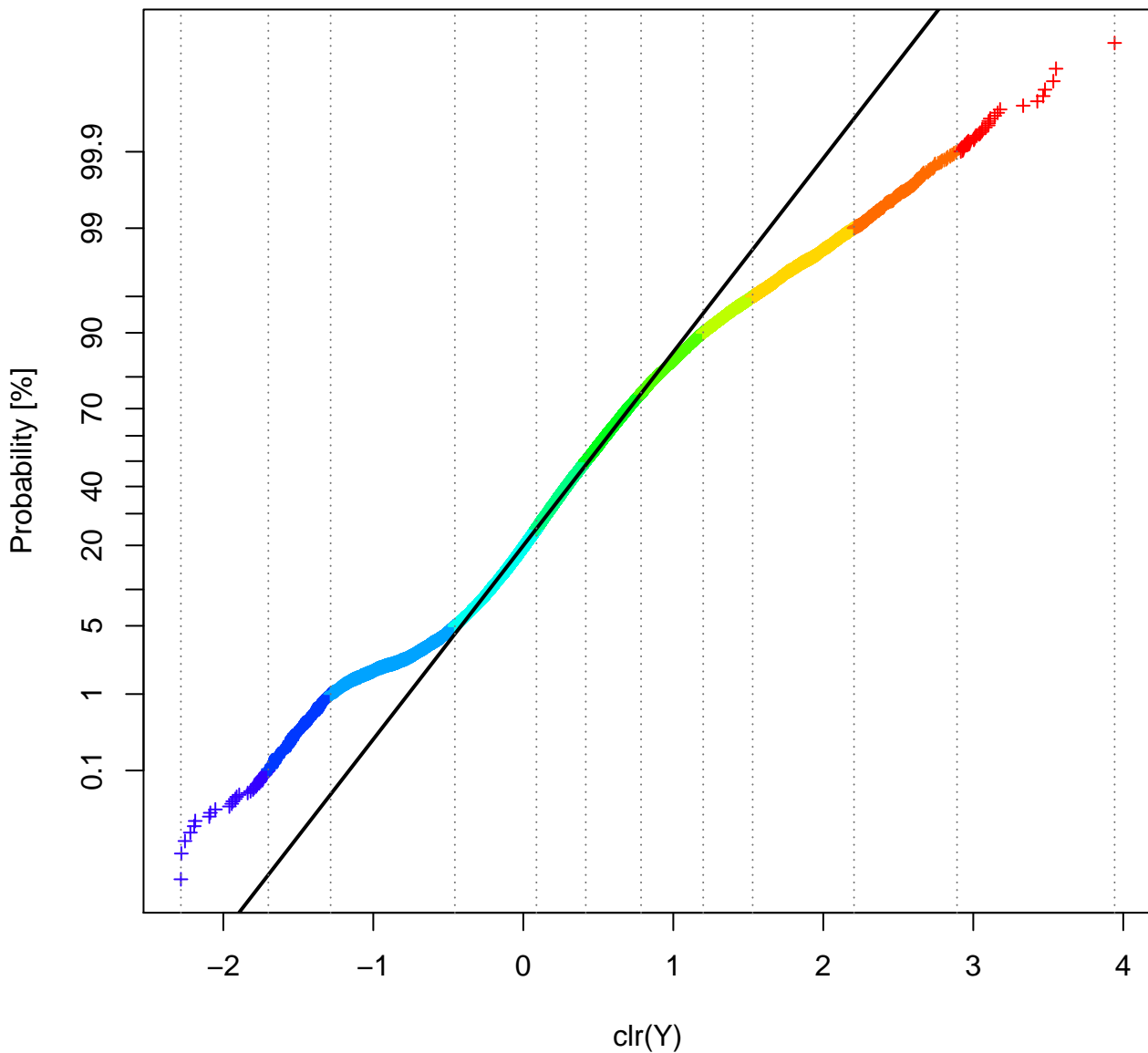
clr(Th) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



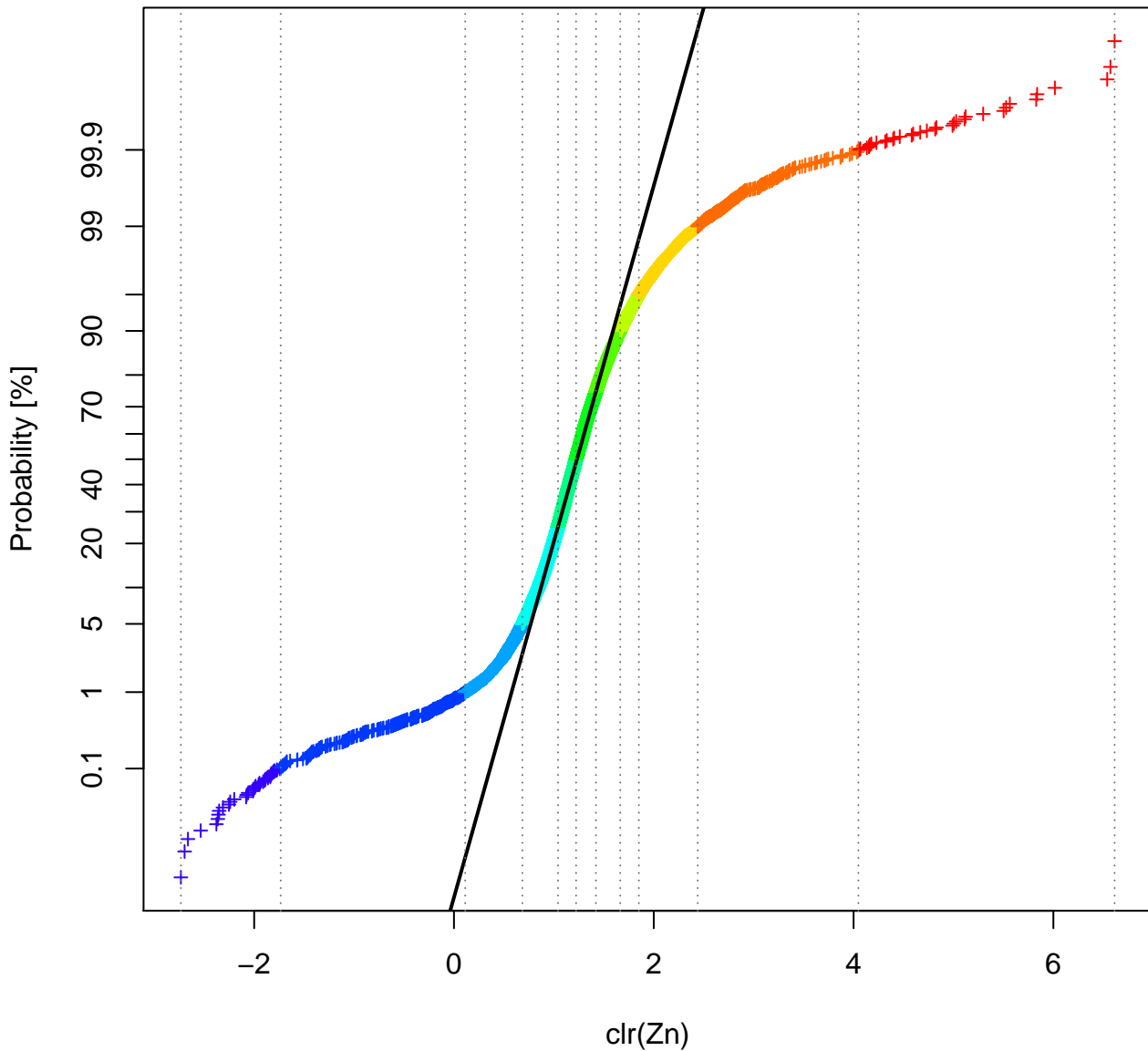
clr(V) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



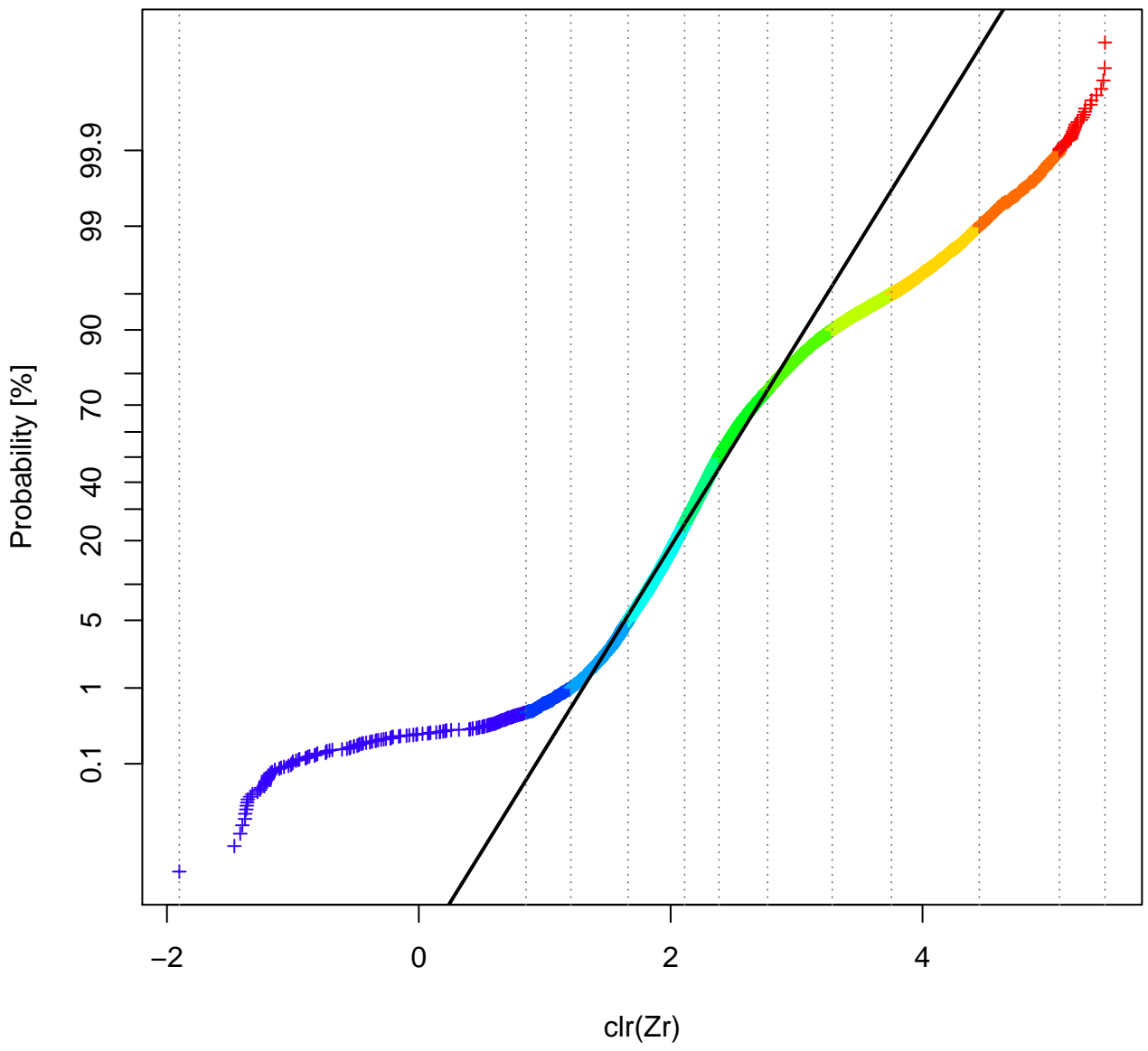
clr(Y) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



clr(Zn) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



clr(Zr) : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1





BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG, WISSENSCHAFT & FORSCHUNG

GEOLOGISCHE BUNDESANSTALT

FA ROHSTOFFGEOLOGIE

Titel

Flächenkarten der Spurenelemente: Vergleich der Absolutwerte mit den cl_r -Koeffizienten

Projekt

ÜLG-070 2019 IRIS-Online

Sachbearbeiter

Th. Filzmoser &
P. Filzmoser

Seiten

22

Datum

Sept. 2019

Datenbank

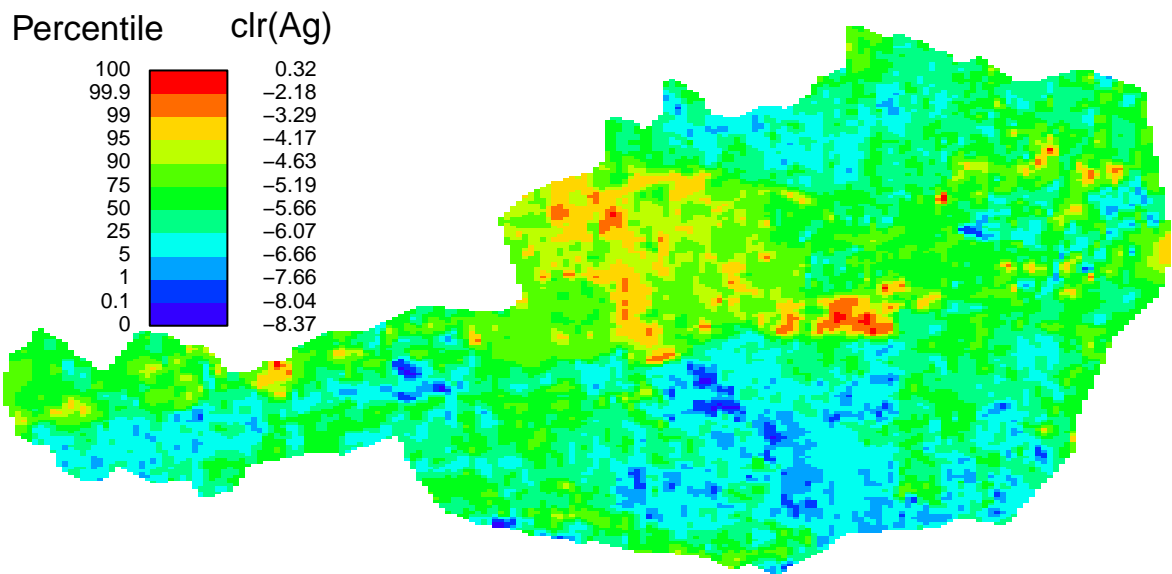
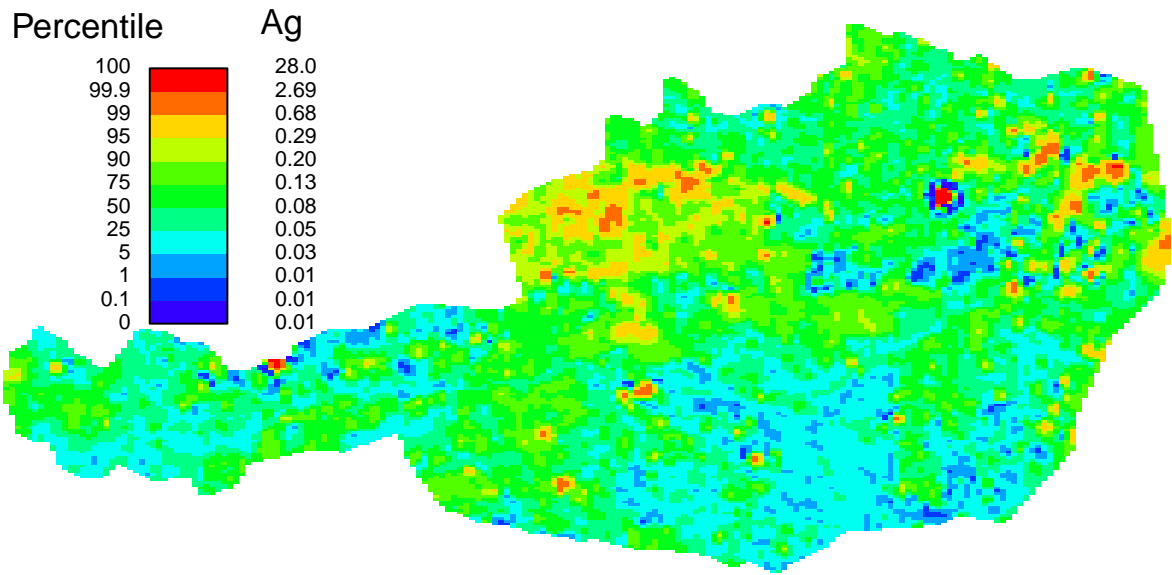


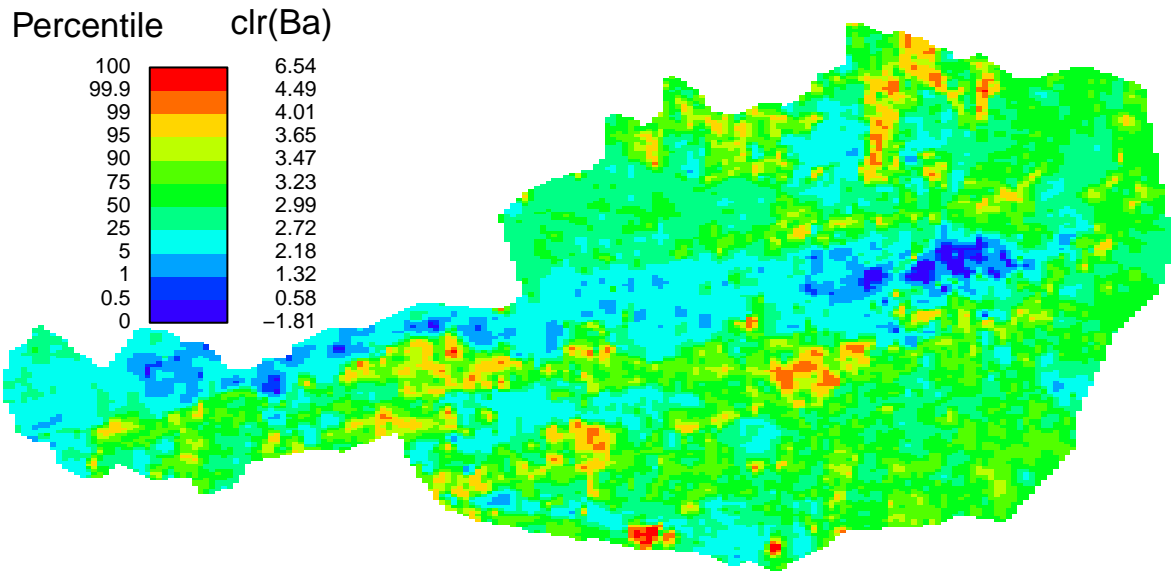
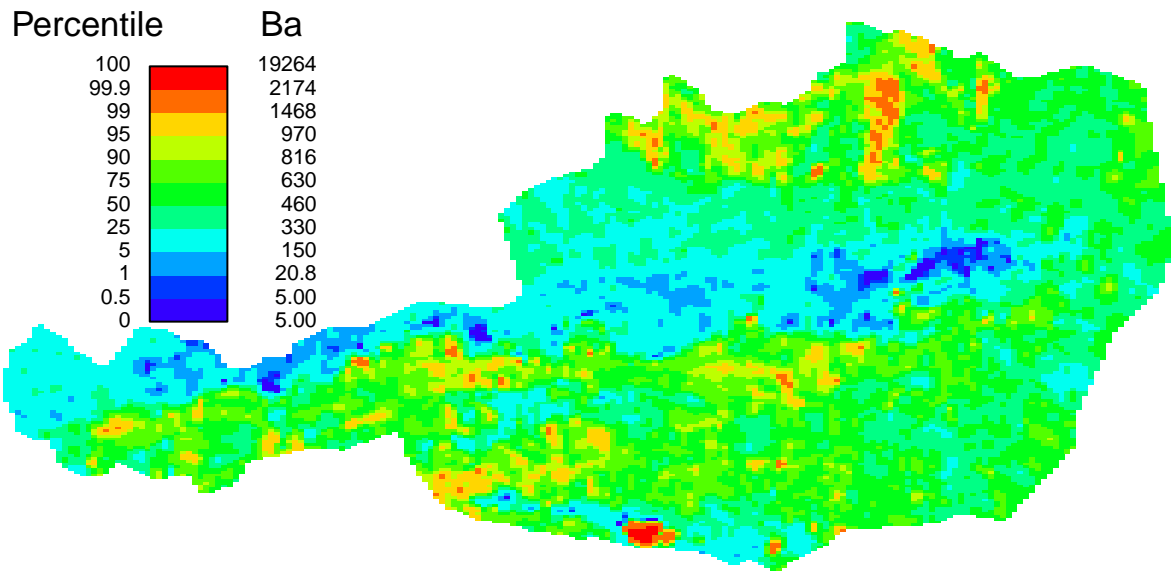
Geologische Bundesanstalt
Neulinggasse 38,
A-1030 Wien

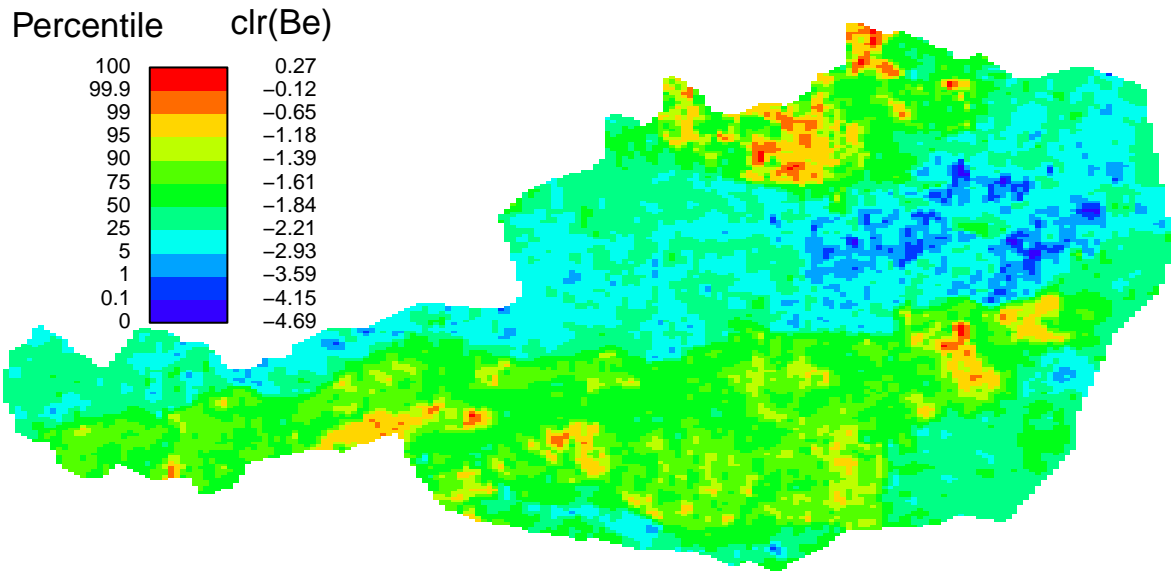
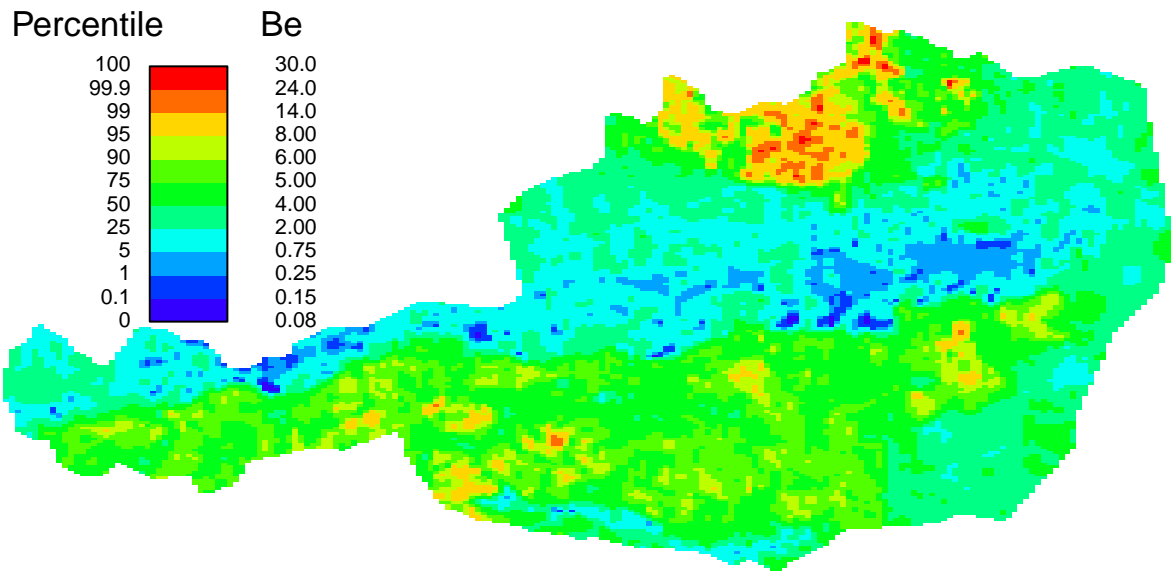
Beilage Nr.

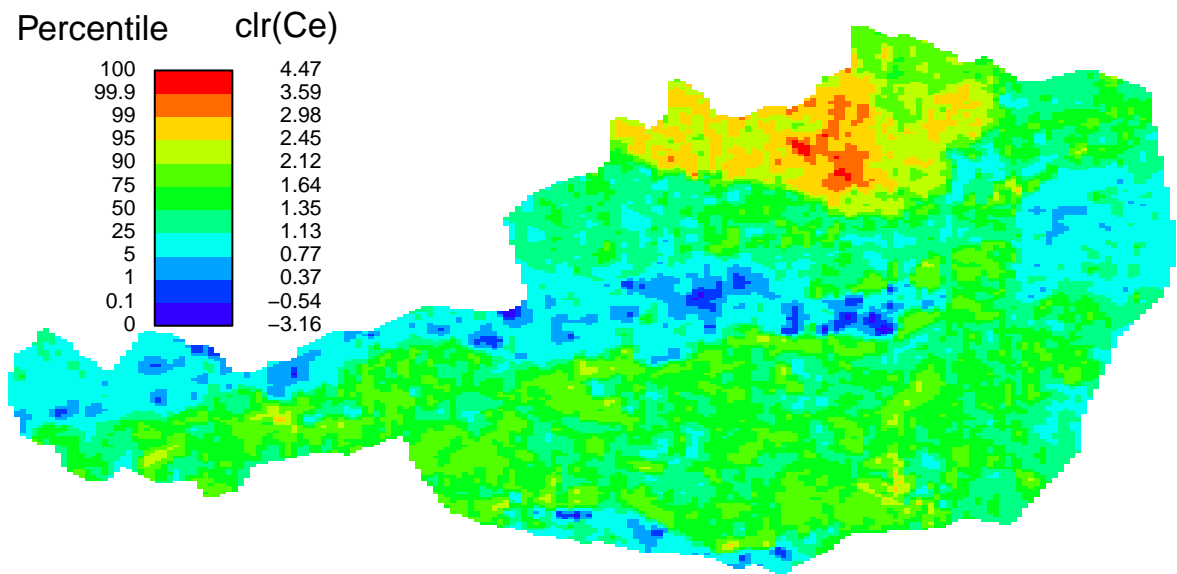
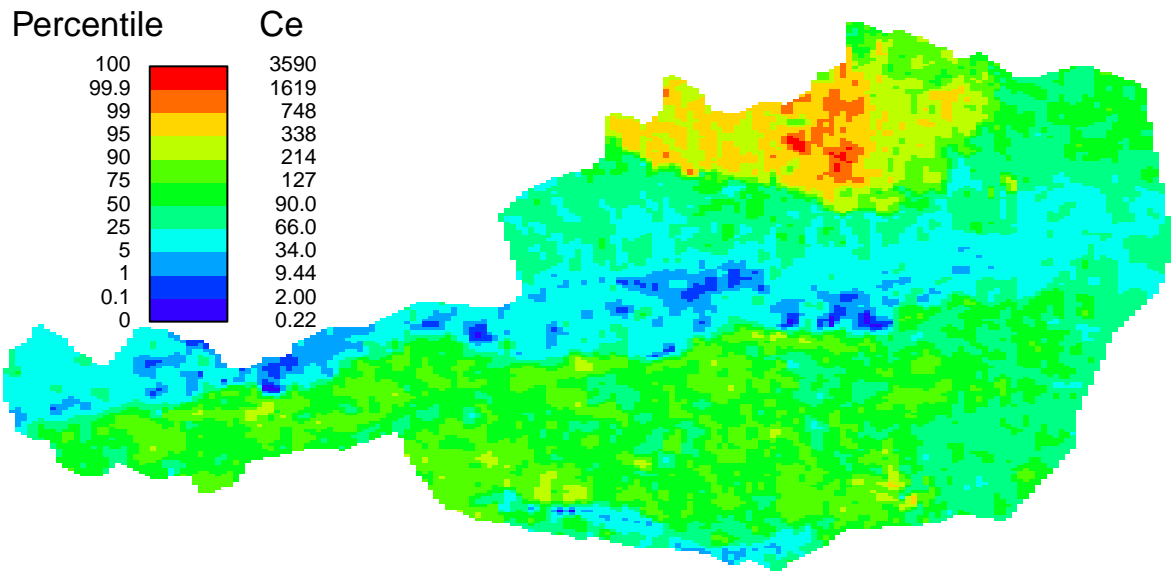
Anhang 7

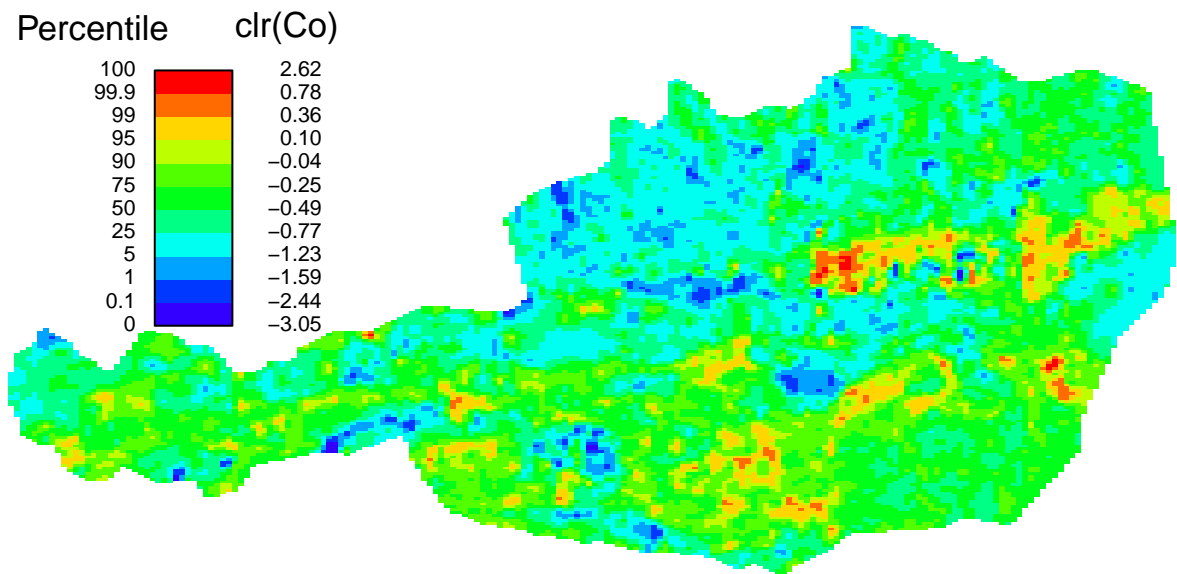
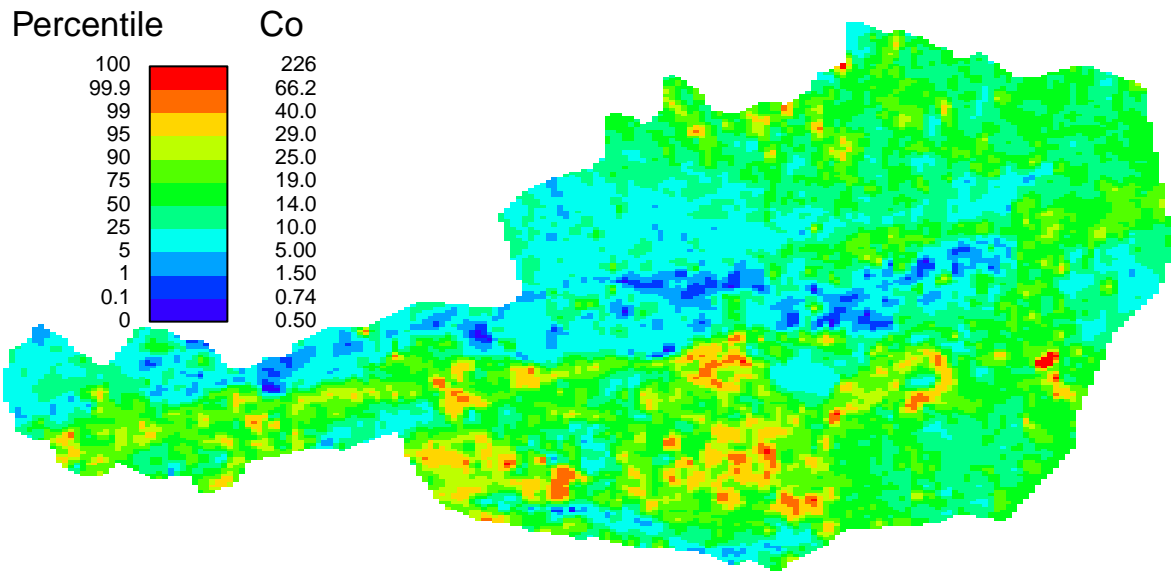
Nur für den Dienstgebrauch

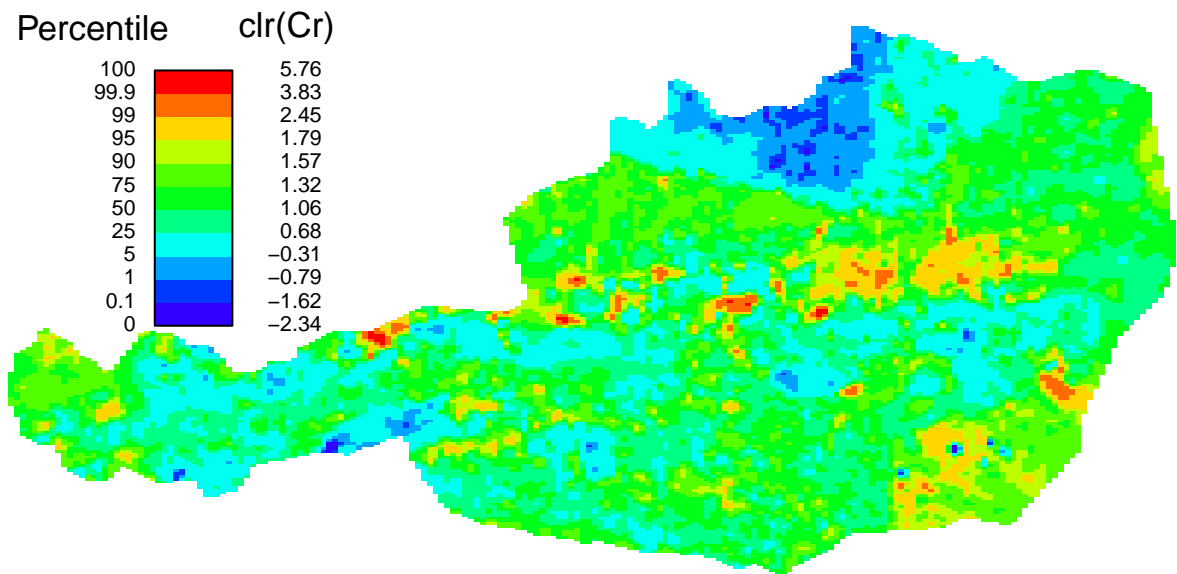
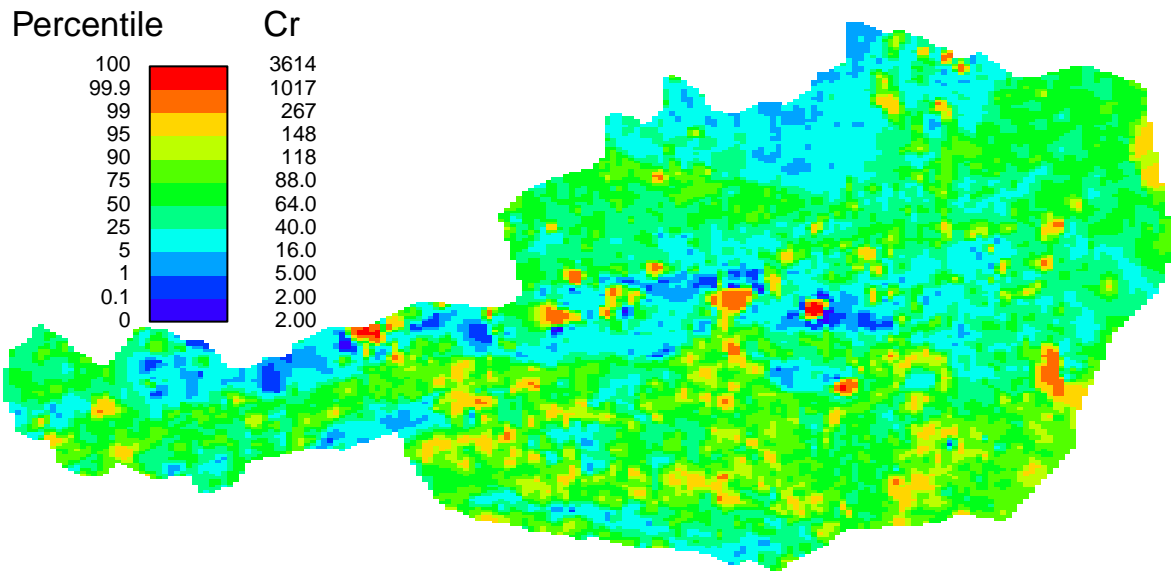


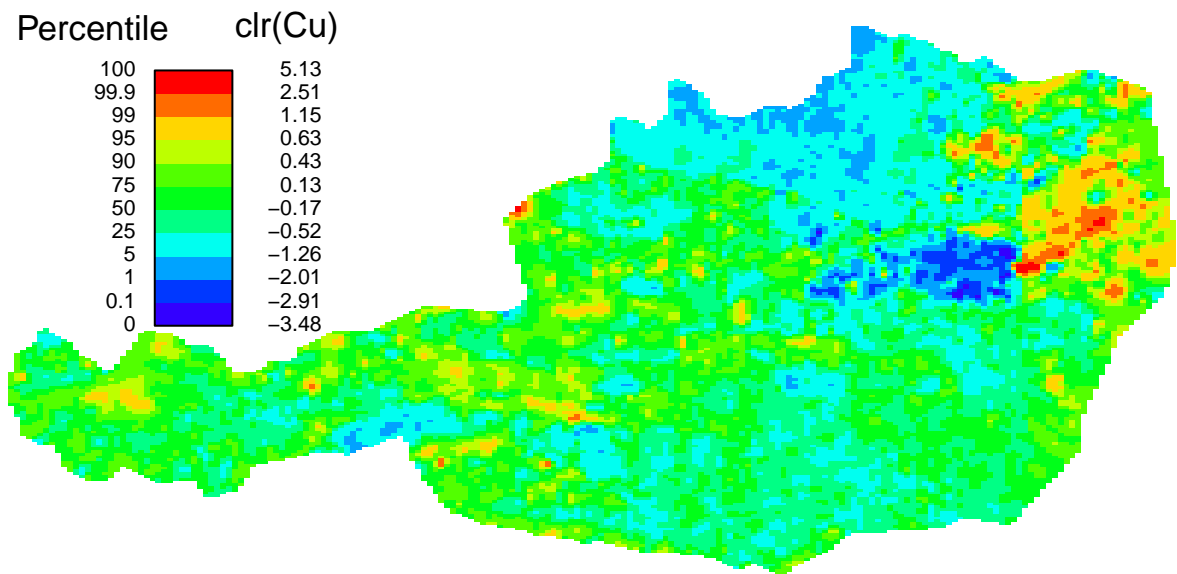
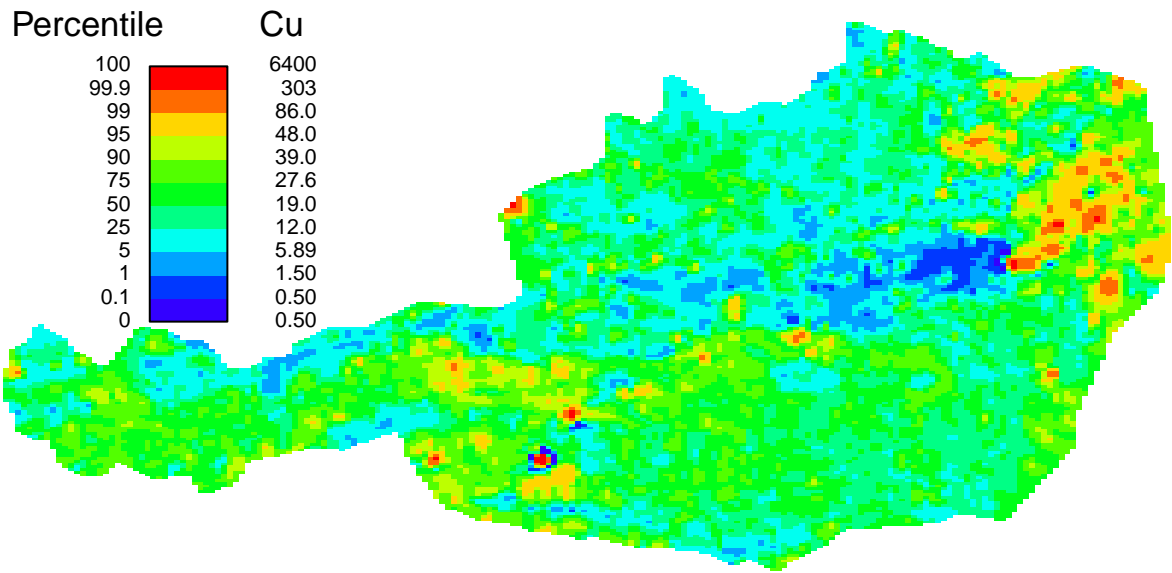


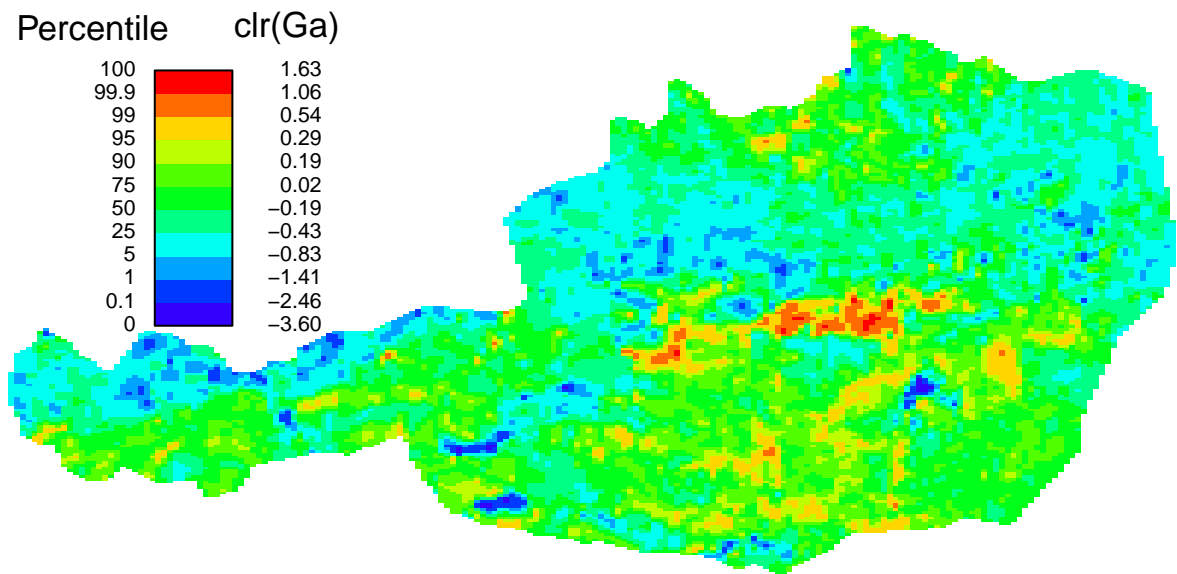
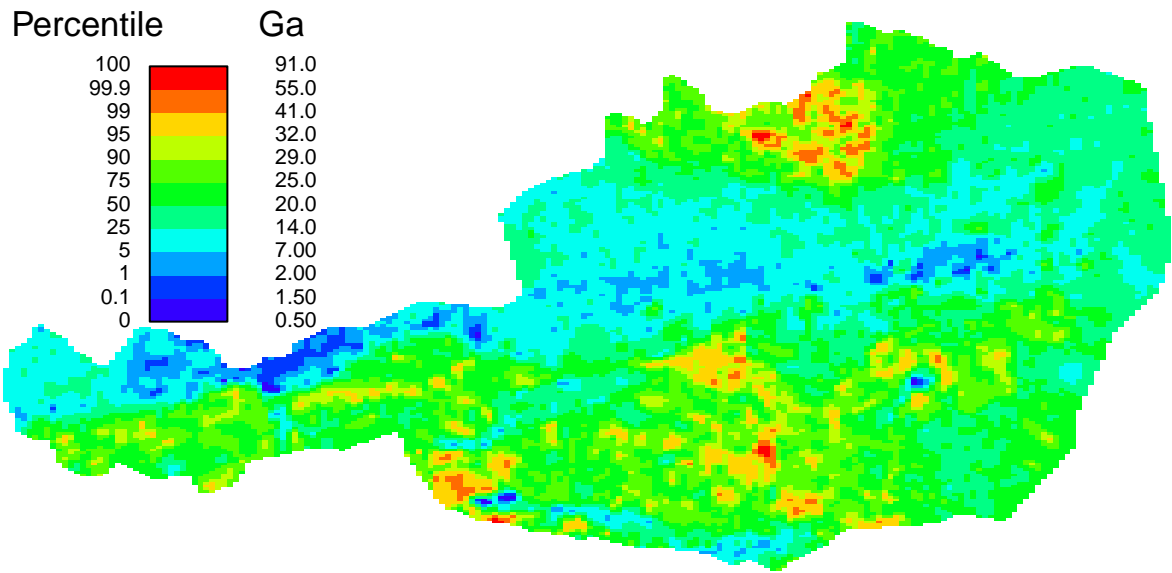


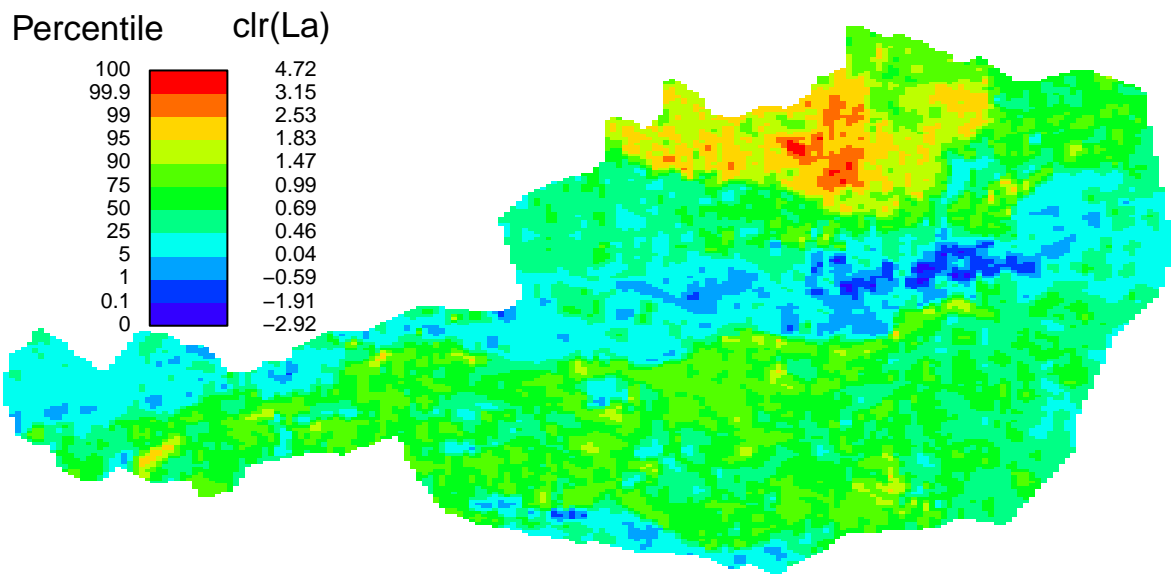
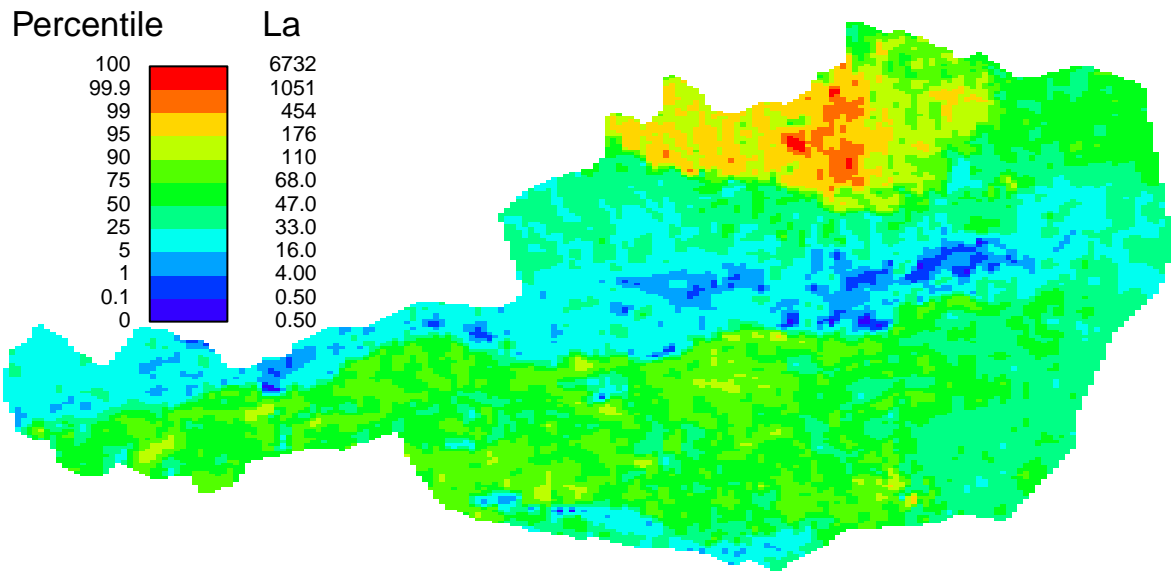


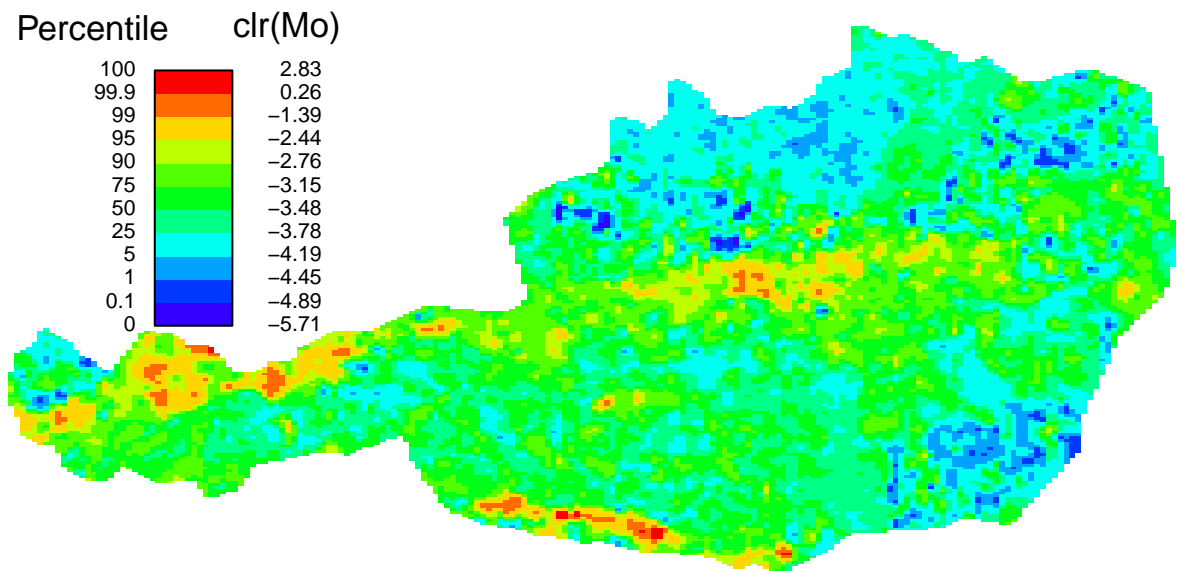
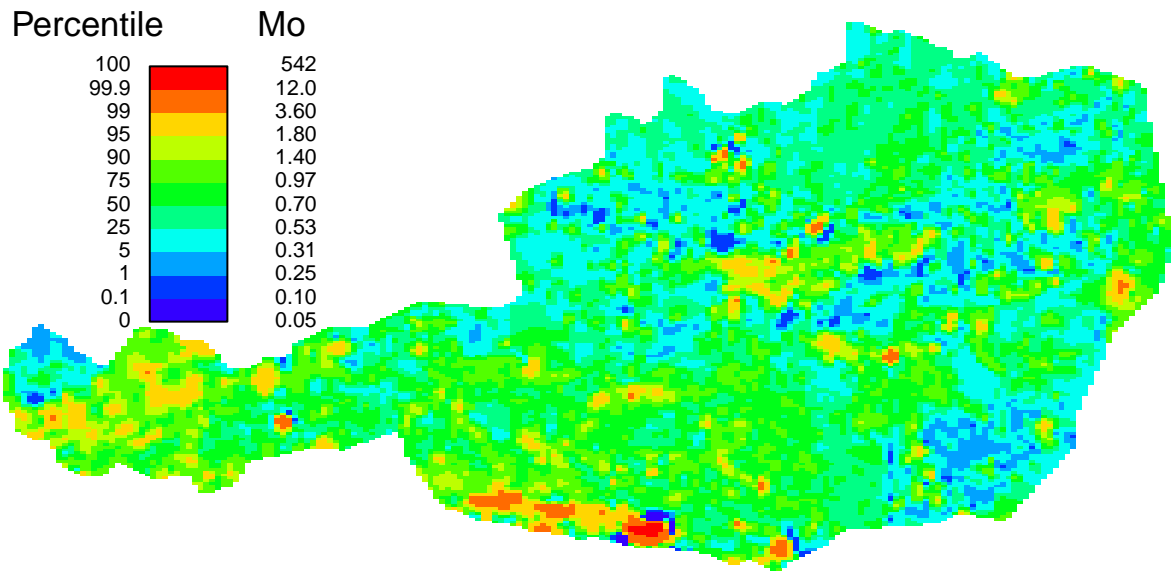


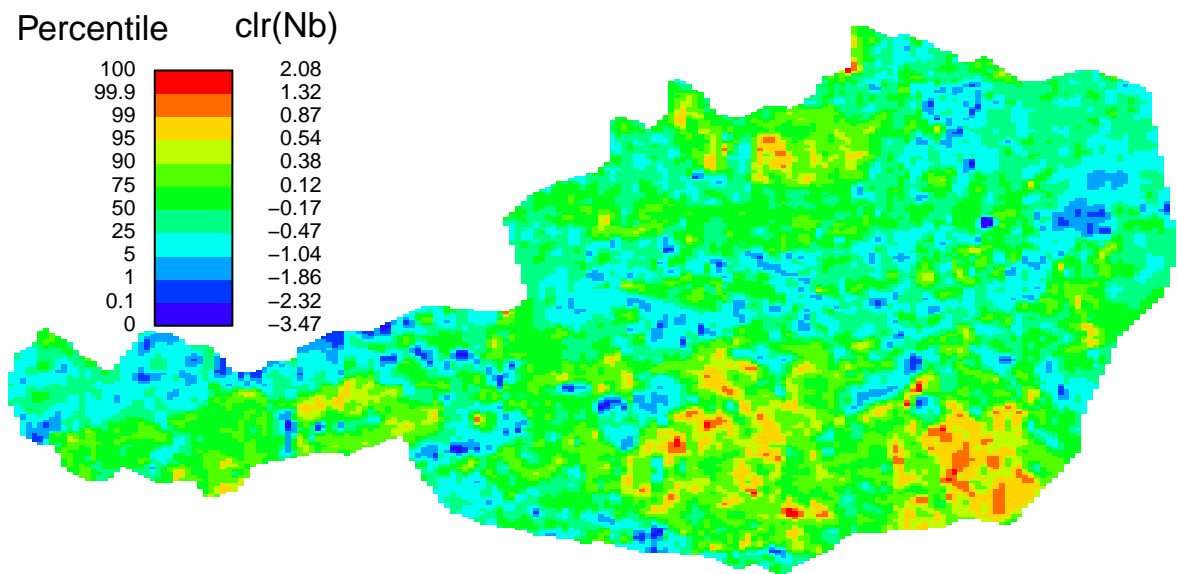
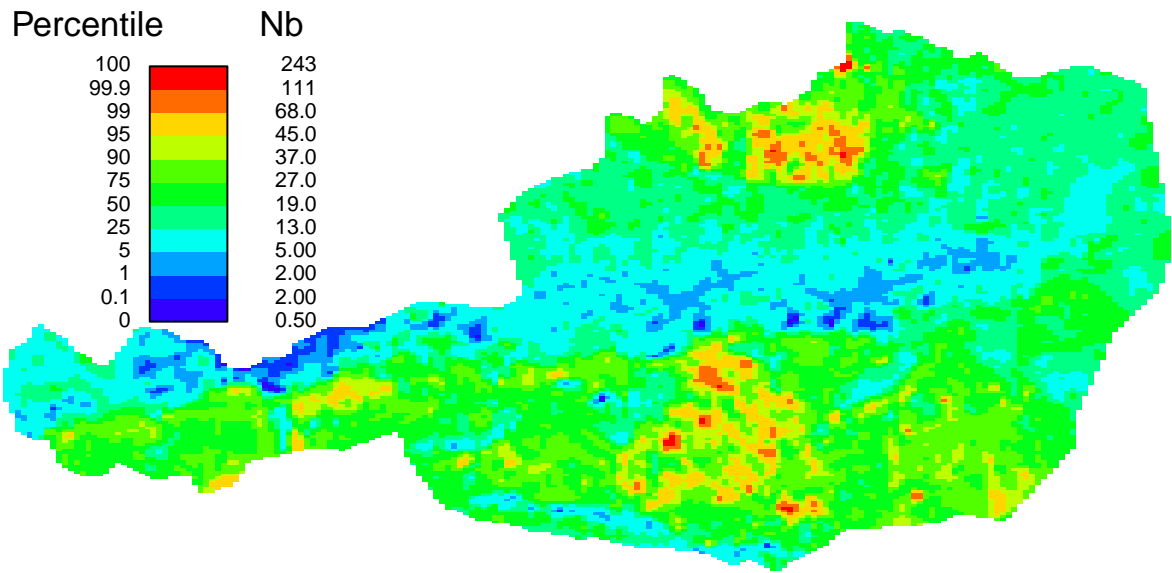


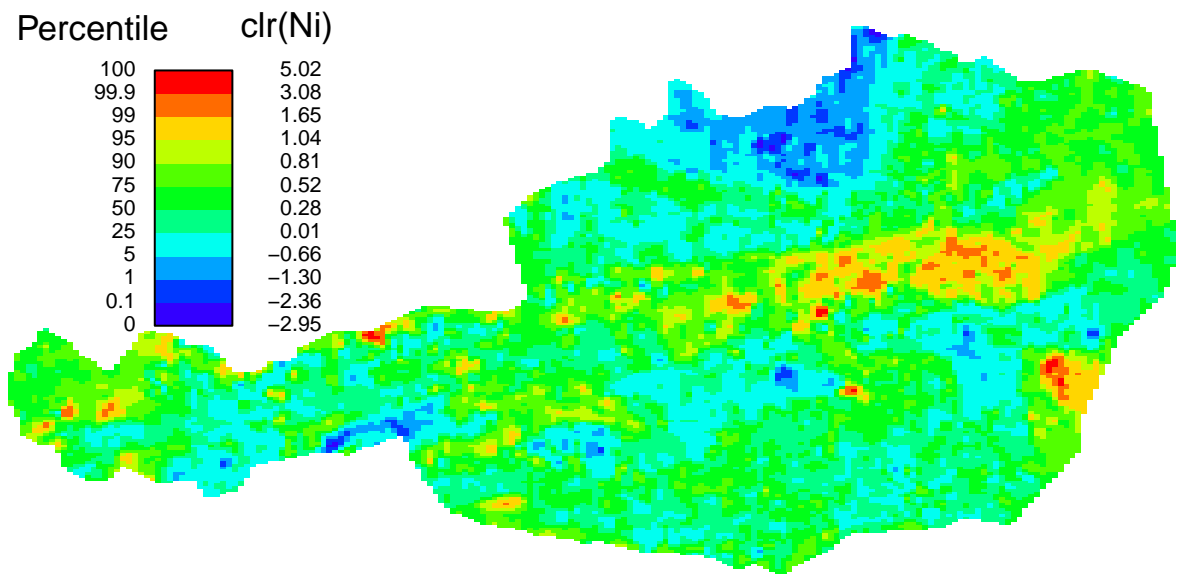
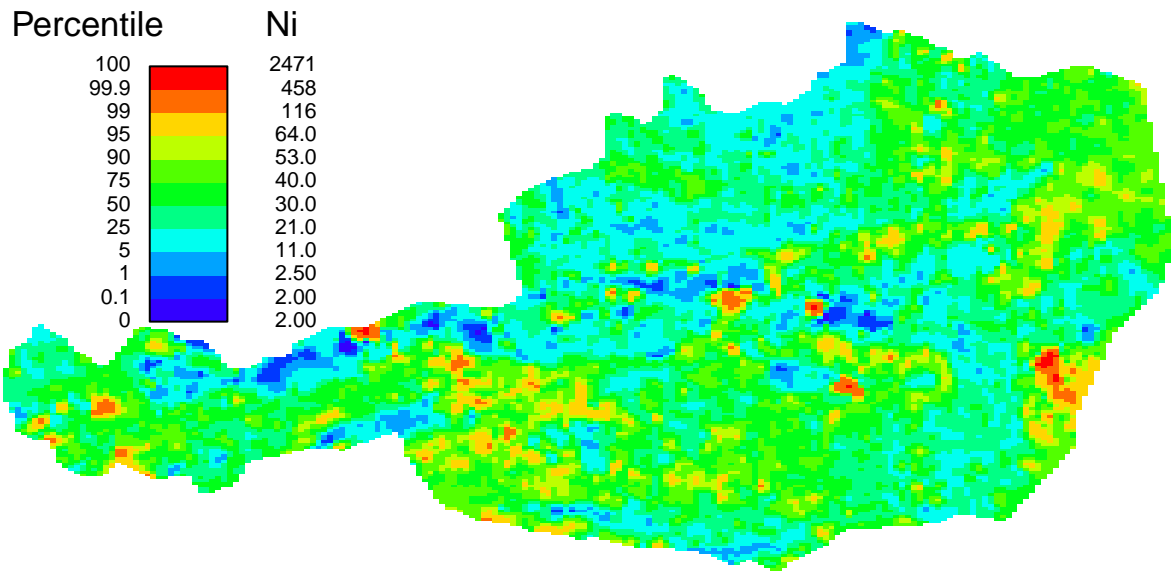


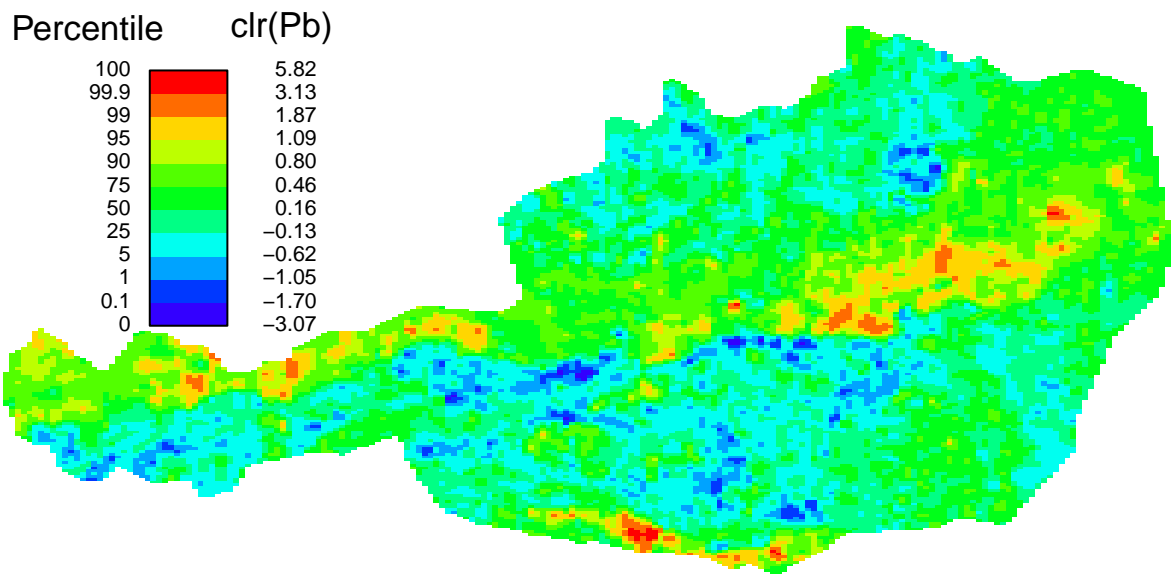
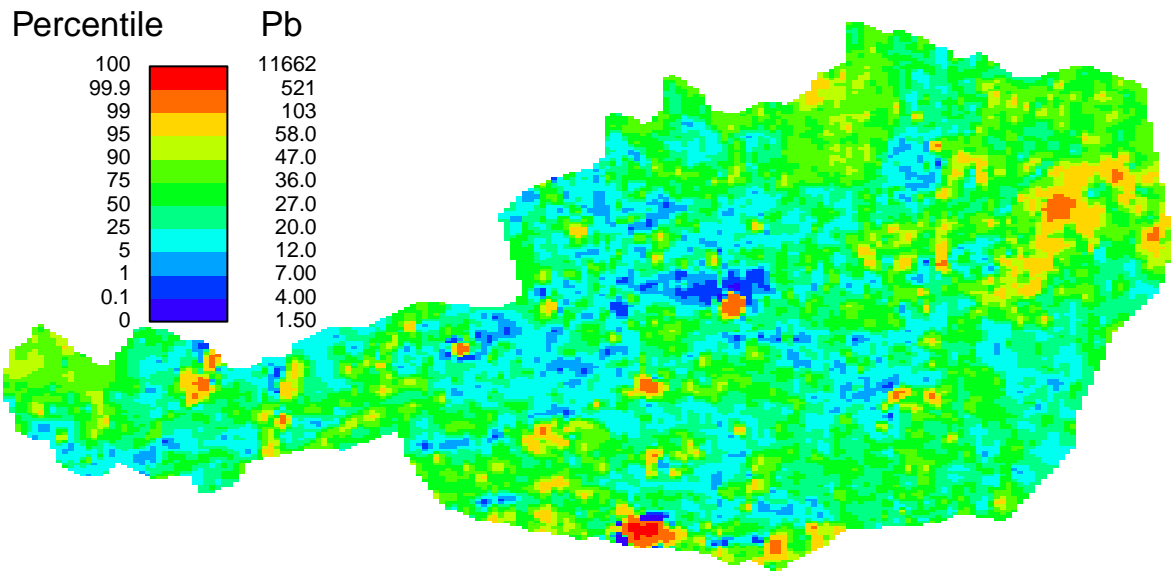


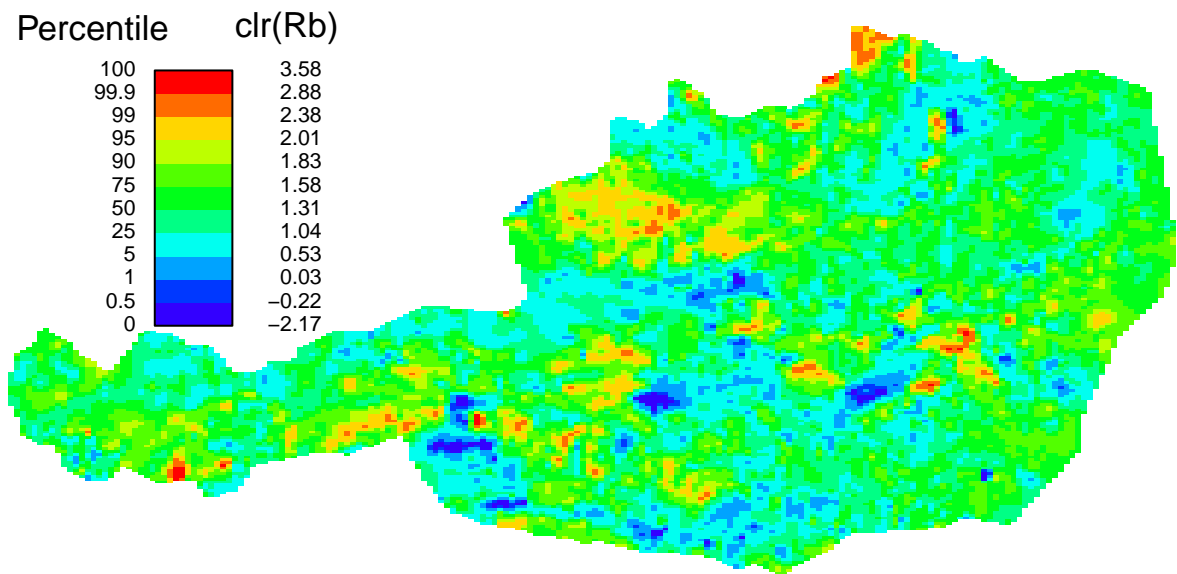
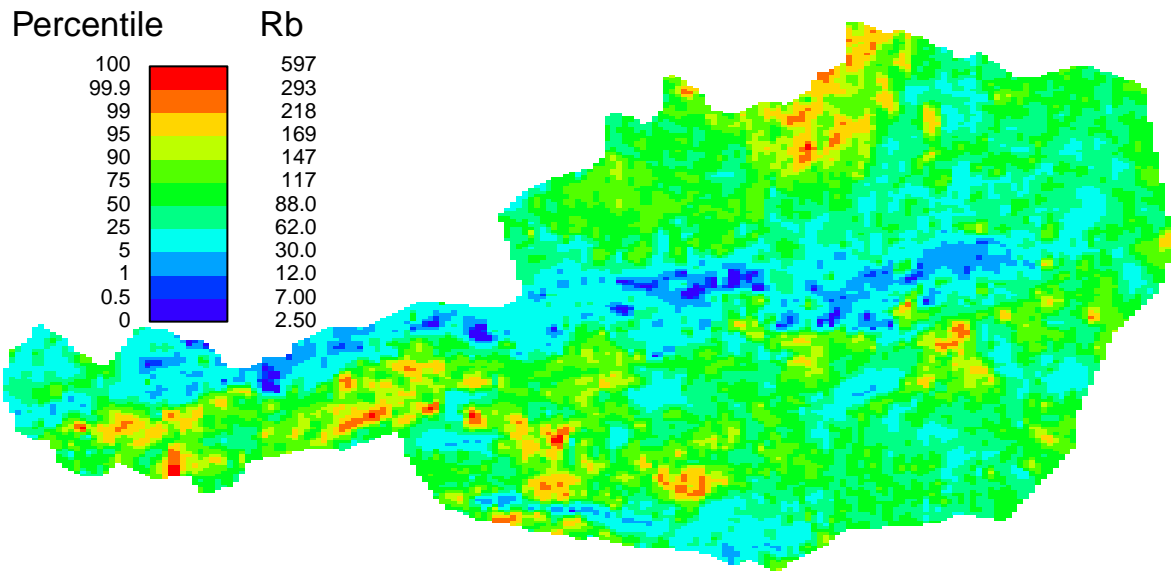


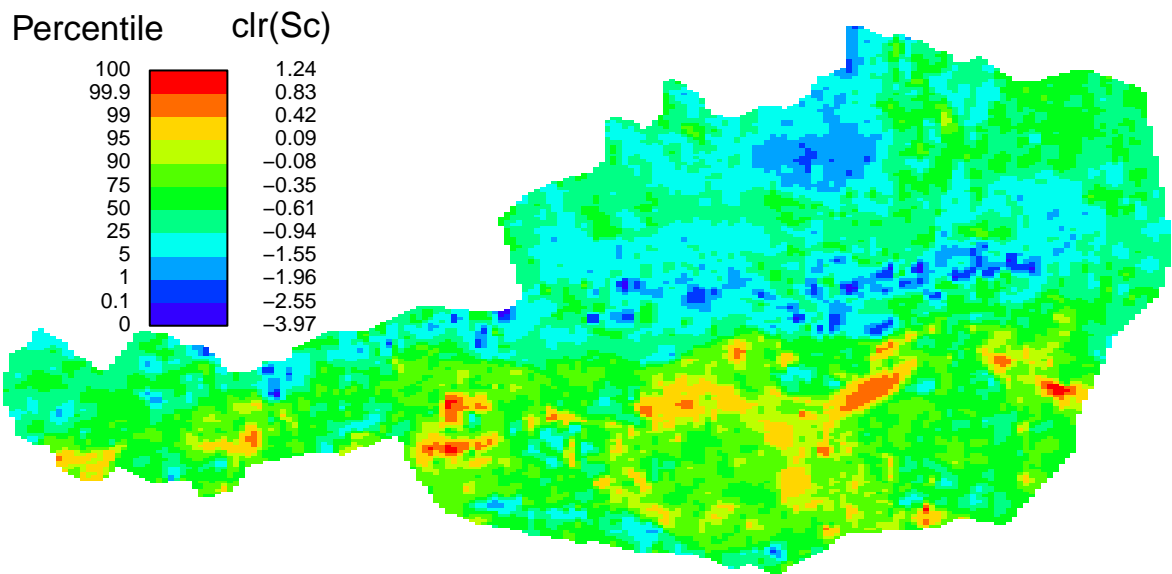
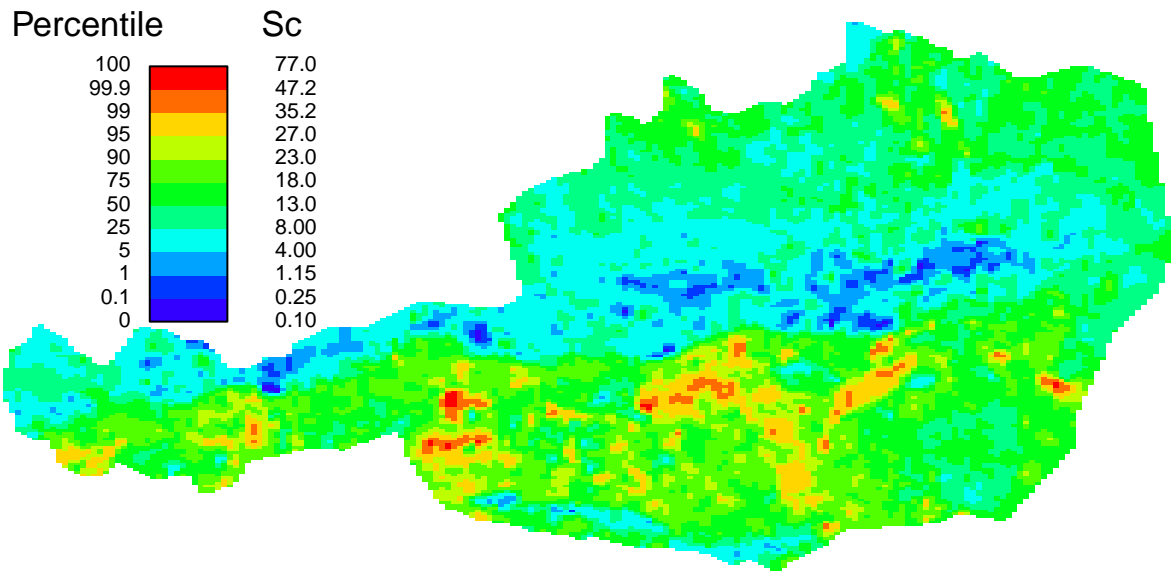


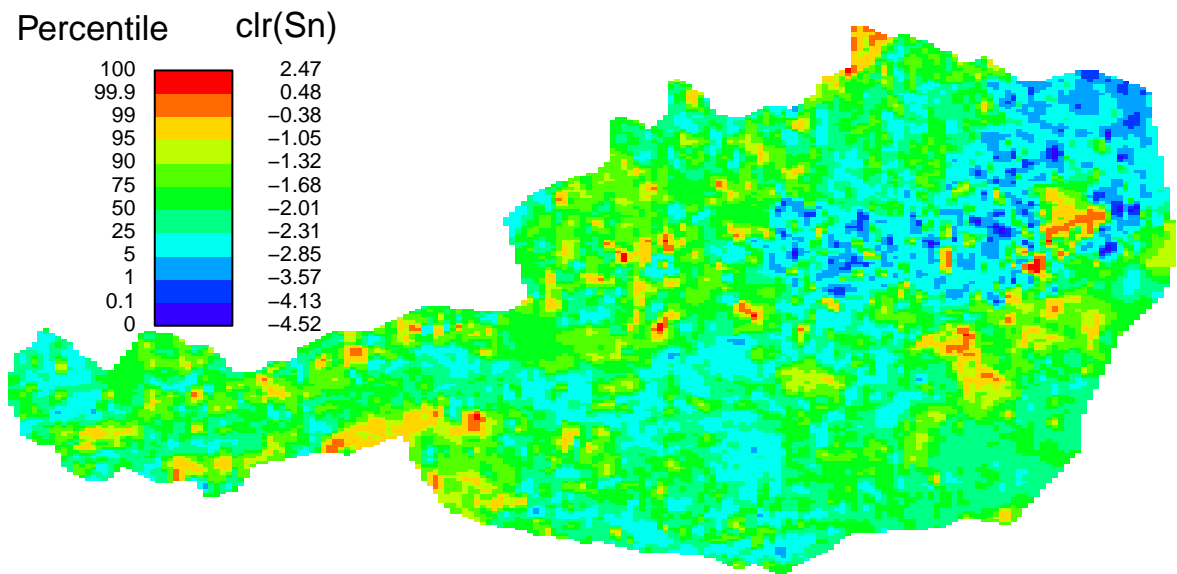
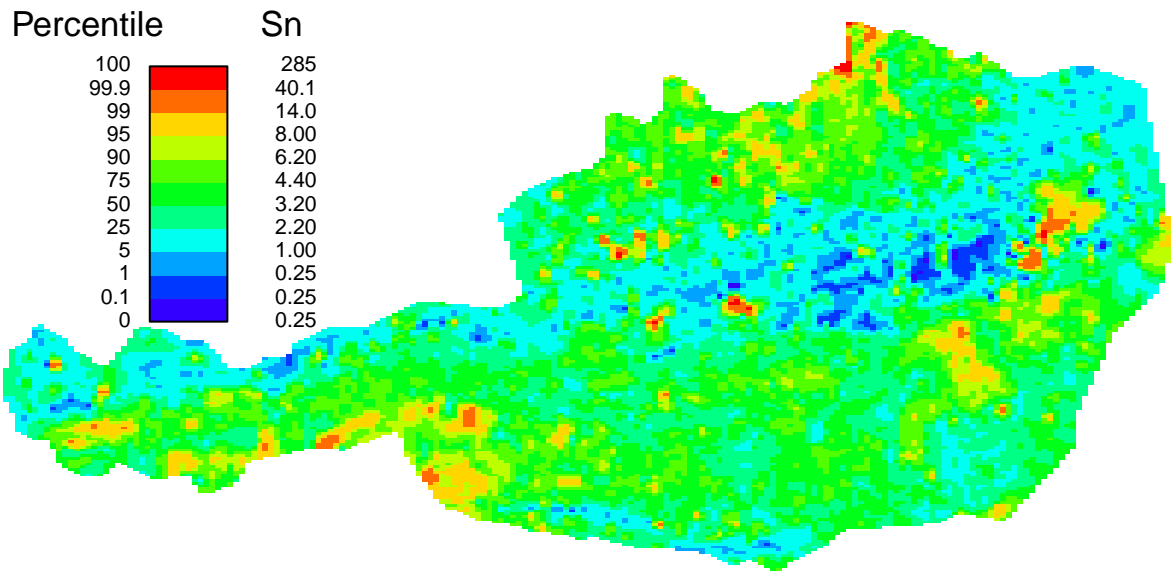


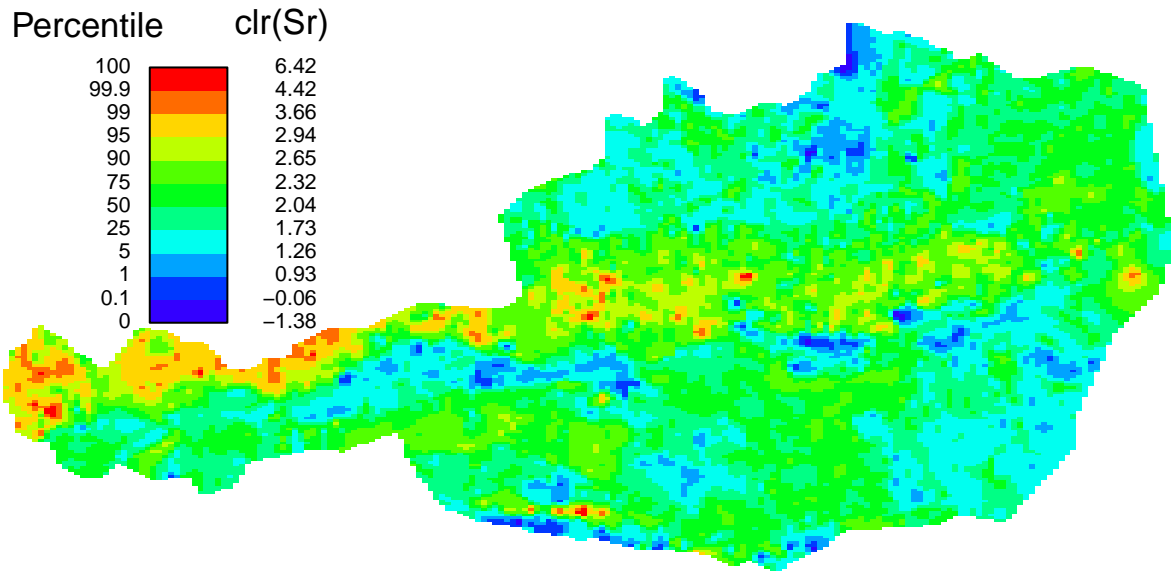
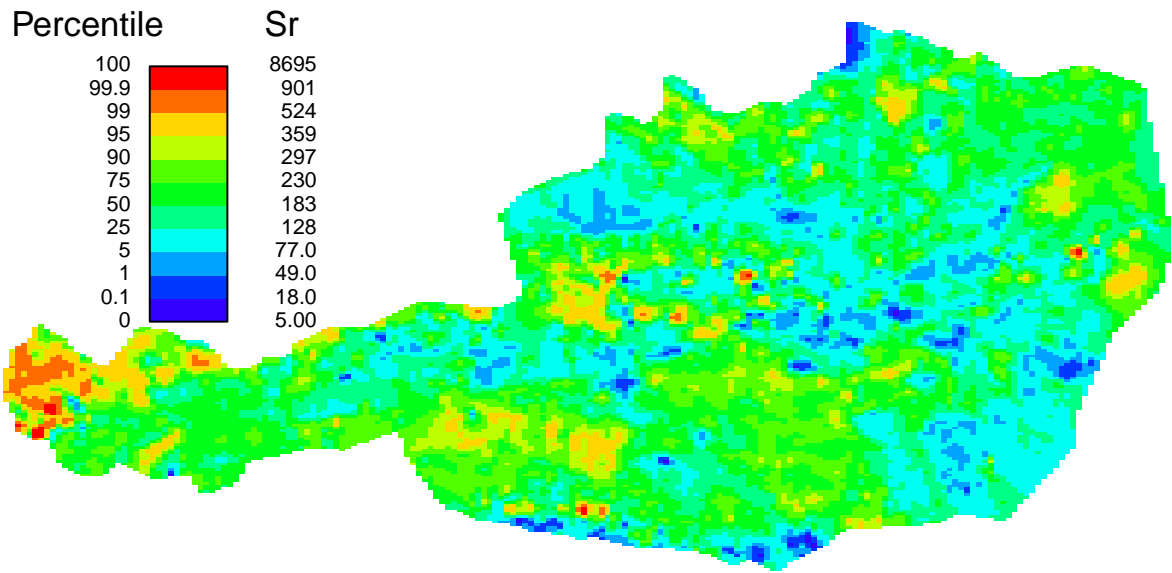


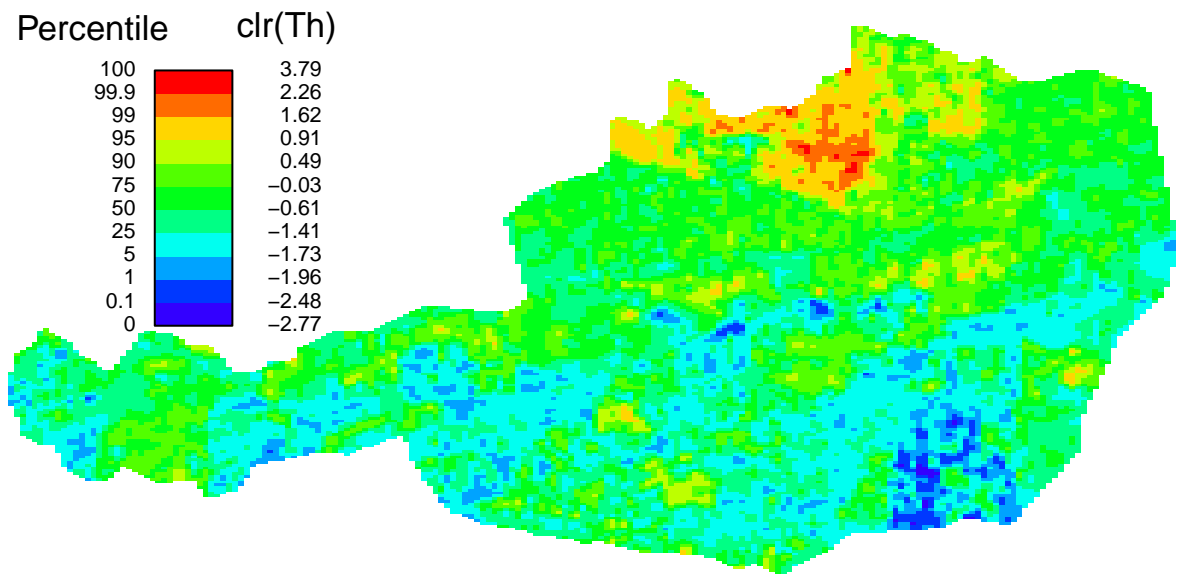
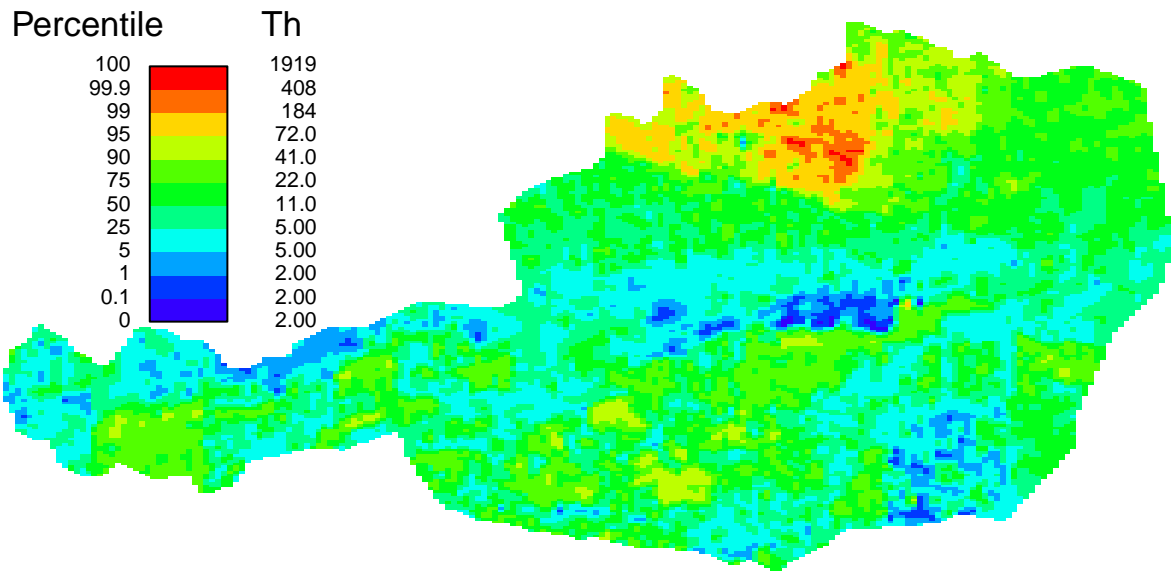


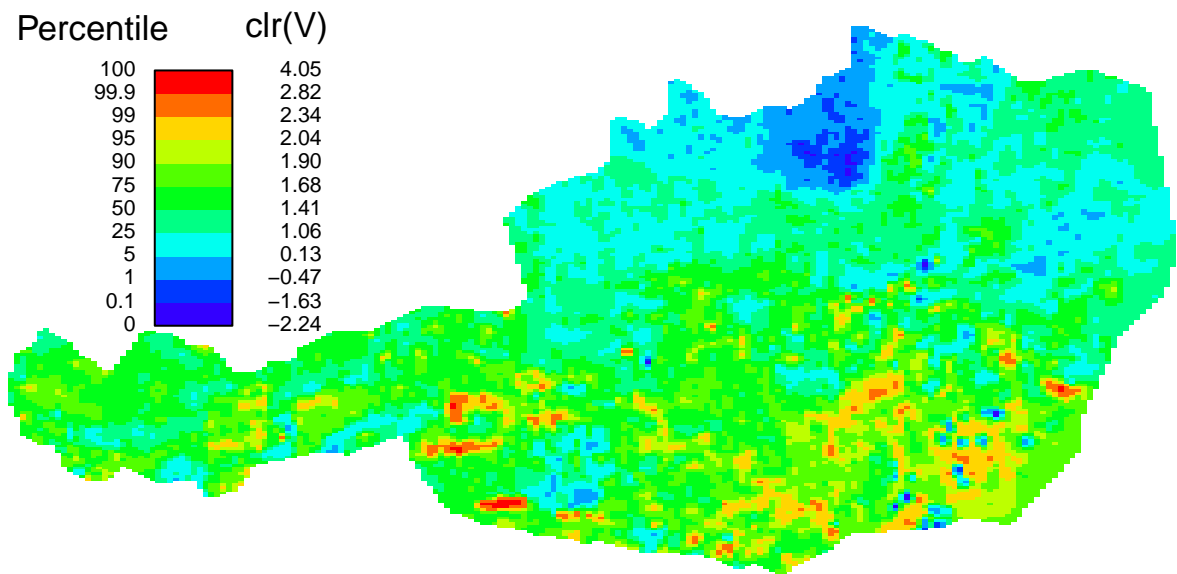
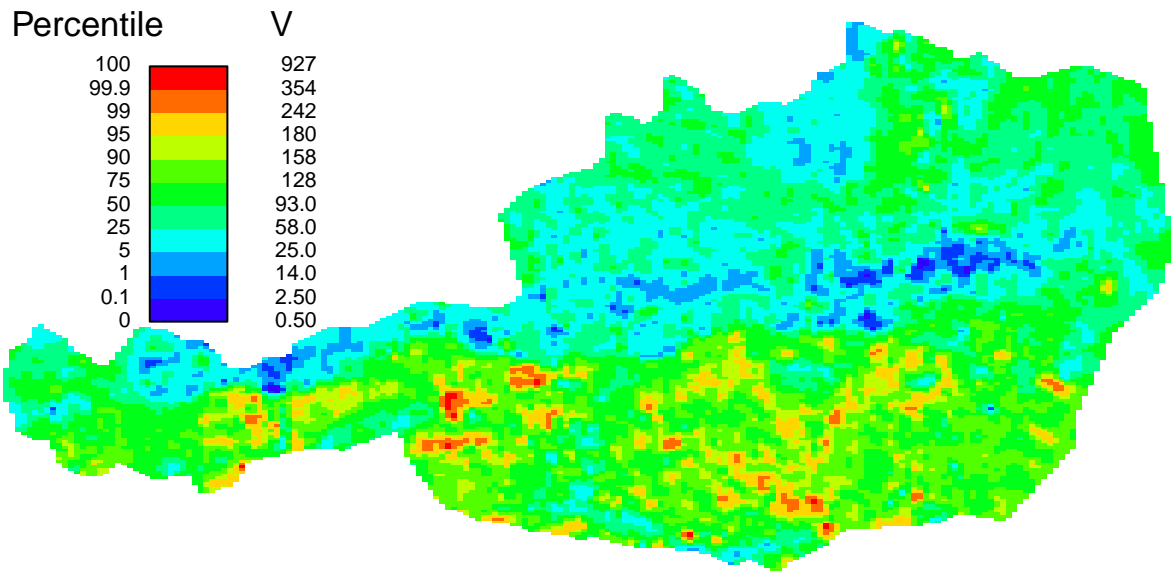


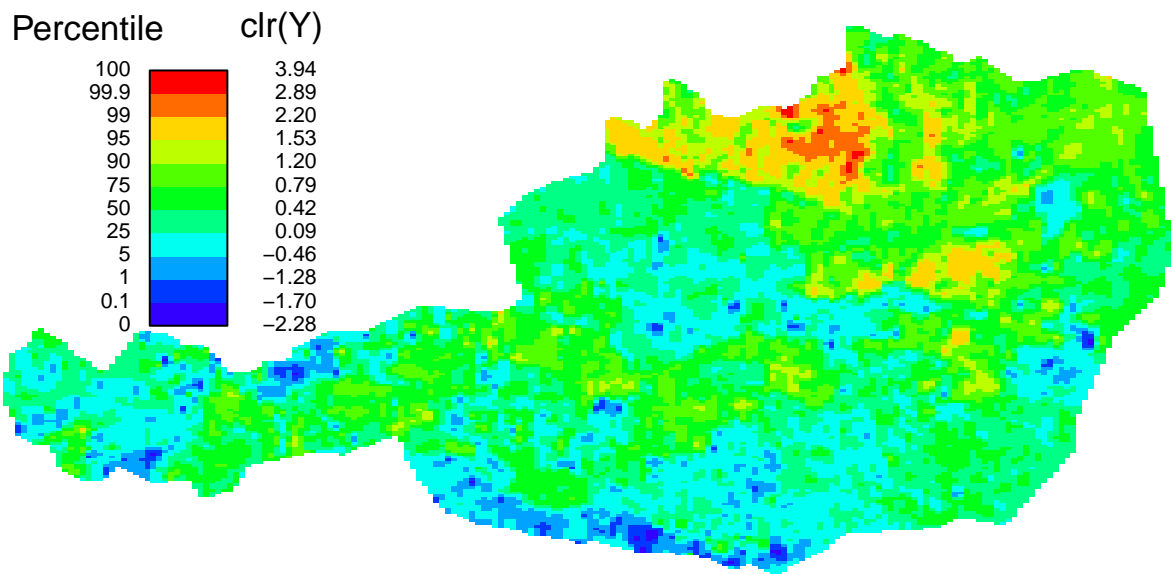
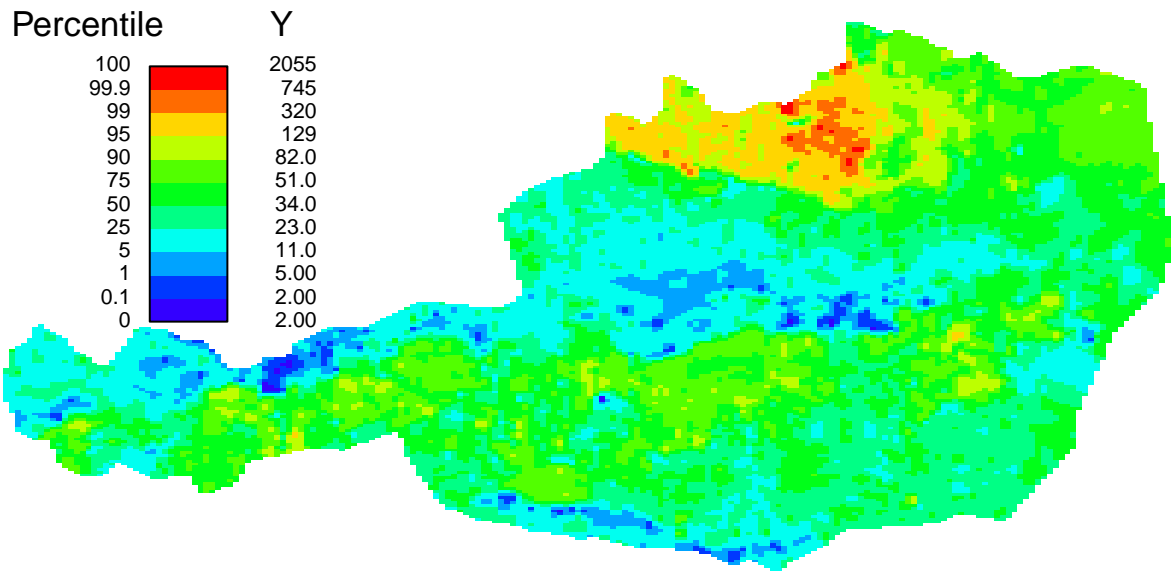


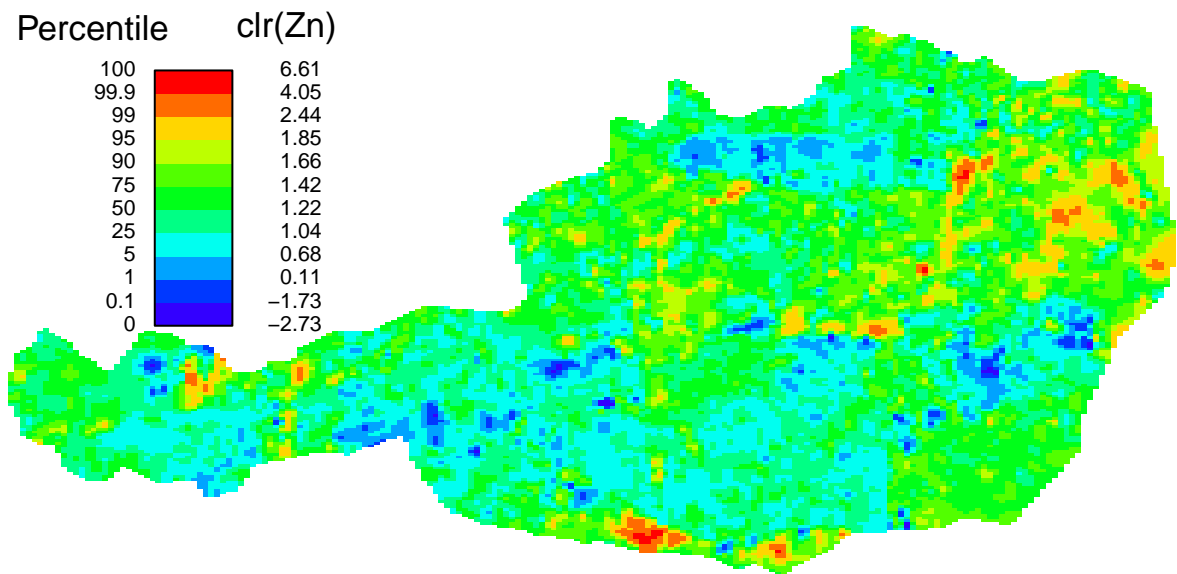
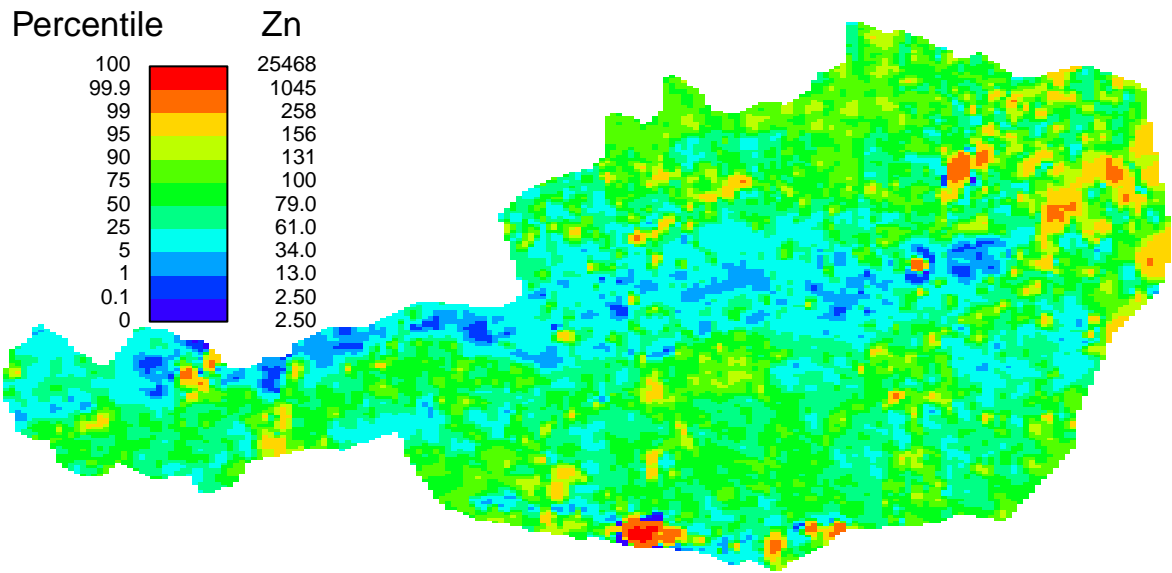


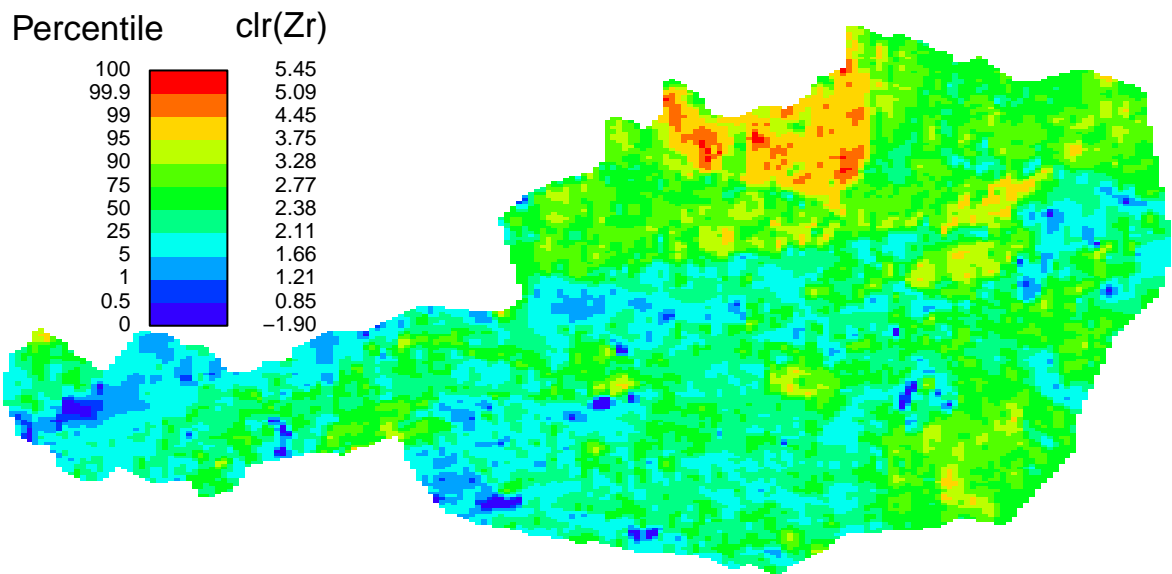
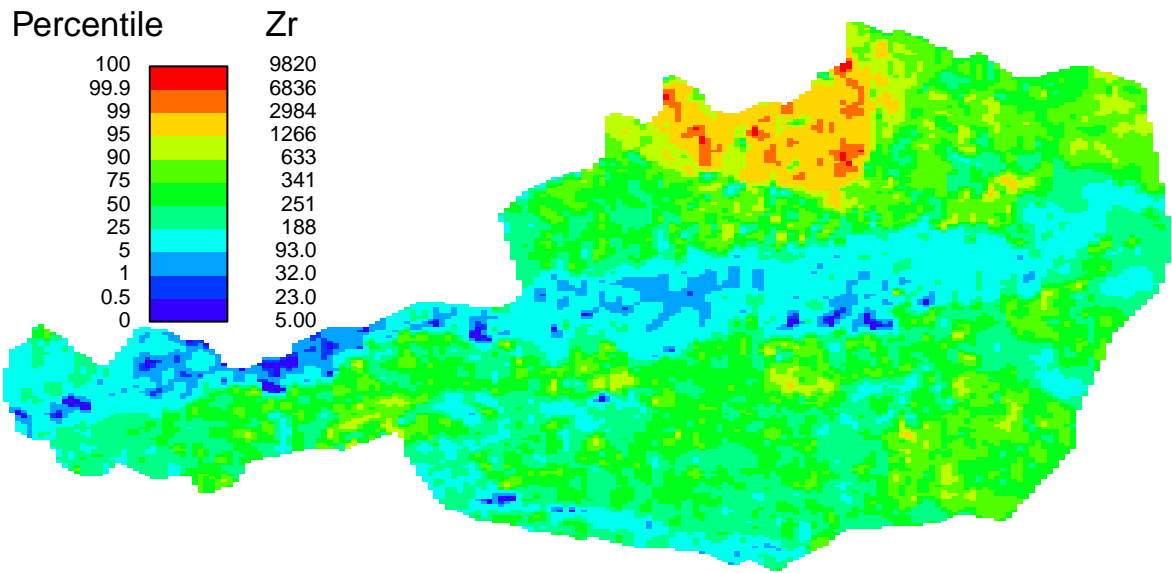














BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG, WISSENSCHAFT & FORSCHUNG

GEOLOGISCHE BUNDESANSTALT

FA ROHSTOFFGEOLOGIE

Titel

**Robuste PCA für Kompositionsdaten der Hauptelemente:
Säulendiagramme der Ladungsmatrizen**

Projekt

ÜLG-070 2019 IRIS-Online

Sachbearbeiter

Th. Filzmoser &
P. Filzmoser

Seiten

2

Datum

Sept. 2019

Datenbank



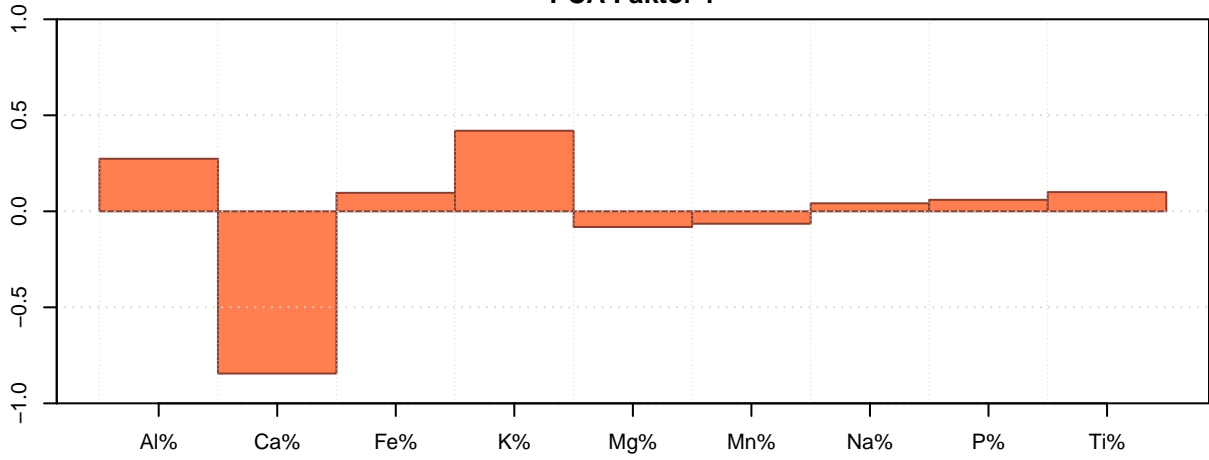
Geologische Bundesanstalt
Neulinggasse 38,
A-1030 Wien

Beilage Nr.

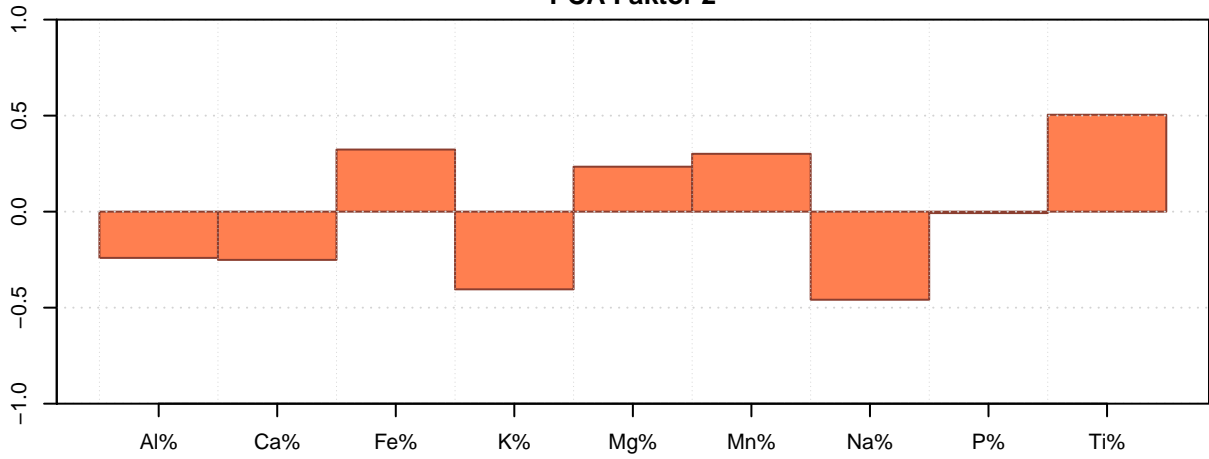
Anhang 8

Nur für den Dienstgebrauch

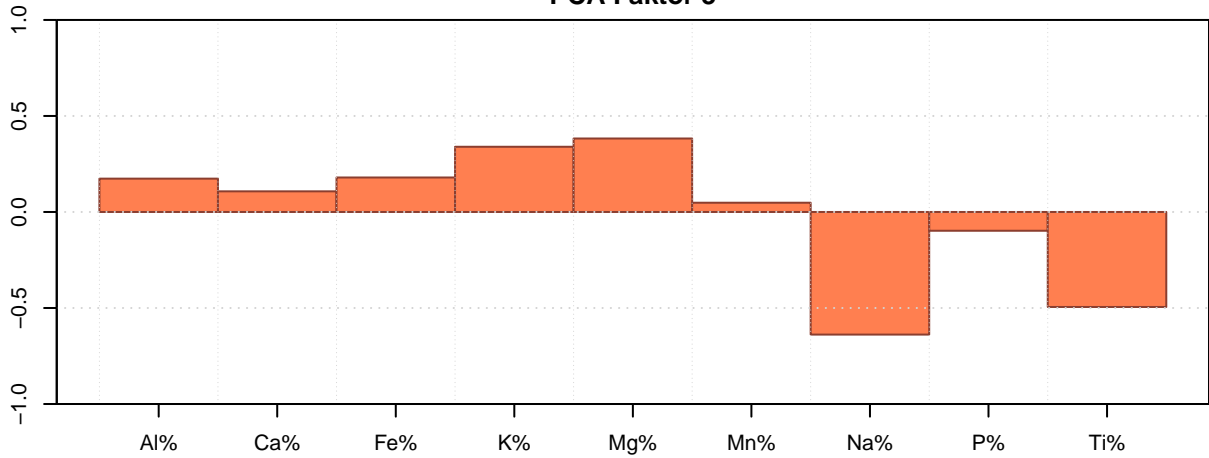
PCA Faktor 1



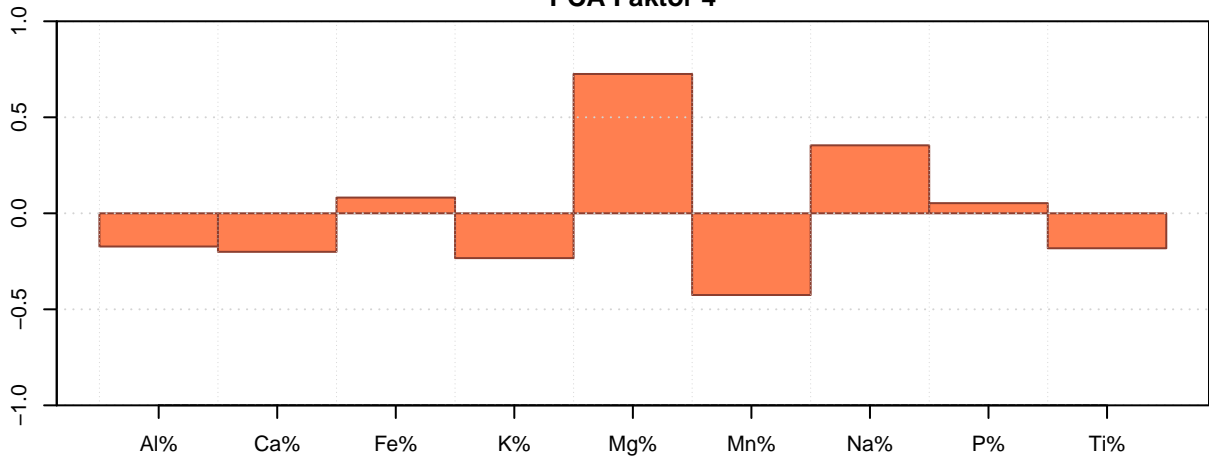
PCA Faktor 2



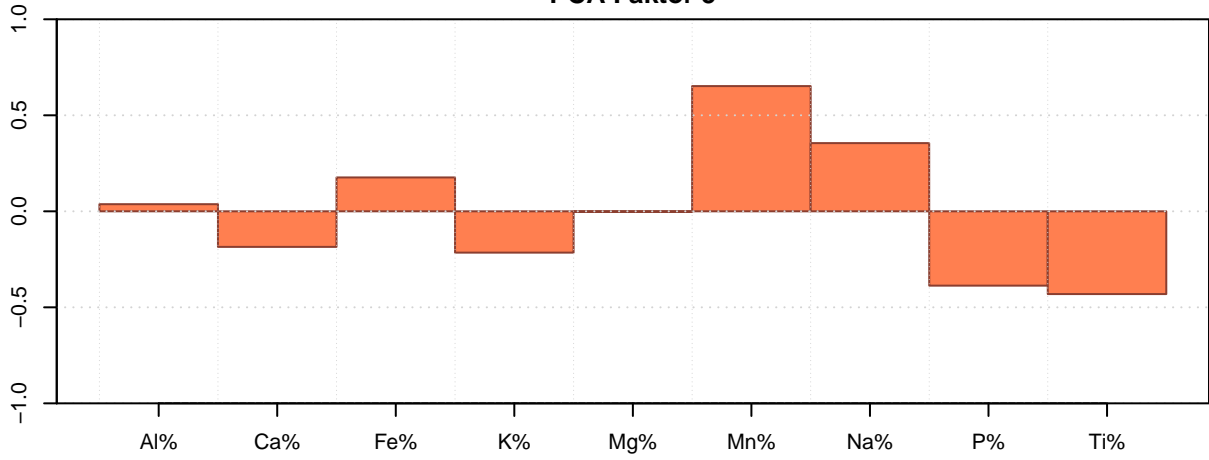
PCA Faktor 3



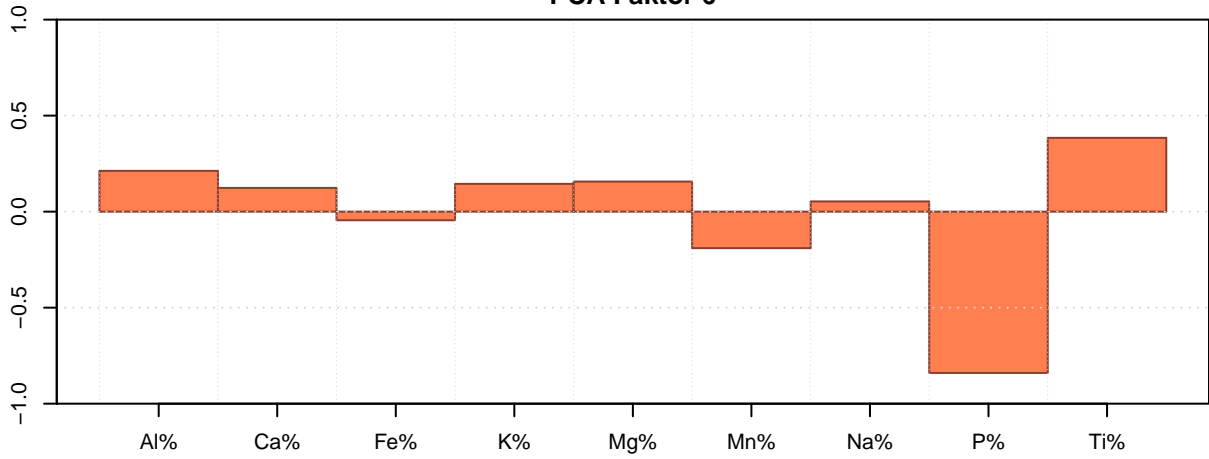
PCA Faktor 4



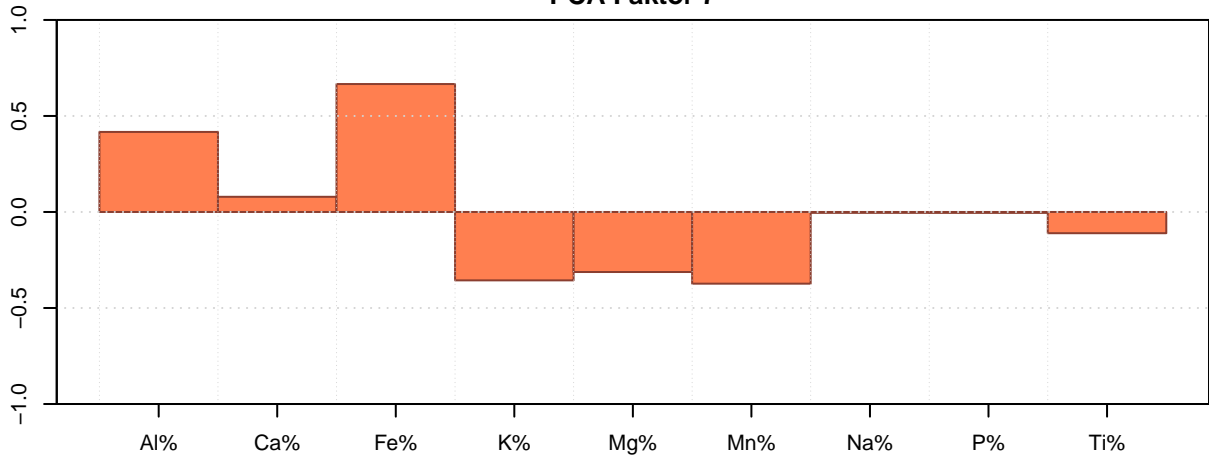
PCA Faktor 5



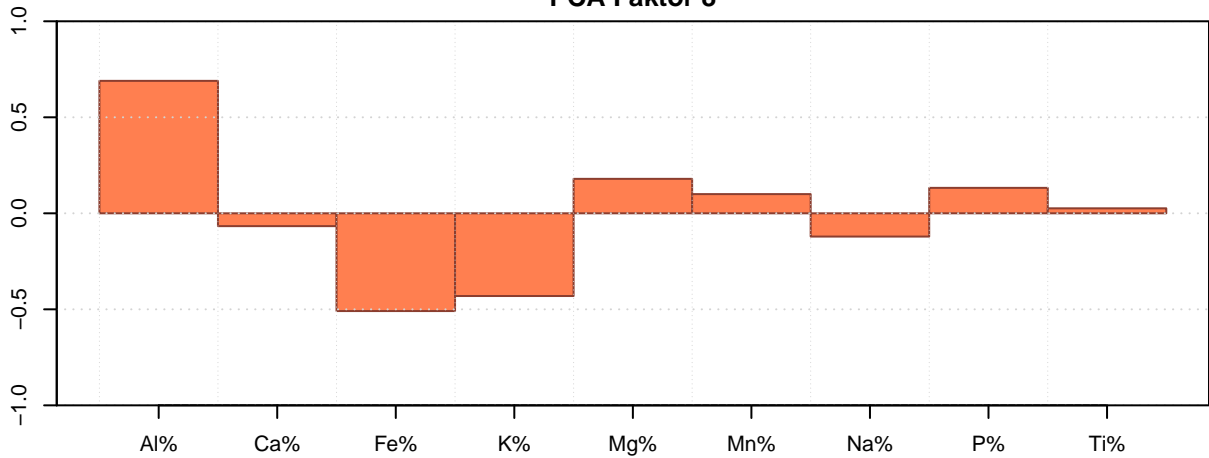
PCA Faktor 6



PCA Faktor 7



PCA Faktor 8





BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG, WISSENSCHAFT & FORSCHUNG

GEOLOGISCHE BUNDESANSTALT

FA ROHSTOFFGEOLOGIE

Titel

**Robuste PCA für Kompositionsdaten der Hauptelemente:
Quantile der Werte der Hauptkomponenten**

Projekt

ÜLG-070 2019 IRIS-Online

Sachbearbeiter

Th. Filzmoser &
P. Filzmoser

Seiten

4

Datum

Sept. 2019

Datenbank



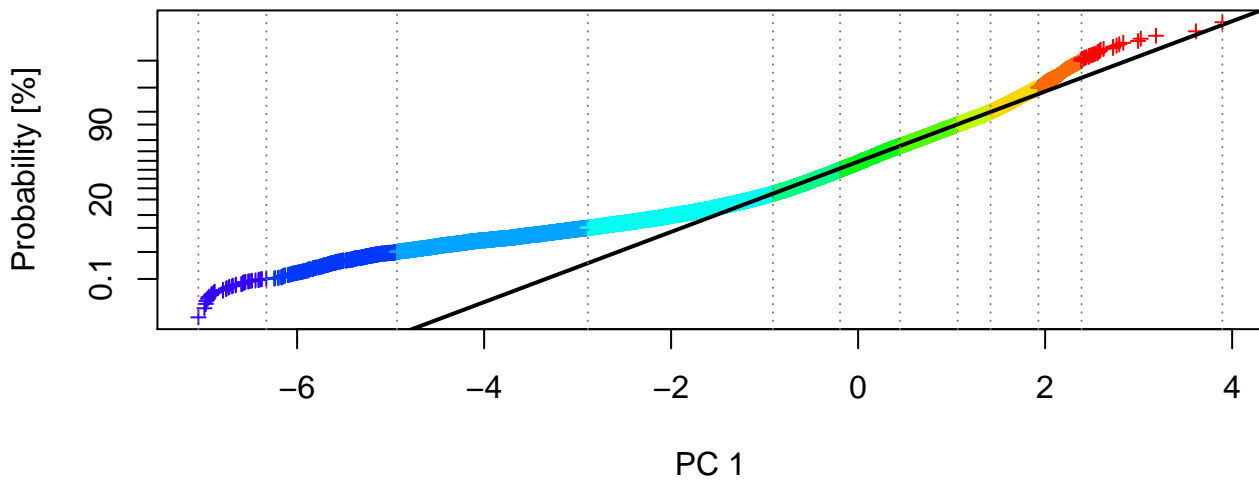
Geologische Bundesanstalt
Neulinggasse 38,
A-1030 Wien

Beilage Nr.

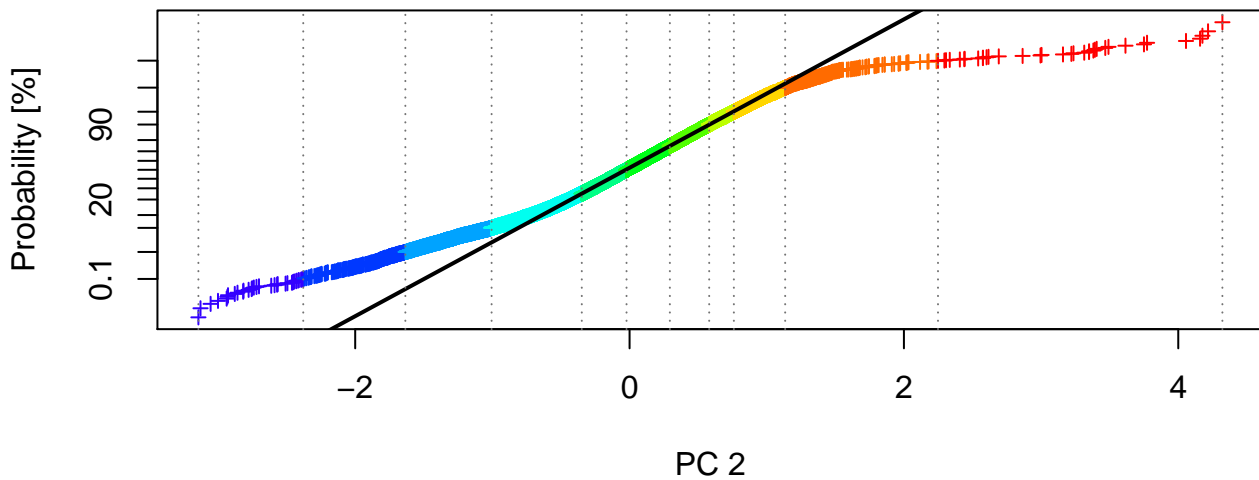
Anhang 9

Nur für den Dienstgebrauch

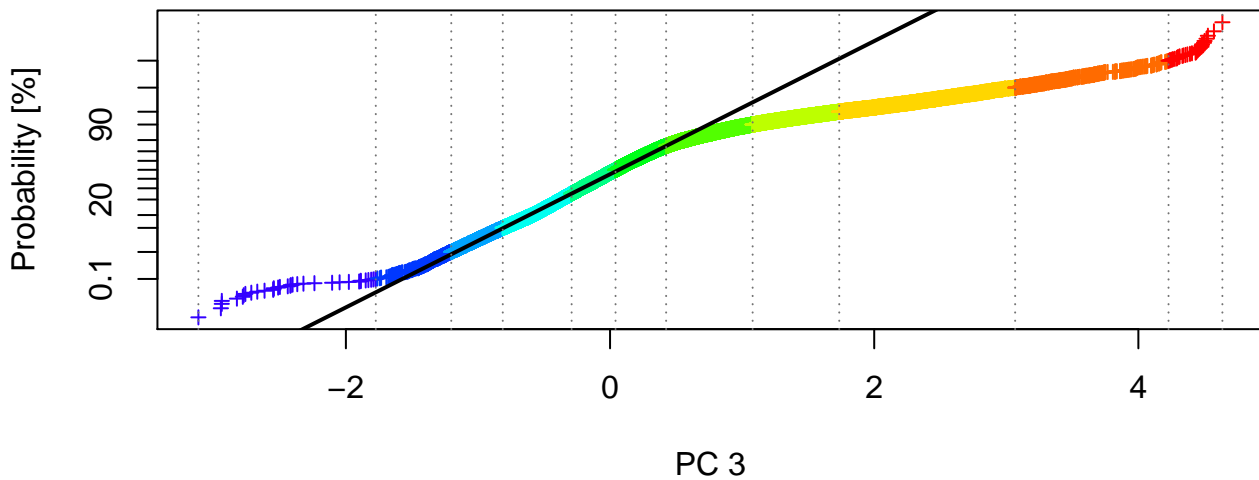
PC 1 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



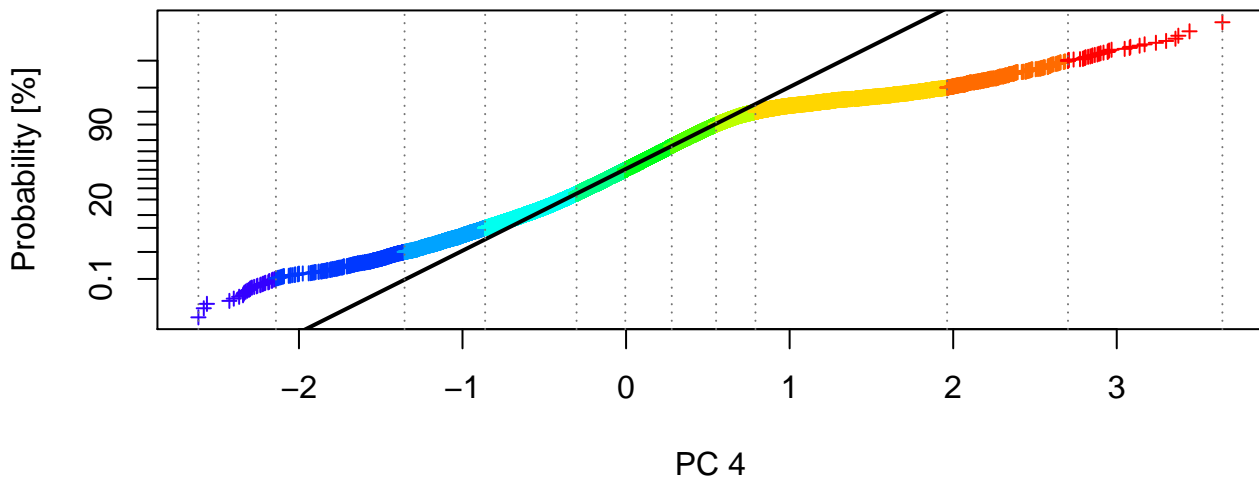
PC 2 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



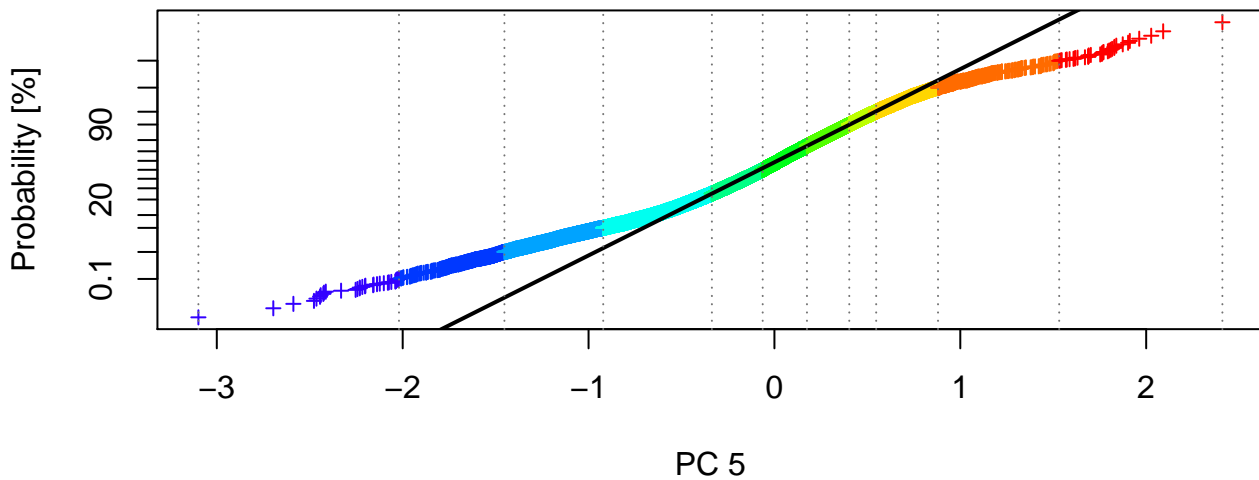
PC 3 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



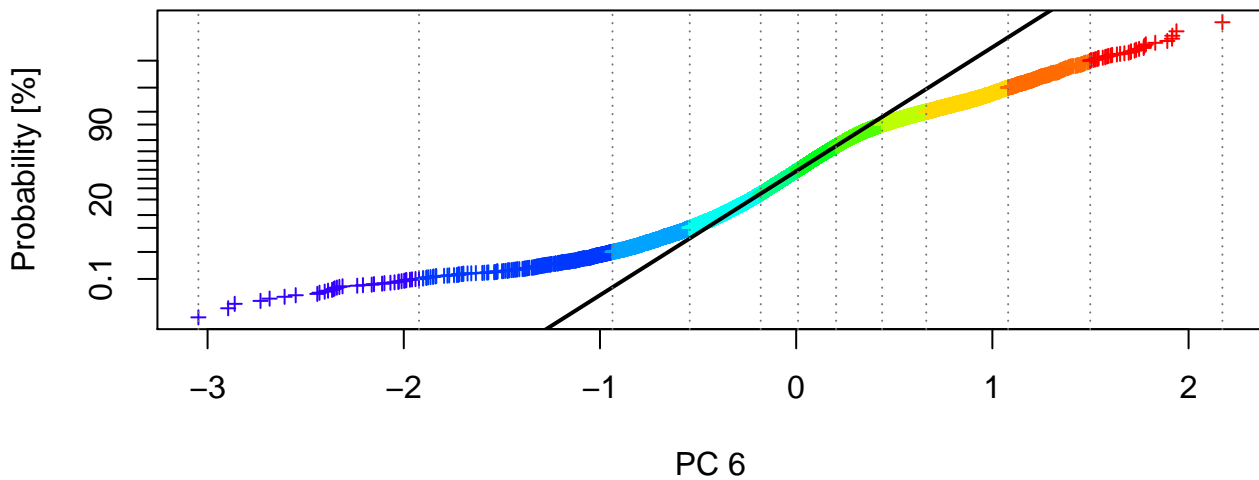
PC 4 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



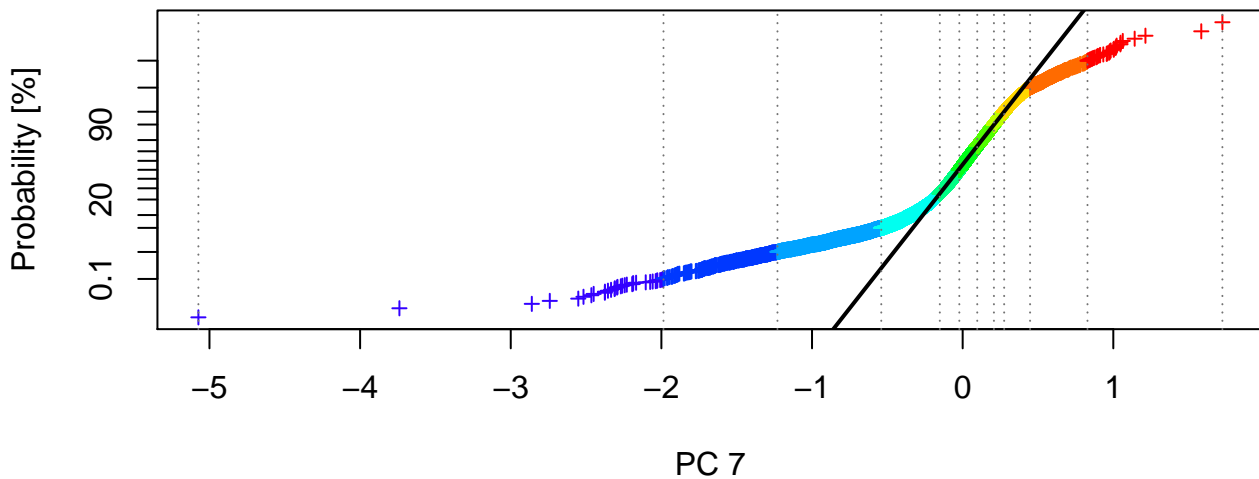
PC 5 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



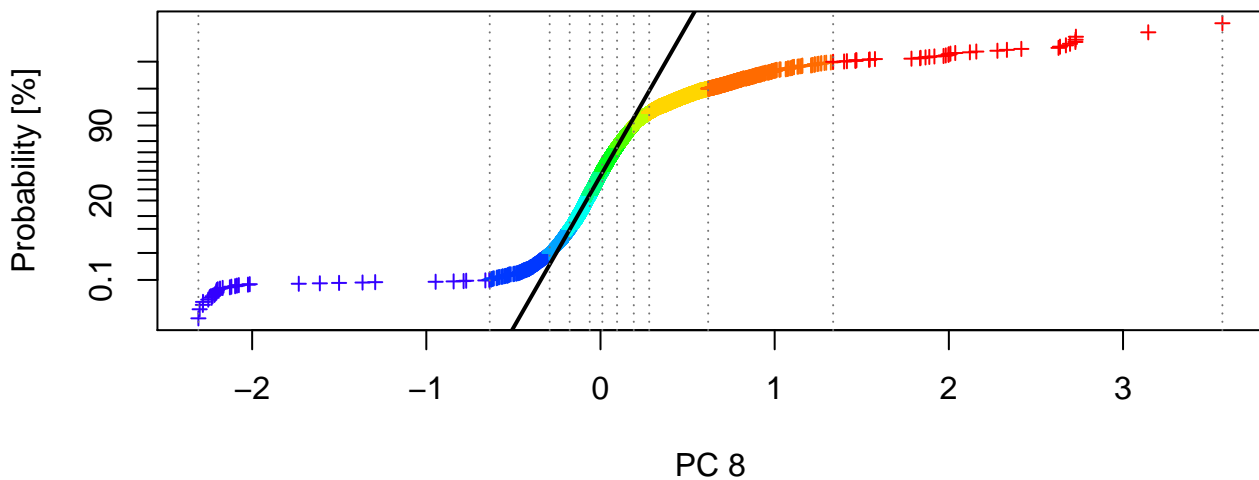
PC 6 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



PC 7 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



PC 8 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1





BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG, WISSENSCHAFT & FORSCHUNG

GEOLOGISCHE BUNDESANSTALT

FA ROHSTOFFGEOLOGIE

Titel

**Robuste PCA für Kompositionsdaten der Hauptelemente:
Vergleich der Flächenkarten der Werte der Hauptkomponenten der
robusten PCA mit den Flächenkarten der Werte der
Hauptkomponenten der robusten PCA für Kompositionsdaten
(pcaCoDa)**

Projekt

ÜLG-070 2019 IRIS-Online

Sachbearbeiter

Th. Filzmoser &
P. Filzmoser

Seiten

8

Datum

Sept. 2019

Datenbank



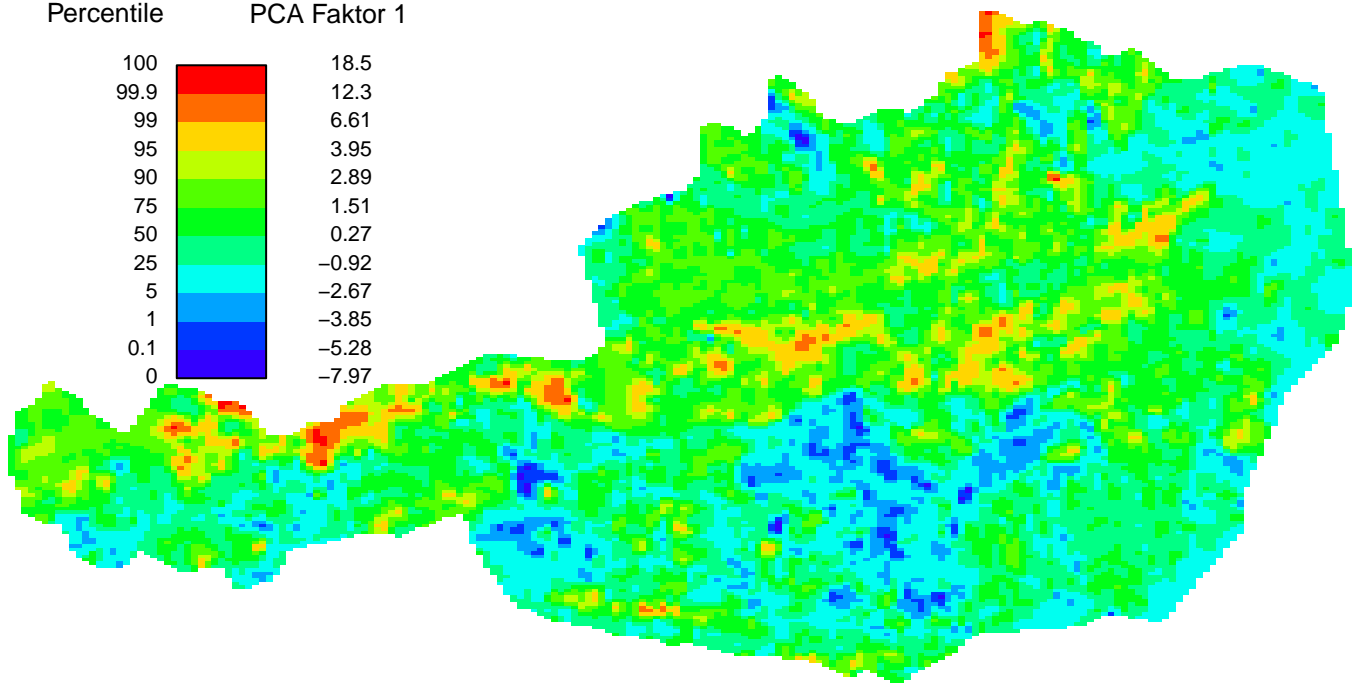
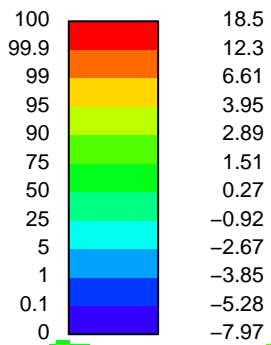
Geologische Bundesanstalt
Neulinggasse 38,
A-1030 Wien

Beilage Nr.

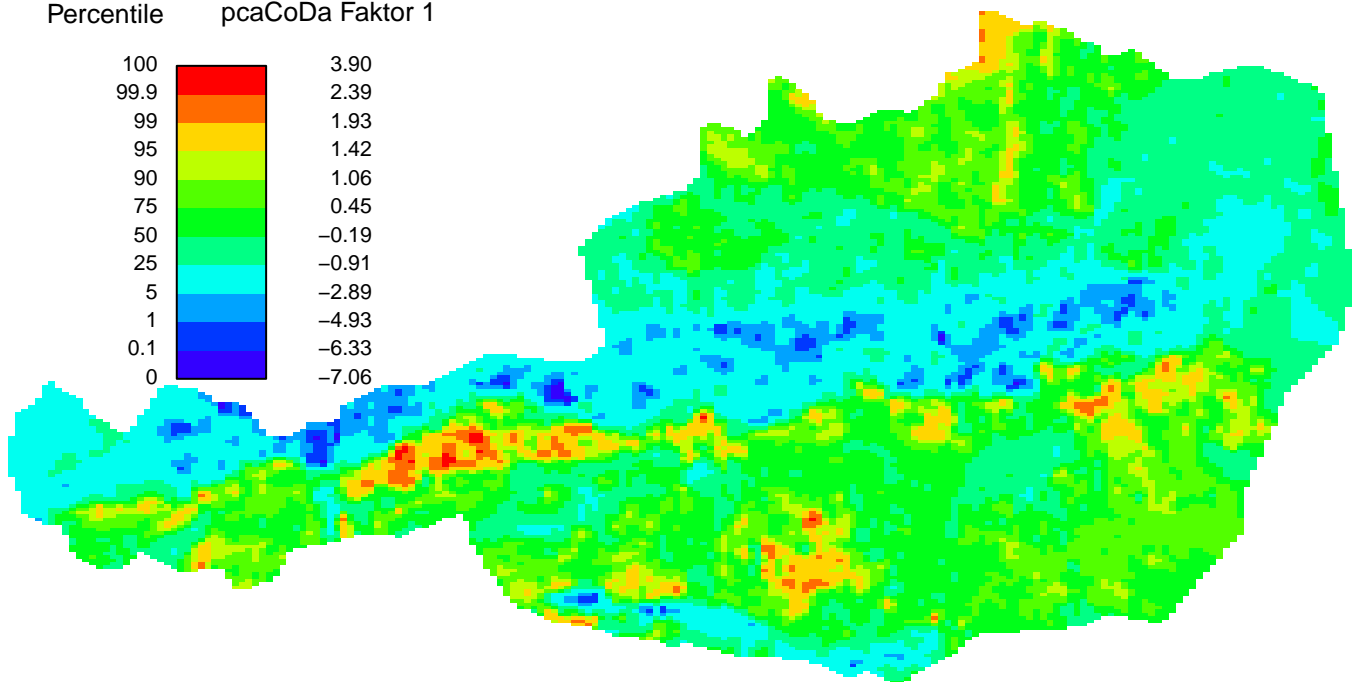
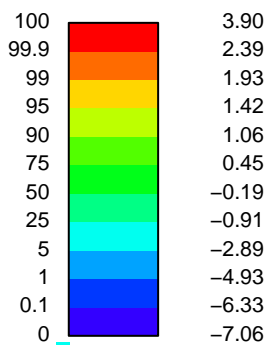
Anhang 10

Nur für den Dienstgebrauch

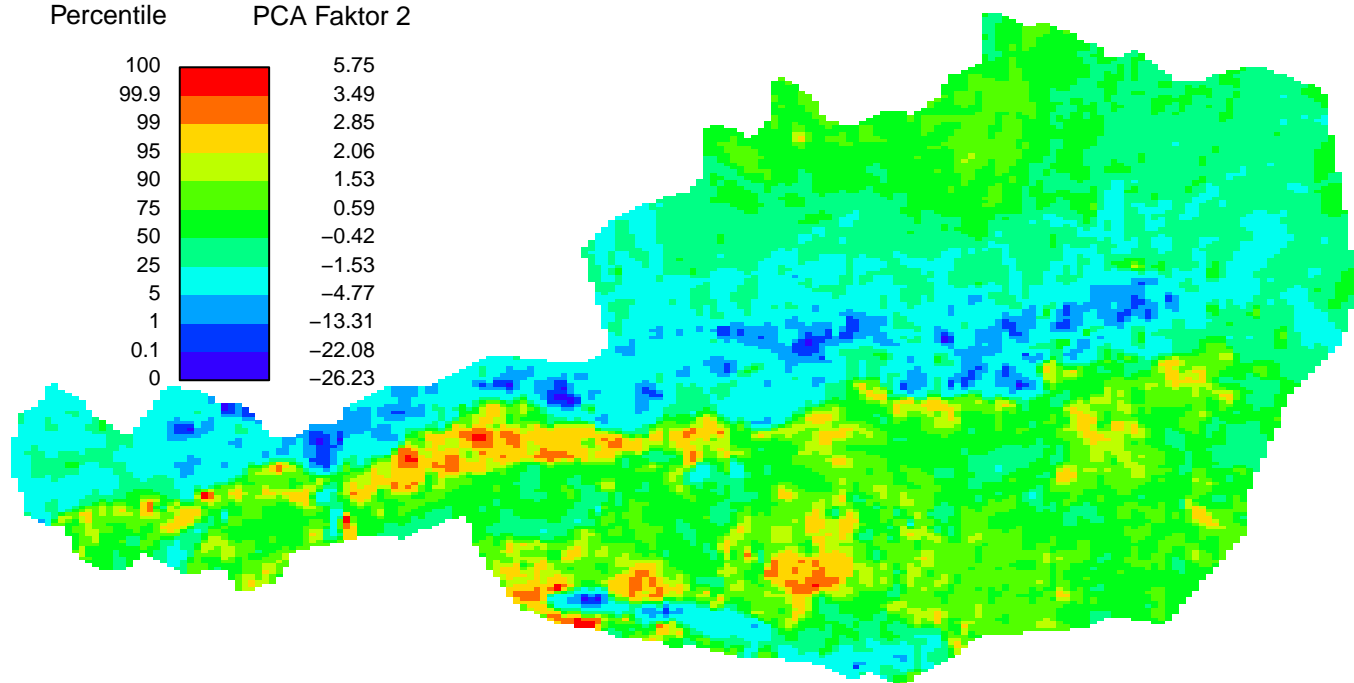
Percentile PCA Faktor 1



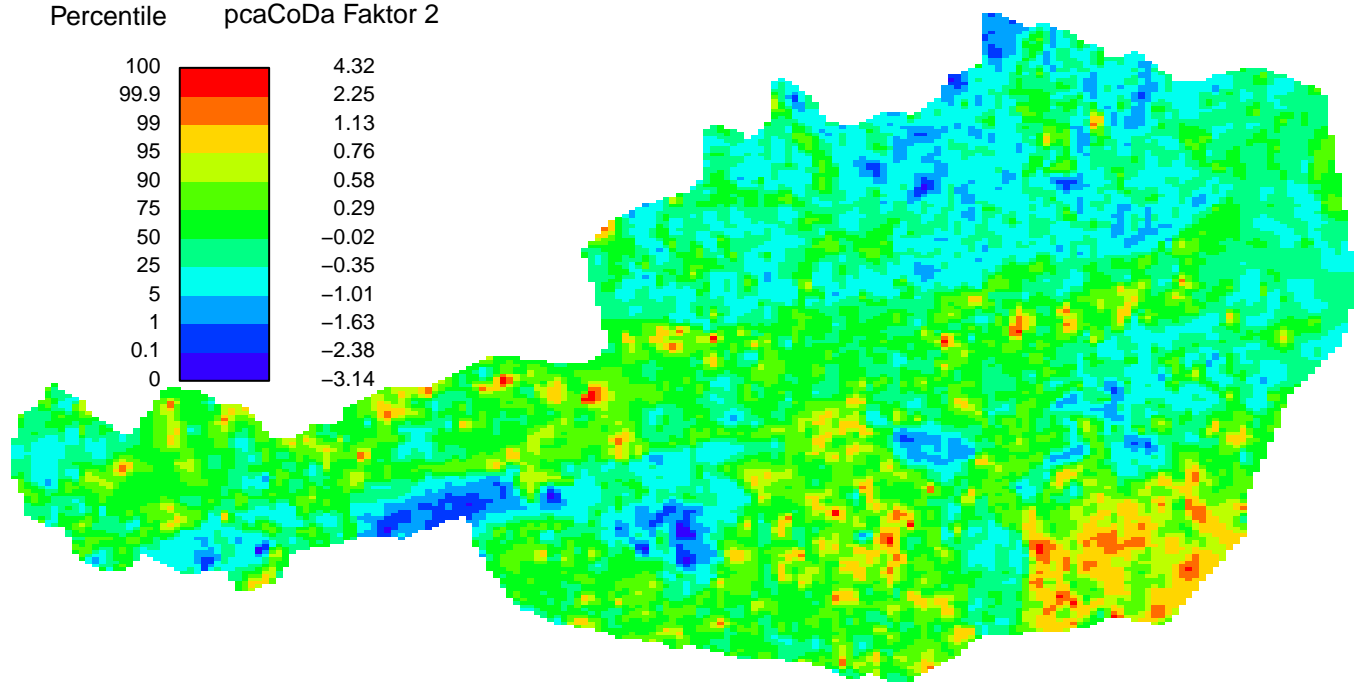
Percentile pcaCoDa Faktor 1



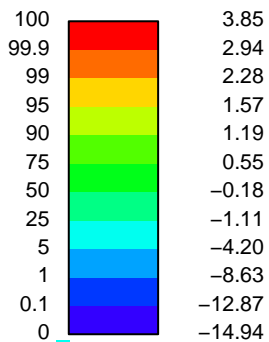
Percentile PCA Faktor 2



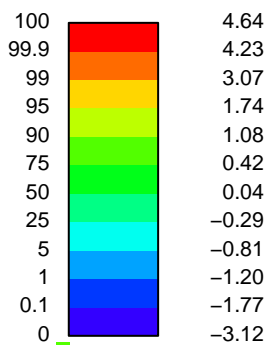
Percentile pcaCoDa Faktor 2



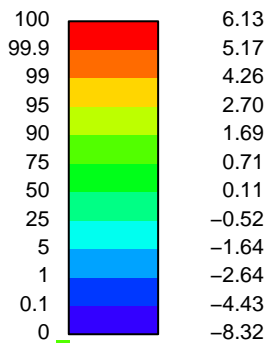
Percentile PCA Faktor 3



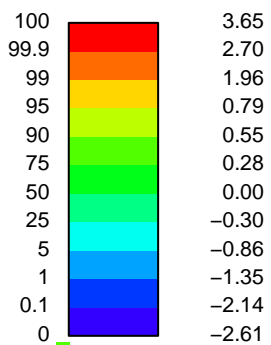
Percentile pcaCoDa Faktor 3



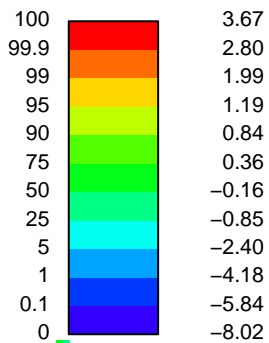
Percentile PCA Faktor 4



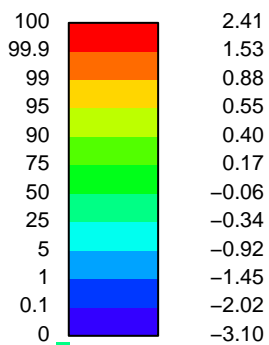
Percentile pcaCoDa Faktor 4



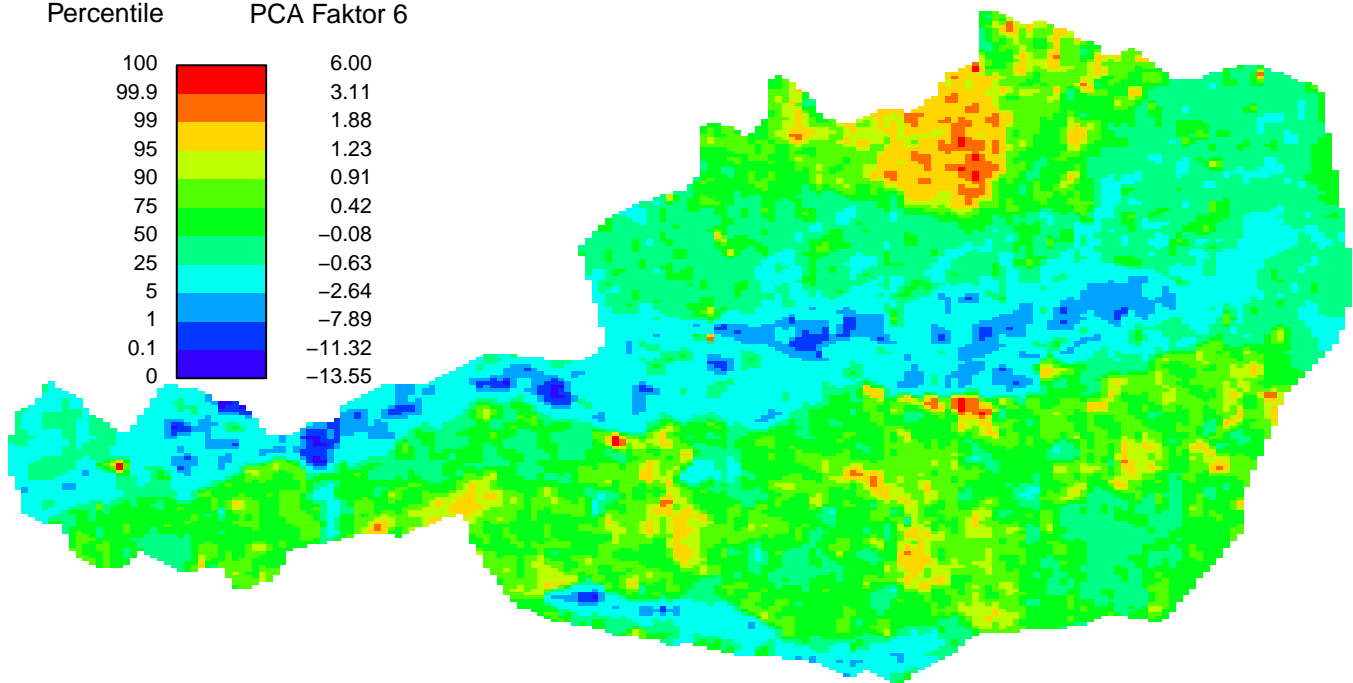
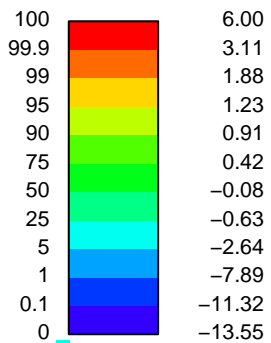
Percentile PCA Faktor 5



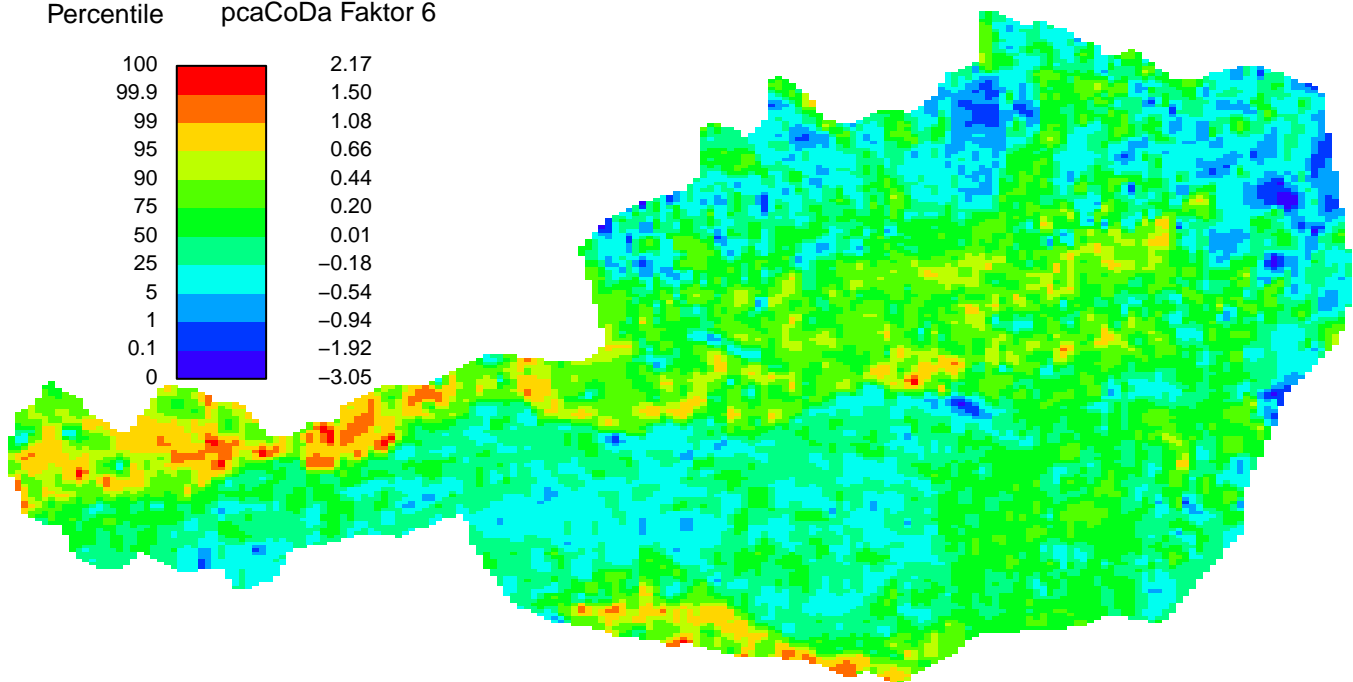
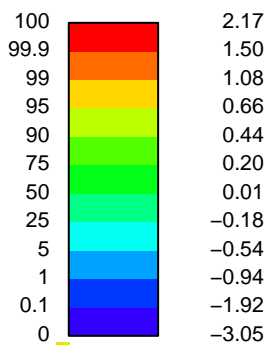
Percentile pcaCoDa Faktor 5



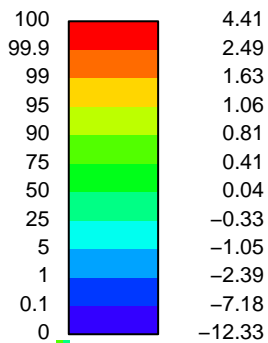
Percentile PCA Faktor 6



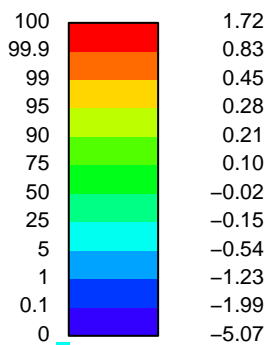
Percentile pcaCoDa Faktor 6



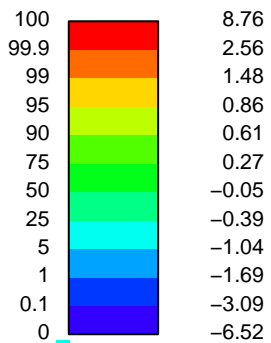
Percentile PCA Faktor 7



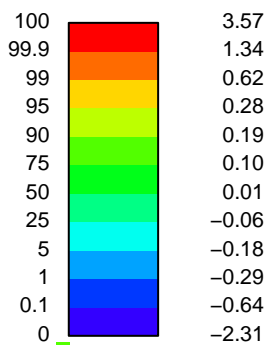
Percentile pcaCoDa Faktor 7



Percentile PCA Faktor 8



Percentile pcaCoDa Faktor 8





BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG, WISSENSCHAFT & FORSCHUNG

GEOLOGISCHE BUNDESANSTALT

FA ROHSTOFFGEOLOGIE

Titel

**Robuste PCA für Kompositionsdaten der Spurenelemente:
Säulendiagramme der Ladungsmatrizen**

Projekt

ÜLG-070 2019 IRIS-Online

Sachbearbeiter

Th. Filzmoser &
P. Filzmoser

Seiten

6

Datum

Sept. 2019

Datenbank



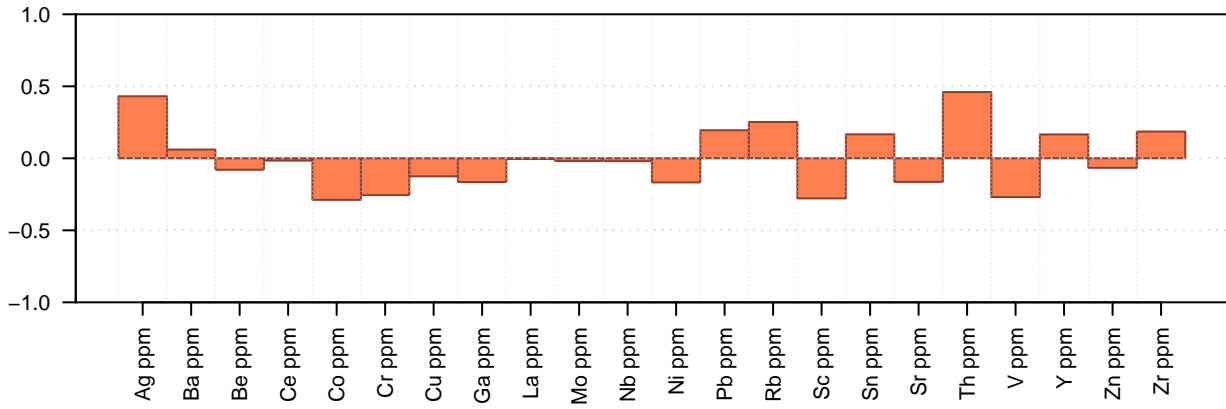
Geologische Bundesanstalt
Neulinggasse 38,
A-1030 Wien

Beilage Nr.

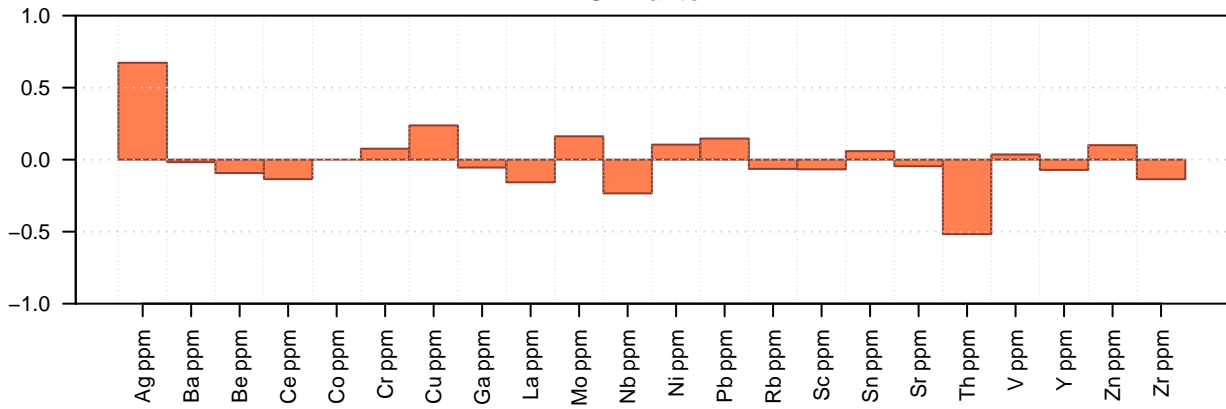
Anhang 11

Nur für den Dienstgebrauch

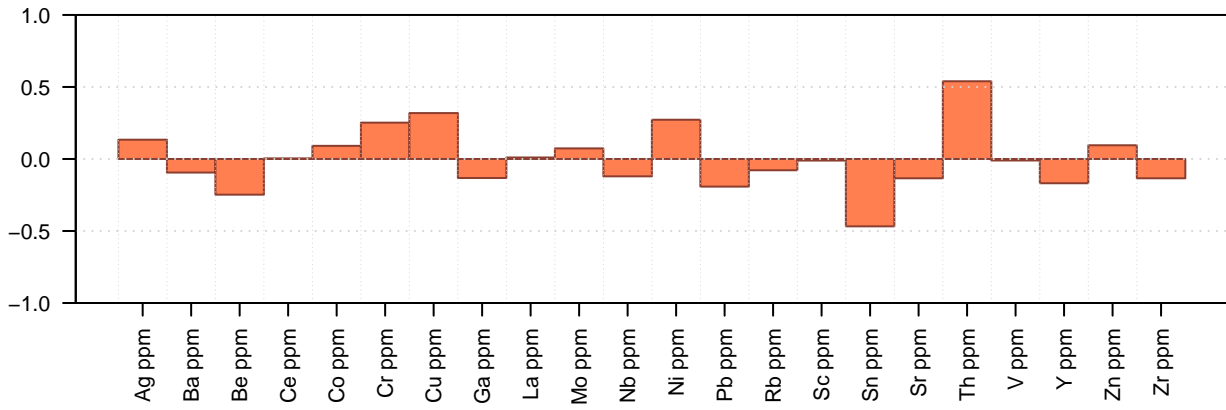
PCA Faktor 1



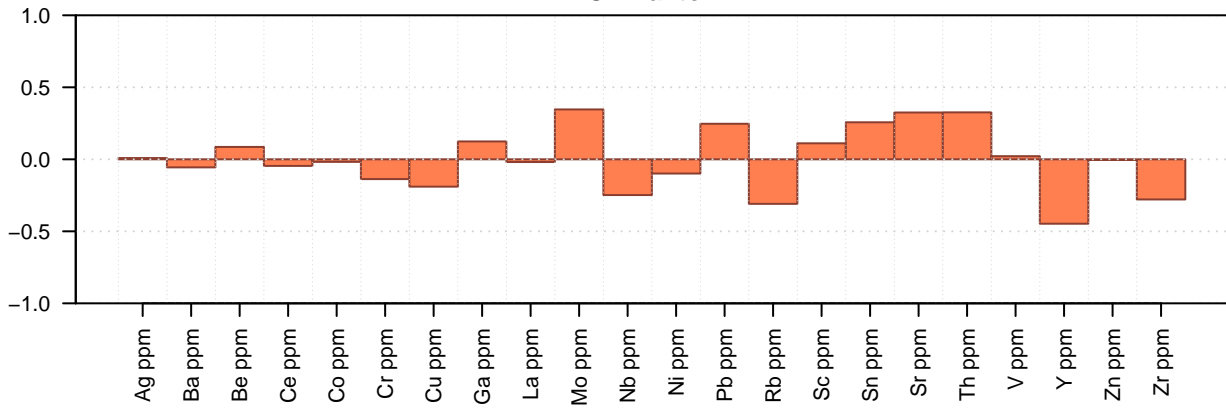
PCA Faktor 2



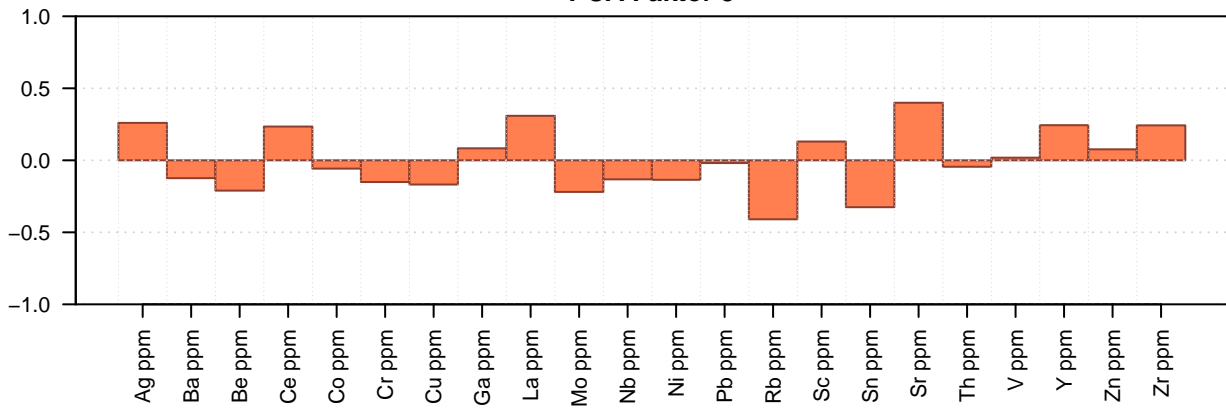
PCA Faktor 3



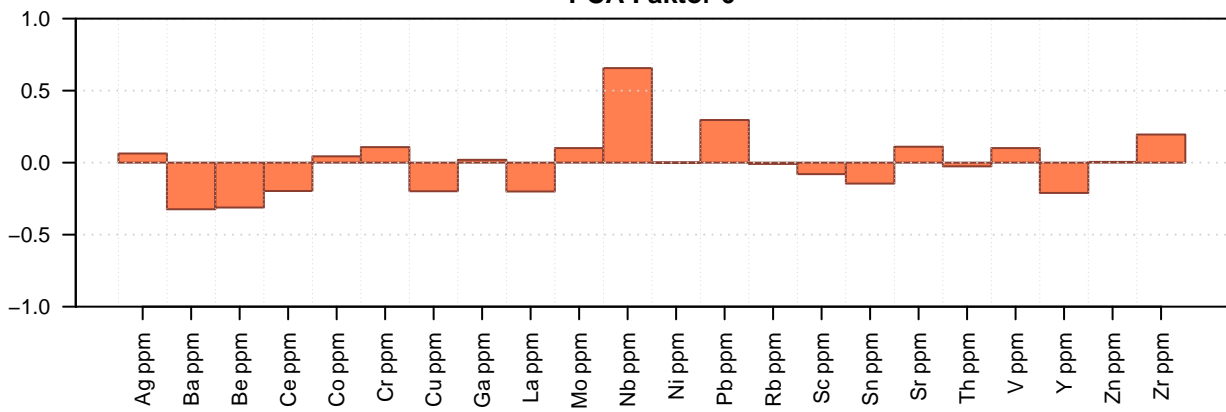
PCA Faktor 4



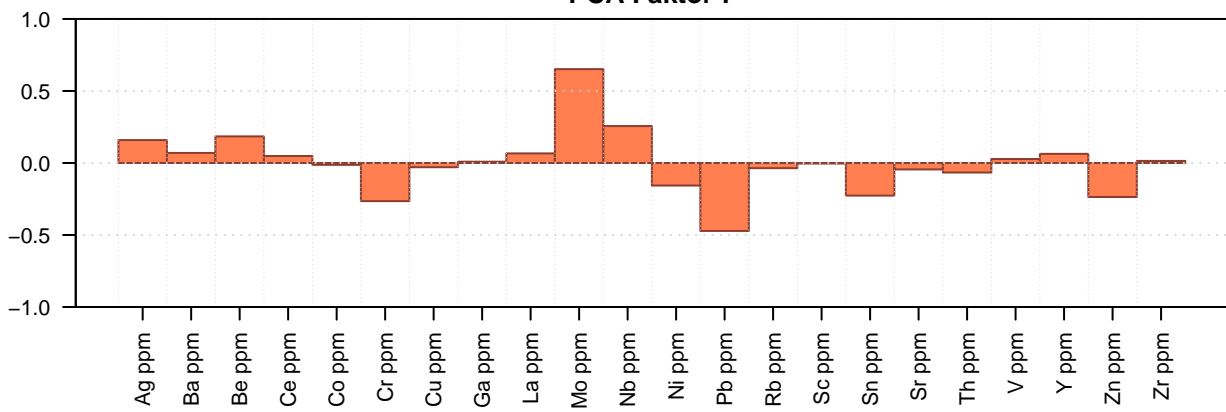
PCA Faktor 5



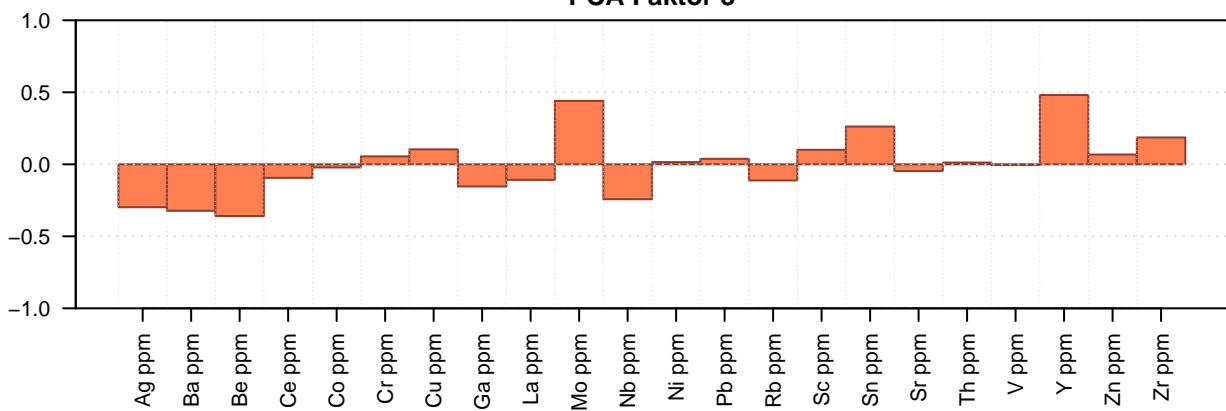
PCA Faktor 6



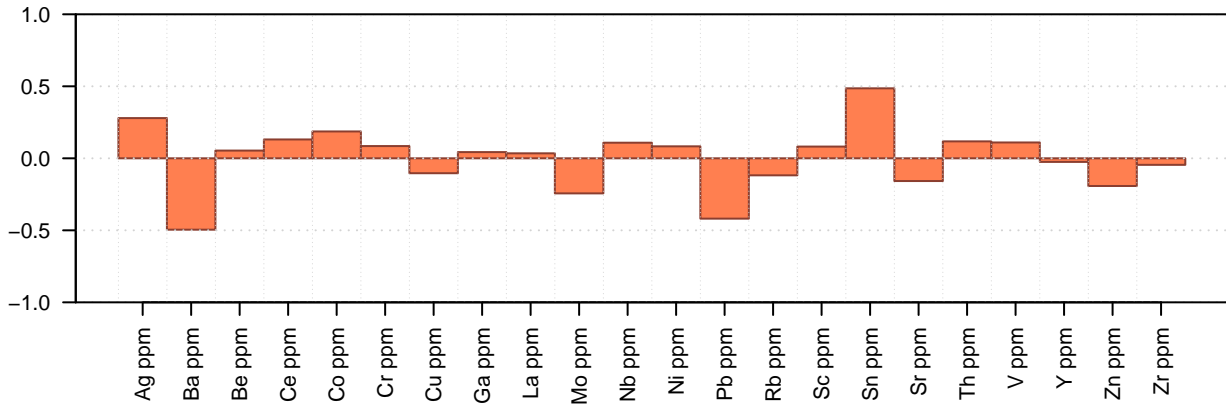
PCA Faktor 7



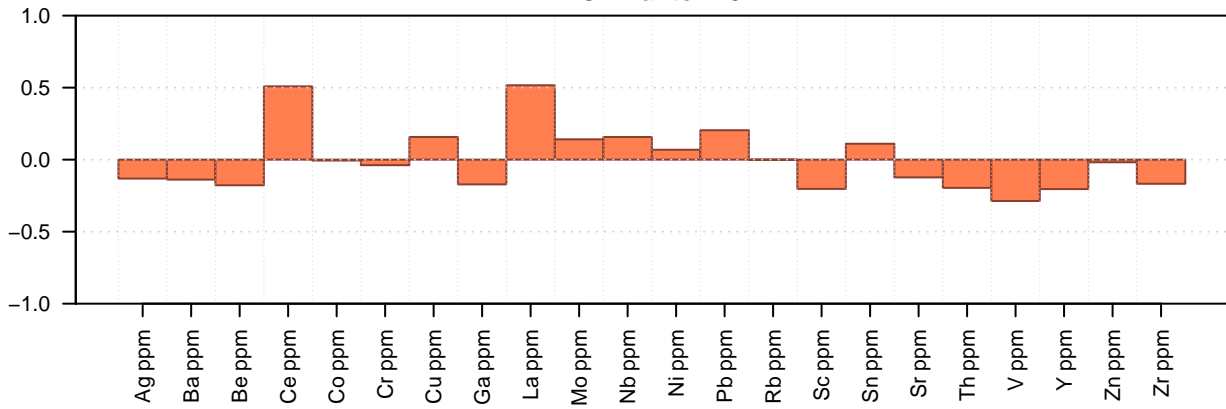
PCA Faktor 8



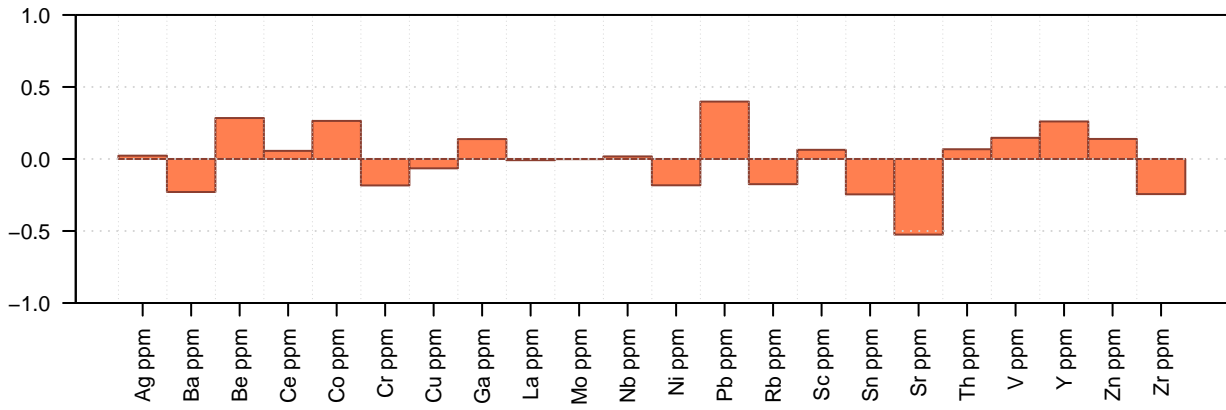
PCA Faktor 9



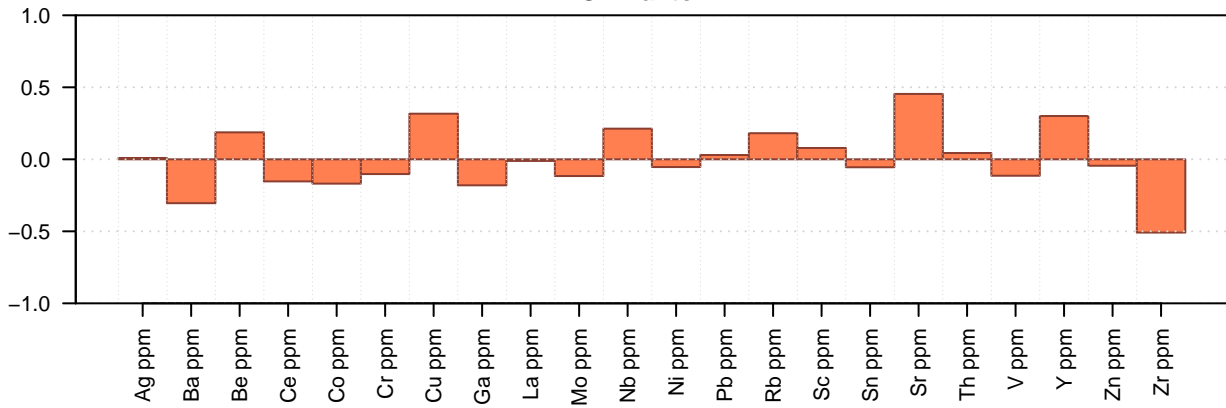
PCA Faktor 10



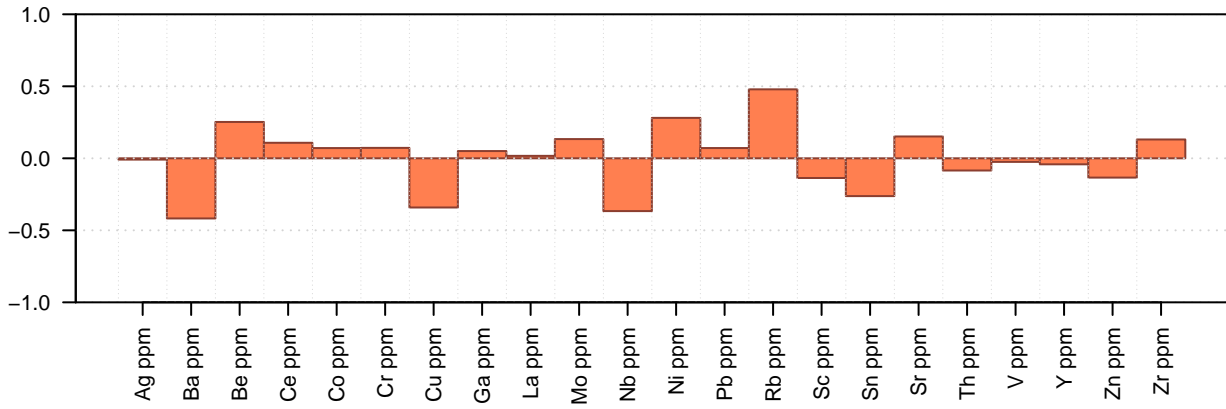
PCA Faktor 11



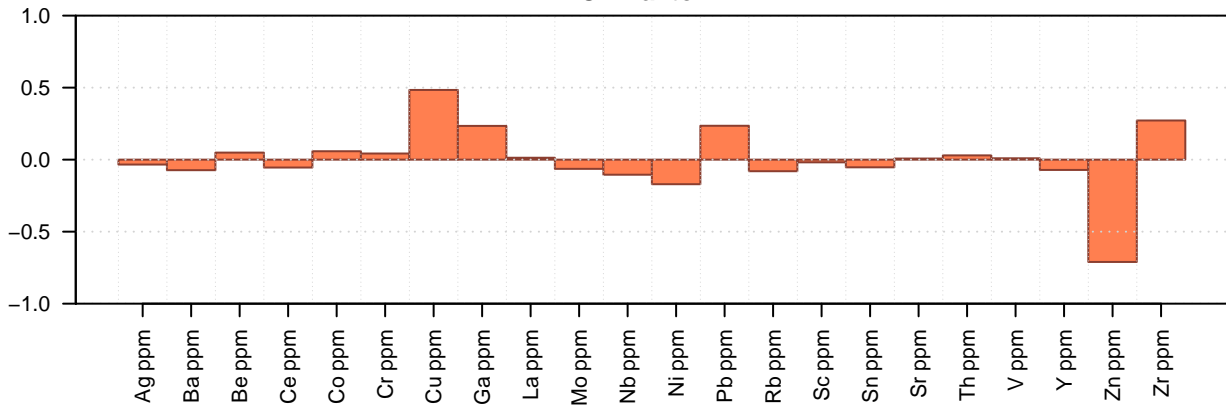
PCA Faktor 12



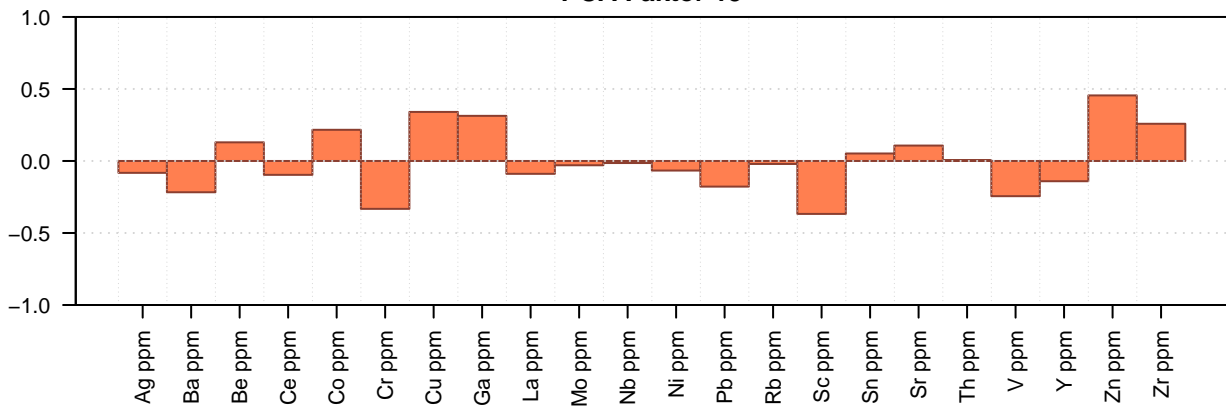
PCA Faktor 13



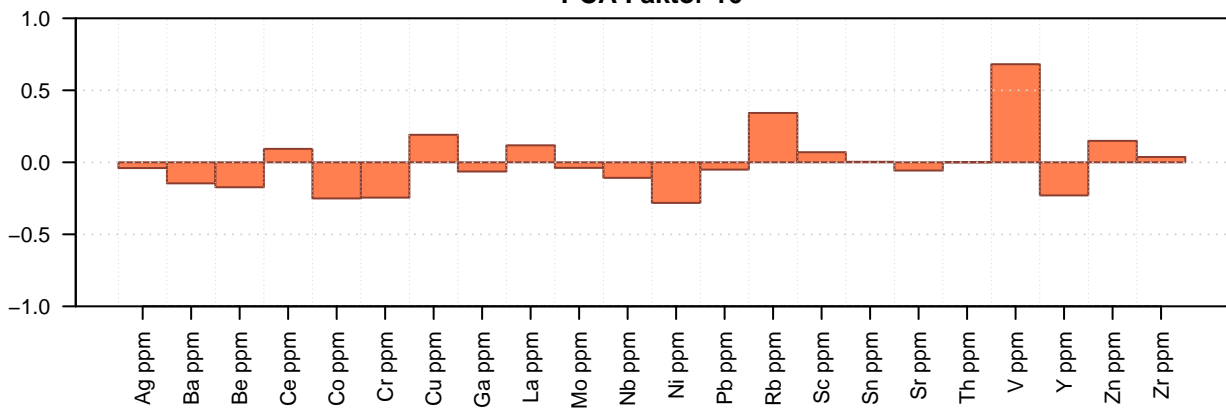
PCA Faktor 14



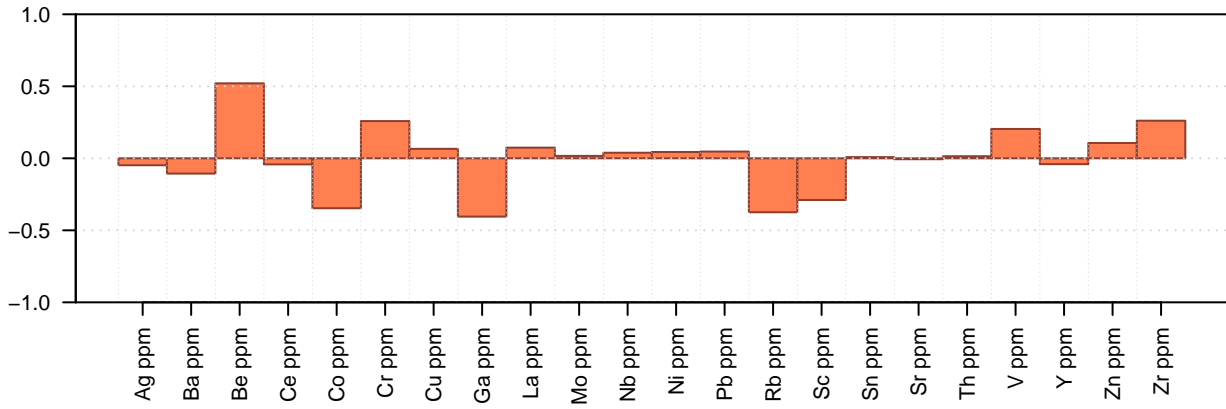
PCA Faktor 15



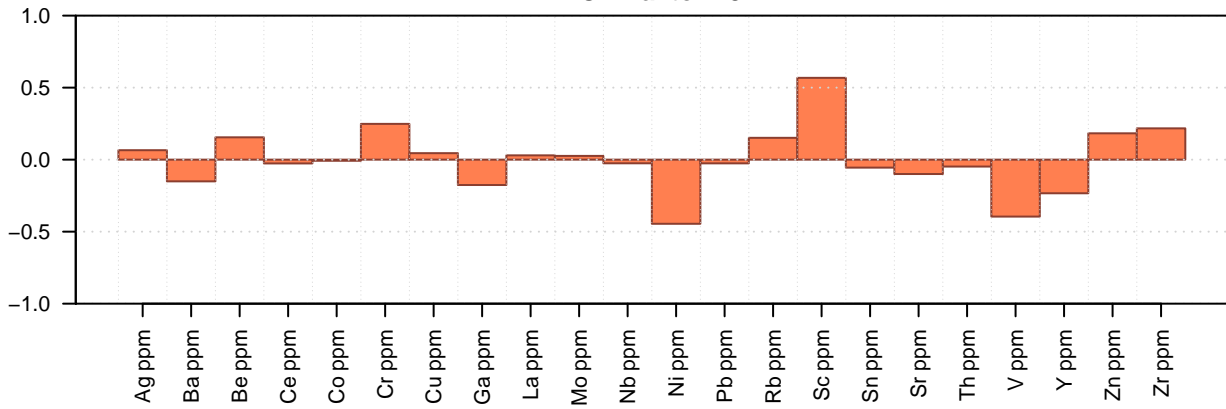
PCA Faktor 16



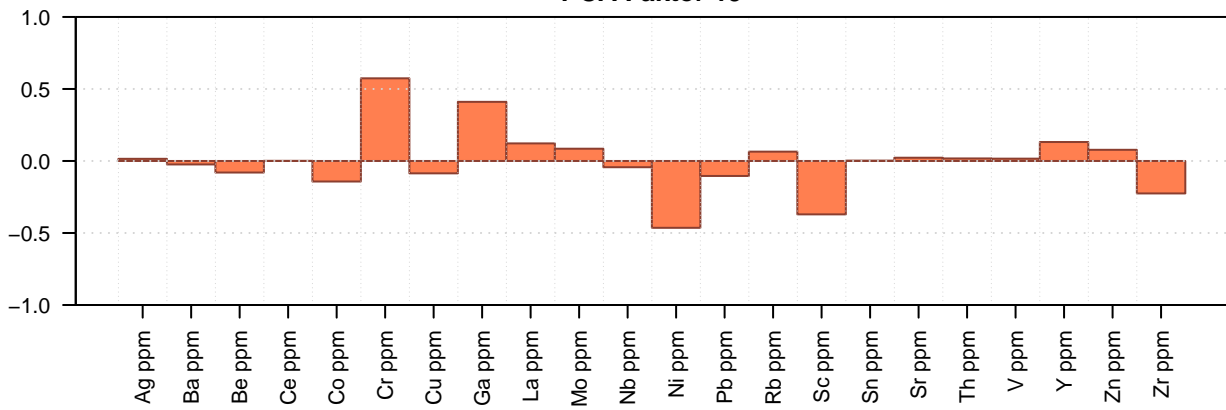
PCA Faktor 17



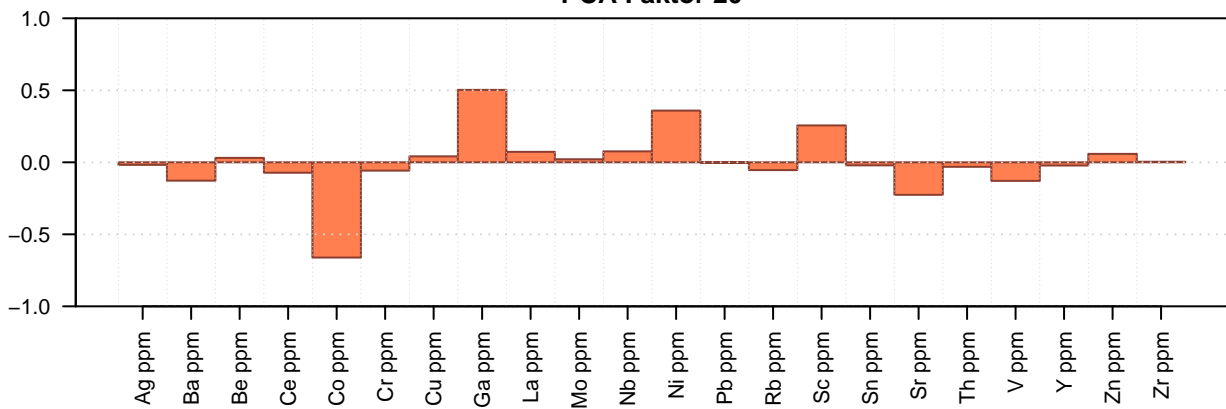
PCA Faktor 18



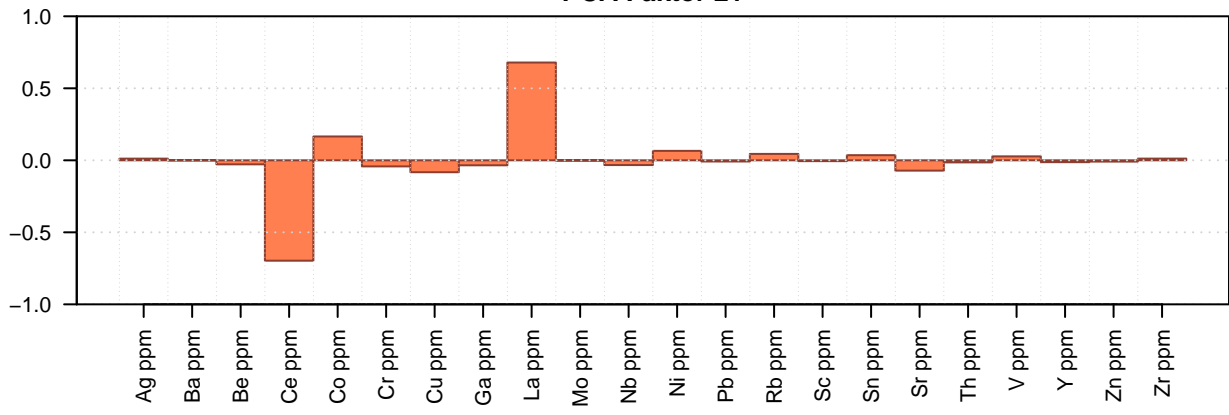
PCA Faktor 19



PCA Faktor 20



PCA Faktor 21





BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG, WISSENSCHAFT & FORSCHUNG

GEOLOGISCHE BUNDESANSTALT

FA ROHSTOFFGEOLOGIE

Titel

**Robuste PCA für Kompositionsdaten der Spurenelemente:
Quantile der Werte der Hauptkomponenten**

Projekt

ÜLG-070 2019 IRIS-Online

Sachbearbeiter

Th. Filzmoser &
P. Filzmoser

Seiten

11

Datum

Sept. 2019

Datenbank



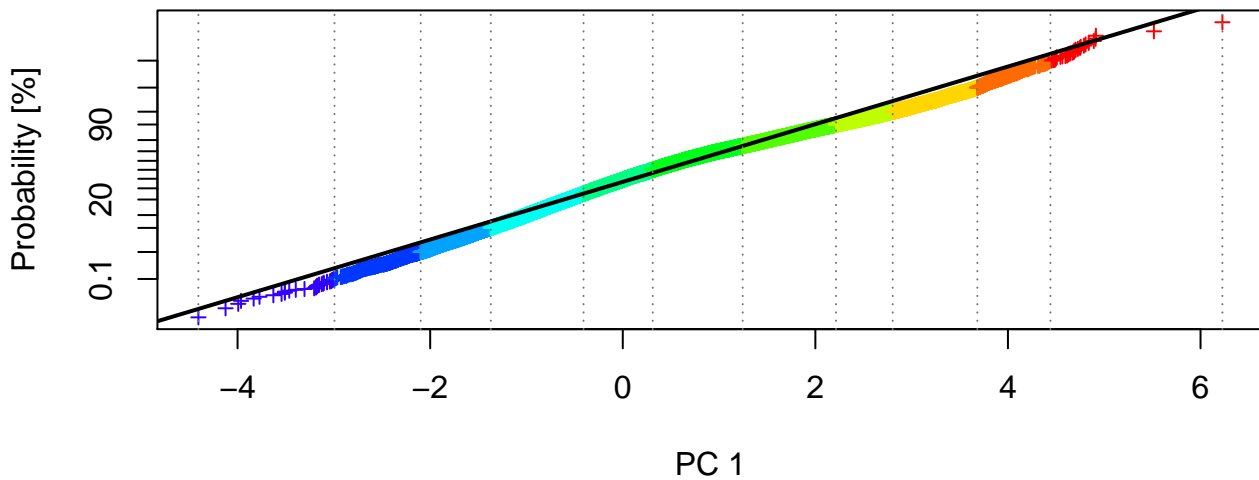
Geologische Bundesanstalt
Neulinggasse 38,
A-1030 Wien

Beilage Nr.

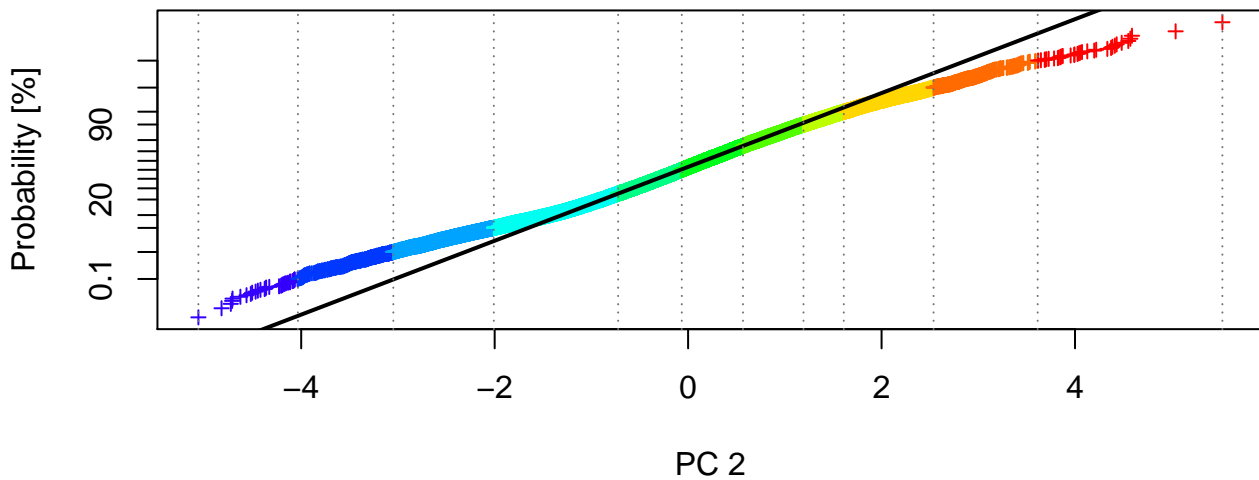
Anhang 12

Nur für den Dienstgebrauch

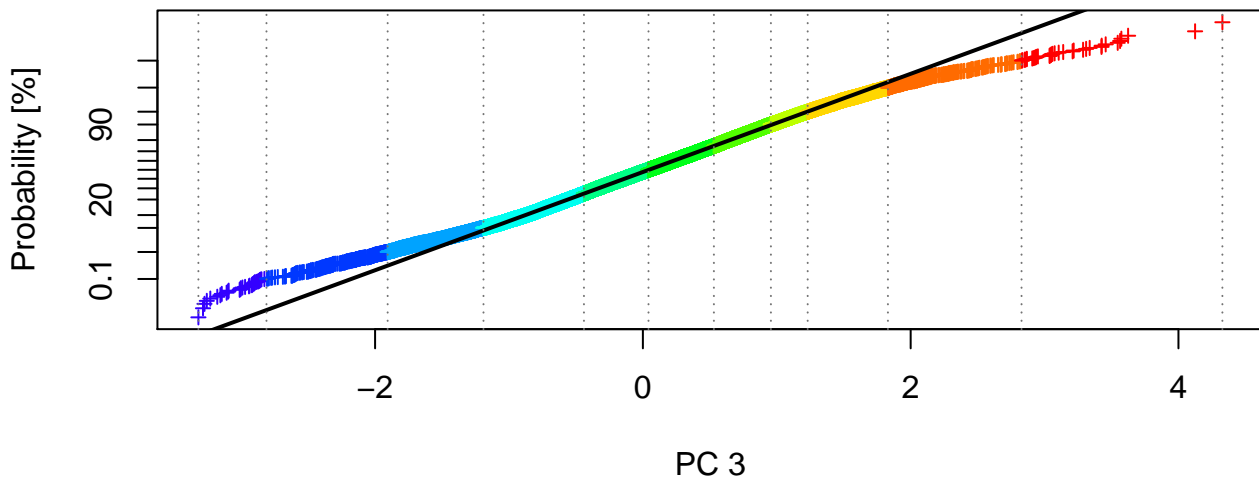
PC 1 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



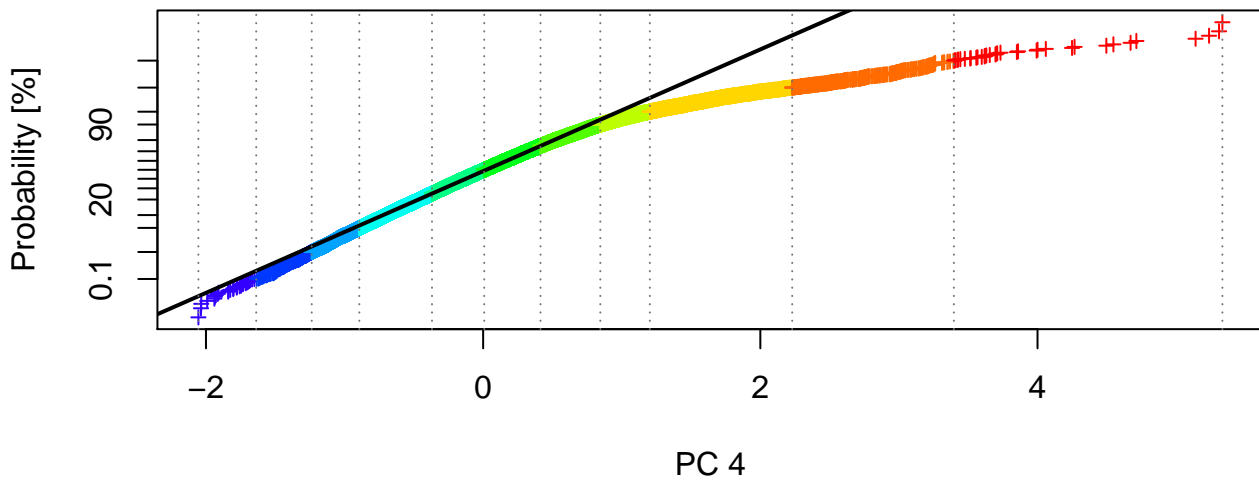
PC 2 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



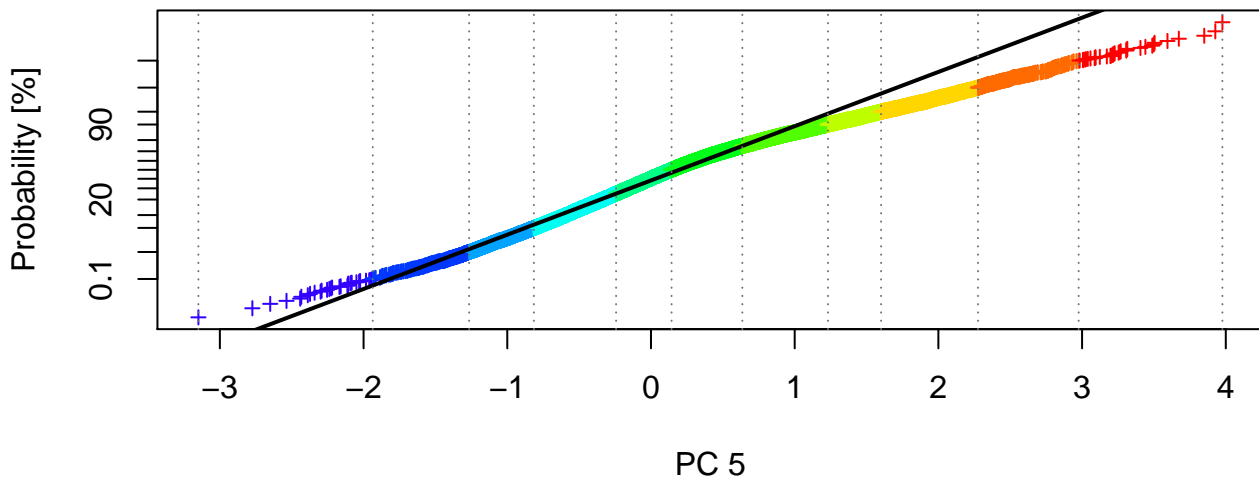
PC 3 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



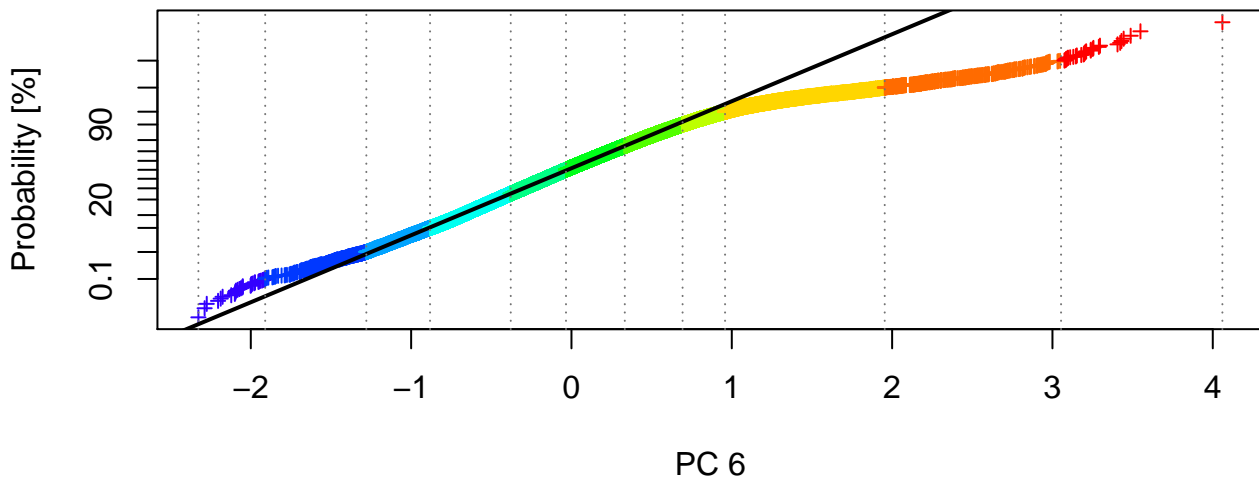
PC 4 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



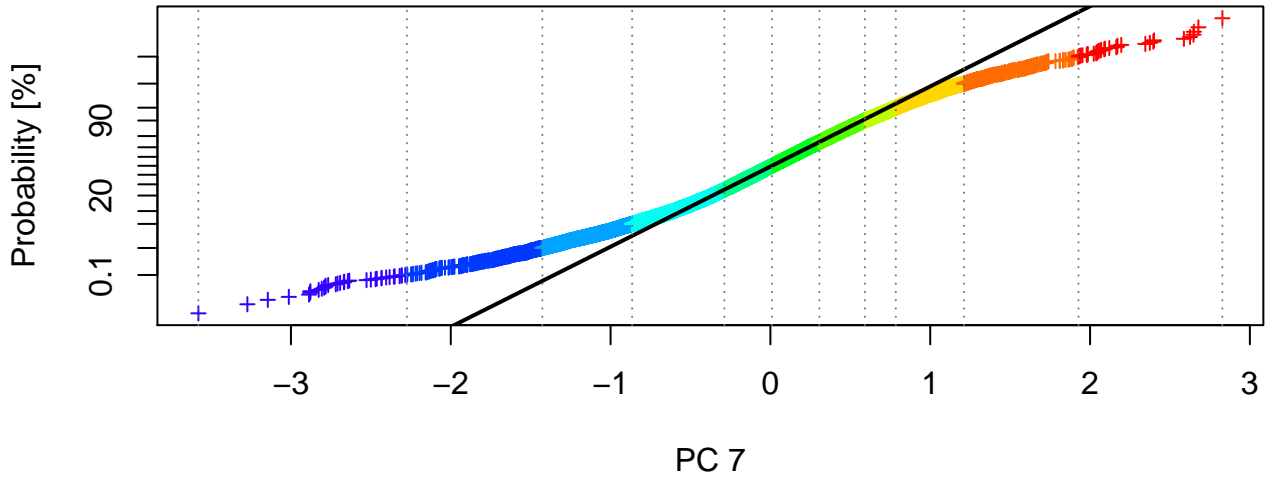
PC 5 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



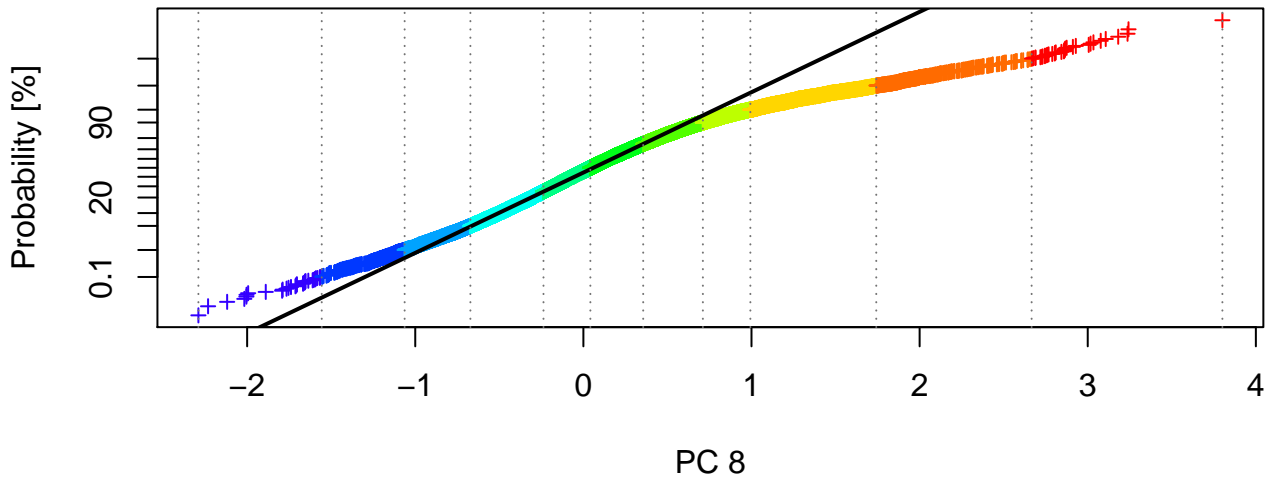
PC 6 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



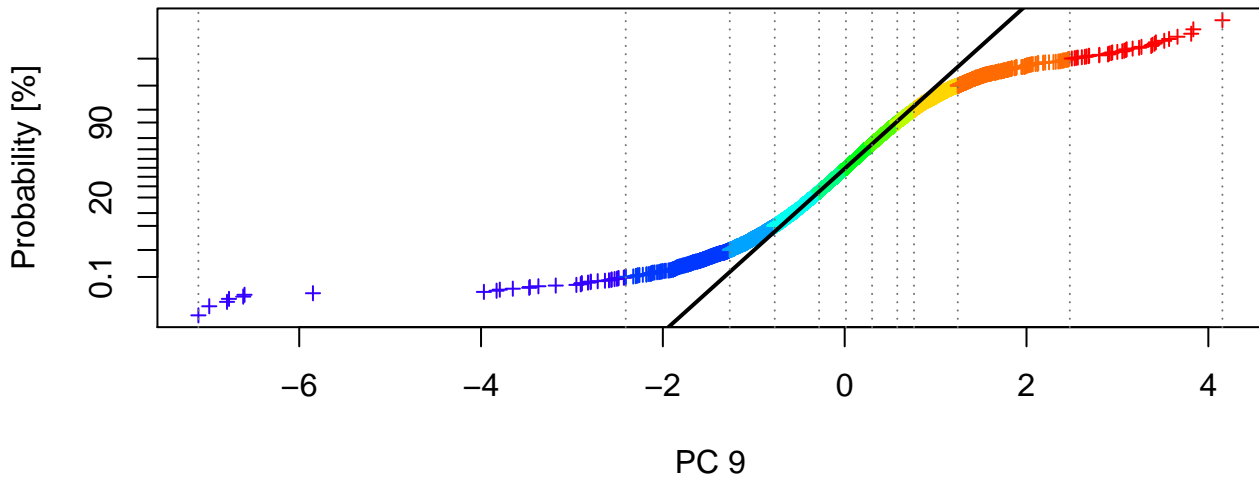
PC 7 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



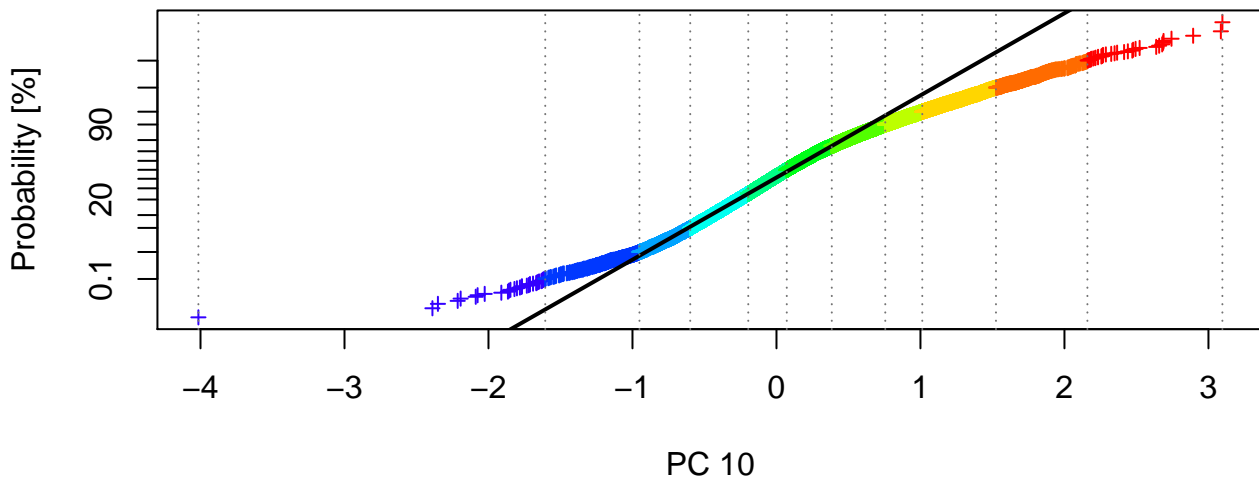
PC 8 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



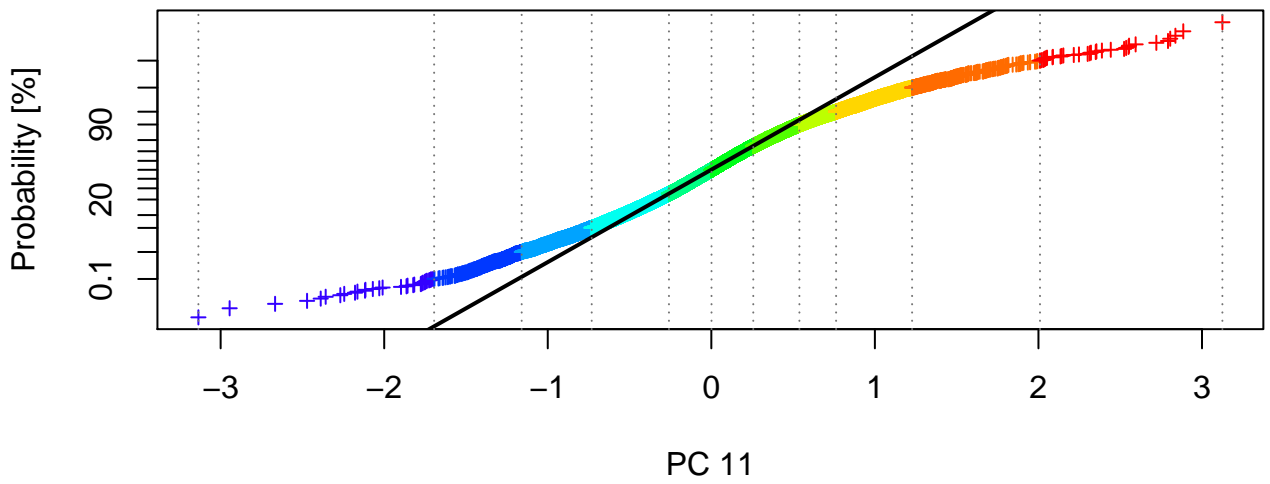
PC 9 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



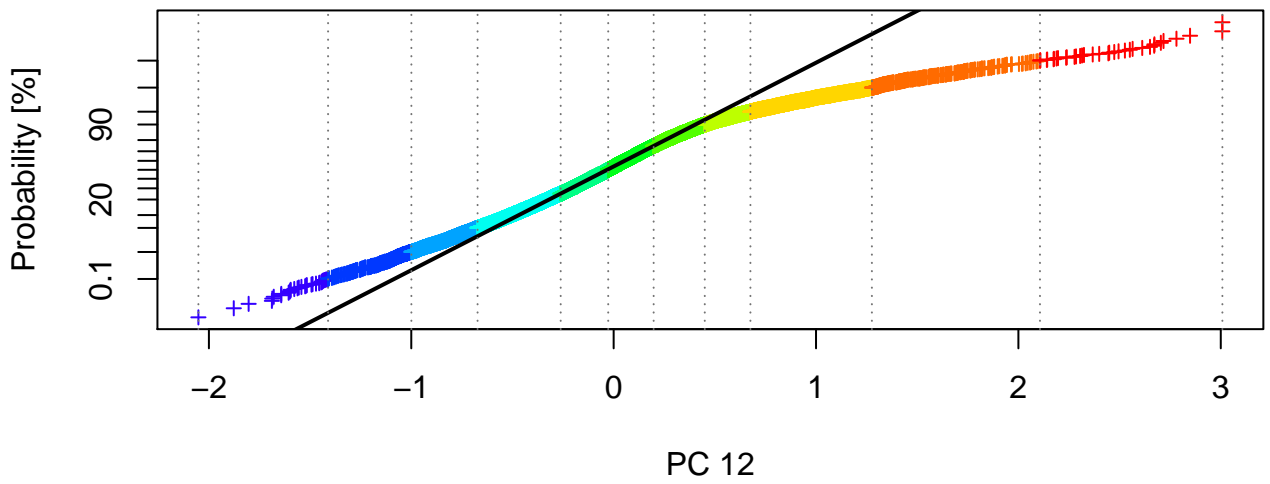
PC 10 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



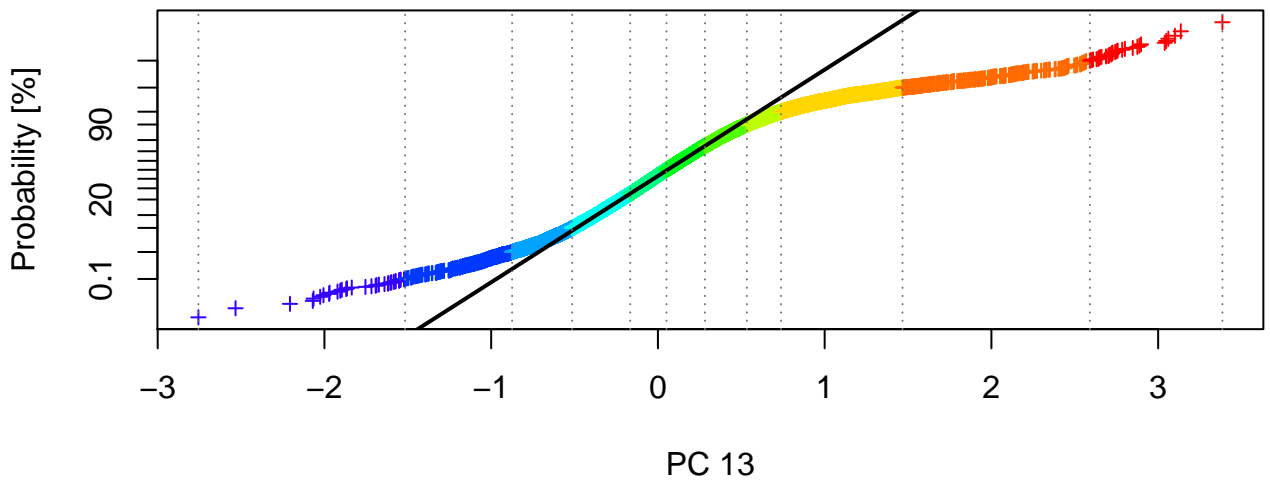
PC 11 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



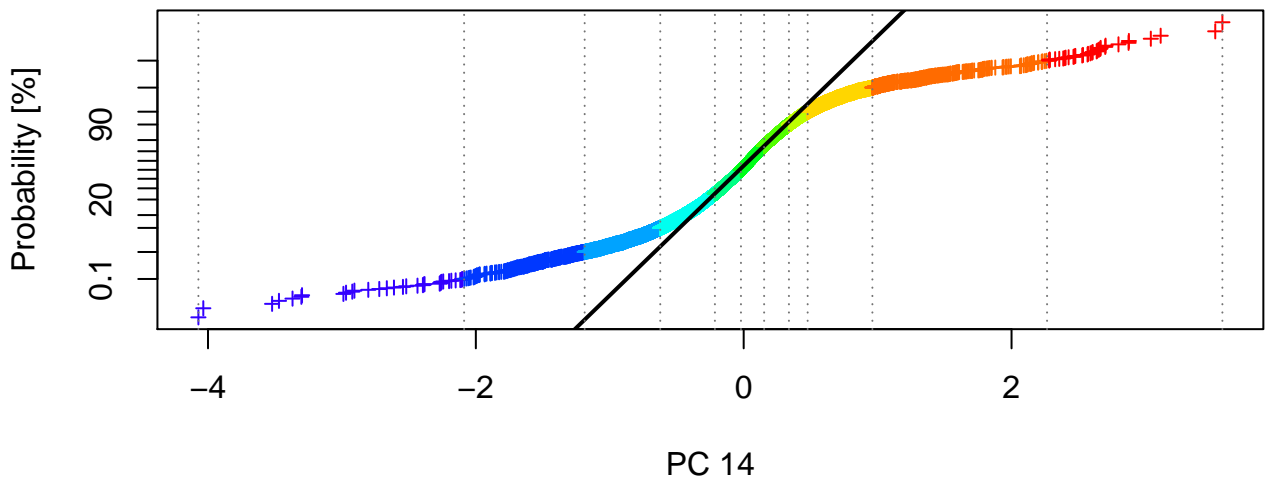
PC 12 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



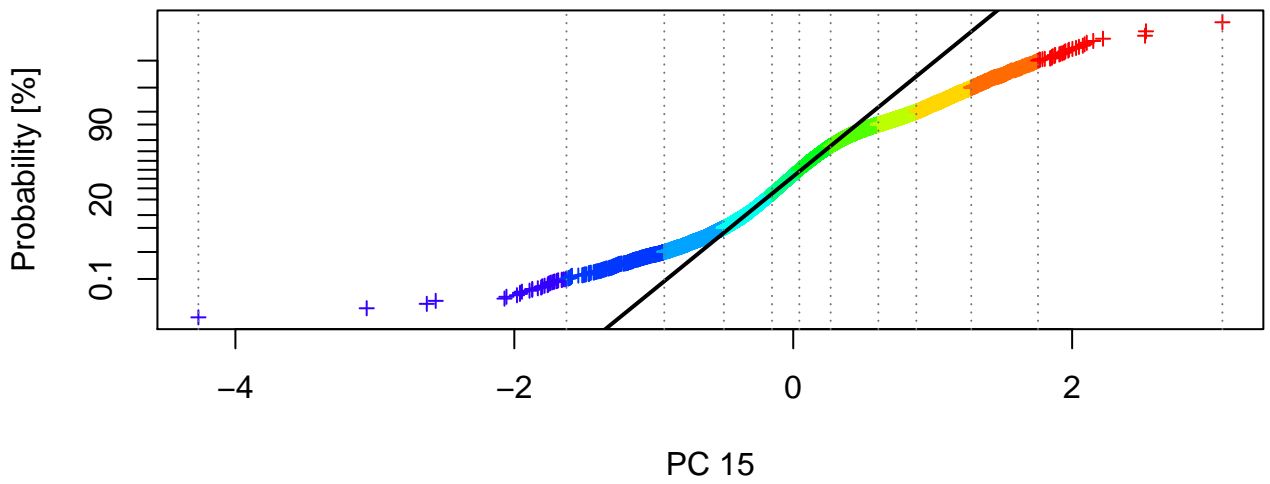
PC 13 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



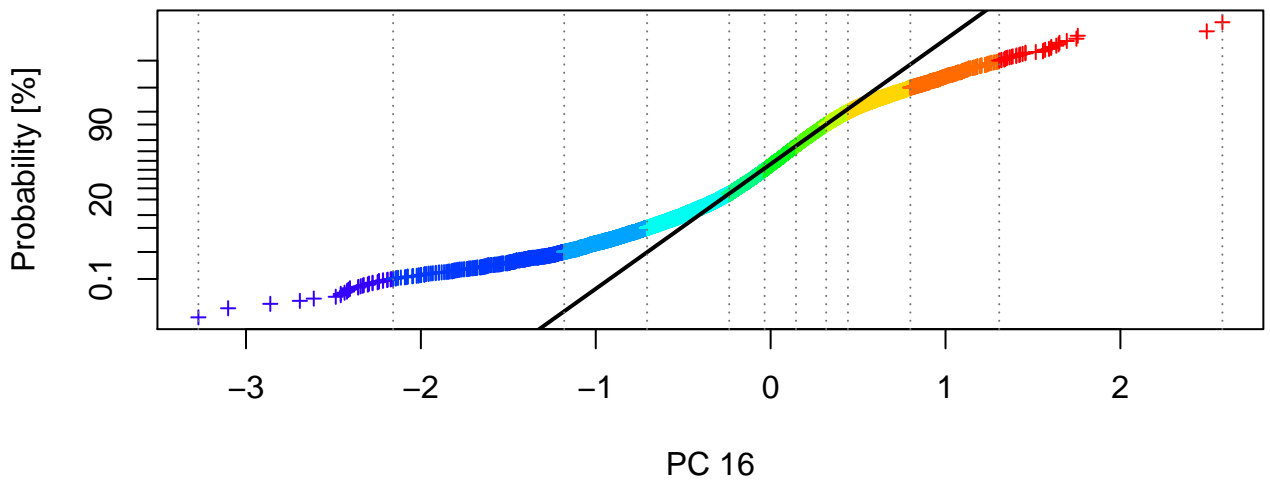
PC 14 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



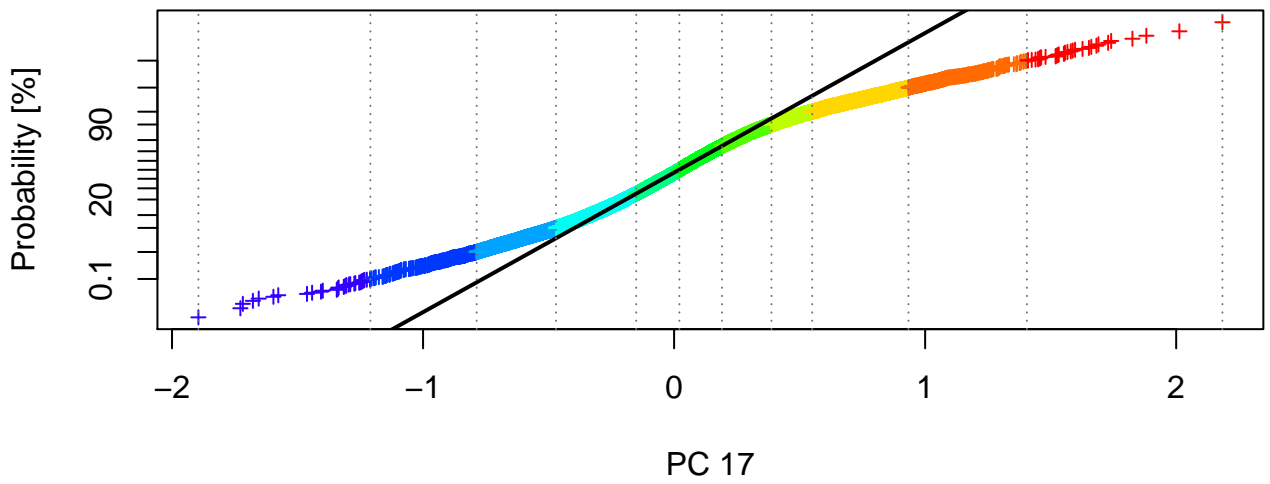
PC 15 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



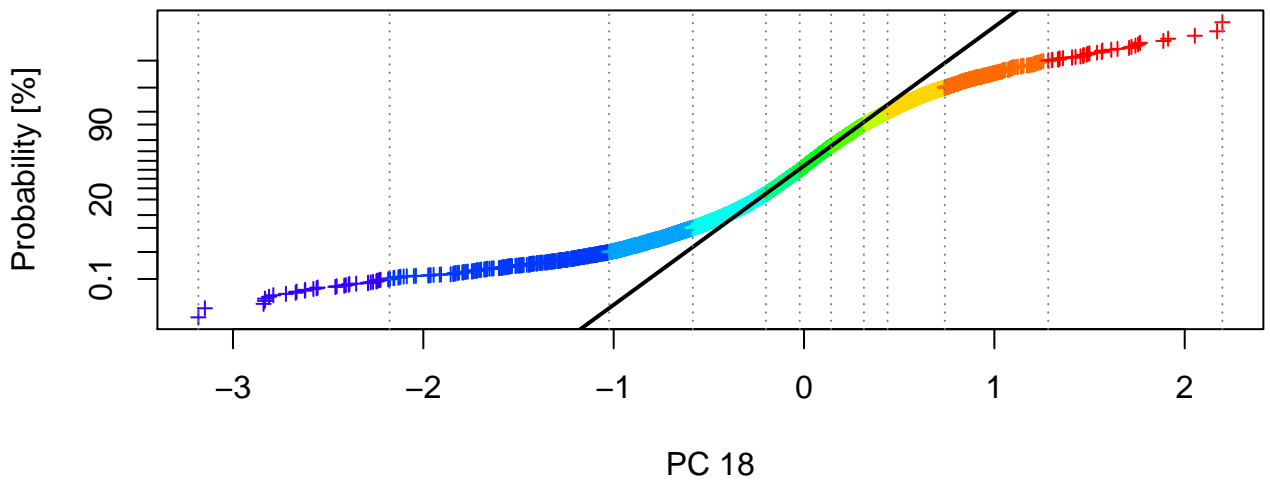
PC 16 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



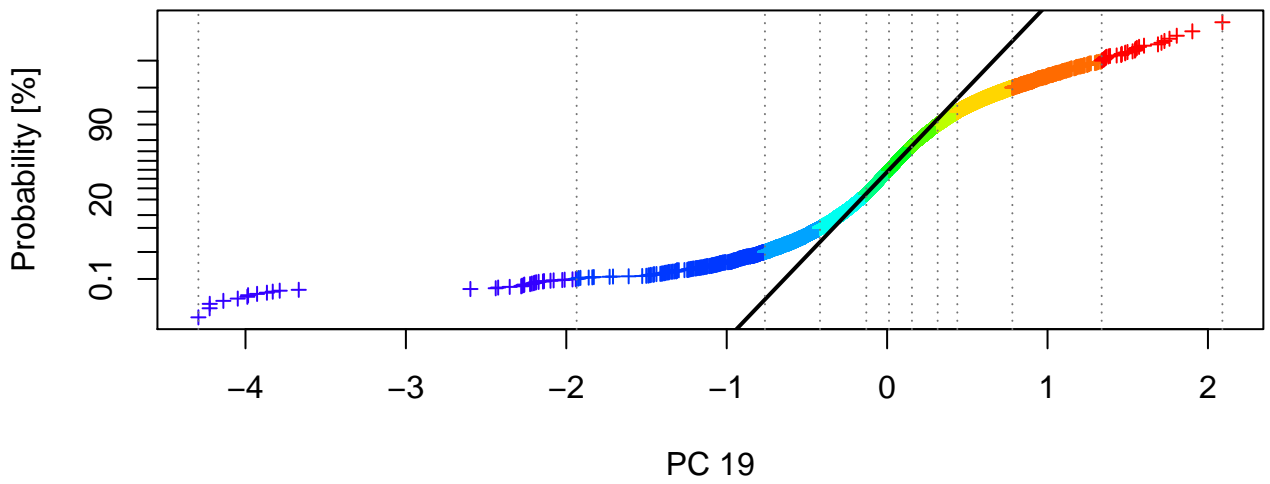
PC 17 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



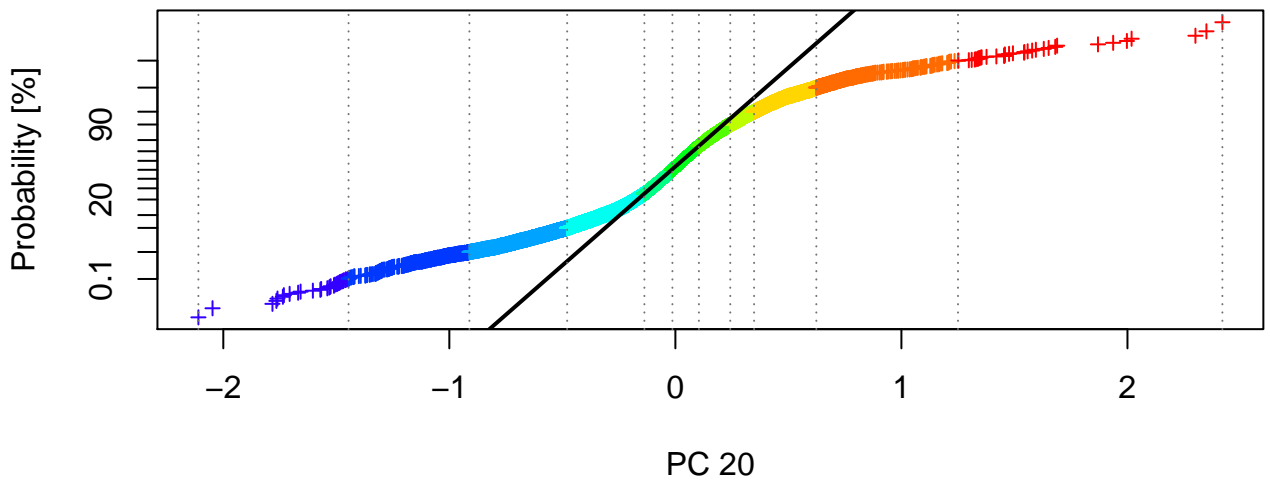
PC 18 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



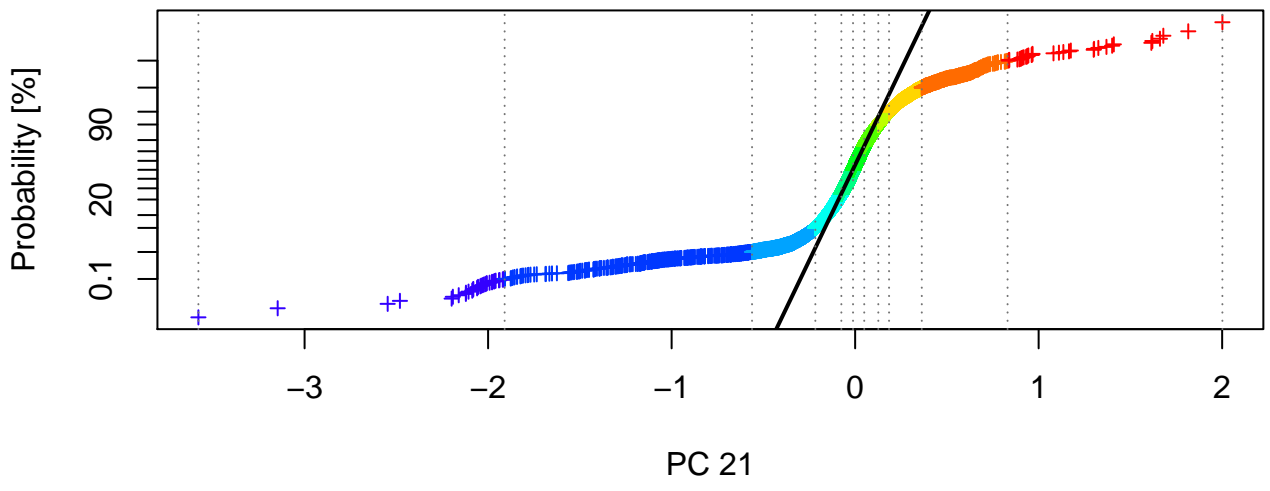
PC 19 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



PC 20 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1



PC 21 : Quantile 0, 0.001, 0.01, 0.05, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9, 0.95, 0.99, 0.999, 1





BUNDESMINISTERIUM FÜR BILDUNG, WISSENSCHAFT & FORSCHUNG

GEOLOGISCHE BUNDESANSTALT

FA ROHSTOFFGEOLOGIE

Titel

**Robuste PCA für Kompositionsdaten der Spurenelemente:
Vergleich der Flächenkarten der Werte der Hauptkomponenten der
robusten PCA mit den Flächenkarten der Werte der
Hauptkomponenten der robusten PCA für Kompositionsdaten
(pcaCoDa)**

Projekt

ÜLG-070 2019 IRIS-Online

Sachbearbeiter

Th. Filzmoser &
P. Filzmoser

Seiten

21

Datum

Sept. 2019

Datenbank



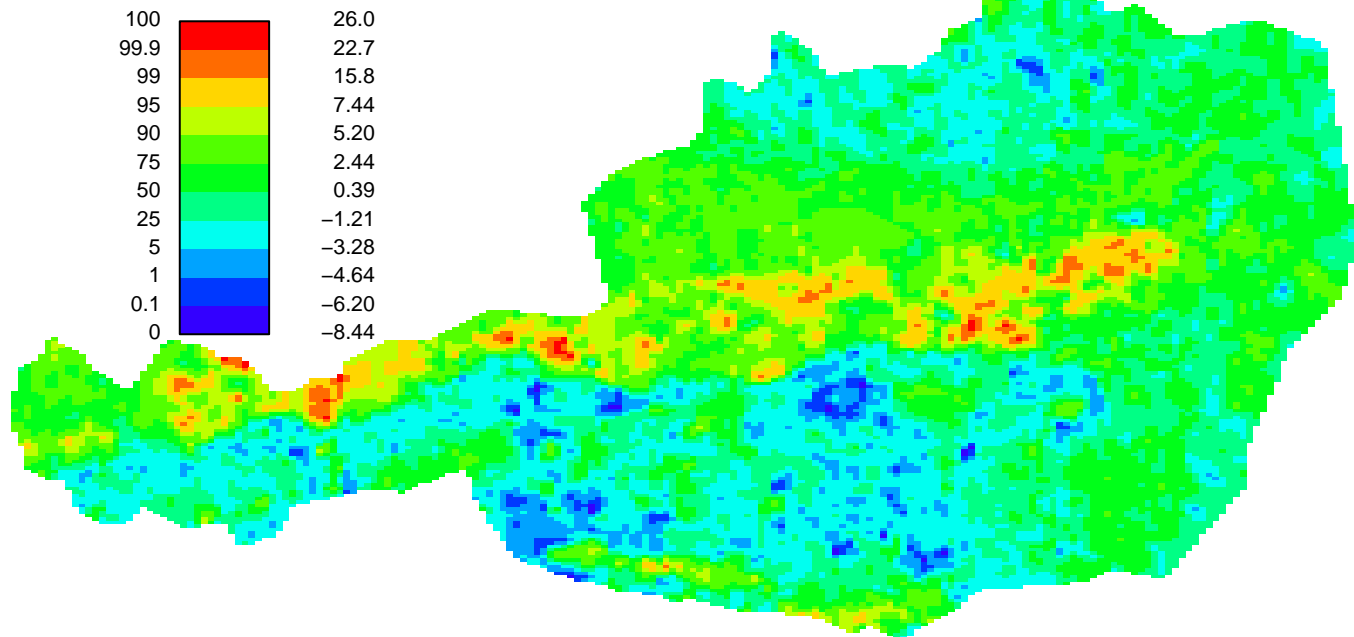
Geologische Bundesanstalt
Neulinggasse 38,
A-1030 Wien

Beilage Nr.

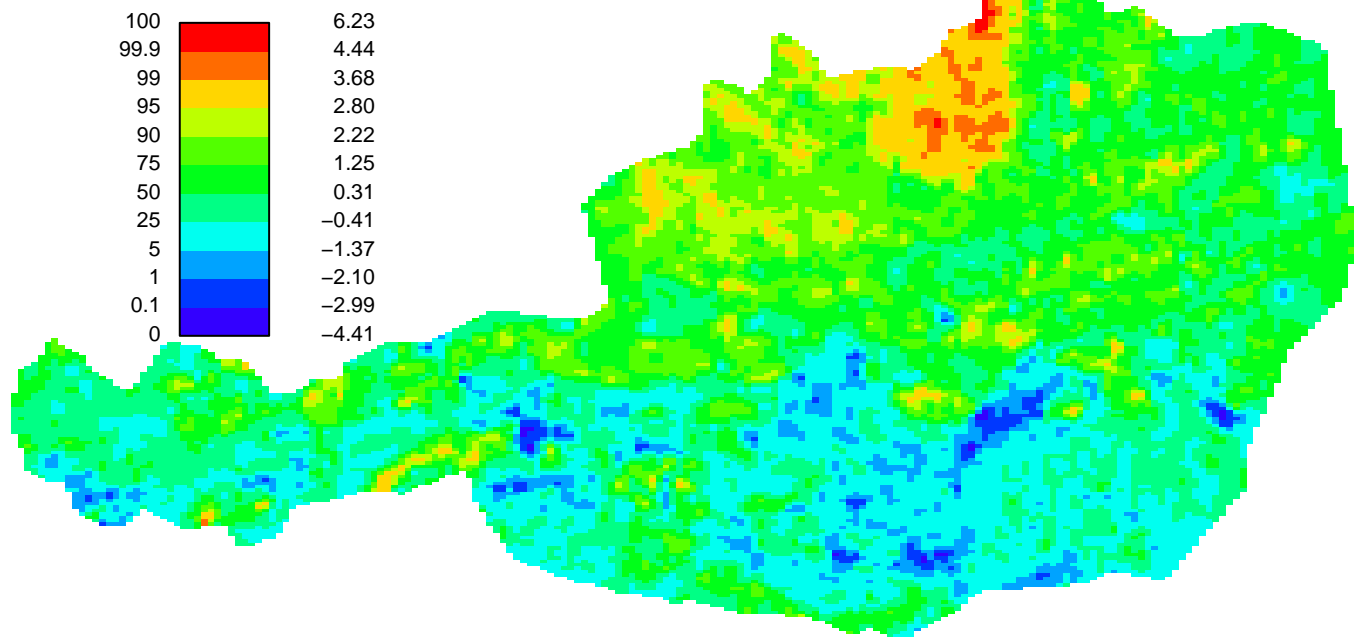
Anhang 13

Nur für den Dienstgebrauch

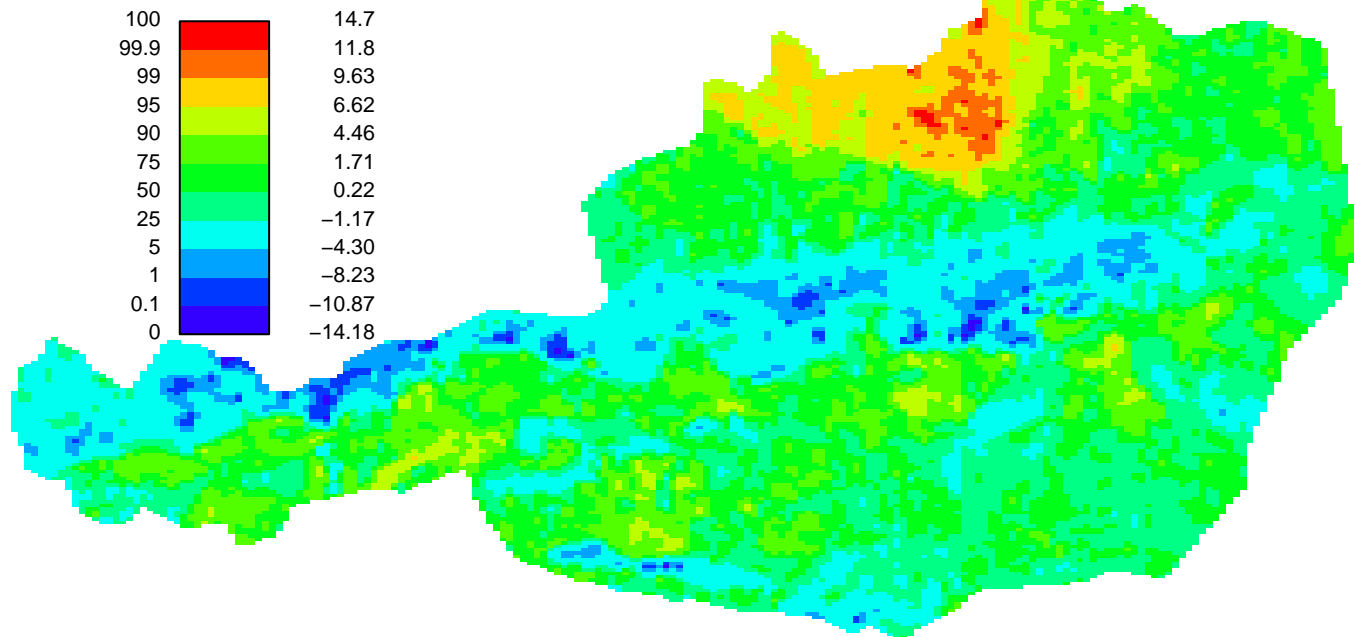
Percentile PCA Faktor 1



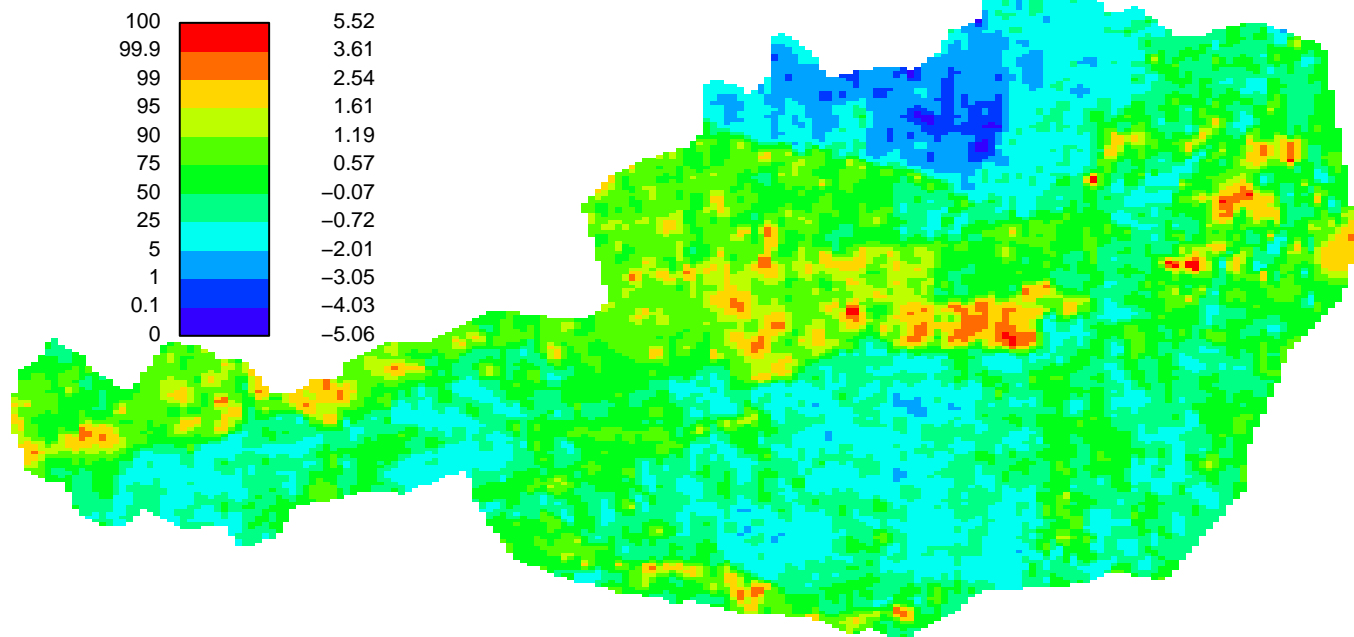
Percentile pcaCoDa Faktor 1



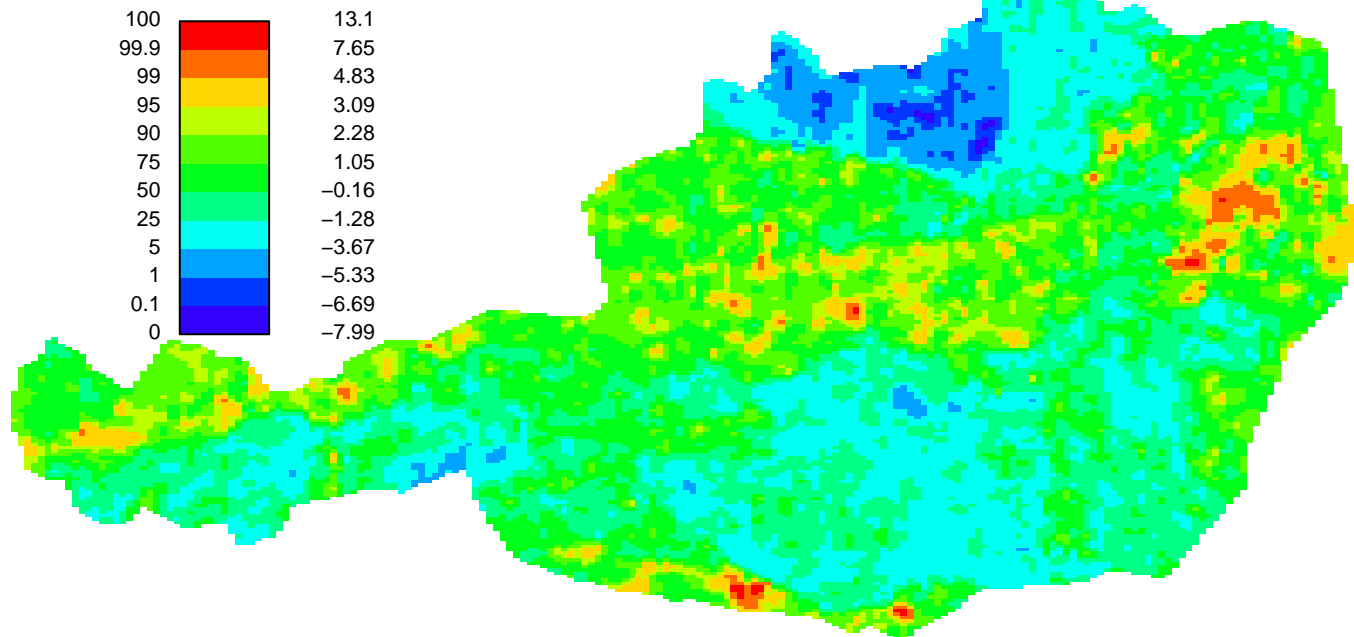
Percentile PCA Faktor 2



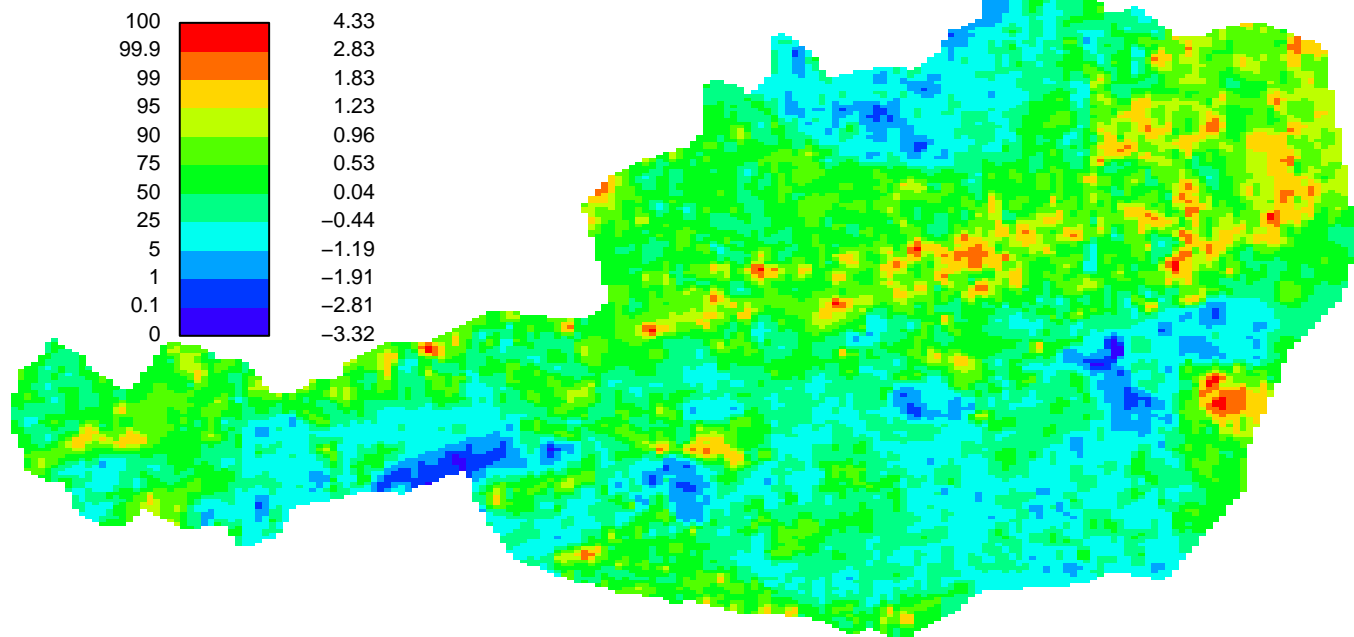
Percentile pcaCoDa Faktor 2



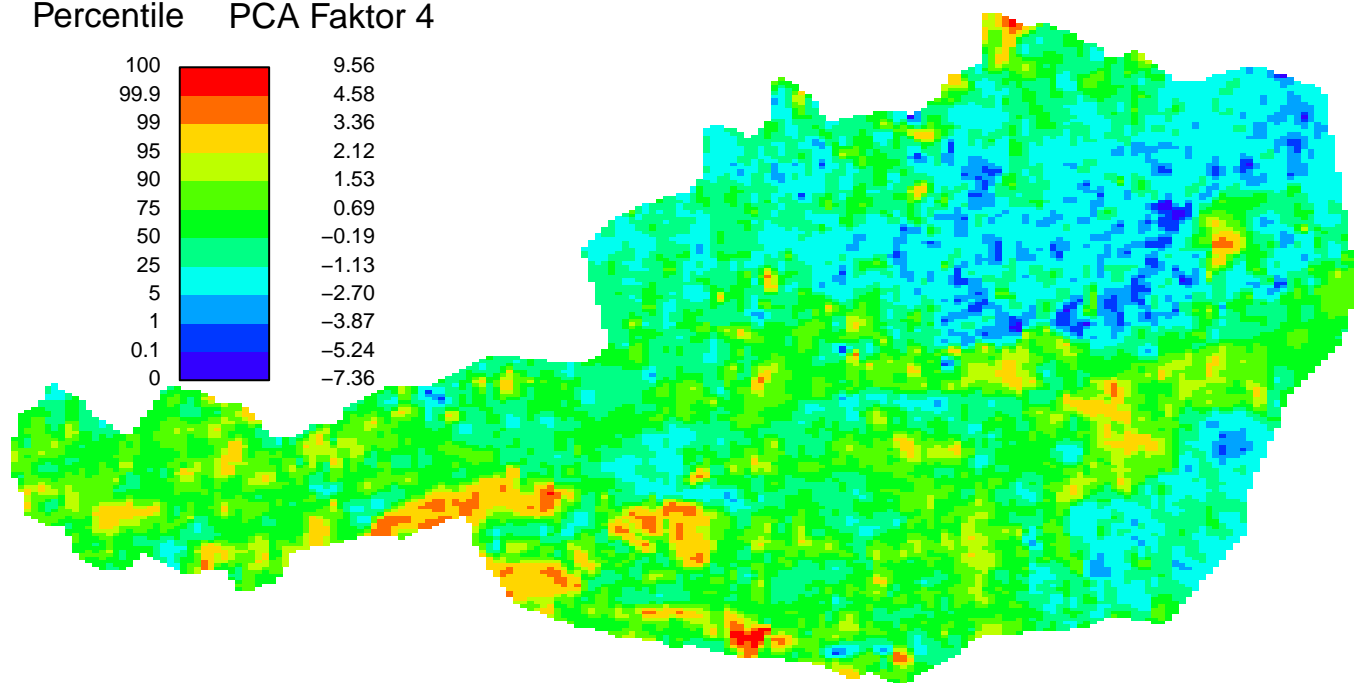
Percentile PCA Faktor 3



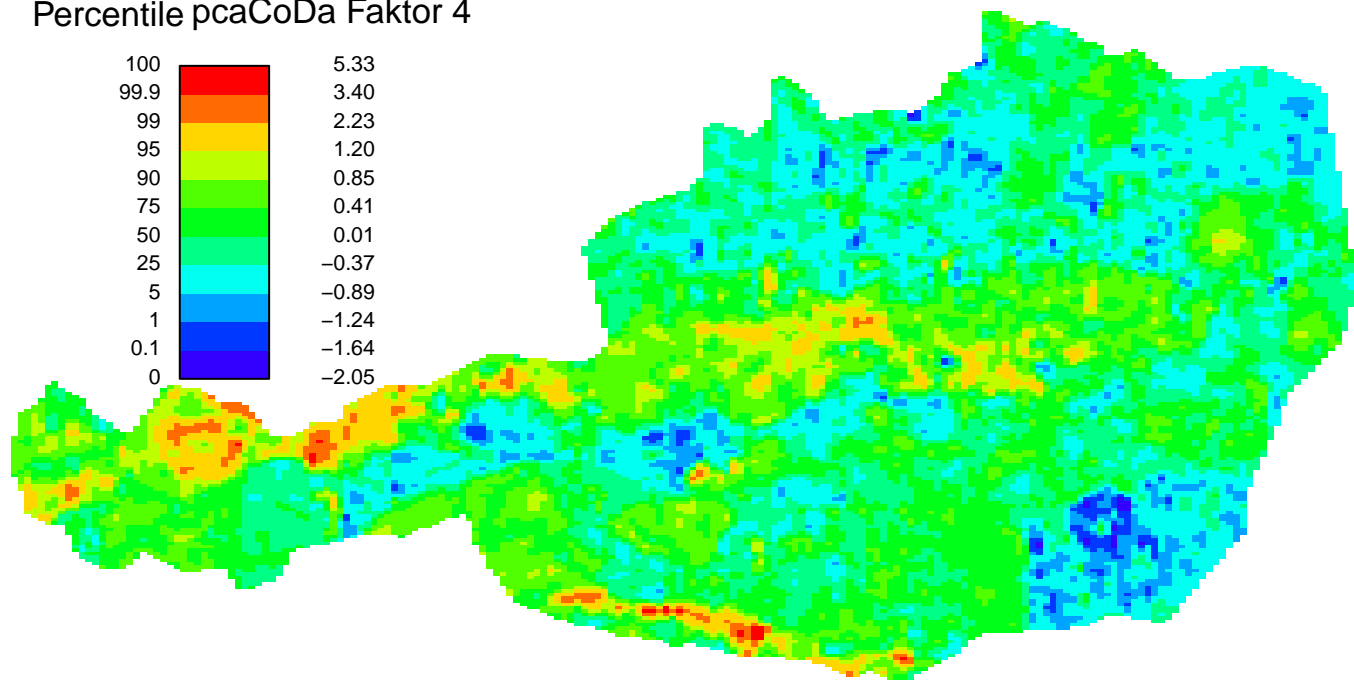
Percentile pcaCoDa Faktor 3



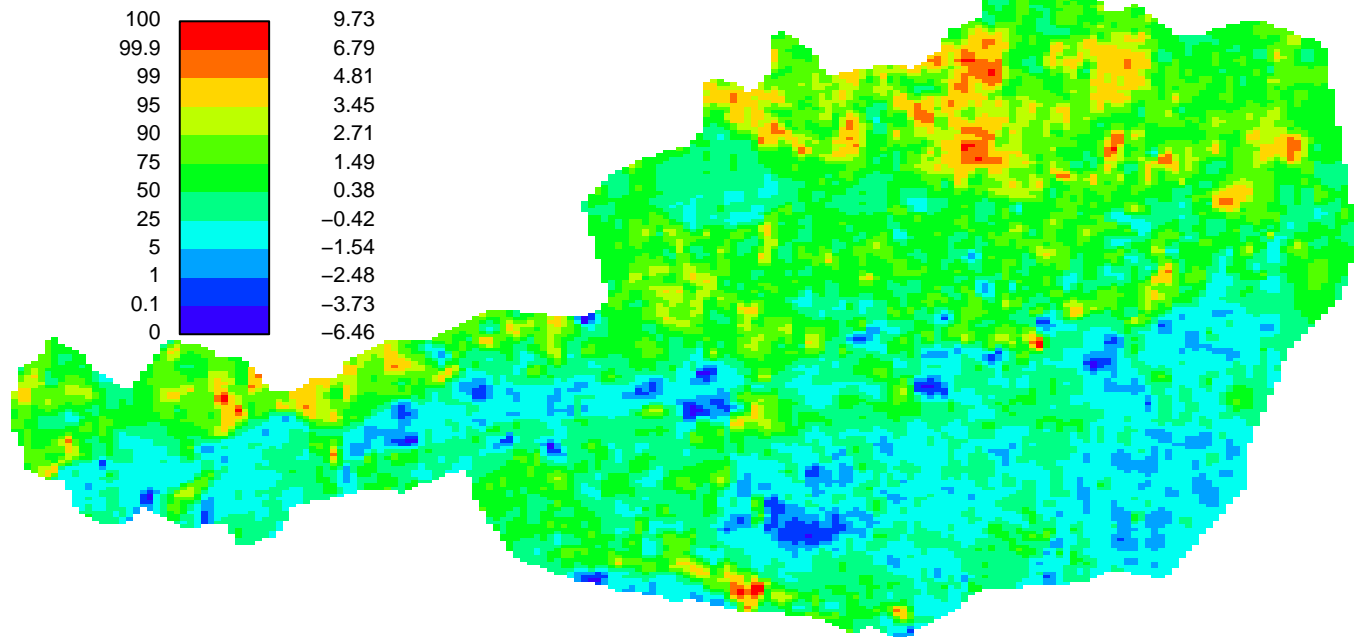
Percentile PCA Faktor 4



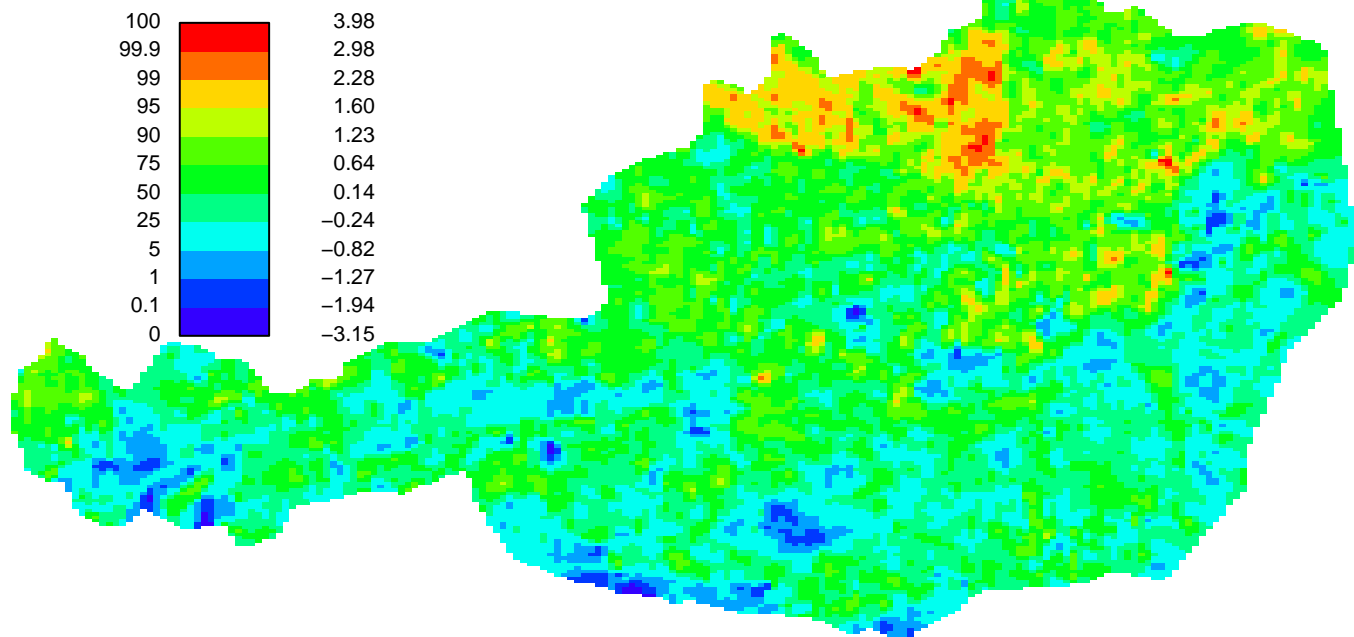
Percentile pcaCoDa Faktor 4



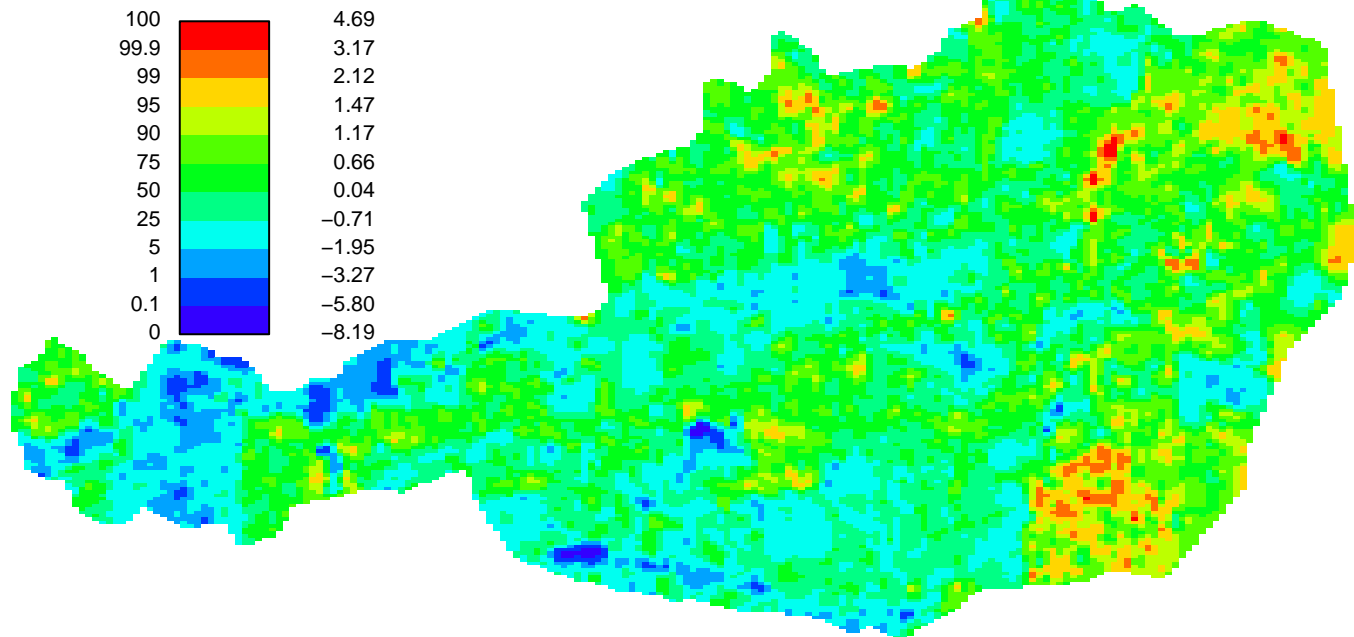
Percentile PCA Faktor 5



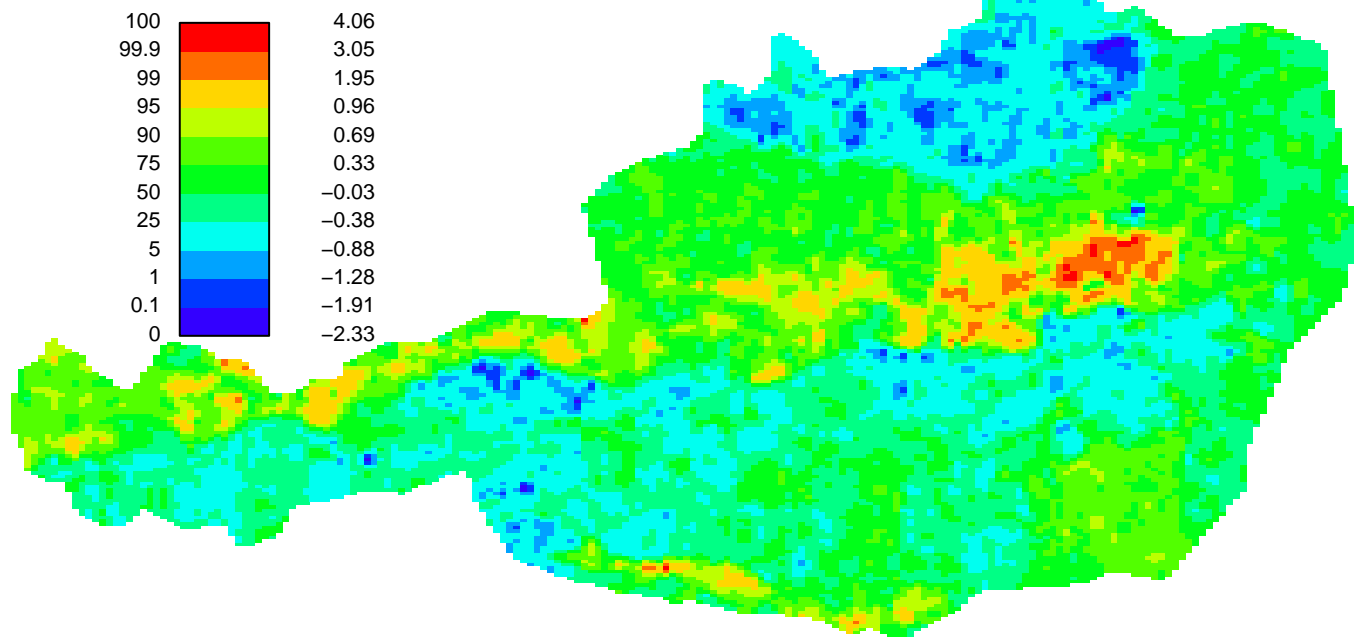
Percentile pcaCoDa Faktor 5



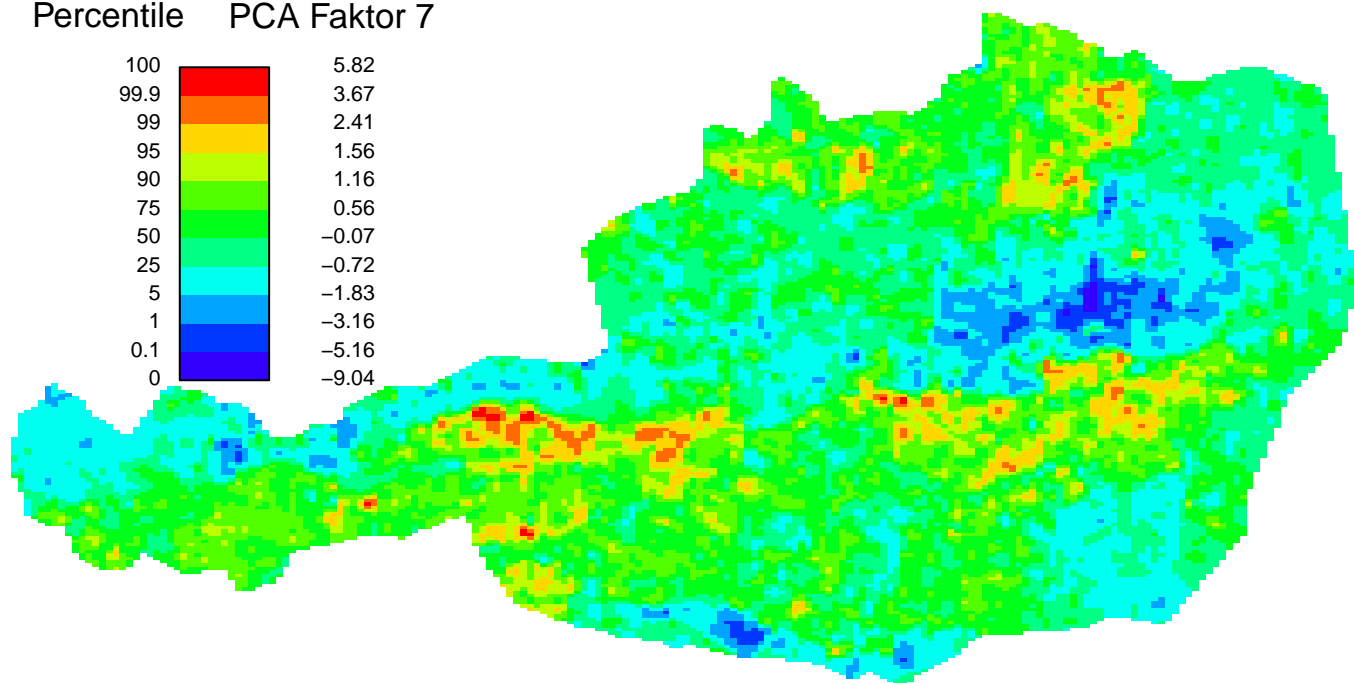
Percentile PCA Faktor 6



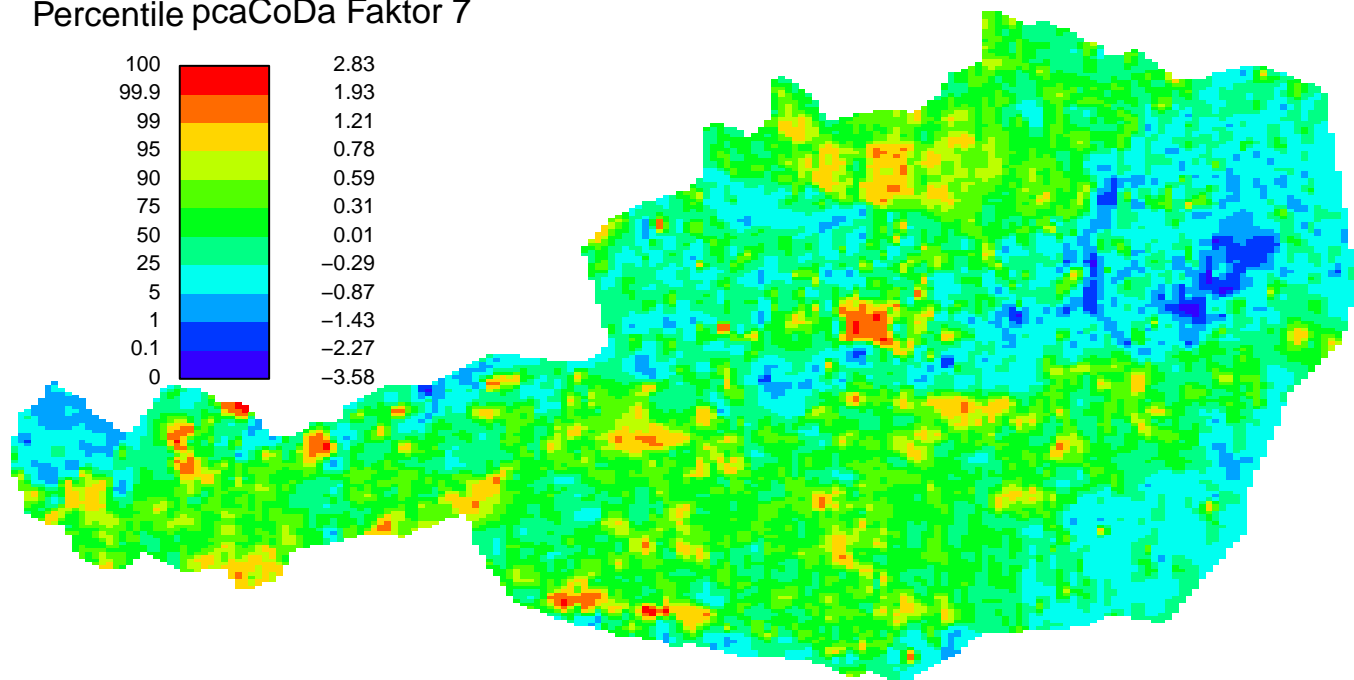
Percentile pcaCoDa Faktor 6



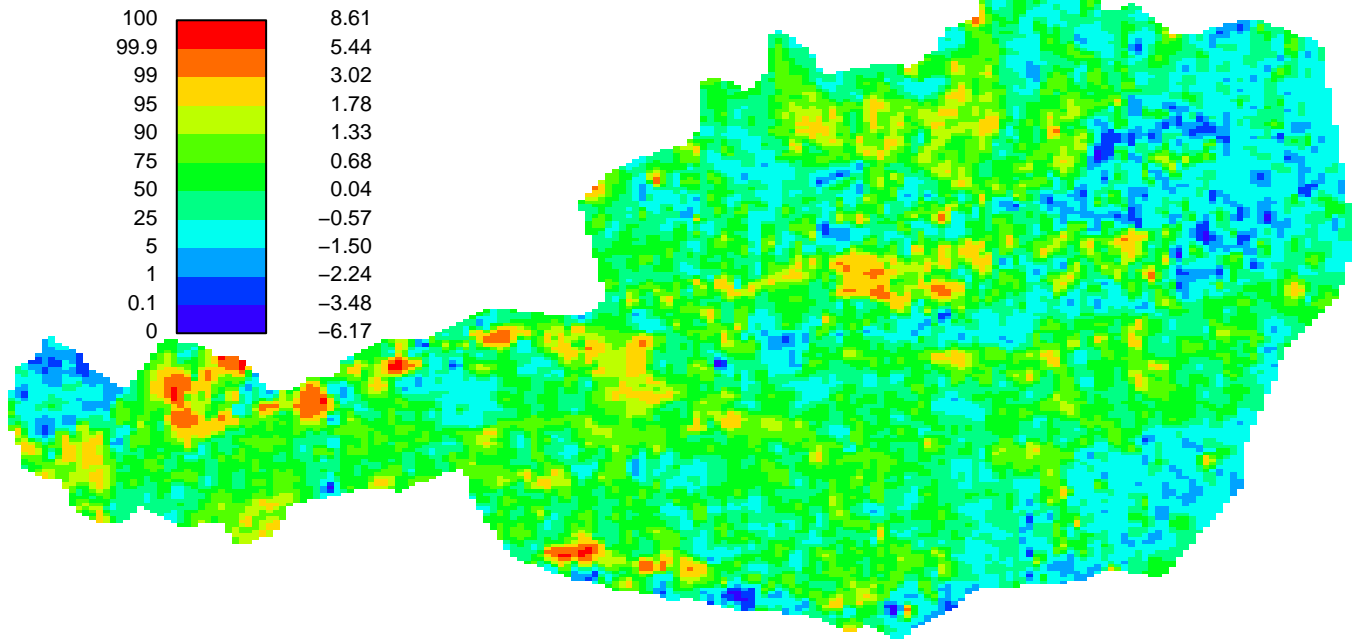
Percentile PCA Faktor 7



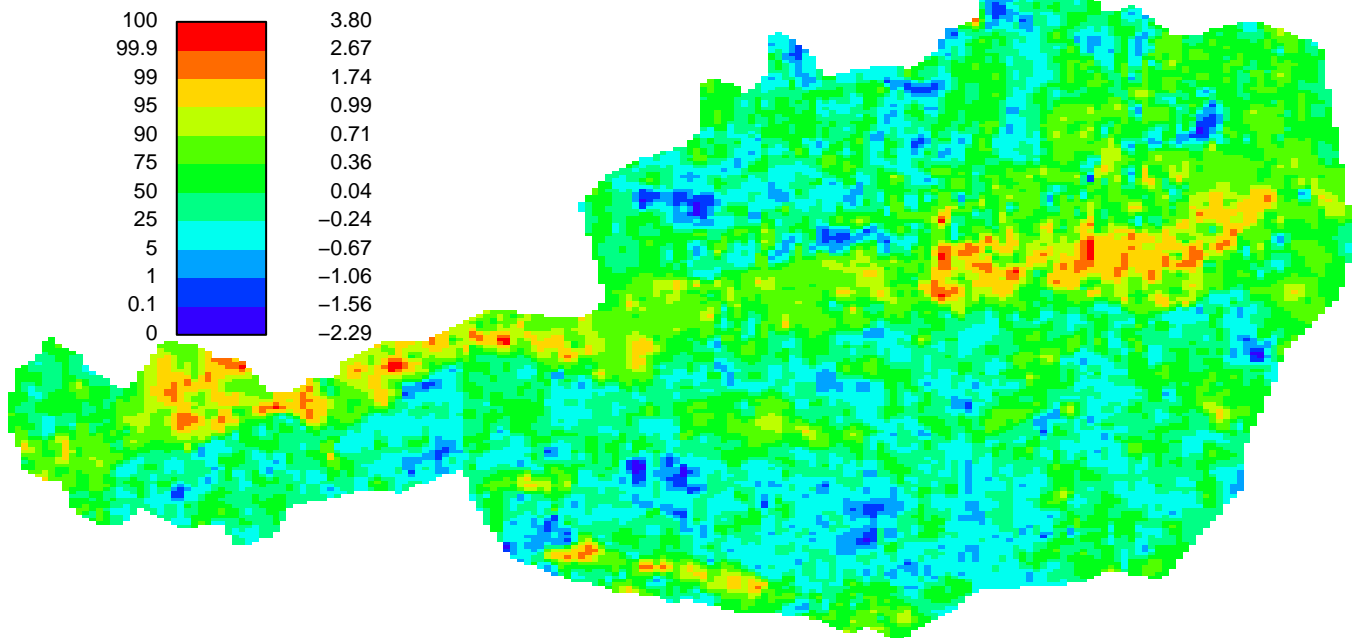
Percentile pcaCoDa Faktor 7



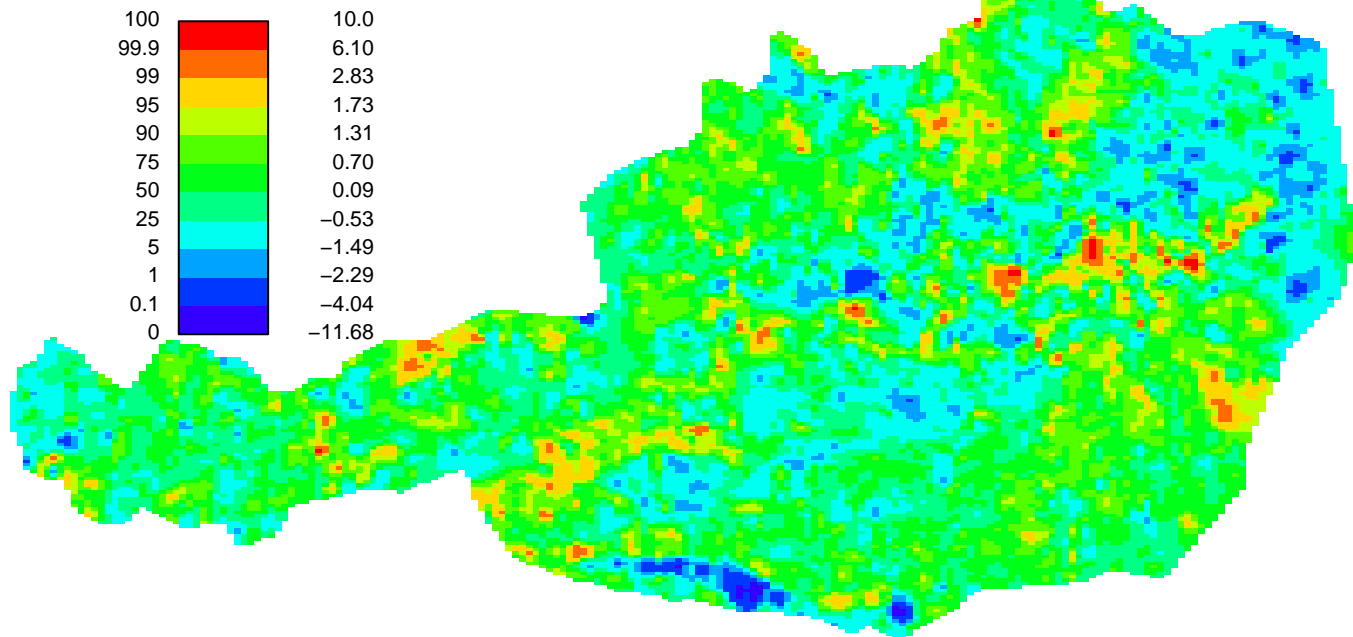
Percentile PCA Faktor 8



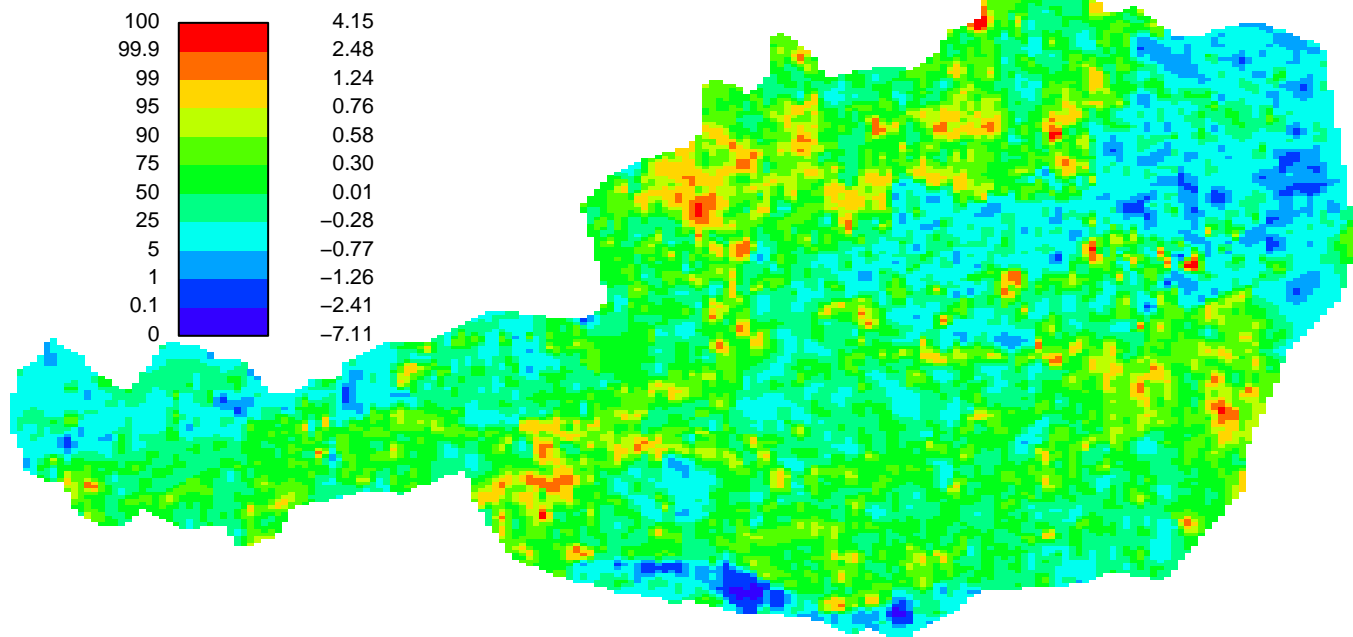
Percentile pcaCoDa Faktor 8



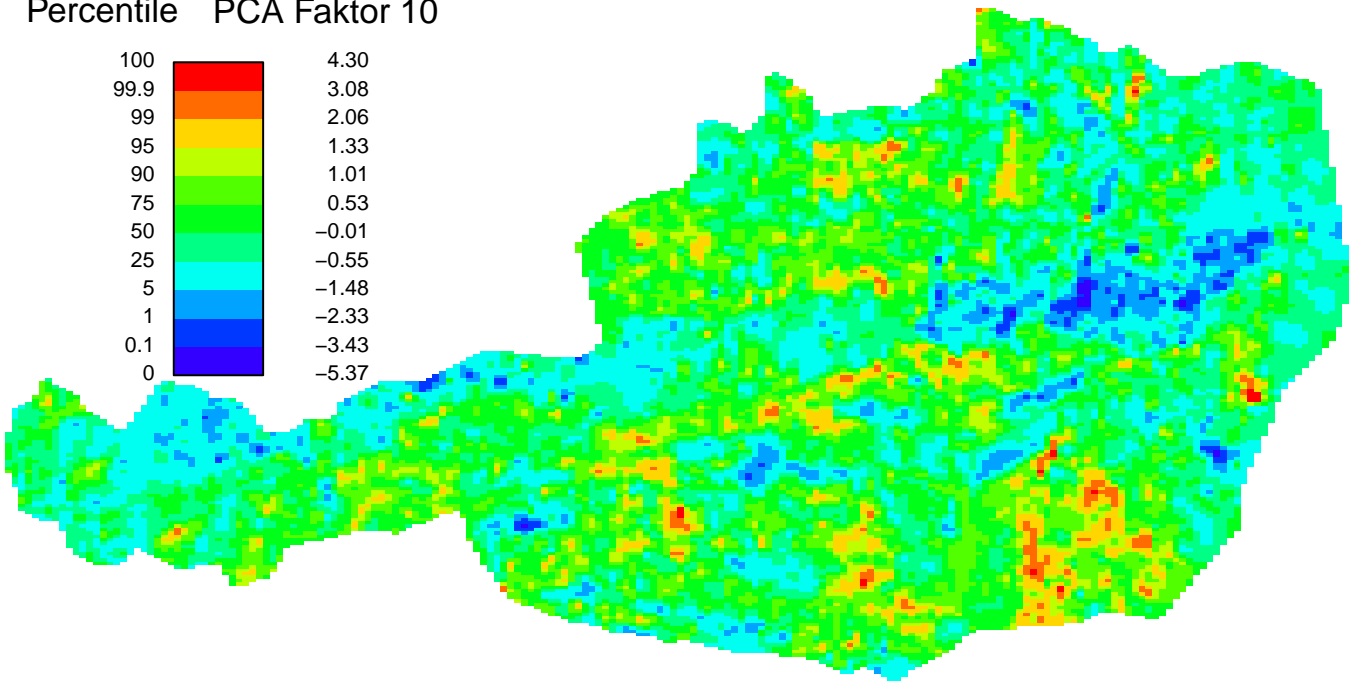
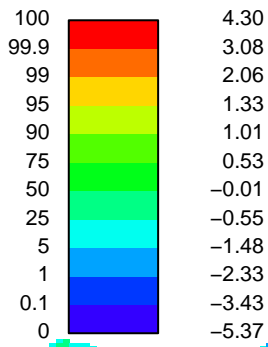
Percentile PCA Faktor 9



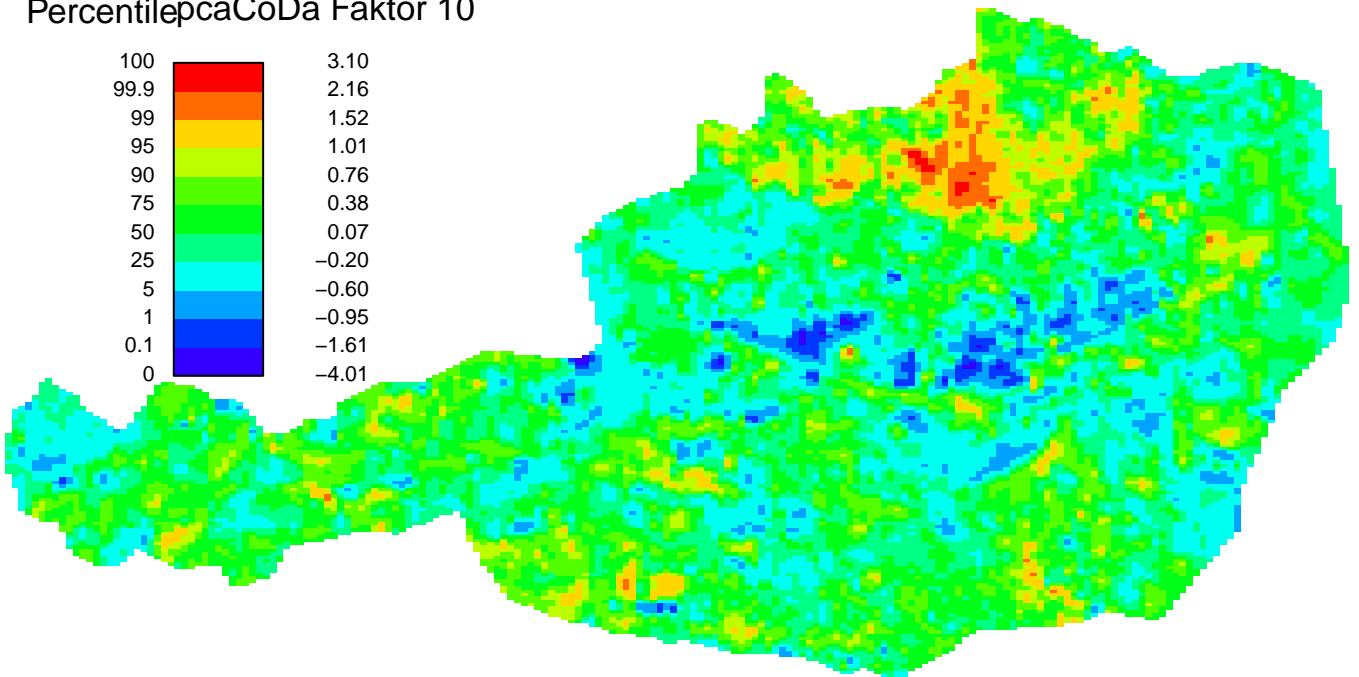
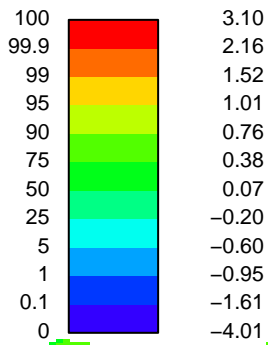
Percentile pcaCoDa Faktor 9



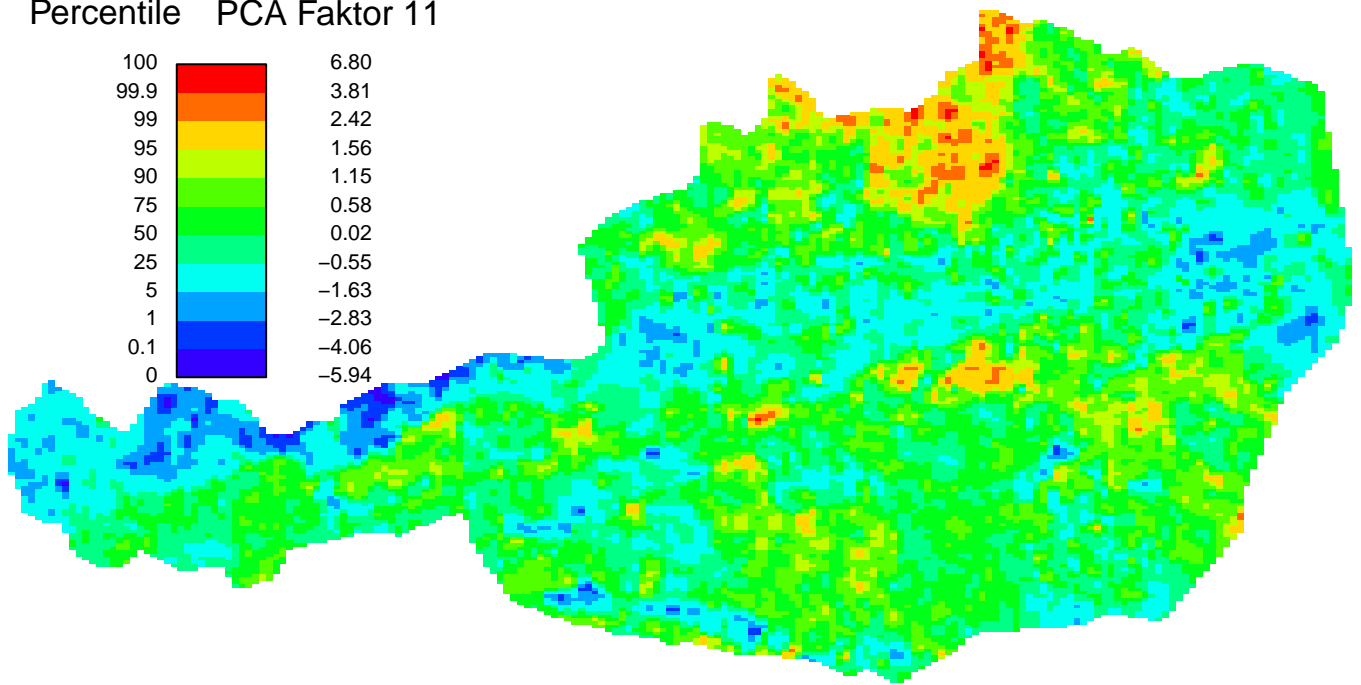
Percentile PCA Faktor 10



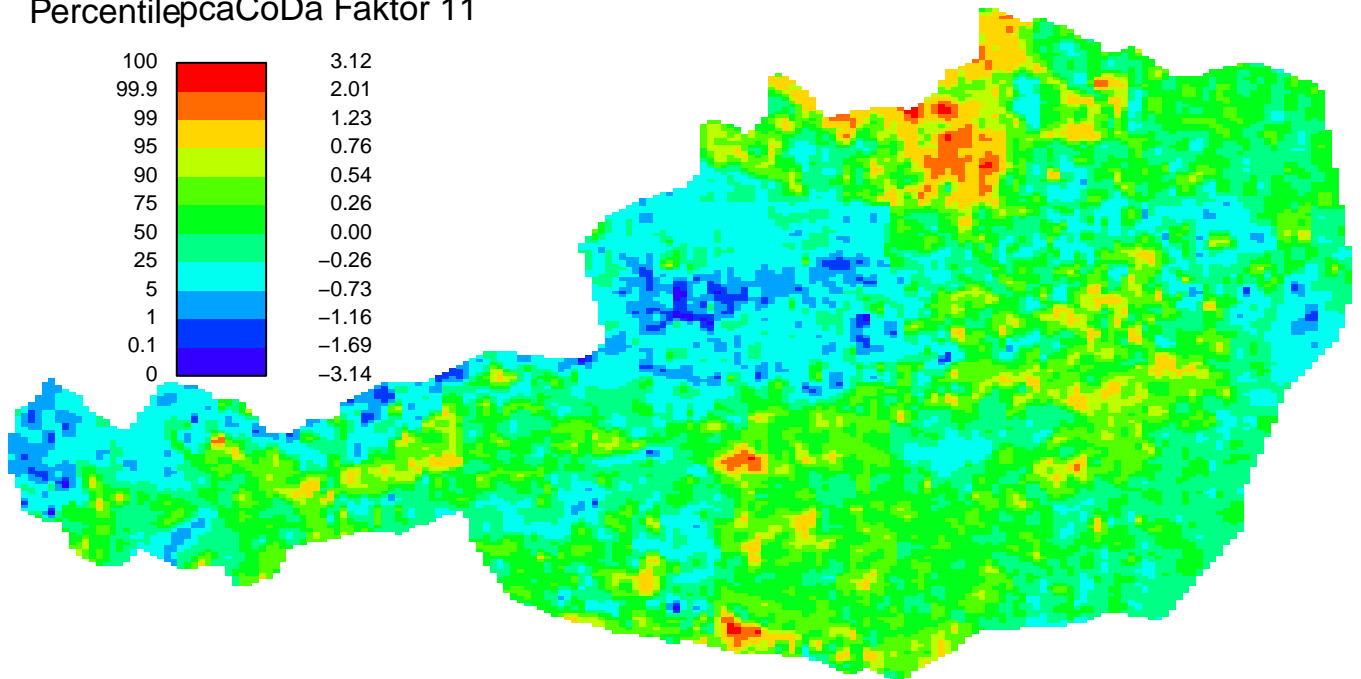
PercentilepcaCoDa Faktor 10



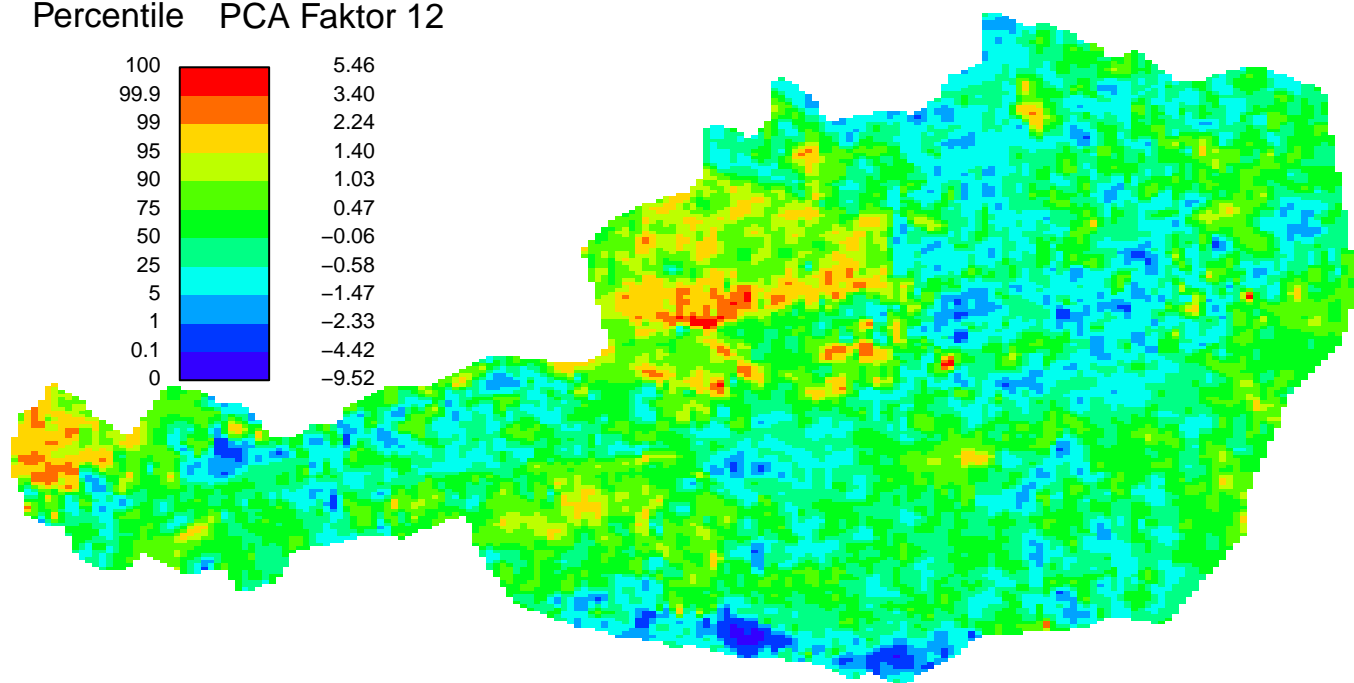
Percentile PCA Faktor 11



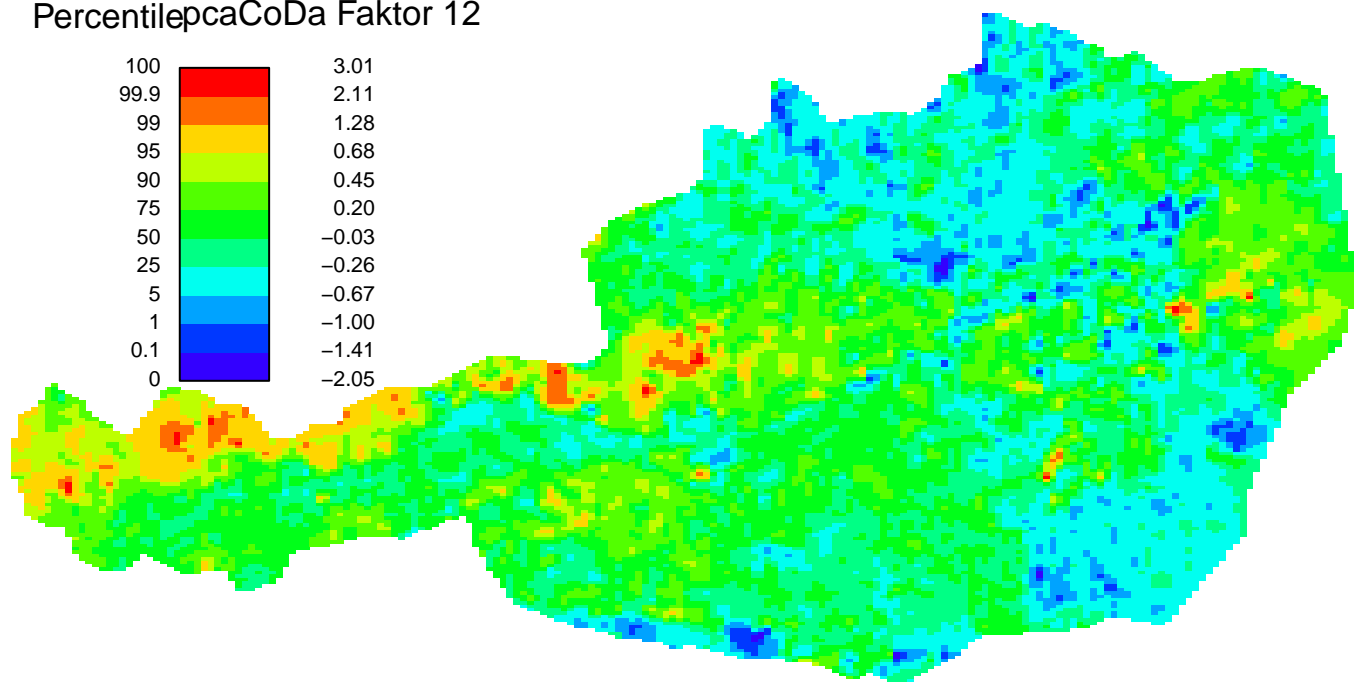
PercentilepcaCoDa Faktor 11



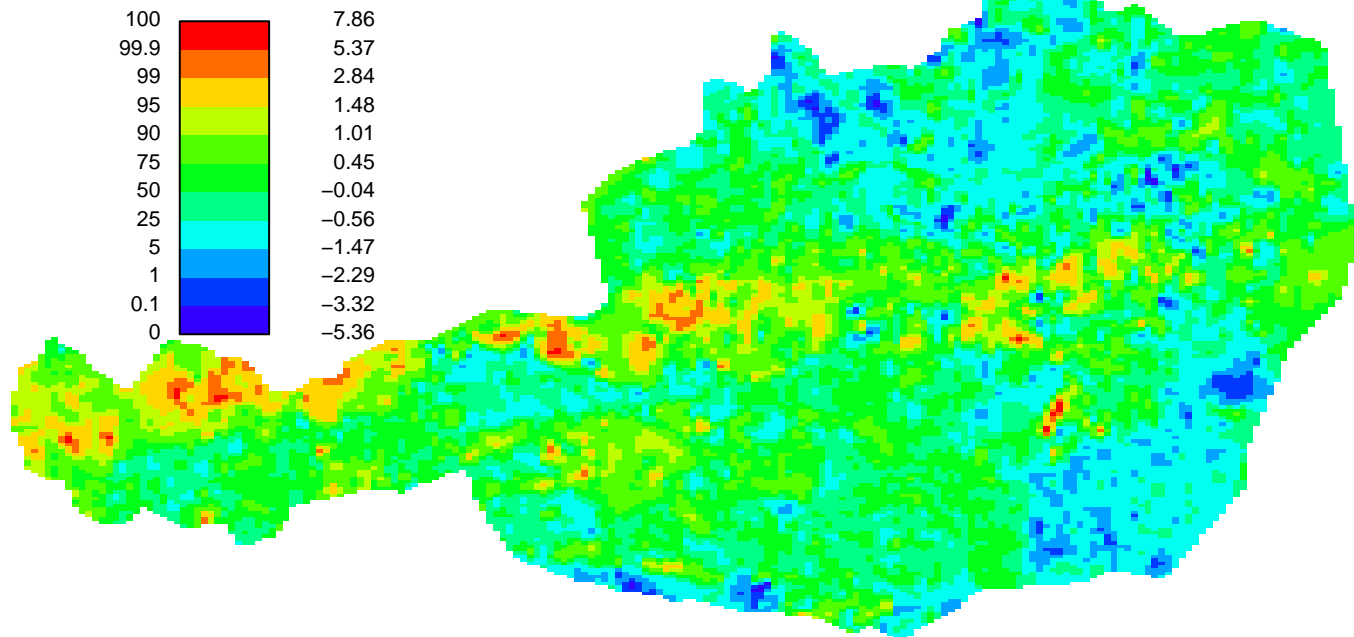
Percentile PCA Faktor 12



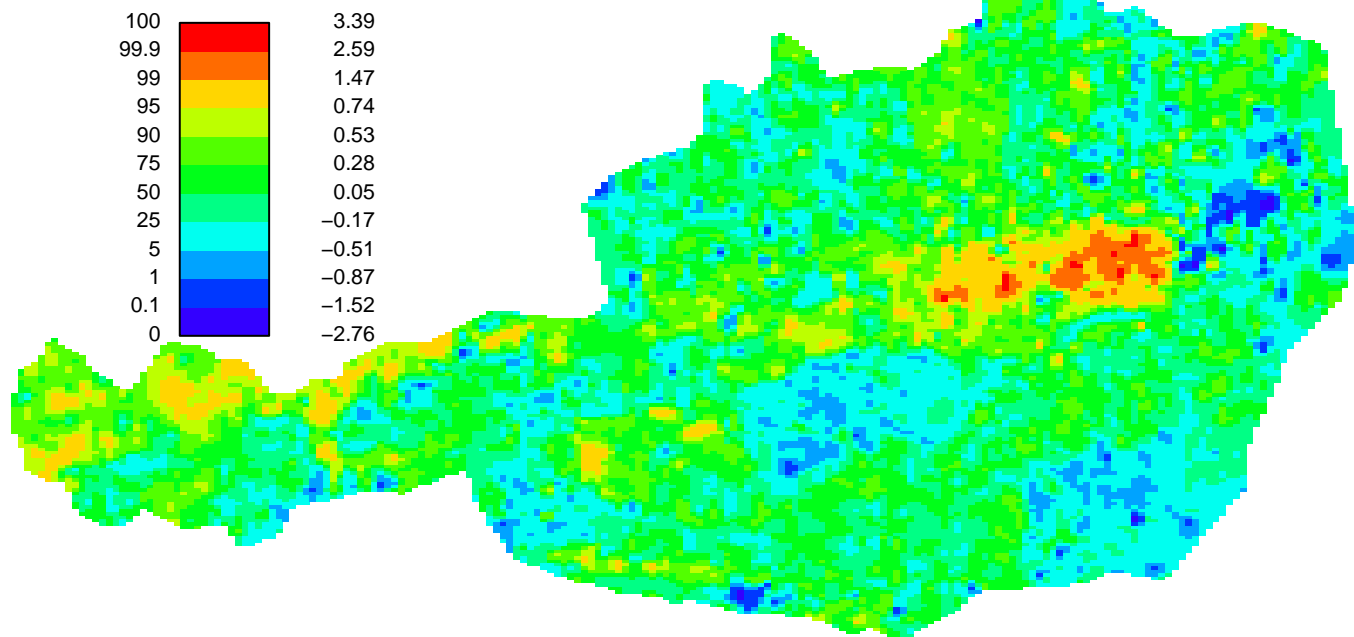
PercentilepcaCoDa Faktor 12



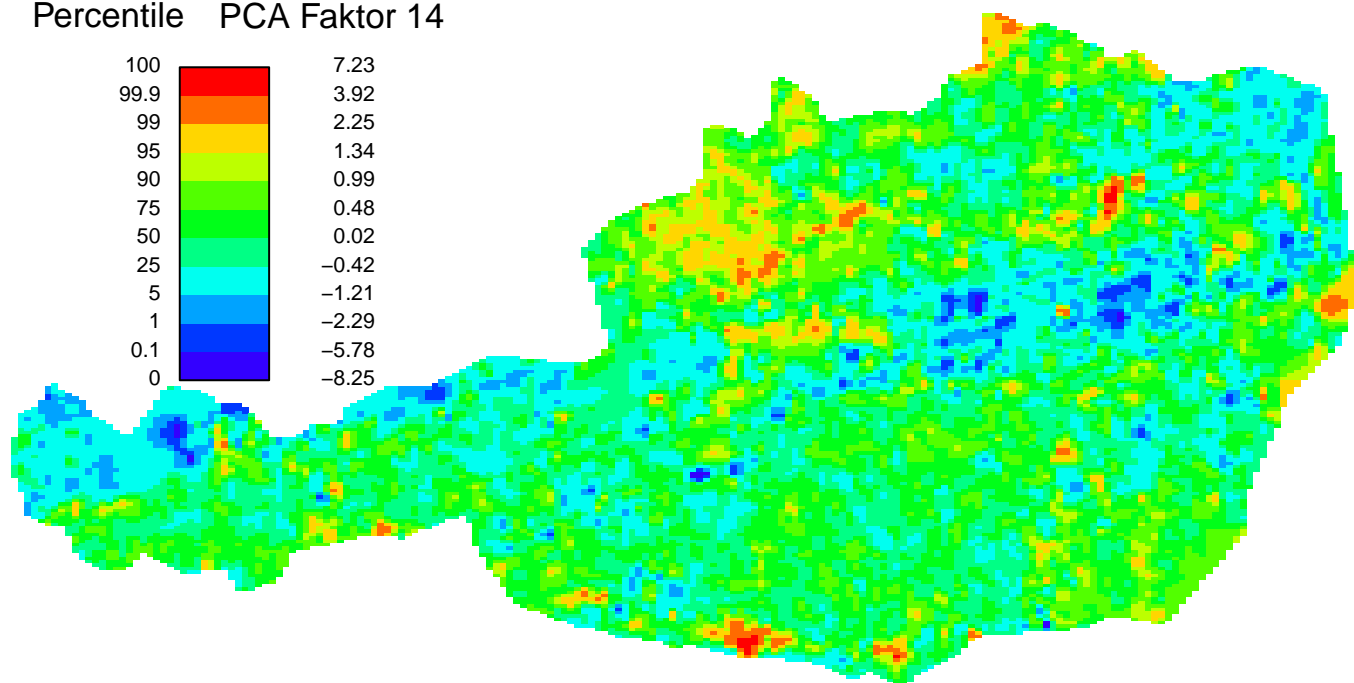
Percentile PCA Faktor 13



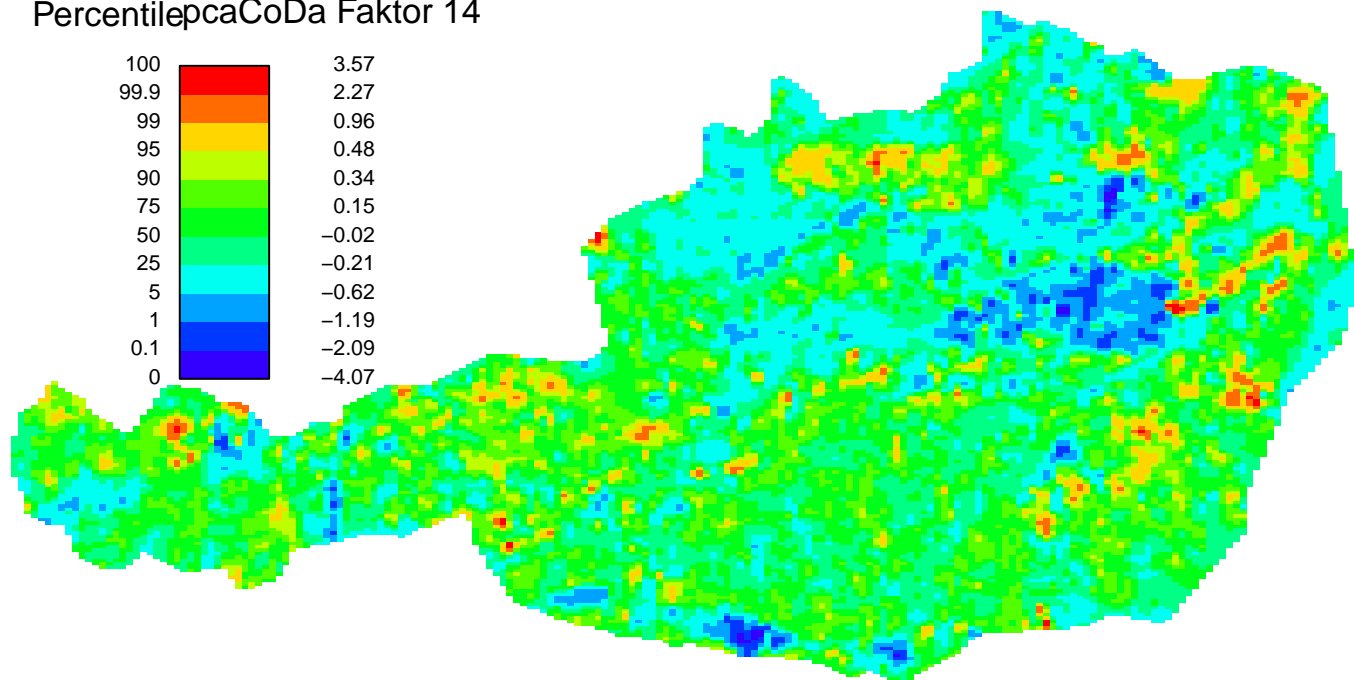
PercentilepcaCoDa Faktor 13



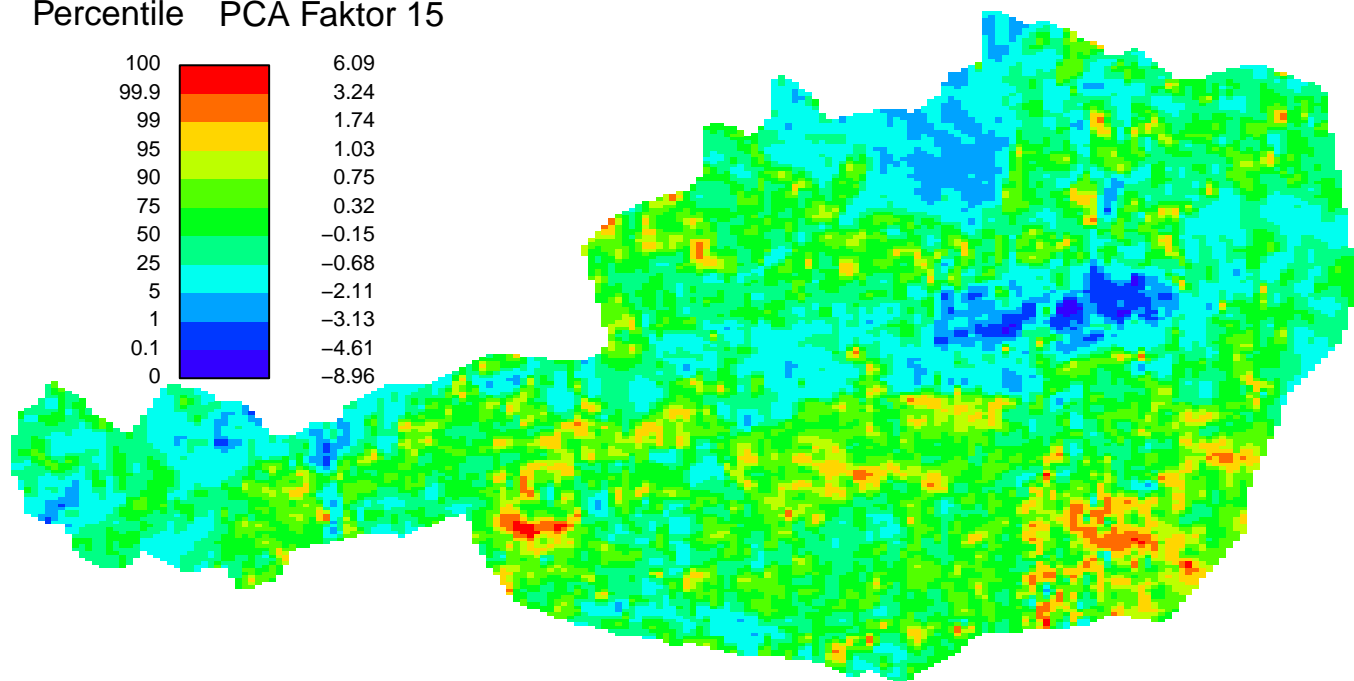
Percentile PCA Faktor 14



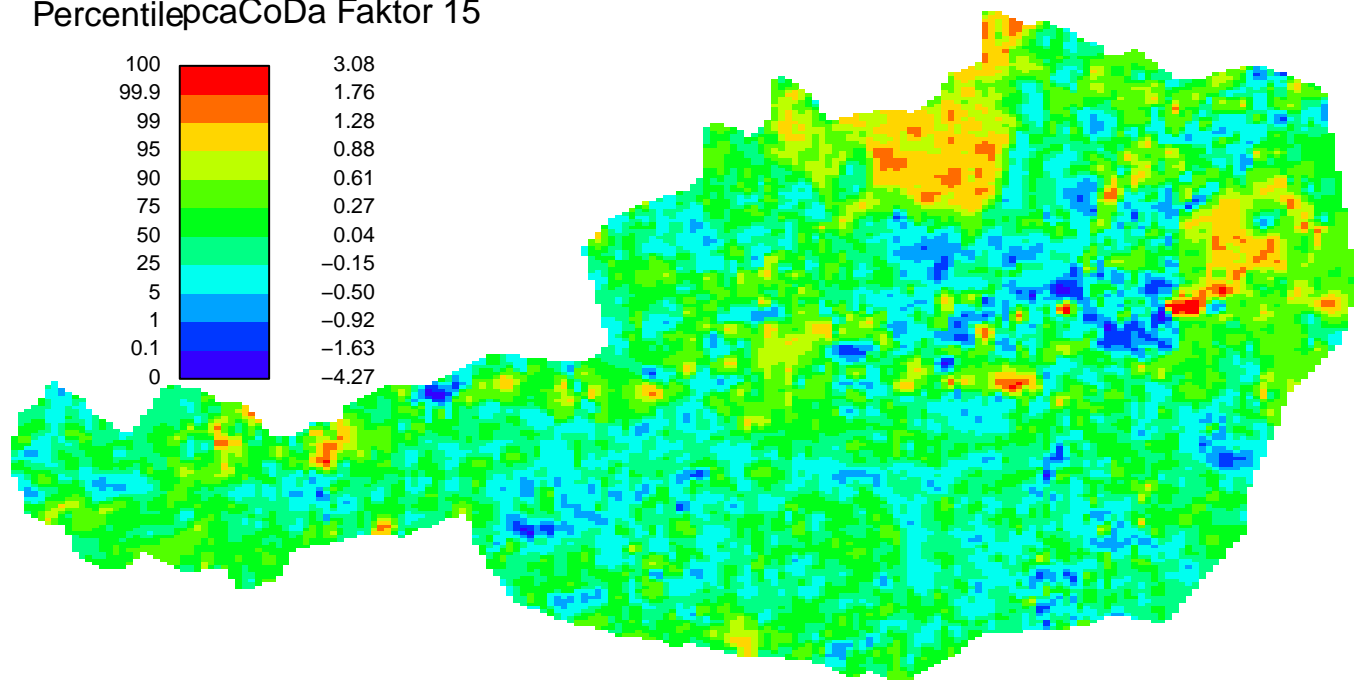
PercentilepcaCoDa Faktor 14



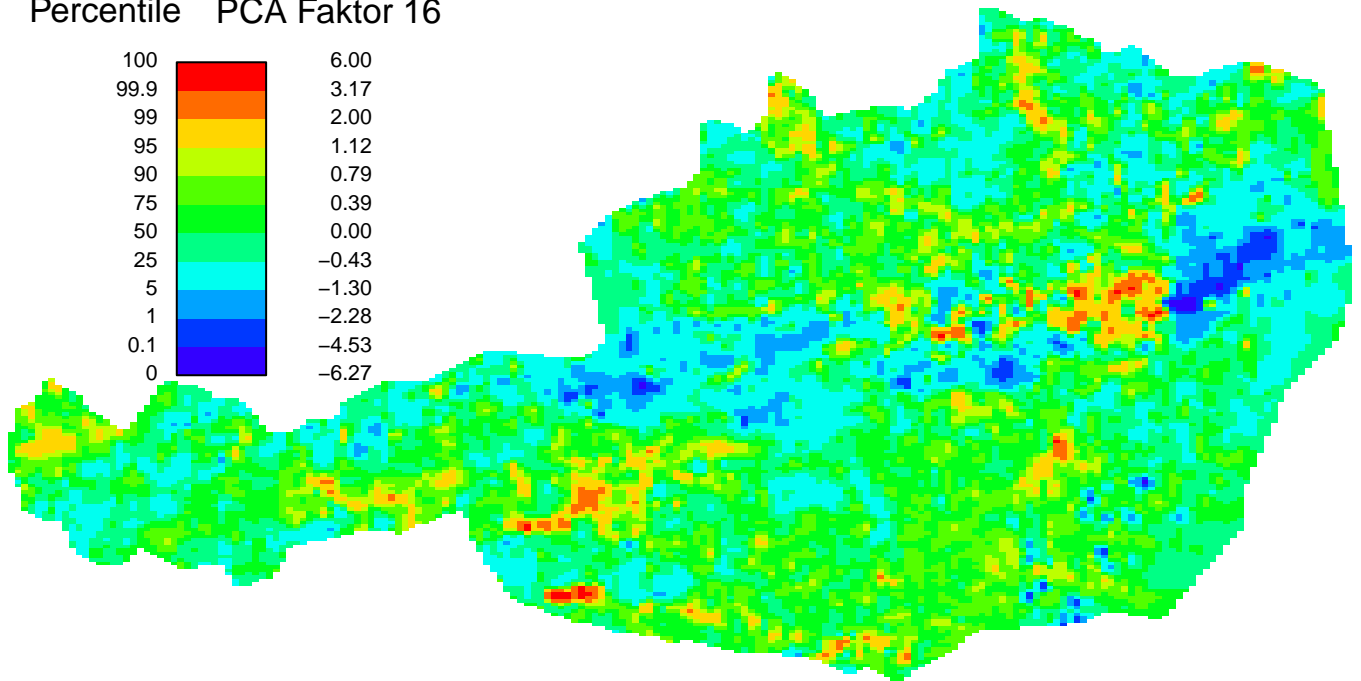
Percentile PCA Faktor 15



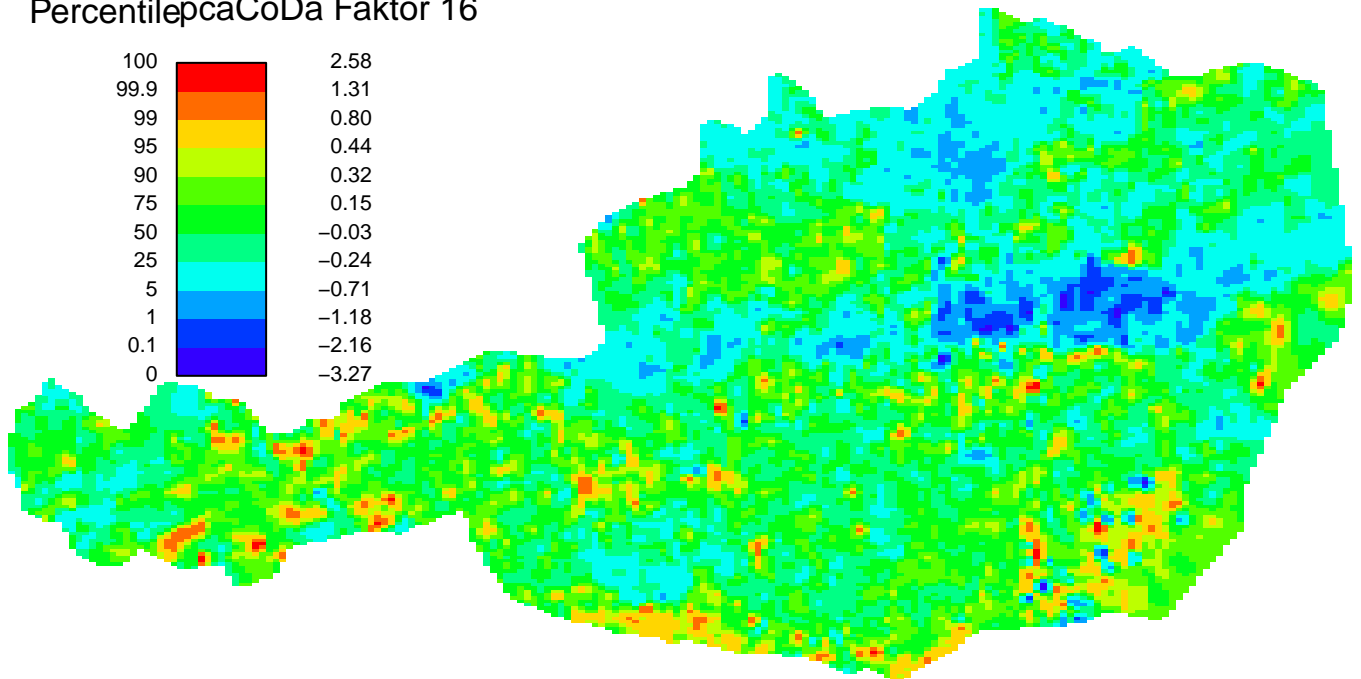
PercentilepcaCoDa Faktor 15



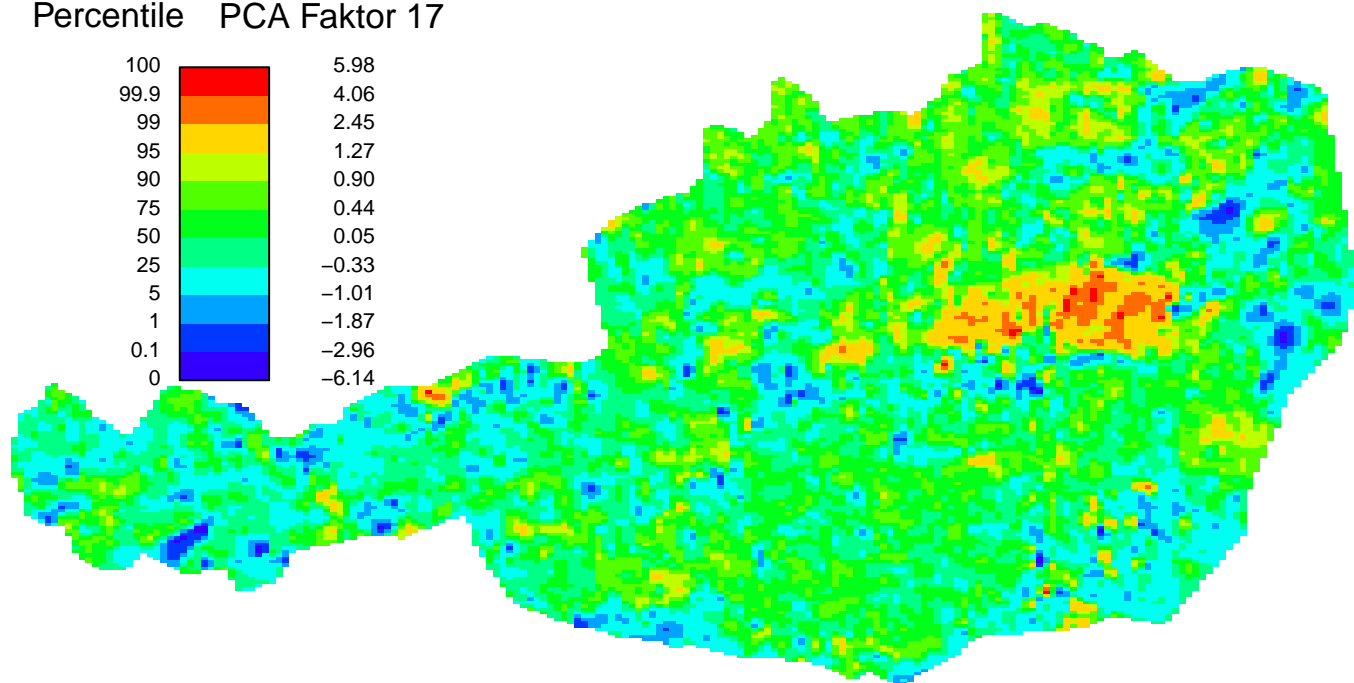
Percentile PCA Faktor 16



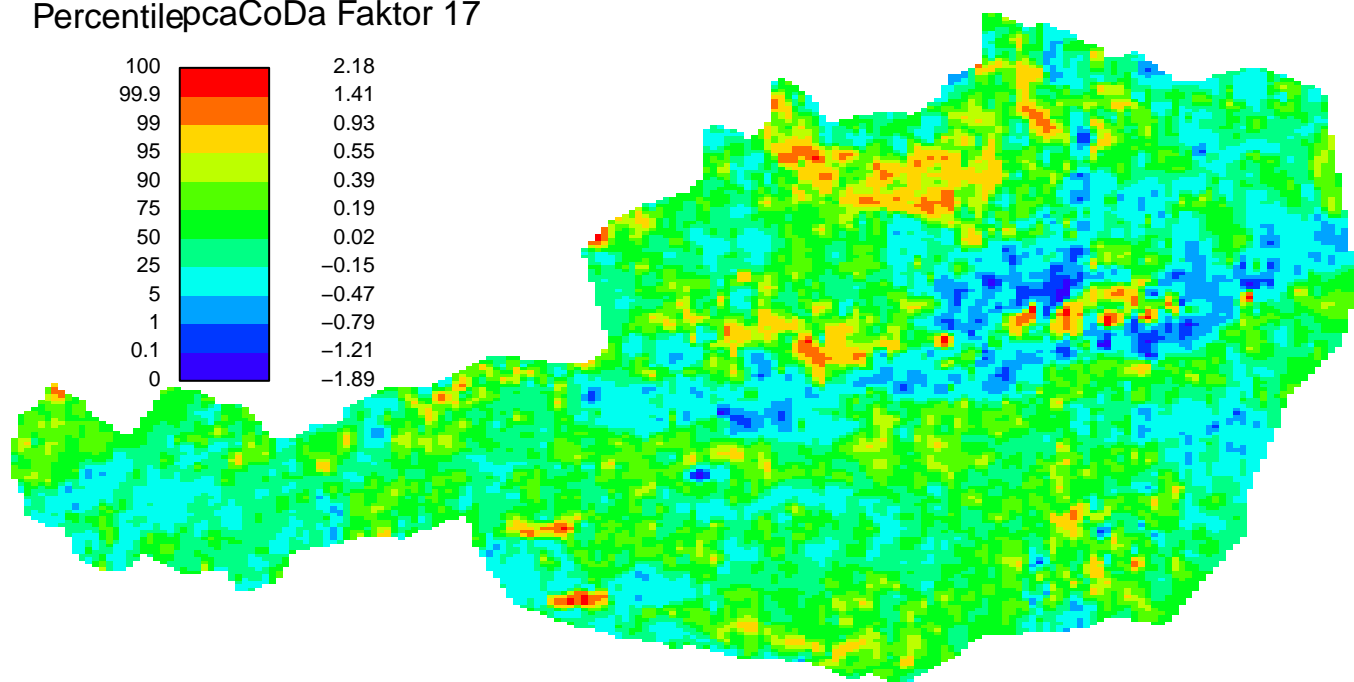
PercentilepcaCoDa Faktor 16



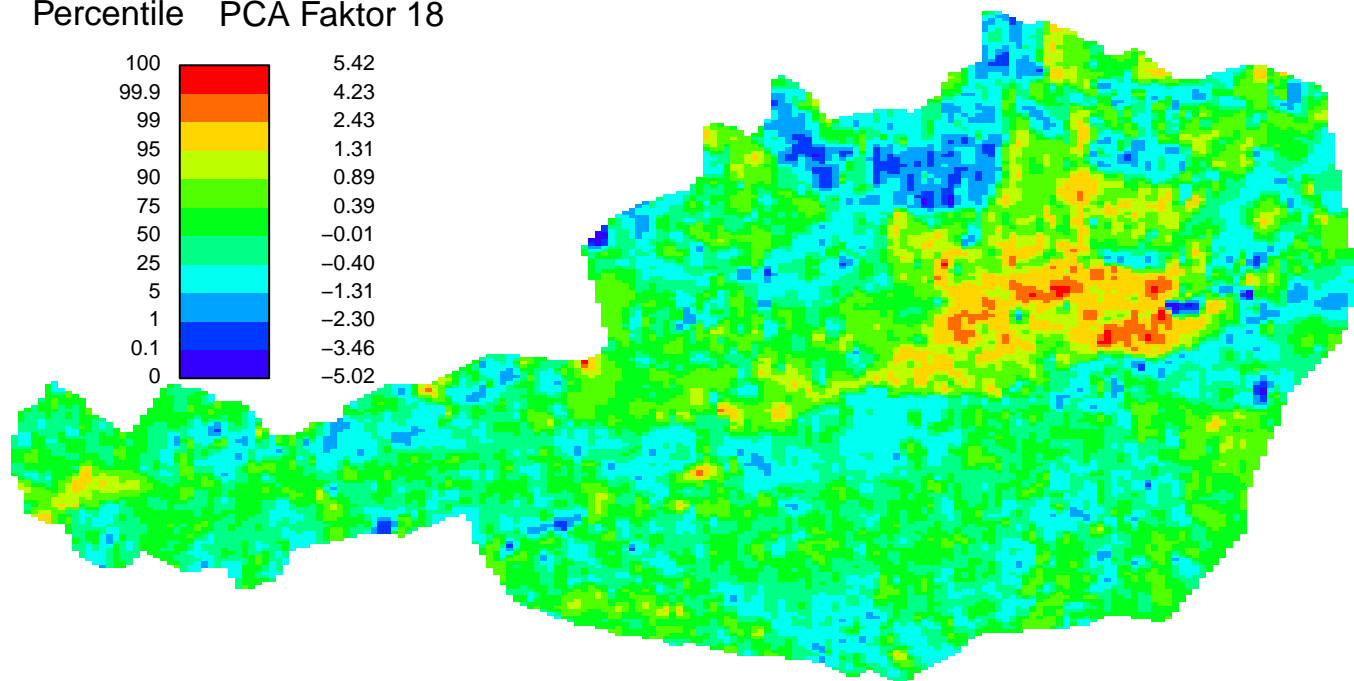
Percentile PCA Faktor 17



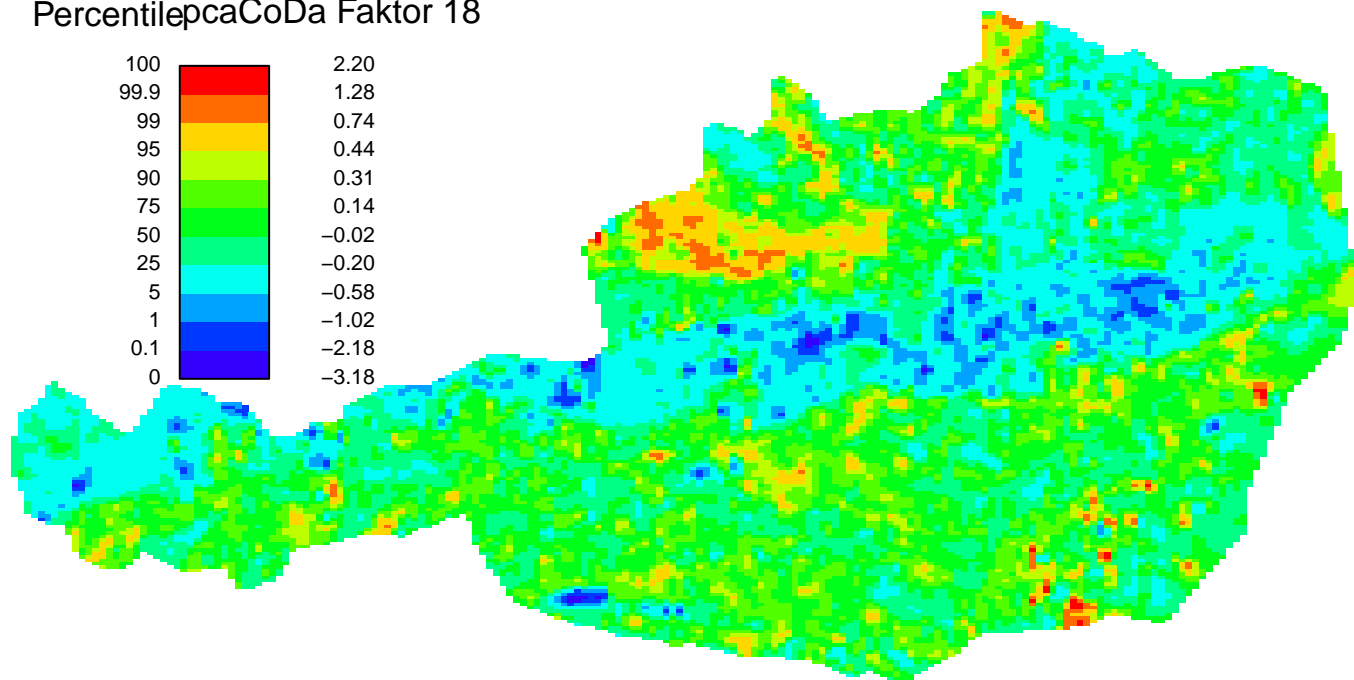
PercentilepcaCoDa Faktor 17



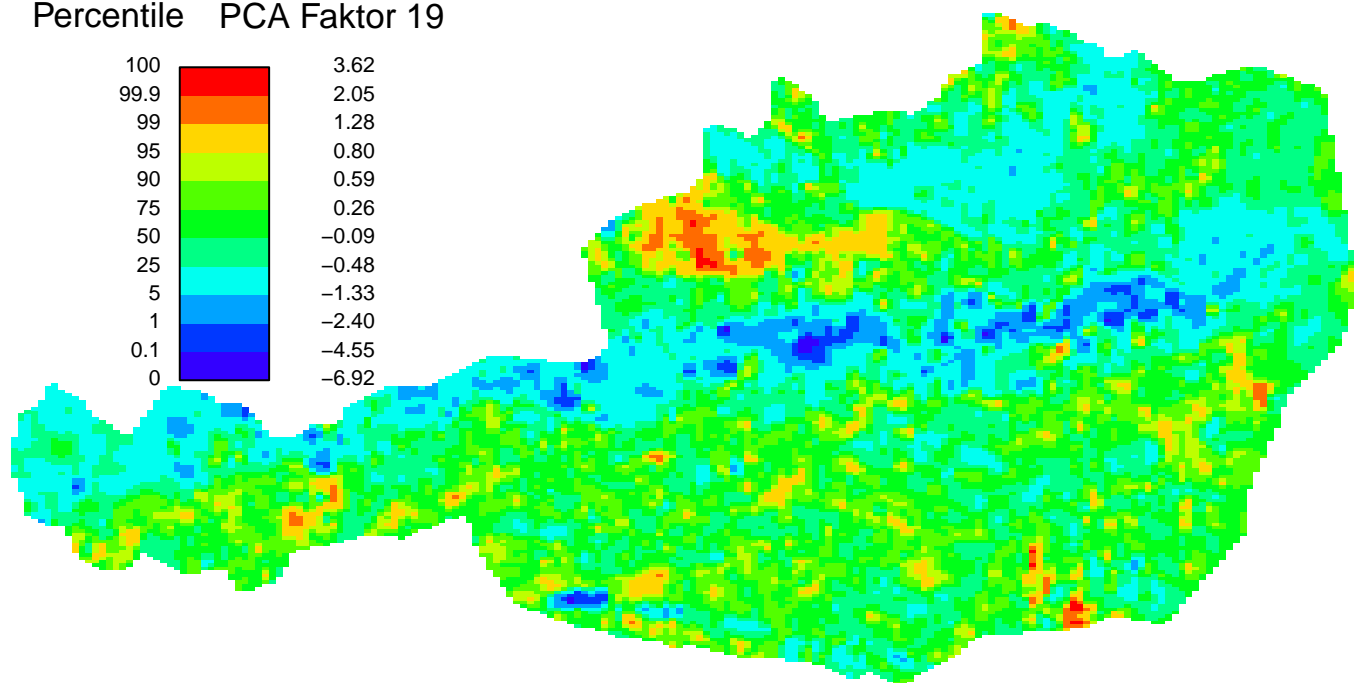
Percentile PCA Faktor 18



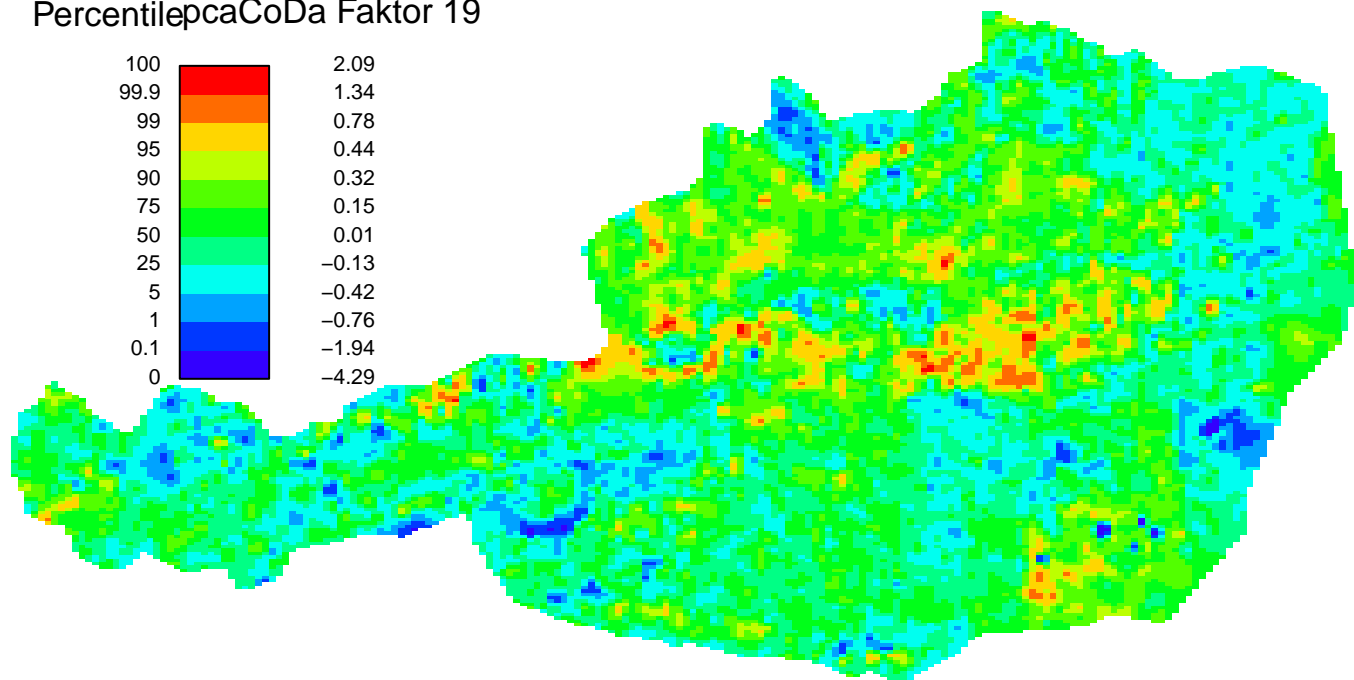
PercentilepcaCoDa Faktor 18



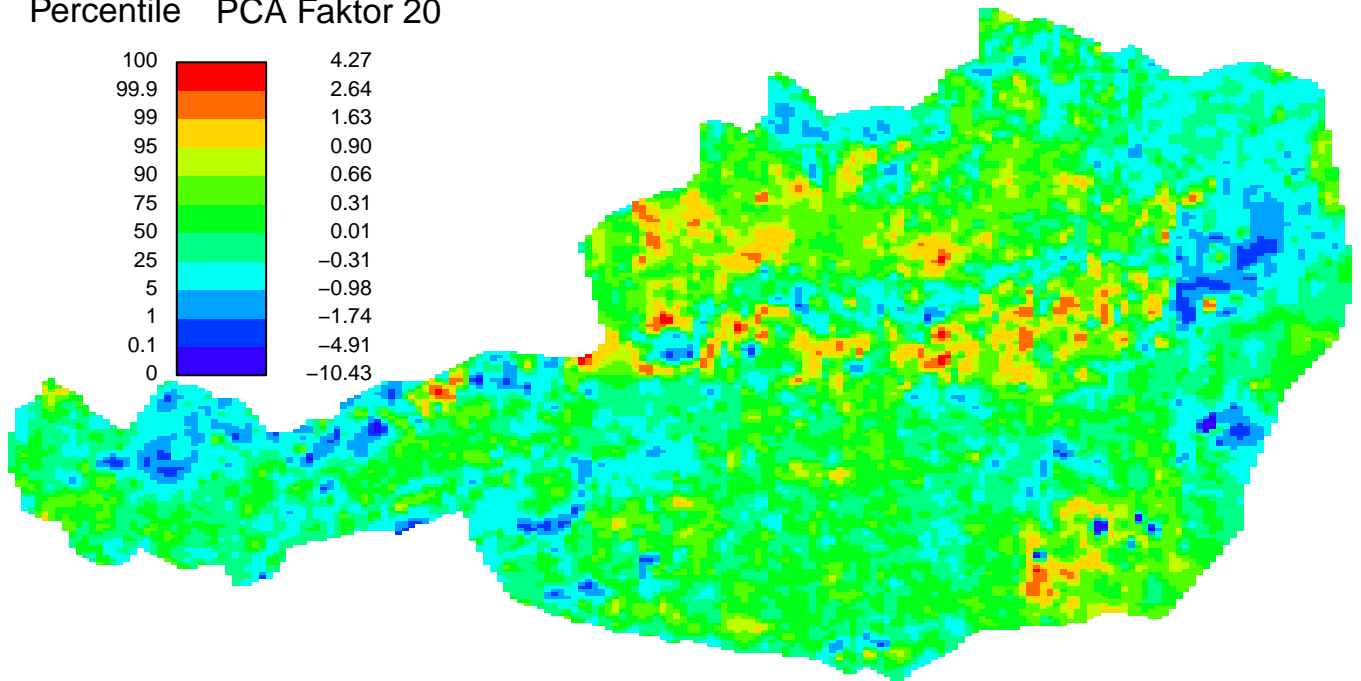
Percentile PCA Faktor 19



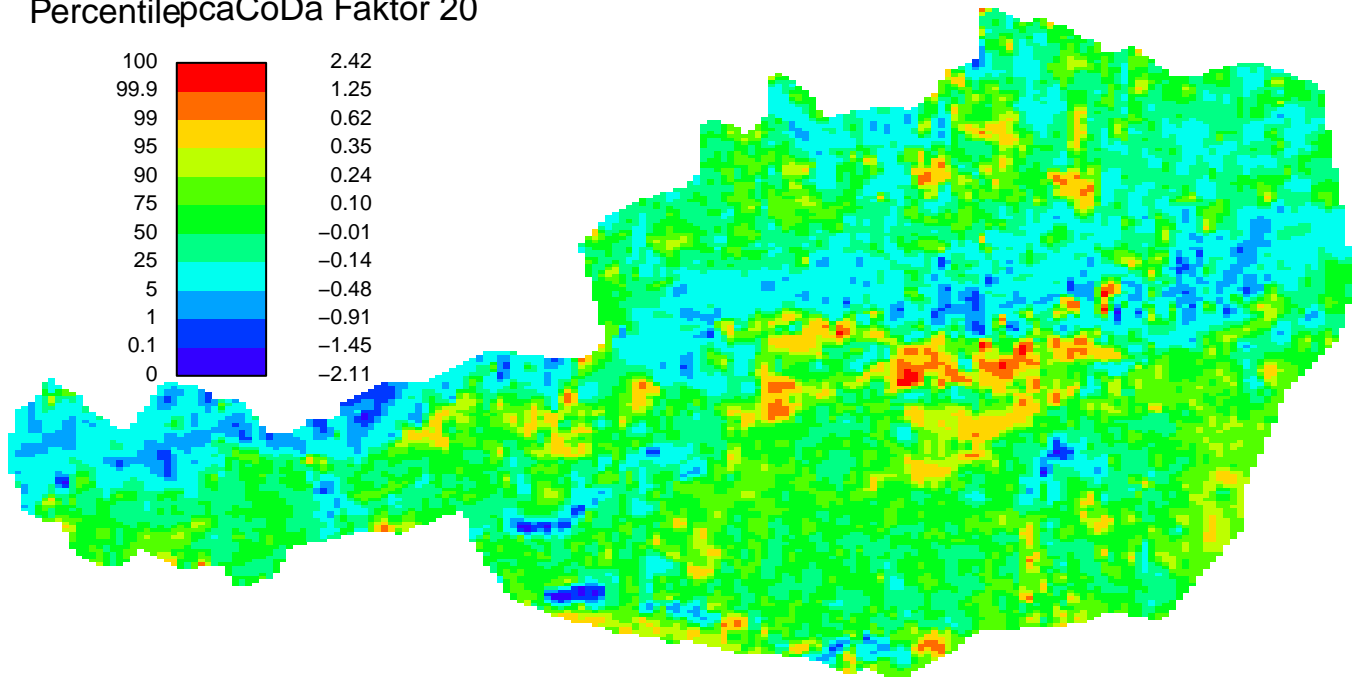
PercentilepcaCoDa Faktor 19



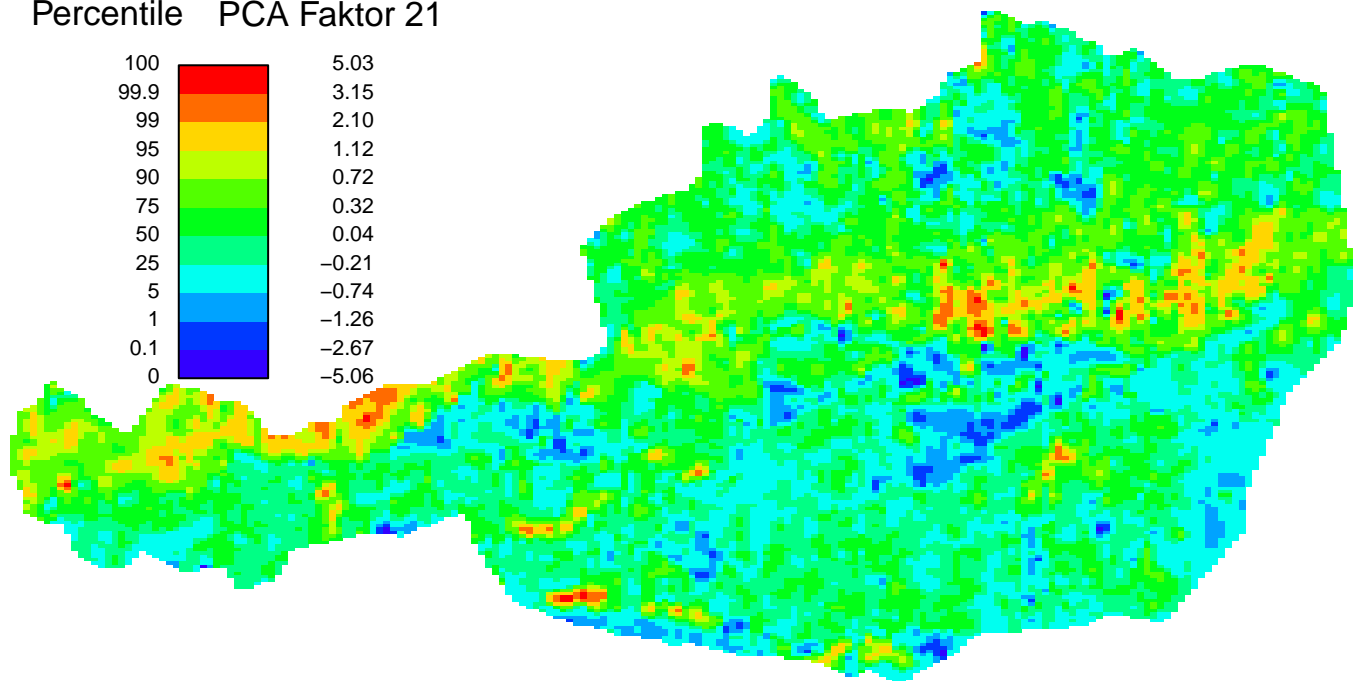
Percentile PCA Faktor 20



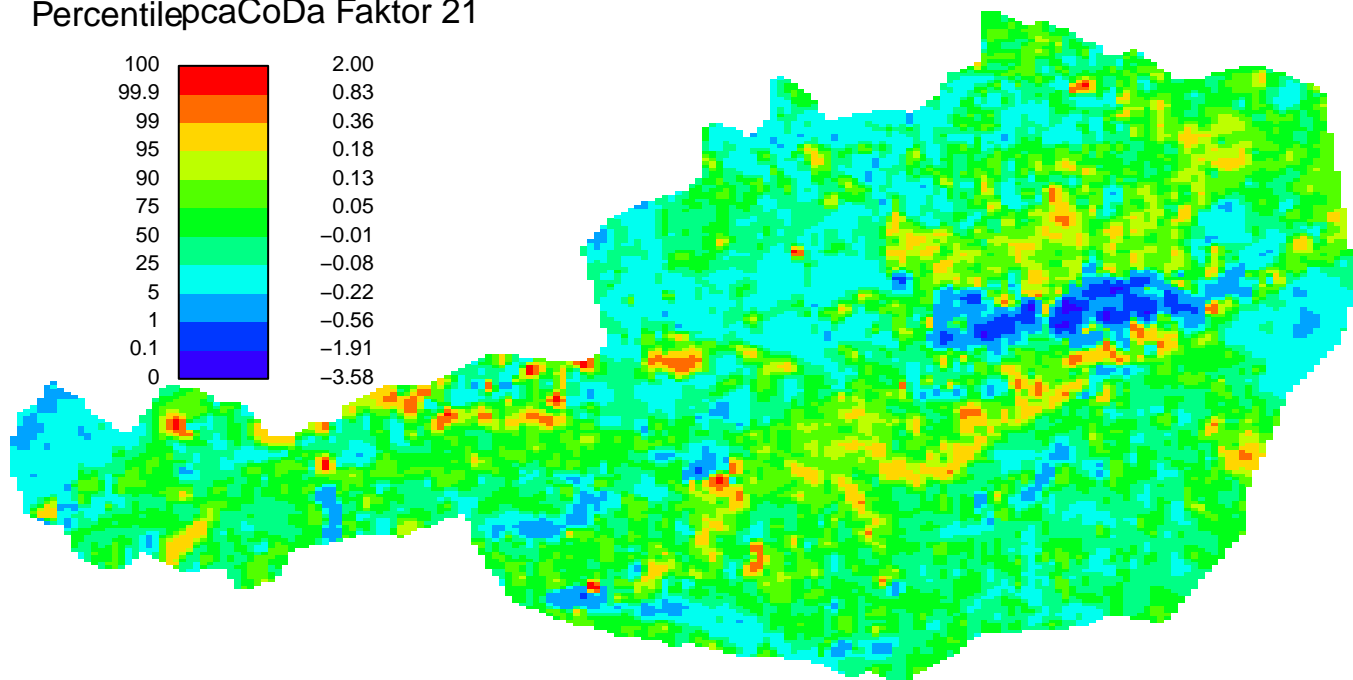
PercentilepcaCoDa Faktor 20



Percentile PCA Faktor 21



PercentilepcaCoDa Faktor 21



Bach- und Flusssedimentgeochemie Kornfraktion < 0,18 mm - Verteilung von Aluminium Methodik: CoDa (Compositional Data Analysis), clr (centered logratio transformation)

Bei Compositional Data Analysis betrachtet man - anstatt der absoluten Werte, die uns nur liefern ob die Konzentration eines Elements in der Probe hoch oder niedrig ist - die Relationen zwischen den einzelnen Elementen. Eine Methode, um von absoluten auf relative Werte zu kommen, ist die zentrierte log-Verhältnis Transformation (clr-Transformation).

Um die Karte der clr-Koeffizienten zu interpretieren, vergleicht man die Werte mit dem geometrischen Mittel. Liegt der Wert weit unter dem geometrischen Mittel, ist die Variable in der Komposition unterrepräsentiert. Dies entspricht dann der Farbe Blau. Liegt der Wert weit über dem geometrischen Mittel, ist die Variable dominant in der Komposition, was der Farbe Rot entspricht.

Interpolationsmethode: Inverse Distance Weighting, Power 2, Neighbours to include 15, Include at least 10

