

1. Στατιστική επεξεργασία και αποτίμηση αποτελεσμάτων

Στατιστική ανάλυση γεωχημικών δεδομένων

Η αποτίμηση των αποτελεσμάτων γεωχημικών διασκοπίσεων είναι σαφές ότι σχετίζεται με τους εκάστοτε στόχους της έρευνας. Έτσι, υπάρχουν διαφορετικοί τρόποι επεξεργασίας γεωχημικών δεδομένων με χρήση στατιστικών μεθόδων ποικίλης πολυπλοκότητας. Η στατιστική ανάλυση του γεωχημικού δείγματος που έχουμε στα χέρια μας, μας δίνει πληροφορίες για τον υπό μελέτη γεωχημικό πληθυσμό που μελετάμε. Είναι φανερό ότι οι πληροφορίες αυτές είναι άμεσα συνδεδεμένες με τον τρόπο δειγματοληψίας και ανάλυσης. Για παράδειγμα μία ελαφριά χωρική μετατόπιση του κανάβου δειγματοληψίας εδαφών σε μία περιοχή έχει σαν αποτέλεσμα τη μεταβολή των στατιστικών παραμέτρων του γεωχημικού δείγματος και ενδεχόμενα διαφορετικά συμπεράσματα για τον υπό μελέτη γεωχημικό πληθυσμό. Επίσης πρέπει να λαμβάνουμε πάντα υπόψη μας τα σφάλματα που συνοδεύουν τις μετρήσεις μας.

Η στατιστική ανάλυση των γεωχημικών δεδομένων γίνεται συνήθως με τη βοήθεια ειδικών στατιστικών προγραμμάτων Η/Υ, έτσι τα πειραματικά δεδομένα πρέπει να είναι οργανωμένα με τρόπο που επιτρέπει την εύκολη εισαγωγή και διαχείρισή τους στον υπολογιστή.

Γενικά ο απλούστερος και βασικότερος στόχος των στατιστικών μεθόδων είναι η περιγραφή της στατιστικής κατανομής των πειραματικών τιμών των γεωχημικών δειγμάτων μέσω της εκτίμησης:

- A) της εγγύτητας των αποτελεσμάτων σε μια κεντρική τιμή
- B) της διασποράς των αποτελεσμάτων

Ως μέτρο του (A) χρησιμοποιείται συνήθως ο **αριθμητικός μέσος** (\bar{x}) ή μέση τιμή (arithmetic mean or average) n μετρήσεων:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$$

Άλλοι στατιστικοί παράμετροι που περιγράφουν την εγγύτητα των μετρήσεών μας σε μια κεντρική τιμή και χρησιμοποιούνται συχνά στην ανάλυση γεωχημικών δεδομένων είναι:

- Ο **διάμεσος** (median), δηλαδή η τιμή για την οποία το ήμισυ των δειγμάτων στην κατανομή έχει τιμές μικρότερες και το ήμισυ μεγαλύτερες. Η διάμεση τιμή αποτελεί πιο σταθερή παράμετρο από τη μέση τιμή σε περιπτώσεις λίγων μετρήσεων ($n < 5$).
- Η **τιμή μέγιστης συχνότητας** (mode). Τα δεδομένα υποδιαιρούνται σε ειδικά διαστήματα (κλάσεις) και λαμβάνεται το κέντρο της κλάσης με την υψηλότερη συχνότητα. Πολλές γεωχημικές κατανομές έχουν περισσότερες από μία τιμή μέγιστης συχνότητας.
- Ο **γεωμετρικός μέσος** (geometric mean). Η μέση τιμή του δεκαδικού λογαρίθμου των δεδομένων.

Σημειώστε ότι για συμμετρικές κατανομές ο αριθμητικός μέσος, ο διάμεσος και η τιμή μέγιστης συχνότητας συμπίπτουν.

Ως μέτρο του (B) διασποράς των δεδομένων είναι δυνατό να χρησιμοποιηθούν οι παρακάτω στατιστικοί παράμετροι:

- **Περιοχή τιμών** (range). Η διαφορά μεταξύ της μέγιστης και της ελάχιστης τιμής των δεδομένων.

- **Διακύμανση ή μεταβλητότητα** (variance). Το τετράγωνο της μέσης διαφοράς μεταξύ τιμών δεδομένων και της μέσης τιμής τους:

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}$$

Επειδή η διακύμανση είναι ποσότητα υψωμένη στο τετράγωνο δεν υπάρχει διάκριση μεταξύ θετικών και αρνητικών διαφορών από τη μέση τιμή.

- **Τυπική απόκλιση** (standard deviation). Η τετραγωνική ρίζα της διακύμανσης. Είναι η συνηθέστερη παράμετρος έκφρασης της διασποράς και σε αντιδιαστολή με τη διακύμανση εκφράζεται με τις μονάδες μέτρησης της μέσης τιμής.

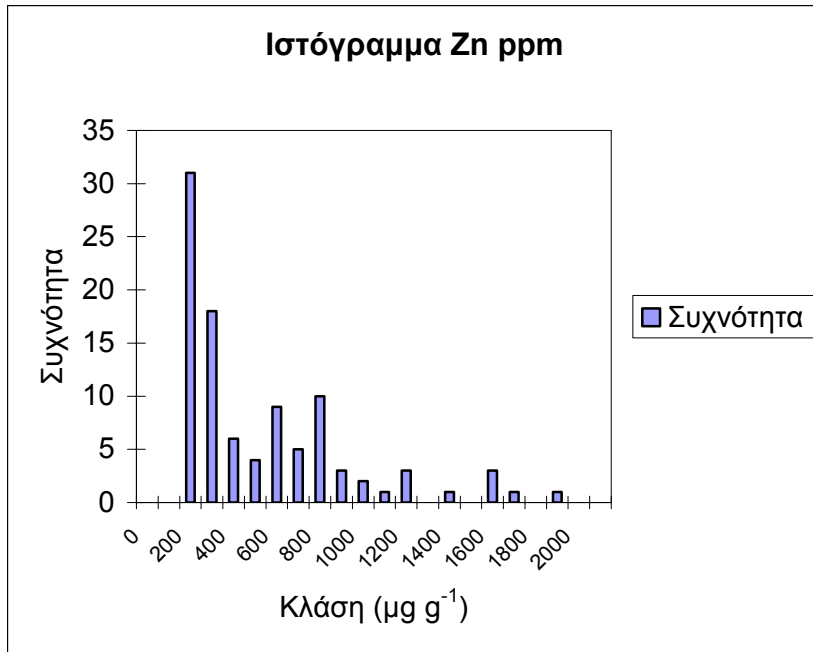
Η παρουσίαση της υπό μελέτη κατανομής των γεωχημικών δεδομένων γίνεται συνήθως σε ένα **ιστόγραμμα** (histogram) όπου οι συγκεντρώσεις του αναλυτή ταξινομούνται σε διαστήματα ανάλογα με τη συχνότητα εμφάνισής τους. Ένας συνηθισμένος τύπος για την εκλογή του αριθμού των διαστημάτων στο οποία υποδιαιρούνται n δεδομένα (όπου $n > 30$) είναι:

$$K = 10 \log n$$

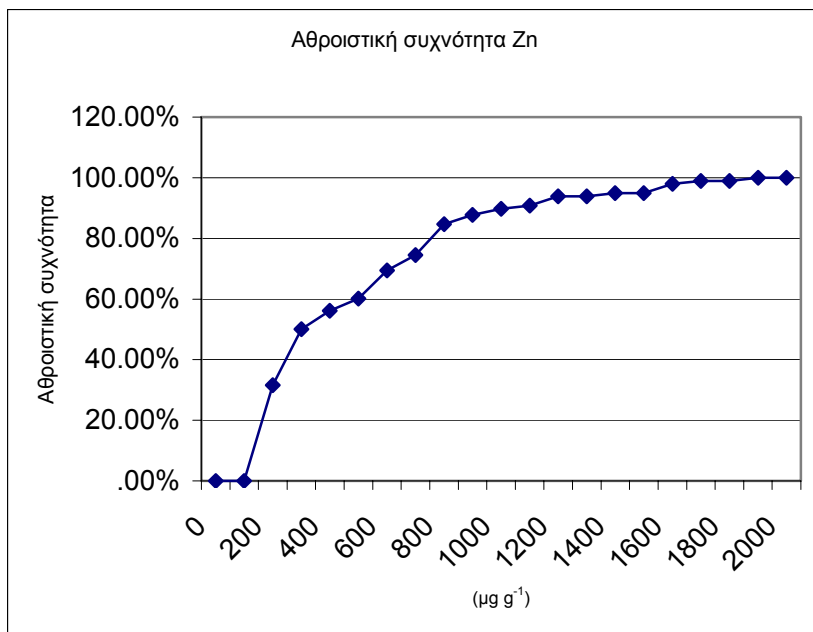
Το εύρος κάθε διαστήματος καθορίζεται διαιρώντας τη μέγιστη τιμή των δεδομένων μας με την τιμή K . Το ιστόγραμμα της γεωχημικής κατανομής είναι ιδιαίτερα χρήσιμο γιατί επιτρέπει την απλή απεικόνιση όλων των στατιστικών παραμέτρων που περιγράφονται παραπάνω. Από το ιστόγραμμα είναι επίσης δυνατό να καθορίσουμε πιθανές **τιμές κατωφλίου** (threshold) που διαχωρίζουν την τιμή του υποβάθρου ή πλαισίου από γεωχημικά ανώμαλες τιμές.

Ένας άλλος τρόπος απεικόνισης των γεωχημικών δεδομένων είναι το **διάγραμμα αθροιστικής συχνότητας** (cumulative frequency distribution) στο οποίο οι συχνότητες προηγούμενων κλάσεων αθροίζονται με τη συχνότητα κάθε κλάσης. Σε τέτοια διαγράμματα οι μέση τιμή και η τιμή του κατωφλίου καθορίζονται από τα σημεία καμπής της καμπύλης της αθροιστικής συχνότητας.

Παραδείγματα ιστογράμματος και διαγράμματος αθροιστικής συγκέντρωσης μιας υποθετικής κατανομής συγκεντρώσεων Zn στο έδαφος παρουσιάζονται στην Εικόνα 1 και Εικόνα 2.



Εικόνα 1



Εικόνα 2

Πέρα από την στατιστική περιγραφή των δεδομένων μας ενδιαφέρει συχνά και ο εντοπισμός συσχετισμών μεταξύ διαφορετικών στοιχείων ή γενικότερα μεταξύ μετρούμενων παραμέτρων. Οι παράμετροι μπορούν να συσχετιστούν με βάση τον **συντελεστή συσχέτισης** (correlation coefficient) r .

$$r = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x - \bar{x})^2 \sum (y - \bar{y})^2}}$$

Ο συντελεστής αυτός παίρνει τιμές από 1 έως -1 με την τιμή 1 να σημαίνει τέλεια θετική συσχέτιση, -1 τέλεια αρνητική συσχέτιση και 0 καμία συσχέτιση. Γενικά τιμές $r >$ από 0.5 σημαίνουν καλή στατιστική συσχέτιση μεταξύ παραμέτρων. Υψηλοί συντελεστές συσχέτισης στοιχείων σε έρευνες περιβαλλοντικής γεωχημείας μπορεί να σημαίνουν κοινές πηγές ρύπανσης.

Αποτίμηση αποτελεσμάτων- ερμηνεία στατιστικής ανάλυσης

Η ερμηνεία μιας απλής στατιστικής ανάλυσης γεωχημικών δεδομένων περιλαμβάνει συνήθως την αναγνώριση σημαντικών γεωχημικών ανωμαλιών. Γεωχημικές ανωμαλίες μπορούν να καθοριστούν με βάση την στατιστική ανάλυση των δειγμάτων οπότε οι τιμές πλαισίου και κατωφλίου καθορίζονται από το ιστόγραμμα ή το διάγραμμα αθροιστικής συχνότητας της κατανομής των δεδομένων μας. Ένας άλλος τρόπος εκτίμησης γεωχημικών ανωμαλιών σε έρευνες περιβαλλοντικής γεωχημείας είναι η σύγκριση των στατιστικών παραμέτρων με θεσμοθετημένα όρια περιεκτικότητας χημικών στοιχείων. Επίσης εάν έχουμε αναλύσει τα δείγματά μας για περισσότερα από ένα στοιχεία είναι χρήσιμο να εξετάσουμε και τους συσχετισμούς μεταξύ των προσδιοριζόμενων παραμέτρων.

Τα αποτελέσματα γεωχημικών διασκοπίσεων απεικονίζονται συνήθως σε γεωχημικούς χάρτες συγκέντρωσης στους οποίους γραφικά σύμβολα δείχνουν την προσδιοριζόμενη συγκέντρωση αναλυτή σε κάθε θέση δειγματοληψίας. Οι πληροφορίες που πρέπει να περιλαμβάνονται στους γεωχημικούς χάρτες περιλαμβάνουν:

- Χημικό στοιχείο που αναλύθηκε και μονάδες μέτρησης
- Αναλυτική μέθοδος
- Τύπος δείγματος (βάθος ορίζοντα, μέγεθος κλάσματος)
- Θέσεις δειγμάτων
- Αναλυτικά αποτελέσματα
- Τοπογραφία
- Υδρογραφικό δίκτυο
- Πιθανές πηγές ρύπανσης
- Κλίμακα
- Ένδειξη Βορρά
- Τοποθεσία διασκόπισης
- Ημερομηνία
- Ονόματα δειγματοληπτών και του υπεύθυνου του έργου.

2. Συγγραφή γεωχημικής έκθεσης

Τα αποτελέσματα και τα ευρήματα κάθε γεωχημικής διασκόπισης συνοψίζονται συνήθως σε μία τεχνική έκθεση η οποία περιέχει αναλυτικές πληροφορίες για κάθε στάδιο της έρευνας. Τα γεωχημικά δεδομένα είναι δυνατό να αποτιμηθούν με διαφορετικούς τρόπους και από διαφορετικούς ανθρώπους. Γι αυτό το λόγο τέτοιου είδους εκθέσεις πρέπει να παρέχουν στον αναγνώστη όλες τις απαραίτητες πληροφορίες. Συγκεκριμένα πρέπει να περιέχουν υποχρεωτικά:

- τα αναλυτικά αποτελέσματα των χημικών αναλύσεων που πραγματοποιήθηκαν
- χάρτη της περιοχής μελέτης με σημειωμένες τις θέσεις δειγματοληψίας
- χάρτες απεικόνισης των συγκεντρώσεων των χημικών στοιχείων που προσδιορίστηκαν.

Η προτεινόμενη δομή της γεωχημικής μελέτης περιλαμβάνει τις ακόλουθες επικεφαλίδες με την εξής σειρά:

1. Τίτλος
2. Περίληψη

3. Πίνακας Περιεχομένων
4. Εισαγωγή
5. Περιγραφή της περιοχής μελέτης
6. Μεθοδολογία υπαίθριας δειγματοληψίας, προετοιμασίας δειγμάτων και χημικής ανάλυσης
7. Μεθοδολογία επεξεργασίας των αποτελεσμάτων
8. Ποιοτικός έλεγχος αποτελεσμάτων
9. Περιγραφή των αποτελεσμάτων
10. Συζήτηση των αποτελεσμάτων
11. Συμπεράσματα
12. Προτάσεις
13. Βιβλιογραφία
14. Παραρτήματα

Η περίληψη πρέπει να περιέχει τα σημαντικότερα από τα ευρήματα της έρευνας, ποσοτικά αποτελέσματα των ανώμαλων δειγμάτων και αναφορά στην χωρική έκταση της ανωμαλίας. Πρέπει επίσης να αναφέρονται τα συνοπτικά συμπεράσματα και οι προτάσεις για περαιτέρω έρευνα.

Στην εισαγωγή πρέπει να αναφέρονται οι στόχοι της έρευνας, και να παρατίθενται τα βιβλιογραφικά δεδομένα για την περιοχή και πληροφορίες από προηγούμενες σχετικές έρευνες.

Η περιοχή μελέτης πρέπει να περιγράφεται ως προς την τοπογραφία, τη γεωλογία, το υδρογραφικό δίκτυο καθώς και τις εμφανείς πηγές ρύπανσης. Ιδιαίτερα χρήσιμες είναι οι σημειώσεις υπαίθρου.

Η μεθοδολογία δειγματοληψίας, ανάλυσης και επεξεργασίας των δεδομένων πρέπει να περιγράφεται αναλυτικά ώστε να επιτρέπει την επανάληψη των διαδικασιών από μελλοντικούς ερευνητές. Λεπτομέρειες των αναλυτικών μεθόδων παρατίθενται σε ειδικό παράρτημα.

Ο ποιοτικός έλεγχος των μετρήσεων πρέπει να γίνεται πριν από κάθε είδους αποτίμηση των δεδομένων και περιλαμβάνει τον ποσοτικό προσδιορισμό της αναλυτικής επαναληψιμότητας και ακρίβειας. Τα αποτελέσματα του ποιοτικού ελέγχου πρέπει να σχολιάζονται ως προς την επιρροή που μπορεί να έχουν στην αποτίμηση των αποτελεσμάτων. Τα αναλυτικά δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν για τον ποιοτικό έλεγχο παρατίθενται σε ειδικό παράρτημα.

Τα αποτελέσματα της έρευνας παρουσιάζονται σε συνάρτηση με τους στόχους της έρευνας και εκτίθεται αναλυτικά η στατιστική επεξεργασία στην οποία έχουν υποβληθεί. Πίνακες και εικόνες που συνοδεύουν τα αποτελέσματα μπορούν να παρατεθούν σε ειδικό παράρτημα με τη φροντίδα τις σωστής αρίθμησης και λεζάντας.

Η συζήτηση των αποτελεσμάτων γίνεται επίσης σε συνάρτηση με τους στόχους της έρευνας και πρέπει να περιέχει πληροφορίες σχετικές με την ποιότητα των μετρήσεων. Οι παράγοντες που επηρεάζουν τις συγκεντρώσεις και τη χωρική διασπορά των χημικών στοιχείων πρέπει να σχολιάζονται με αναφορές στη σχετική βιβλιογραφία.

Τα συμπεράσματα της έρευνας παρατίθενται με περιεκτικό τρόπο. Δίνονται οι ποσοτικές εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων, γεωχημικών ανωμαλιών και χωρικής έκτασης των ανωμαλιών αυτών σχολιάζοντας την αξιοπιστία τους.

Οι προτάσεις πρέπει να στηρίζονται στα ευρήματα της έρευνας και να προσδιορίζουν τους τρόπους, τα μέσα και την έκταση δειγματοληψίας και ανάλυσης για περαιτέρω έρευνα.

3. Ολοκλήρωση της πρακτικής άσκησης

Το στάδιο της επεξεργασίας και αποτίμησης των αποτελεσμάτων αρχίζει με τον ποιοτικό έλεγχο των μετρήσεων. Προσδιορίστε την αναλυτική ακρίβεια και την επαναληψιμότητα χρησιμοποιώντας τις πληροφορίες από την ανάλυση των HRMs, των τυφλών διαλυμάτων και των διπλών δειγμάτων. Δίνονται οι αποδεκτές συγκεντρώσεις στα HRMs:

| ΔΕΙΓΜΑ | Zn_ppm | Pb_ppm | Cd_ppm | Cr_ppm | Ni_ppm |
|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| HRM1 | 43 | 24 | 1 | - | 242 |
| HRM2 | 40 | 24 | 1 | - | 289 |
| HRM3 | 162 | 325 | 1 | 24 | 7 |

Για τον προσδιορισμό της επαναληψιμότητας για κάθε στοιχείο, να χρησιμοποιήσετε το γράφημα επαναληψιμότητας 10%.

Αφού λάβετε τη μέση τιμή των αποτελεσμάτων των διπλών μετρήσεων, περιγράψτε τις κατανομές για κάθε στοιχείο που αναλύσατε στο έδαφος, τη σκόνη δρόμου και το ενεργό ίζημα. Χωρίστε τα δεδομένα σας σε κλάσεις και κατασκευάστε χάρτες συμβολίζοντας τις προσδιορισμένες τιμές συγκέντρωσης σε κάθε σημείο δειγματοληψίας. Συγκρίνετε τα αποτελέσματά σας με τυπικές συγκεντρώσεις των στοιχείων και θεσμοθετημένα όρια για τα υπό μελέτη στοιχεία όπως δίνονται στη βιβλιογραφία. Σχολιάστε τα αποτελέσματά σας και προτείνεται ενέργειες για περαιτέρω έρευνα.

Γράψτε μία περιεκτική αλλά σύντομη έκθεση με τα ευρήματά σας (2-3 σελίδες κείμενο συν χάρτες, διαγράμματα, εικόνες, πίνακες, παραρτήματα). Παραδώστε την έκθεσή σας έως την ημερομηνία που θα κανονιστεί με τους υπεύθυνους της άσκησης.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Κελεπερτζής, Α. (2000) *Εφαρμοσμένη Γεωχημεία*, Μακεδονικές Εκδόσεις, Αθήνα.

Flecher, W.K., Hoffman, S.J., Mehrtens, M.B., Sinclair, A.J and Thomson, I (1986) *Exploration Geochemistry: Design and interpretation of soil surveys*, Society of Economic Geologists, Socorro.

Hoffman, S.J. (1986) *Writing Geochemical Reports*, The Association of Exploration Geochemists, Special Volume No. 12, Vancouver.

Salminen et al. (1998) *FOREGS Geochemical Mapping Field Manual*, Geological Survey of Finland, Espoo.