

Programm zur Berechnung sedimentologischer Parameter aus verfestigten klastischen Sedimenten

P. FAUPL, R. FISCHER & W. SCHNABEL *)

Schlüsselwörter

Korngrößenanalyse
Sehnenschnittverfahren
Programm (FORTRAN IV)

I. Einleitung

Es wird ein Programm in FORTRAN IV (für IBM 360/44) vorgelegt, das es gestattet, die wichtigsten aus einer Korngrößenanalyse verfestigter klastischer Sedimente resultierenden sedimentologischen Parameter wie die Korngrößenmittelwerte und Kennzahlen für die Variabilität und Schiefe zu berechnen. Bei der Korngrößenanalyse von verfestigten klastischen Sedimenten wird auf das Sehnenschnittverfahren von MÜNZNER & SCHNEIDERHÖHN (1953) zurückgegriffen.

Gerade in jüngster Zeit sind eine ganze Reihe von Programmen, die der Berechnung von Korngrößenanalysen und den daraus abgeleiteten Parametern aus unverfestigten Gesteinen dienen, in den verschiedensten Computersprachen publiziert worden. Uns ist jedoch kein Programm, das vom Sehnenschnittverfahren ausgeht und in einer für uns benützbaren Sprache erstellt ist, bekannt geworden. Die Veröffentlichung erfolgt in erster Linie, um auf die Existenz dieses Programms in Wien hinzuweisen und zur Benützung einzuladen. Die FORTRAN-Listen der Programme können von den Autoren bezogen werden.

Der Programmabschnitt, der sich mit der Berechnung der Korngrößenverteilung in verfestigten klastischen Sedimenten nach dem Sehnenschnittverfahren beschäftigt, wurde im Jahre 1969 bei den Sedimentuntersuchungen der Arbeitsgemeinschaft „Wienerwaldflysch“ (FAUPL et al., 1970) angewandt. Herr E. SEYMANN vom Atominstitut der Österreichischen Hochschulen hat in dankenswerter Weise diesen Programmteil erstellt. Dieser Teil konnte nun für das vorliegende Programm in etwas geänderter Organisation übernommen werden.

II. Die Korngrößenanalyse und die Parameter

Das Sehnenschnittverfahren erlaubt es, aus einfachen, am Dünnschliff rasch durchzuführenden Sehnensmessungen an den Körnern des Gesteins mittels einer Rechenverfahrens auf die Korngrößenverteilung im Gestein (in

*) Adresse der Autoren: Dr. P. FAUPL, Geologisches Institut der Universität, Universitätsstraße 7, A-1010 Wien. — Dr. R. FISCHER, Institut für Mineralogie und Kristallographie der Universität, Dr.-Karl-Lueger-Ring 1, A-1010 Wien. — Dr. W. SCHNABEL, Geologische Bundesanstalt, Rasumofskygasse 23, A-1031 Wien.

Gew.-%) zu schließen. Die Resultate sollen näherungsweise einen Vergleich mit Siebanalysen ermöglichen. Als Hilfsmittel zusätzlich zum Mikroskop werden ein Objektführer und ein Meßokular benötigt. Die Sehnenmessungen können allerdings auch an Photographien mit bekanntem Abbildungsmaßstab oder an Folienabzügen durchgeführt werden. Eine genaue Anleitung zur Ausführung der Messungen gibt die Originalarbeit (p. 457) und G. MÜLLER (1964, p. 64). Es sei nur erwähnt, daß etwa 1000 Messungen benötigt werden. Diese werden den logarithmisch-äquidistanten Korngrößenklassen zugeordnet. Die eingegebene absolute Häufigkeit der einzelnen Sehnen pro Kornklasse erscheint zu Kontrollzwecken im Output des Programms.

Der für dieses Verfahren brauchbare Kornklassenbereich reicht von 0,0063 mm (Unterkante Mittelsilt) als unterste Grenze bis 6,3 mm (Oberkante Feinkies) als oberste Grenze. Dieses Verfahren eignet sich daher auf Grund des gegebenen Kornklassenbereiches besonders für die Bearbeitung von Sandsteinen. Enthält ein Gestein einen wesentlichen Prozentsatz an kleineren Kornklassen — meist handelt es sich um die optisch nicht näher auflösbare Matrix — so ist natürlich diese Methode nicht geeignet, eine Analyse des Gesamtgesteins zu geben, sondern die erzielten Parameter beziehen sich immer auf den hier betrachteten Kornklassenbereich.

Das vorliegende Programm erstellt die Häufigkeitsverteilung in Gew.-% und die dazugehörigen Summenzahlen. Im Anschluß daran werden folgende für die Klassifikation klastischer Sedimente wichtiger Parameter abgeleitet.

Korngrößenmittelwerte

Der *Mean-Wert*, auch arithmetisches Mittel (\bar{x}) genannt, bei dessen Berechnung alle Werte der Häufigkeitskurve verwendet werden, gilt allgemein als der für die sedimentologische Beschreibung am besten geeignete Mittelwert (FOLK, 1966).

Der *Median-Wert* (Q_2) leitet sich aus der Summenkurve ab. Er zerlegt zu je 50 Gew.% die vertretenen Korngrößen in einen gröberen und einen feineren Anteil.

Zusätzlich zum Median-Wert werden noch die beiden anderen Quartile Q_1 (für 25%) und Q_3 (für 75%) der kumulierten Häufigkeit mitgeteilt, da sie zusammen mit dem Median-Wert die Grundlage für die Berechnung der Quartilmaße bilden.

Der *Modal-Wert*, der die am häufigsten vorkommende Korngrößenklasse bezeichnet, wird nicht gesondert ausgedruckt, da er der Häufigkeitsverteilung direkt zu entnehmen ist. Er ist übrigens für die Sedimentbeschreibung keine sehr brauchbare Kenngröße.

Wir haben keine weiteren Korngrößenmittelwerte, wie z. B. *Graphic Mean* (M_z) von FOLK & WARD (1957) und eine ganze Reihe ähnlicher Maße für Mittelwerte (siehe Zusammenstellung bei FOLK, 1966, p. 81) errechnet, da alle diese Kenngrößen aufbauend auf graphisch ermittelte Perzentile mittels eines wenig aufwendigen Rechenverfahrens eine Näherung an das arithmetische Mittel anstreben.

Variabilitätsmaße als Ausdruck der Sedimentsortierung

Die *Standardabweichung* (standard deviation, σ) berücksichtigt bei der Berechnung die gesamte Häufigkeitskurve. Die Abweichung bezieht sich dabei auf das arithmetische Mittel. Zur numerischen Angabe wird die verbale Klassifikation, die FOLK & WARD (1957) für die Inclusive Graphic Standard Deviation (σ_1) vorgeschlagen hat, verwendet. Die Kenngröße σ_1 entspricht einer guten Näherung an die hier benützte statistische Standardabweichung, so daß die dort angegebenen Grenzen für beide Maßzahlen Geltung besitzen. So wird diese verbale Klassifikation auch in dem ALGOL-Programm von FABRICIUS & ST. MÜLLER (1970) für beide Parameter verwendet.

Als weitere Variabilitätsmaße werden die *Quartilabweichung* und der *Sortierungskoeffizient von TRASK* (S_o) angegeben. Zum Traskschen Sortierungskoeffizienten wird die von FÜCHTBAUER (1959) vorgeschlagene verbale Klassifikation hinzugefügt.

Maße für die Schiefe

Die Maße für die Schiefe (skewness) geben an, wie stark die Verteilungskurve von einer symmetrischen Form abweicht, d. h. wie weit feinere oder gröbere Kornklassen dominieren.

Der *Momentkoeffizient der Schiefe* (α_3) berücksichtigt wieder die gesamte Verteilungskurve. Die verbale Klassifikation von FOLK & WARD (1957) wird hinzugefügt.

Als weitere Kenngrößen der Schiefe werden der *Quartilkoeffizient der Schiefe* und der *Schiefekoeffizient von TRASK* sowie der *Logarithmus des Traskschen Koeffizienten* errechnet. Beim letzten Parameter ist bei positiven Werten vermerkt, daß gröbere Kornklassen überwiegen und entsprechend bei negativen Werten, daß feinere Kornklassen dominieren. Liegt der Wert zwischen $-0,01$ und $+0,01$ wird die Verteilung als symmetrisch bezeichnet.

Die zur Berechnung der Parameter angewandten Formeln sind bei FOLK (1966), MARSAL (1967) und FÜCHTBAUER & G. MÜLLER (1970) nachzuschlagen.

III. Programmübersicht

Die Verteilung einer Veränderlichen (Korngröße eines Sediments), die als Summe stochastisch unabhängiger Veränderlicher beliebiger Verteilungen zustande kommt, nähert sich im allgemeinen mit wachsender Zahl der Summanden gegen eine Normalverteilung. Die Veränderliche ist in unserem Fall die Korngröße. Eine der Möglichkeiten, die Näherung an die Normalverteilung bei Korngrößen zu prüfen, besteht in der Verwendung von Wahrscheinlichkeitspapier. Da aber die Korngrößenverteilung sehr oft keine einfache, sondern eine zwei- oder dreifache ist, wird meist die graphische Darstellung von relativer Häufigkeit gegen Korngröße gewählt. Da die Verteilung der Durchmesser von Körnern sehr heterogen ist, bedient man sich bei der Klassierung der logarithmischen Dar-

stellung. Im halblogarithmischen Diagramm — \log (Durchmesser) gegen Häufigkeit — erhält man also nach Analyse des Sediments einige Meßpunkte einer Verteilungskurve. Zur Deutung der Verteilung benutzt man jedoch nicht nur die Verteilungskurve, sondern auch die Summenkurve. Man versucht, auf dieser bestimmte Quantilwerte und daraus abgeleitete Größen zu ermitteln. Unter jenen versteht man die Korngröße, die einer bestimmten Summenhäufigkeit entspricht. Das Verbinden der Meßpunkte zu einer Kurve ist besonders bei komplizierteren Verteilungen mehr dem Zufall als irgendwelchen Regeln unterworfen. Dieses Programm benutzt nun eine der möglichen Regeln, die vielleicht nicht die beste ist; sie wird jedoch einheitlich für alle Verteilungen angewendet.

IV. Programmbeschreibungen

Das Programm KORN mit seinen Unterprogrammen dient zur Bestimmung der Korngrößenverteilung von verfestigten klastischen Sedimenten nach dem Sehnenschnittverfahren. Den Rechenablauf erläutert das Grobblockdiagramm Abbildung 1. Lediglich durch Eingabe der Anzahl der Klassen, der kleinsten Klasse und der Anzahl der Sehnenschnitte pro Klasse werden unter Verwendung der Formeln (4), (5) und (6) der Arbeit von MÜNZNER & SCHNEIDERHÖHN (1953) die prozentuale Häufigkeit, sowie die Gewichtsprozente der Verteilungs- und Summenkurve berechnet. Formel (6) gilt streng nur für kugelige Teilchen. Auf Wunsch können die beiden Kurven auch in einem Diagramm dargestellt werden. Die Obergrenze der kleinsten Kornklasse hat einen Durchmesser von 0,011246 mm, jene der größten einen Durchmesser von 632,46 mm, wobei natürlich diese größten Durchmesser bei Schliften nie gemessen werden können. Die Klassenbreite ist $\Delta \log (\text{Durchmesser}) = 0,25$. Die Berechnung der Mittelwerte erfolgt in Φ -Graden, wobei der Mittelwert eine Klassenhalbierung vorausgeht. Dieser Wert -mean- wird in Φ -Graden und mm ausgegeben. Neben dem Mittelwert sind Verteilungen durch ihre Variabilität — es wird die Streuung bzw. Varianz einer Stichprobe angegeben — und den Grad ihrer Abweichung von einer symmetrischen Form — durch den Momentkoeffizient der Schiefe — charakterisiert.

Nach der allgemeinen Konvention ist die Summenkurve so definiert, daß die prozentualen Summenhäufigkeiten mit dem Korndurchmesser wachsen. In klastischen Sedimenten können jedoch zwei oder mehr Verteilungen gleichzeitig auftreten, die in den meisten Fällen infolge der wenigen Meßpunkte nicht getrennt werden können. Dies drückt sich u. a. dadurch aus, daß eine oder mehrere Klassen vollkommen fehlen, d. h. zwei oder mehr benachbarte Klassen den gleichen Wert der Summenhäufigkeit besitzen. Da in diesem Programm zur Ermittlung der Quartilwerte (= Quantilwerte für 25, 50 und 75%) der nichtlinearen Interpolation Priorität gegeben wird, mußte die Summenkurve derart verändert werden, daß dieser Wert der Summenhäufigkeit dem Mittelwert der beiden benachbarten Korndurchmesser zugeordnet wird. Erst die in diesen Fällen so veränderte Kurve wird zur Interpolation der Quartilwerte herangezogen.

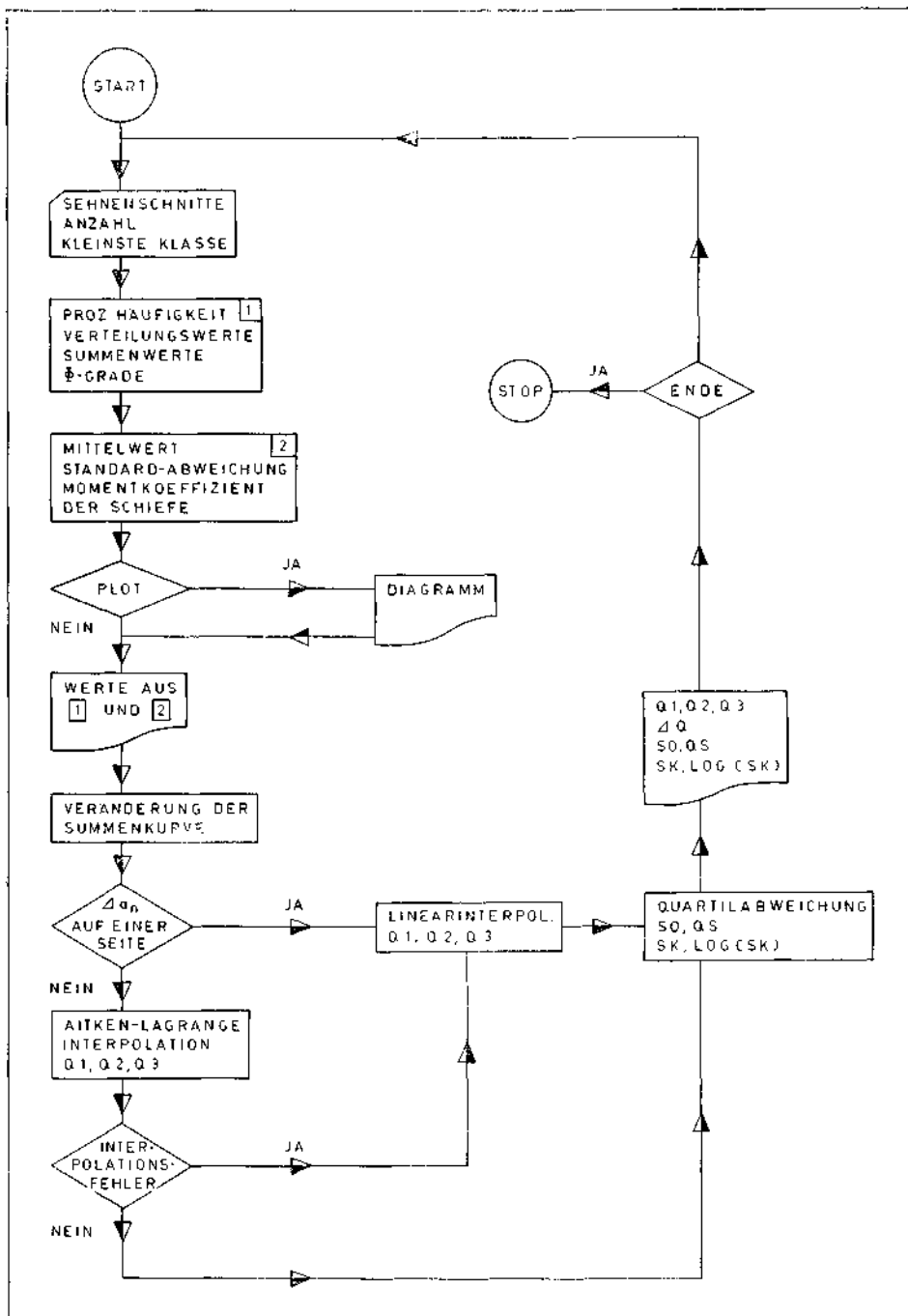


Abb. 1. Erläuterung der Abkürzungen im Grobblockdiagramm. — Q_1, Q_2, Q_3 Quartile (25%, 50%, 75%), ΔQ = Quartilabweichung, SO = Sortierungskoeffizient nach TRASK, QS = Quartilkoeffizient der Schiefe, SK = Schiefekoeffizient nach TRASK, $LOG (SK)$ = Logarithmus des Traskschen Schiefekoeffizienten.

Vor der Interpolation wird die $\log a$ /Prozent-Tabelle im Unterprogramm DTSGT nach aufsteigenden $\Delta \log a$ geordnet. Falls durch Eingabe nicht bewußt anders gewünscht, werden für die Ermittlung der Quartilwerte fünf benachbarte Werte aus der Tabelle verwendet. Sollten mehr als drei Werte von $\Delta \log a$ dasselbe Vorzeichen besitzen, erfolgt im Unterprogramm GRAD die Interpolation linear. Liegen jedoch die $\Delta \log a$ annähernd symmetrisch um den aufzusuchenden Quartilwert, wird dieser nach AITKEN-LAGRANGE (HILDEBRAND, 1956, p. 49) über ein Polynom 5. Grades interpoliert. Sowohl für die Aufstellung der $\Delta \log a$ /Prozent-Tabelle als auch für die iterierte Interpolation werden SSP-Unterprogramme von IBM (IBM, SSP-Programme, 1968) verwendet. Da die Quartilwerte auch um $\log a = \emptyset$ liegen können und daher bei der Interpolation kleine Differenzen aus großen Zahlen berechnet werden, hat es sich als zweckmäßig erwiesen, doppelt genau zu rechnen. Sollte der Fehler bei der iterierten Interpolation für $\log Q_n$ größer als 0,05 sein oder sollte der zu interpolierende Wert zu oszillieren beginnen, wird auch in diesen Fällen eine lineare Interpolation vorgezogen.

Mit den linear oder nach AITKEN-LAGRANGE interpolierten drei Quartilwerten werden eine Reihe von Maßzahlen zur Kennzeichnung von Verteilungen abgeleitet. Die Variabilität der Verteilung wird durch Quartilabweichung und den Sortierungskoeffizient von TRASK, die Schiefe durch den Quartilkoeffizient der Schiefe und den Schiefekoeffizient von TRASK wertmäßig belegt.

Nach Einbau von einigen zusätzlichen Abfragen erwies sich das Programm auch für die Berechnung „anormaler“ Verteilungen geeignet. An einigen Beispielen konnte vollkommene Übereinstimmung der Verteilungs- und Summenwerte sowie Mittelwerte zwischen händischer und Computerberechnung festgestellt werden. Bei einigen fraglichen Interpolationen der Quartilwerte traten mäßige Abweichungen bei parallelen händischen Berechnungen auf, während die Reproduzierbarkeit dieser Werte mittels Computer hundertprozentig war. Abb. 2 zeigt einen Ausdruck des Programms, der nach Angaben einer Arbeit von SCHNABEL (in FAUPL et al., 1970) gewonnen wurde.

Im Anschluß an das Programm KORN wurde ein analoges Programm GRANU zur Berechnung der charakteristischen Werte einer Korngrößenverteilung erstellt, für das die Eingabedaten durch Schlammung und Siebung von Lockersedimenten gewonnen werden. Die Obergrenze der kleinsten Kornklassen beträgt hier 2μ , die der größten 200 mm im Durchmesser, die Klassenbreite ist $\Delta \log a = 0,5$. Die Angabe der Gewichte erfolgt in den ersten vier Klassen von $\emptyset \text{ mm}$ bis zur jeweiligen Obergrenze, die übrigen Gewichte beziehen sich dann nur für die entsprechende Klasse. Im übrigen gelten aber die gleichen Bedingungen wie für das Programm KORN.

Sehr oft werden in der Literatur auch andere Quantilwerte als die in dieser Arbeit verwendeten zur Klassifizierung einer Kornverteilung herangezogen. Zur Ermittlung dieser Werte wurde das Programm QUANT geschrieben, wobei als Eingabe die zur Interpolation verwendete Tabelle der Programme KORN und GRANU dient. Jeder beliebige Quantilwert kann damit berechnet werden.

GRADIERUNGSZYKLUS H 14

NDIM 5 EPS 2 START 2 ANZAHL 9

AI (I)	FI	NO	P (I)	PROZ	SUM	LOG A	XI (I)
0.020000	6.0001	148	50.2298	0.8899	0.8899	-1.6990	0.0156
0.035556	5.1697	168	43.4078	4.3249	5.2148	-1.4470	0.0278
0.063246	4.3392	127	0.0	0.0	5.2148	-1.1990	0.0494
0.112468	3.5087	259	4.8618	15.3190	20.5338	-0.9490	0.0879
0.200000	2.6784	169	1.2296	21.7873	42.3211	-0.6990	0.1362
0.355660	1.8477	98	0.2262	21.5422	64.8633	-0.4490	0.2778
0.632460	1.0172	46	0.0614	25.1985	88.0620	-0.1990	0.4941
1.124680	0.1868	10	0.0032	10.0222	98.0842	0.0510	0.8786
2.000000	-0.6437	1	0.0001	1.9158	100.0000	0.5010	1.5623

IN PH

MEAN = 2.0569 (0.2403 MM)
 STANDARDABWEICHUNG 1.3097 FOLK/WARD, 1957- POORLY SORTED
 MOMENTKOEFF. SCHIEFE 0.4788 FOLK/WARD, 1957- VERY POSITIVE-SKEWED

ZUR INTERPOLATION VERWENDETE TABELLE

ANEU	LOG A	SUM NEU
0.0200	-1.6990	0.8899
0.0474	-1.3240	5.2148
0.1125	-0.9490	20.5338
0.2000	-0.6990	42.3211
0.3557	-0.4490	64.8633
0.6325	-0.1990	88.0620
1.1247	0.0510	98.0842
2.0000	0.5010	100.0000

IN MM

Q1 = 0.1266 (LINEAR INTERPOLIERT), LOG(Q1) = -0.89772
 Q3 = 0.2237 (FENNER 1. Q1), LOG(Q3) = -0.61252
 Q3 = 0.4574 (LINEAR INTERPOLIERT), LOG(Q3) = -0.33973

QUARTILABWEICHUNG = 0.16541
 SORTIERUNGSKOEFFIZIENT TRASK (S0) = 1.90106 FUECHTBAUER, 1959
 SORTIERUNG SCHLECHT
 QUARTILKOEFFIZIENT DER SCHIEFE = 0.29068
 SCHLEIFEKOEFFIZIENT TRASK (SK) = 0.97316
 LOG(SK) = -0.01182 SYMMETRISCHE KORNGRADEKURVENVERTEILUNG

Abb. 2. Ausdruck des Ergebnisses einer Korngrößenanalyse (Grenzen der Verbalklassifizierung von log [SK] wurden nachträglich — siehe Text geändert).

Diese Arbeit wurde mit Unterstützung des Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung in Österreich im Rahmen eines Forschungsauftrages über den Wienerwaldflysch durchgeführt.

Literatur

FABRICIUS, F., & MÜLLER, ST.: A buret cylinder for grain-size analysis of silt and clay (with ALGOL-program). — *Sedimentology*, 14, 39—50, Amsterdam 1970.
 FAUPL, P., GRÜN, W., LAUER, G., MAUERER, R., PAPP, A., SCHNABEL, W., & STURM, M.: Zur Typisierung der Sievinger Schichten im Flysch des Wienerwaldes. — *Jb. Geol. B.-A.*, 113, 73—158, Wien 1970.
 FOLK, R. L.: A review of grain-size parameters. — *Sedimentology*, 6, 73—93, Amsterdam 1966.
 FOLK, R. L., & WARD, W. C.: Brazos river bar: a study in the significance of grain size parameters. — *Jour. Sed. Petrol.*, 27, 3—26, Tulsa 1957.
 FÜCHTBAUER, H.: Zur Nomenklatur der Sedimentgesteine. — *Erdöl und Kohle*, 12, 605—613, Hamburg 1959.
 FÜCHTBAUER, H., & MÜLLER, G.: Sedimente und Sedimentgesteine. — 726 S., E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart 1970.
 HILDEBRAND, F. B.: Introduction to numerical analysis. — p. 49, McGraw Hill, 1956.
 IBM System/360 Scientific subroutine package. — p. 241 and 248, 1968.
 MARSAL, D.: Statistische Methoden für Erdwissenschaftler. — 152 S., Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart 1967.
 MÜLLER, G.: Methoden der Sedimentuntersuchung. — 303 S., E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart 1964.
 MÜNZNER, H., & SCHNEIDERHÖHN, P.: Das Schnenschnittverfahren. — *Heidelberger Beitr. Min. Petrogr.*, 3, 456—471, 1953.