



ALTERRA

WAGENINGEN UR

Kwantificering van de fosfaattoestand in de bodem van vier stroomgebieden

D.J.J. Walvoort, D.J. Brus, C. van der Salm, M. Pleijter en T.P. van Tol-Leenders

Alterra-rapport 1958, ISSN 1566-7197
Reeks Monitoring Stroomgebieden 21



Kwantificering van de fosfaattoestand in de bodem
van vier stroomgebieden

In opdracht van de Ministeries van EL&I en I&M
Projectcode BO-12.07-005-006

Kwantificering van de fosfaattoestand in de bodem van vier stroomgebieden

D.J.J. Walvoort, D.J. Brus, C. van der Salm, M. Pleijter, T.P. van Tol-Leenders

Alterra-Rapport 1958

Alterra Wageningen UR
Wageningen, 2010

Referaat

D.J.J. Walvoort, D.J. Brus, C. van der Salm, M. Pleijter, T.P. van Tol-Leenders, 2010, *Kwantificering van de fosfaattoestand in de bodem van vier stroomgebieden*, Wageningen, Alterra, Alterra-Rapport 1958

In dit rapport staat beschreven hoe voor vier stroomgebieden de fosfaattoestand van de bodem is gekwantificeerd. Deze informatie wordt gebruikt om procesmodellen te voeden die de af- en uitspoeling van fosfaat naar grond- en oppervlaktewater kunnen voorspellen. Eerst is op een beperkt aantal locaties binnen elk stroomgebied de fosfaattoestand bepaald op vier dieptes. Vervolgens is de fosfaattoestand op deze locaties ruimtelijk geïnterpoleerd naar alle overige locaties in het stroomgebied waarbij zoveel mogelijk gebruik is gemaakt van bestaande informatielagen. Op deze wijze is voor elk stroomgebied een driedimensionaal beeld verkregen van de fosfaattoestand. Het gebruik van deze gegevens als invoer voor de procesmodellen heeft geleid tot een verbetering van de berekende af- en uitspoeling van fosfaat.

Trefwoorden: fosfaat, mestbeleid, fosfaatophoping, bemonstering, ruimtelijke interpolatie, kriging, kruisvalidatie

ISSN 1566-7197

Dit rapport is gratis te downloaden van www.alterra.wur.nl (ga naar 'Alterra-rapporten'). Alterra Wageningen UR verstrekt geen gedrukte exemplaren van rapporten. Gedrukte exemplaren zijn verkrijgbaar via een externe leverancier. Kijk hiervoor op www.boomblad.nl/rapportenservice.

© 2010 Alterra Wageningen UR, Postbus 47; 6700 AA Wageningen; Nederland
Telefoon 0317 48 07 00; fax 0317 41 90 00; e-mail info.alterra@wur.nl

Niets uit deze uitgave mag worden verveelvoudigd en/of openbaar gemaakt door middel van druk, fotokopie, microfilm of op welke andere wijze ook onder voorafgaande schriftelijke toestemming van Alterra Wageningen UR.

Alterra B.V. aanvaardt geen aansprakelijkheid voor eventuele schade voortvloeiend uit het gebruik van de resultaten van dit onderzoek of de toepassing van de adviezen.

Alterra-rapport 1958
Wageningen, November 2010

Inhoud

1	Inleiding	9
1.1	Achtergrond	9
1.2	Doelstelling	9
1.3	Leeswijzer	9
2	Werkwijze	11
2.1	Studiegebieden	11
2.2	Opzetten van het bemonsteringsplan	11
2.3	Veldwerk- en laboratoriumwerkzaamheden	13
2.4	Exploratieve data-analyse	13
2.5	Ruimtelijke interpolatie	13
2.6	Validatie	14
3	Resultaten en discussie	15
3.1	Exploratieve data-analyse	15
3.2	Ruimtelijke interpolatie	21
4	Conclusies	39
5	Aanbevelingen	41
6	Dankbetuiging	43
A	Universal Kriging	49
B	Modelleren van de ruimtelijke structuur	51

Woord vooraf

Deze rapportage vormt een onderdeel van het project 'Monitoring Stroomgebieden'. Het primaire doel van dit project is het leveren van een bijdrage aan de evaluatie van het mestbeleid door het kwantificeren van het aandeel van de landbouw in de belasting van het oppervlaktewater en de verandering van dit aandeel van de landbouw als gevolg van (mest)beleid in een aantal representatieve stroomgebieden in karakteristieke landschappelijke regio's. Het secundaire doel is om een methodiek te ontwikkelen die het mogelijk maakt en perspectieven biedt om deze methodiek ook in andere stroomgebieden in te voeren.

Voor dit project zijn vier pilotgebieden geselecteerd: Drentse Aa, Schuitembeek, Krimpenerwaard en Quarles van Ufford. De waterbeheerders, Hoogheemraadschap van Schieland en de Krimpenerwaard, Waterschap Veluwe, Waterschap Rivierenland, Waterschap Hunze en Aa's en Waterlaboratorium Noord participeren actief in dit project.

Het project wordt aangestuurd door een stuurgroep. In de stuurgroep hebben de Ministeries EL&I en I&M als opdrachtgevers en een vertegenwoordiger van de Unie van Waterschappen namens de betrokken waterbeheerders zitting. Het project wordt uitgevoerd door Alterra Research Instituut voor de Groene Ruimte onderdeel van Wageningen Universiteit en Researchcentrum.

In de reeks rapportages van het project 'Monitoring Stroomgebieden' is per gebied een systeemverkenning en een aantal systeemanalyses verschenen. Op basis van deze rapportages is aanvullend in de pilotgebieden gemeten om meer gebiedspecifieke gegevens te verkrijgen. De metingen en analyses die zijn uitgevoerd om de fosfaattoestand in elk pilotgebied beter te kunnen karakteriseren zijn beschreven in het voor u liggende rapport.

Voor informatie over het project 'Monitoring Stroomgebieden' kunt u terecht op www.monitoringstroomgebieden.nl of bij:

Dorothee van Tol-Leenders
0317 – 48 42 79
dorothee.vantol-leenders@wur.nl

Frank van der Bolt
0317 – 48 64 44
frank.vanderbolt@wur.nl

1 Inleiding

1.1 Achtergrond

De diffuse fosfaatbelasting van het oppervlaktewater vanuit het landsysteem wordt mede bepaald door de fosfaatvoorraad in de bodem, de mate waarin fosfaat in de bodem is vastgelegd, de (resterende) bindingscapaciteit van de bodem en de (geo)hydrologische situatie.

De diffuse fosfaatbelasting van het oppervlaktewater kan niet rechtstreeks worden gemeten en wordt daarom vaak met procesmodellen berekend (Wolf *et al.*, 2003; Siderius *et al.*, 2008; Roelsma *et al.*, 2008; Kroes *et al.*, 2008; Jansen *et al.*, 2009). Deze procesmodellen moeten worden gevoed met gebiedspecifieke gegevens over de fosfaattoestand van de bodem.

Het is veelal niet mogelijk om deze gegevens uit bestaande bronnen te verkrijgen. Als er gegevens beschikbaar zijn, dan is dat vaak voor een beperkt aantal locaties en/of voor een geringe diepte. Ook is het niet mogelijk om de fosfaattoestand af te leiden uit gegevens over de bemestingshistorie. Er zijn namelijk nauwelijks regionaal gedifferentieerde gegevens beschikbaar over (historische) bemestingsgiften en de mestamenstelling.

Daarom is in het kader van het project 'Monitoring Stroomgebieden' een deelonderzoek uitgevoerd om de fosfaattoestand te kwantificeren op basis van metingen in het veld. Omdat deze metingen relatief kostbaar zijn kan de fosfaattoestand maar op een beperkt aantal locaties en diepten worden bepaald. Door gebruik te maken van geostatistische interpolatiemethoden kunnen op basis van de veldmetingen predicties (geïnterpoleerde waarden) van de fosfaattoestand worden verkregen voor elke locatie in het studiegebied. Op deze wijze kan een driedimensionaal beeld worden verkregen van de actuele fosfaattoestand. Door gebruik te maken van bestaande gebiedsgegevens (denk bijvoorbeeld aan een digitale bodemkaart of landgebruikskaart) kunnen de predicties potentieel worden verbeterd.

1.2 Doelstelling

Het doel van dit onderzoek is het kwantificeren van de fosfaattoestand van de bodem in vier stroomgebieden om de af- en uitspoeling van fosfaat naar het oppervlaktewater beter te kunnen voorspellen.

1.3 Leeswijzer

In hoofdstuk 2 wordt de werkwijze beschreven. Na een korte beschrijving van de studiegebieden wordt het bemonsteringsplan behandeld. Vervolgens wordt aangegeven langs welke weg een driedimensionaal beeld van de fosfaattoestand is verkregen. Hiervoor is eerst de data geanalyseerd, vervolgens ruimtelijk geïnterpoleerd en gevalideerd. In hoofdstuk 3 worden de resultaten gegeven en bediscussieerd. Tot slot worden de conclusies samengevat (hoofdstuk 4) en aanbevelingen gedaan (hoofdstuk 5). Nadere details zijn opgenomen in bijlagen A en B.

2 Werkwijze

Om tot een driedimensionaal beeld van de fosfaattoestand te komen zijn de volgende stappen gevolgd voor elk stroomgebied:

1. *Opzetten van het bemonsteringsplan*: In dit plan staat aangegeven op welke locatie en dieptes bodemonsters moeten worden genomen en welke analyses in het laboratorium moeten worden uitgevoerd.
2. *Uitvoeren van veld- en laboratoriumwerkzaamheden*: Op basis van het bemonsteringsplan zijn bodemonsters genomen in het veld en geanalyseerd in het laboratorium.
3. *Uitvoeren van een exploratieve data-analyse*: Het uitvoeren van een verkennende analyse van de ruwe meetgegevens.
4. *Ruimtelijk interpolatie*: De fosfaattoestand is alleen bekend op bemonsteringslocaties. Op andere locaties zal de fosfaattoestand worden berekend met behulp van ruimtelijke interpolatie.
5. *Validatie*: Met validatie wordt de betrouwbaarheid van de resulterende kaarten op objectieve wijze gekwantificeerd.

Deze onderdelen worden in onderstaande paragrafen nader toegelicht.

2.1 Studiegebieden

De fosfaattoestand zal worden gekwantificeerd in vier stroomgebieden, te weten:

- de Drentse Aa, een zandgebied met lage nutriëntenbelasting;
- de Krimpenerwaard, een veenpolder;
- Quarles van Ufford, een bemalen rivierkleigebied;
- de Schuitenbeek, een zandgebied met hoge nutriëntenbelasting.

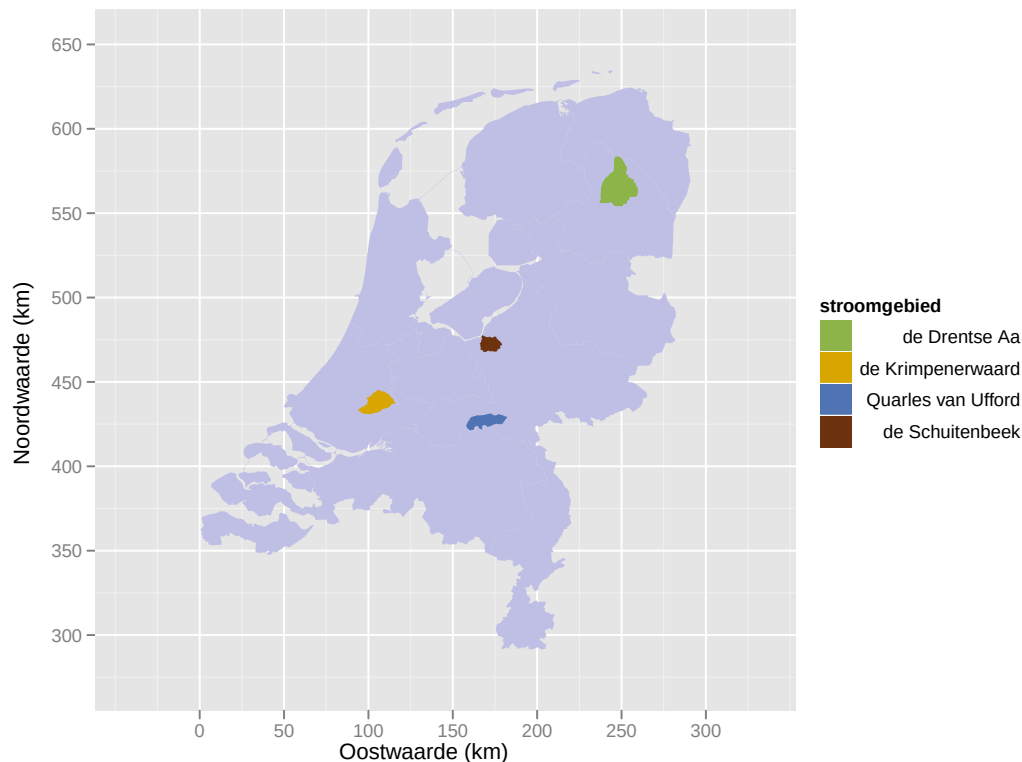
De geografische ligging van de stroomgebieden is weergegeven in figuur 2.1. Zie Roelsma *et al.* (2006b), Kroes *et al.* (2006), Roelsma *et al.* (2006a) en Jansen *et al.* (2006) voor een uitgebreide beschrijving van respectievelijk de Drentse Aa, de Krimpenerwaard, Quarles van Ufford en de Schuitenbeek.

2.2 Opzetten van het bemonsteringsplan

Om een nauwkeurige kaart te verkrijgen is het van belang dat de bemonsteringslocaties gelijkmatig over het gebied worden verdeeld (Cochran, 1977).

Dit kan worden bewerkstelligd met behulp van *spatial simulated annealing*. Dit algoritme staat beschreven in van Groenigen & Stein (1998) en is gebaseerd op het werk van Kirkpatrick *et al.* (1983). Bij *spatial simulated annealing* wordt een initiële configuratie van bemonsteringslocaties via een iteratieve procedure stap voor stap gewijzigd. Elke permutatie wordt getoetst aan een bepaald criterium. Dit criterium kwantificeert bijvoorbeeld de mate waarin de bemonsteringslocaties over het gebied verspreid liggen (geometrisch criterium, zie bijv. van Groenigen & Stein, 1998), of de nauwkeurigheid van de geïnterpoleerde kaart als functie van de configuratie (geostatistisch criterium, zie bijv. McBratney *et al.*, 1981; McBratney & Webster, 1981; van Groenigen *et al.*, 2000). Door aanvankelijk ook configuraties te accepteren die leiden tot een verslechtering van het criterium wordt de kans verkleind dat het algoritme vroegtijdig in een lokaal optimum strandt.

Voor Quarles van Ufford is gebruik gemaakt van de spatial simulated annealing variant zoals beschreven in Brus & Heuvelink (2007). Het criterium dat hierin wordt geoptimaliseerd is de universal kriging variantie (zie bijlage A). Dit geostatistische criterium leidt tot een configuratie van bemonsteringslocaties die de nauwkeurigheid van de interpolatie maximaliseert, gebruik makend van bestaande informatielagen. De geoptimaliseerde configuratie zal daardoor niet alleen de geografische ruimte goed dekken, maar gegeven de bestaande informatielagen, ook de eigenschappenruimte.



Figuur 2.1
Geografische ligging van de vier stroomgebieden.

Tabel 2.1
Gebruikte methodes voor het bepalen van de bemonsteringslocaties, het gebruikte algoritme, en de jaren waarin het veldwerk is uitgevoerd.

gebied	sampling methode	algoritme	jaar veldwerk
de Drentse Aa	spatial coverage sampling	<i>k</i> -means (SPCOSA)	2008–2009
de Krimpenervaard	spatial coverage sampling	<i>k</i> -means (SPCOSA)	2009
Quarles van Ufford	model-based sampling	spatial simulated annealing	2007
de Schuitembeek	stratified simple random sampling	-	1988 en 2008

Spatial simulated annealing is echter een zeer rekenintensieve procedure die op basis van ervaring moet worden ingeregeld. Daarom is besloten om voor de Drentse Aa en de Krimpenervaard gebruik te maken van het snellere *k*-means algoritme (Hartigan, 1975). Dit algoritme is voor ruimtelijke bemonstering geïmplementeerd in de software package SPCOSA (Walvoort *et al.*, 2009b). Voor achtergronden en voorbeelden zie Brus *et al.* (1999) en Walvoort *et al.* (2009a, 2010a).

Het criterium dat bij *k*-means wordt geoptimaliseerd is een geometrisch criterium dat ervoor zorgt dat de bemonsteringslocaties zo goed mogelijk over het gebied verspreid komen te liggen. Voor bepaalde criteria geeft *spatial simulated annealing* vergelijkbare resultaten als *k*-means (Brus *et al.*, 2007). Ook bij de implementatie van *k*-means in SPCOSA wordt de kans gereduceerd dat het algoritme in een lokaal optimum strandt.

Beide algoritmes houden rekening met het landgebruik. Bemonsteringslocaties zijn alleen geplaatst in landbouw- en natuurgebieden. Bebouwd gebied en sportvelden zijn uitgesloten van bemonstering. Tevens is rekening gehouden met locaties waar de fosfaattoestand al eerder is bepaald, d.w.z. dat nieuwe locaties alleen worden geplaatst in gebiedsdelen waar relatief weinig over de fosfaattoestand bekend is.

Voor de Schuitembeek zijn geen aanvullende meetpunten geselecteerd, omdat voor dit gebied al informatie over de fosfaattoestand voorhanden was uit eerder onderzoek (zie bijv. Breeuwsma *et al.*, 1989).

Tabel 2.2

Aantal steken per bodemlaag per stroomgebied. GLG: gemiddelde laagste grondwaterstand. Er is geen aanvullend veldwerk verricht in de Schuitenbeek.

	de Drentse Aa	de Krimpenerwaard	Quarles van Ufford
0 tot -0.20 m	9	9	5
-0.20 tot -0.35 m	9	9	5
-0.35 tot -0.50 m	9	9	1
-0.50 tot 1.00 m	1		1
-0.50 m tot GLG*		1	
GLG* tot 1.20 m		1	

* Als de GLG < -0.70 m dan is -0.80 m aangehouden.

Tabel 2.3

Overzicht van de gemeten bodemeigenschappen, de gehanteerde symbolen en eenheden en de relevantie van de bodemeigenschap.

bodemeigenschap	symbool	eenheid	relevantie
oxalaat-extraheerbaar fosfor	P_{ox}	mg/kg	Maat voor de hoeveelheid fosfor in de bodem die gebonden is aan ijzer- en aluminiumverbindingen
oxalaat-extraheerbaar ijzer	Fe_{ox}	mmol/kg	Bepalend voor het fosfaatbindend vermogen van de bodem
oxalaat-extraheerbaar aluminium	Al_{ox}	mmol/kg	Bepalend voor het fosfaatbindend vermogen van de bodem
water-extraheerbaar fosfor	P_w	g/m^3 P_2O_5	Makkelijk beschikbaar fosfaat (voor het gewas)
droge bulkdichtheid	ρ_d	kg/m^3	Van belang voor het converteren van eenheden

2.3 Veldwerk- en laboratoriumwerkzaamheden

Er was financiële ruimte voor het bemonsteren van maximaal 70 locaties per stroomgebied. Doordat niet overal toestemming werd gegeven om te bemonsteren kan het werkelijke aantal bemonsterde locaties lager uitvallen. Per locatie zijn vier of vijf bodemlagen bemonsterd. In tabel 2.2 is per bodemlaag en stroomgebied aangegeven hoeveel steken er van elke laag zijn genomen. De steken werden binnen een straal van vijf meter van het bemonsteringspunt genomen en als mengmonster bij het laboratorium van Centrum Bodem van Alterra aangeleverd. In het laboratorium zijn de mengmonsters vervolgens geanalyseerd op een aantal bodemeigenschappen die relevant zijn voor de fosfaattoestand van de bodem: oxalaat-extraheerbaar fosfor (P_{ox}), een maat voor de hoeveelheid aan ijzer en aluminium gebonden fosfor in de bodem; oxalaat-extraheerbaar ijzer en aluminium ($Fe_{ox} + Al_{ox}$), bodemeigenschappen die het fosfaatbindend vermogen van de bodem bepalen; en het P_w -getal (P_w), een maat voor de hoeveelheid fosfaat die makkelijk beschikbaar is (voor het gewas). Tevens is voor elk monster de droge bulkdichtheid (ρ_d) geschat op basis van veldschattingen van het lutum- en het organischestofgehalte (Hoekstra, 1982; van Wallenburg, 1988). Zie tabel 2.3 voor een overzicht van gemeten bodemeigenschappen.

2.4 Exploratieve data-analyse

Het doel van een exploratieve data-analyse is om vertrouwd te raken met de meetgegevens en eventuele problemen op te sporen. Te denken valt aan het berekenen van statistieken (zoals gemiddeldes, varianties, correlaties), het maken van grafieken (histogrammen, scatter plots, e.d.) en het maken van bellenkaartjes (Eng.: bubble plots) zodat ruimtelijke patronen zichtbaar worden. Deze informatie kan worden gebruikt om na te gaan of er extreme waarden in de data voorkomen. Ook wordt duidelijk of er nog data ontbreken of in de verkeerde eenheid zijn aangeleverd. Tevens kunnen aannames worden getoetst (bijvoorbeeld die van normaliteit) die van belang zijn bij de verdere verwerking.

2.5 Ruimtelijke interpolatie

In elk stroomgebied zijn op slechts een beperkt aantal locaties metingen beschikbaar. Om van de fosfaattoestand op deze locaties naar de fosfaattoestand in het hele stroomgebied te komen kan gebruik worden gemaakt van ruimtelijke interpolatie. In dit rapport wordt gebruik gemaakt van *universal kriging* (Matheron,

1969). Bij *universal kriging* wordt een bodemeigenschap op een locatie berekend door niet alleen gebruik te maken van de waarnemingen op de meetlocaties, maar ook van andere beschikbare informatie zoals digitale bodemkaarten, landgebruikskaarten, grondwaterstandskaarten, en/of uitkomsten van (proces)modellen. Op deze wijze kan de beschikbare informatie optimaal worden benut.

Het kriging-algoritme is zodanig afgeleid dat de voorspellingen statistisch gezien zuiver zijn. Dat wil zeggen dat de *gemiddelde* interpolatiefout gelijk is aan nul. Daarnaast is ook de variantie van de interpolatiefout geminimaliseerd. Hierdoor liggen de interpolatiefouten zo dicht mogelijk bij nul. Dit is analoog aan het maximaliseren van de precisie van de interpolatie en, vanwege de statistische zuiverheid, tevens van de nauwkeurigheid. Zie bijvoorbeeld Isaaks & Srivastava (1989), Goovaerts (1997) of Walvoort (2004) voor meer details over deze en andere interessante eigenschappen van kriging-interpolatie (zoals afstandsweging en declustering). Zie bijlage A voor meer informatie over universal kriging.

In tegenstelling tot andere ruimtelijke interpolatiemethoden zoals *nearest neighbor* interpolatie, *inverse (squared) distance* interpolatie, *local mean* interpolatie, triangulatie (Isaaks & Srivastava, 1989; Davis, 1986) en spline interpolatie (Davis, 1986), maakt kriging interpolatie *expliciet* gebruik van een model van de ruimtelijke structuur in het gebied. Dit model bevat informatie over de ruimtelijke samenhang tussen de meetlocaties. In bijlage B staat beschreven hoe de ruimtelijke structuur is gemodelleerd.

2.6 Validatie

Om te beoordelen welke (combinatie van) informatielagen (bodemkaart, landgebruikskaart, GHG-kaart) tot de beste interpolatieresultaten leiden, is gebruik gemaakt van n -voudige kruisvalidatie (bijv. Efron & Gong, 1983). Hierbij wordt voor elk van de n meetlocaties de fosfaattoestand voorspeld op basis van de overige $n - 1$ meetlocaties. Het verschil tussen de n voorspellingen en de n waarnemingen geeft n predictiefouten op basis waarvan de kwaliteit van de interpolatie kan worden beoordeeld. In dit rapport is niet alleen gekeken naar de overeenkomst tussen de gemeten en voorspelde *waarden* van de bodemeigenschappen, maar tevens naar de overeenkomst in gemeten en voorspelde *ruimtelijke patronen*. Hiervoor is gebruik gemaakt van het 'extended Taylor'-diagram zoals beschreven in Walvoort *et al.* (2010b,c,d,e).

3 Resultaten en discussie

3.1 Exploratieve data-analyse

In tabel 3.1 is voor elke diepte het aantal (meng)monsters gegeven per stroomgebied. Voor de Drentse Aa, de Krimpenerwaard en Quarles van Ufford was het beoogde aantal (meng)monsters per diepte 70 (paragraaf 2.3). In de praktijk zijn het er soms minder geworden doordat bijvoorbeeld geen toestemming is verleend door de grondeigenaar of -gebruiker. Voor de Schuitenbeek zijn veel meer monsters beschikbaar dan voor de overige stroomgebieden. Deze monsters zijn in het kader van andere projecten verzameld (bijv. Breeuwsma *et al.*, 1989).

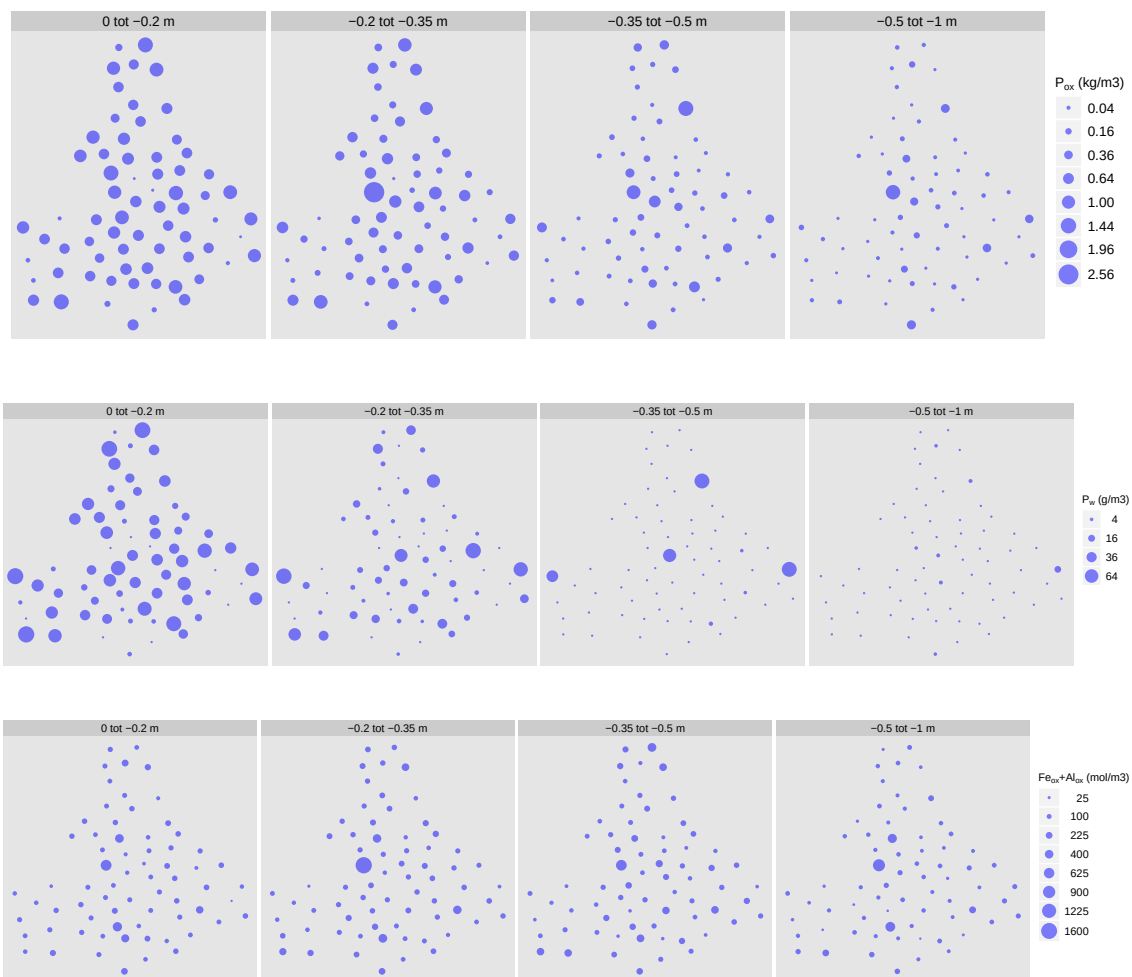
Tabel 3.1

Overzicht van het aantal monsters per diepte voor de vier studiegebieden.

bodemeigenschap	laag	de Drentse Aa	de Krimpenerwaard	Quarles van Ufford	de Schuitenbeek
P_{ox}	0 tot -0.2 m	69	64	70	335
P_{ox}	-0.2 tot -0.35 m	69	64	70	335
P_{ox}	-0.35 tot -0.5 m	69	64	70	335
P_{ox}	-0.5 tot -1 m	69	63	70	335
P_w	0 tot -0.2 m	69	63	70	262
P_w	-0.2 tot -0.35 m	69	64	70	259
P_w	-0.35 tot -0.5 m	69	64	70	255
P_w	-0.5 tot -1 m	69	62	70	0
$Fe_{ox} + Al_{ox}$	0 tot -0.2 m	69	64	70	335
$Fe_{ox} + Al_{ox}$	-0.2 tot -0.35 m	69	64	70	335
$Fe_{ox} + Al_{ox}$	-0.35 tot -0.5 m	69	64	70	335
$Fe_{ox} + Al_{ox}$	-0.5 tot -1 m	69	63	70	335
ρ_d	0 tot -0.2 m	69	64	70	335
ρ_d	-0.2 tot -0.35 m	69	64	70	335
ρ_d	-0.35 tot -0.5 m	69	64	70	335
ρ_d	-0.5 tot -1 m	69	64	70	335

In figuur 3.1, 3.2, 3.3, en 3.4 zijn bellenkaartjes gegeven voor P_{ox} , $Fe_{ox} + Al_{ox}$, en P_w . De kaartjes zijn geanonimiseerd omwille van de privacy. Op basis van deze kaarten wordt duidelijk hoe de bemonsteringslocaties t.o.v. elkaar liggen en hoe de fosfaatgerelateerde bodemeigenschappen ruimtelijk variëren. Alle bodemeigenschappen zijn omgerekend naar eenheden op volumebasis om ze beter met elkaar te kunnen vergelijken.

De gehalten aan P_{ox} en P_w zijn over het algemeen het hoogst in de bovengrond. Dat is ook te verwachten omdat bemesting een belangrijke bron is voor fosfaat in de bodem. Op een aantal locaties zijn ook op grotere dieptes (dieper dan -0.50 m) nog aanzienlijke P_{ox} en P_w gehalten aanwezig. De verdeling van $Fe_{ox} + Al_{ox}$ in de bodem wordt bepaald door de geologische en bodemkundige gesteldheid.



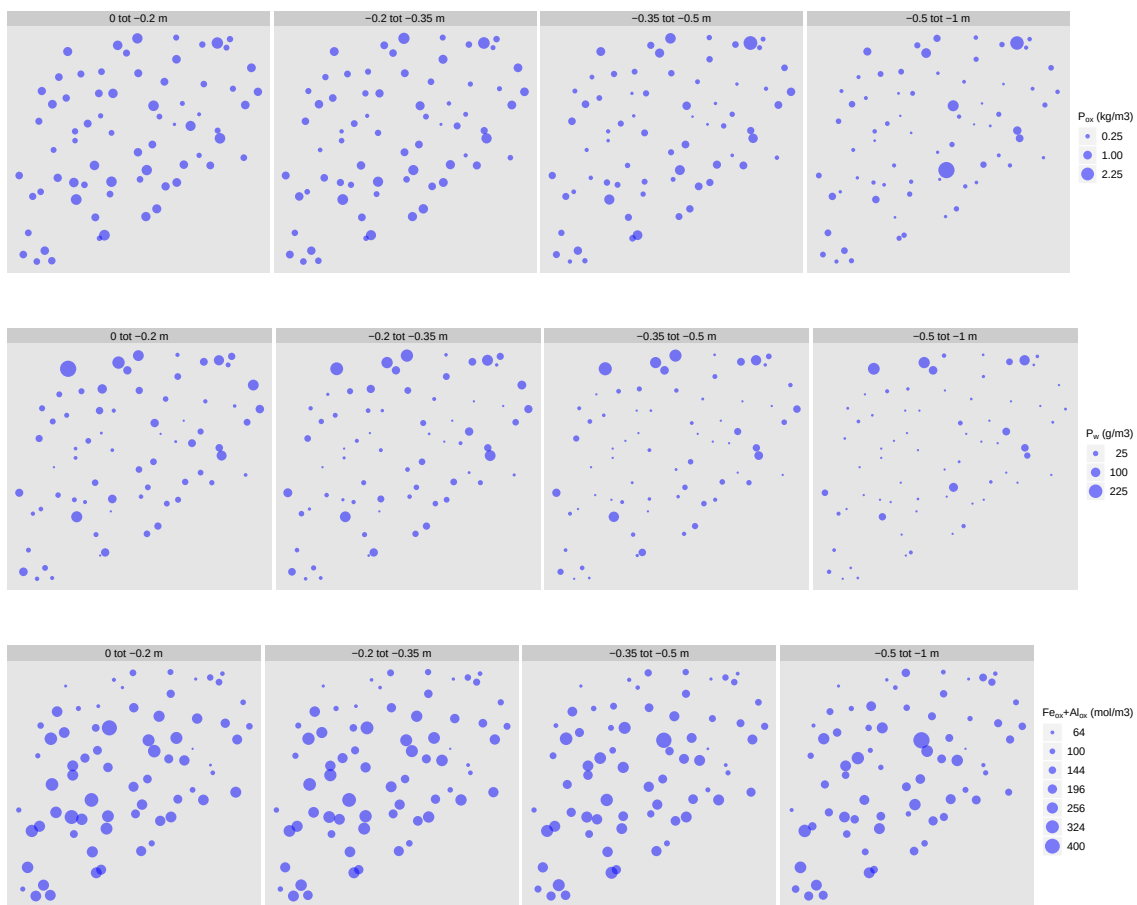
Figuur 3.1

Bellenkaartjes (geanonimiseerd) van P_{ox} , $Fe_{ox} + Al_{ox}$ en P_w voor vier bodemlagen in de Drentse Aa.

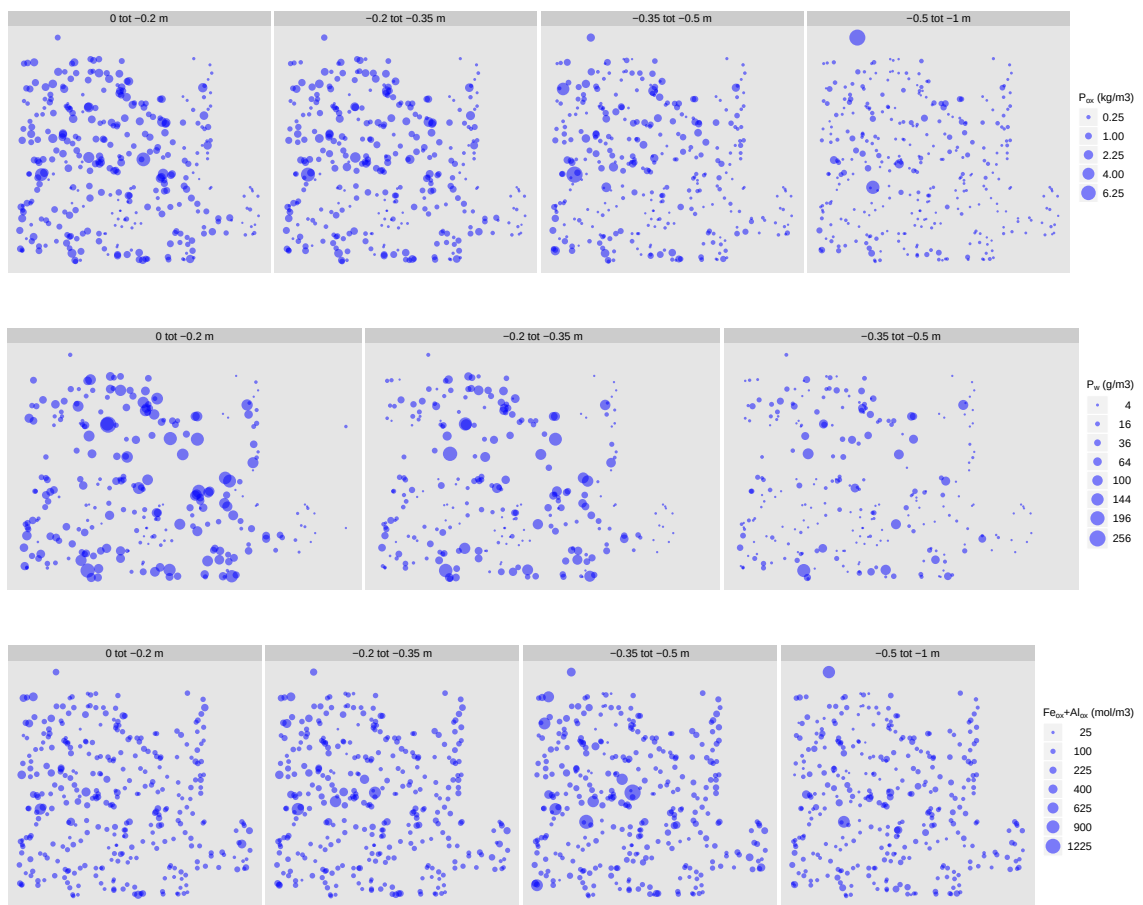


Figuur 3.2

Bellenkaartjes (geanonimiseerd) van P_{ox} , $Fe_{ox}+Al_{ox}$ en P_w voor vier bodemlagen in de Krimpenerwaard.

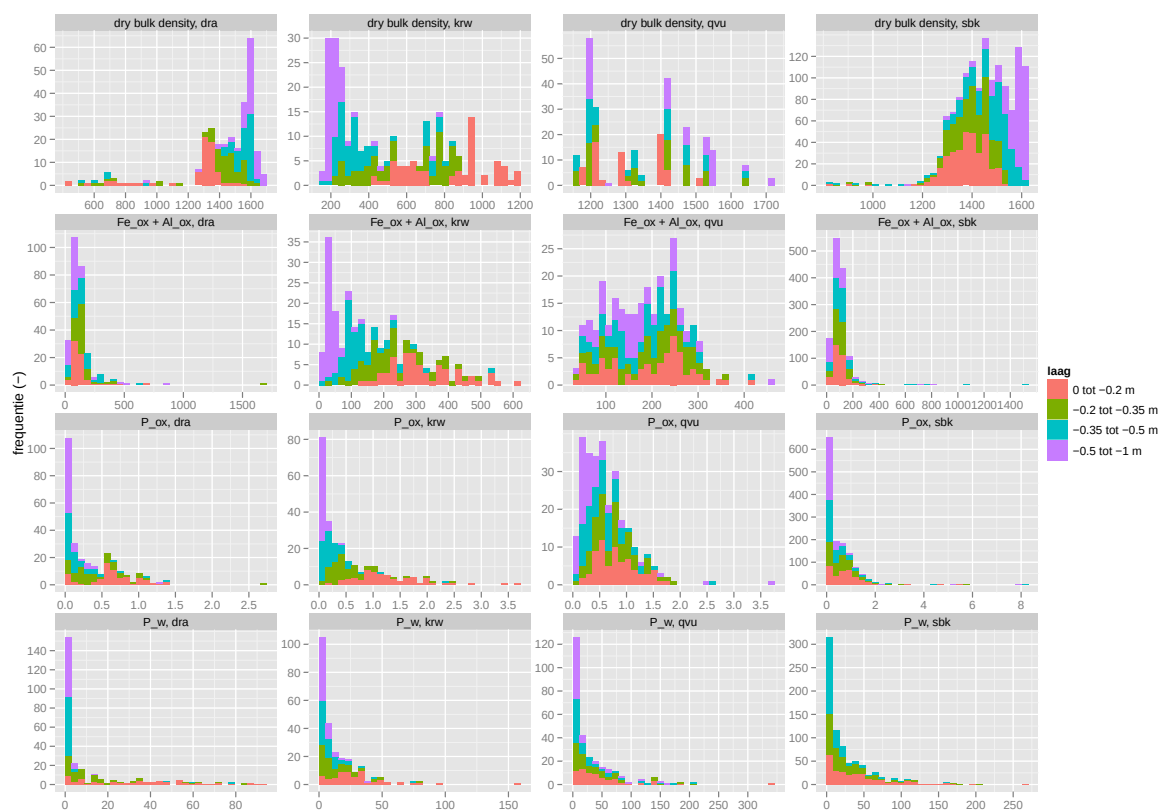


Figuur 3.3
Bellenkaartjes (geanonimiseerd) van P_{ox} , $Fe_{ox} + Al_{ox}$ en P_w voor vier bodemlagen in Quarles van Ufford.



Figuur 3.4

Bellenkaartjes (geanonimiseerd) van P_{ox} , $Fe_{ox}+Al_{ox}$ en P_w voor vier bodemlagen in de Schuitenbeek.

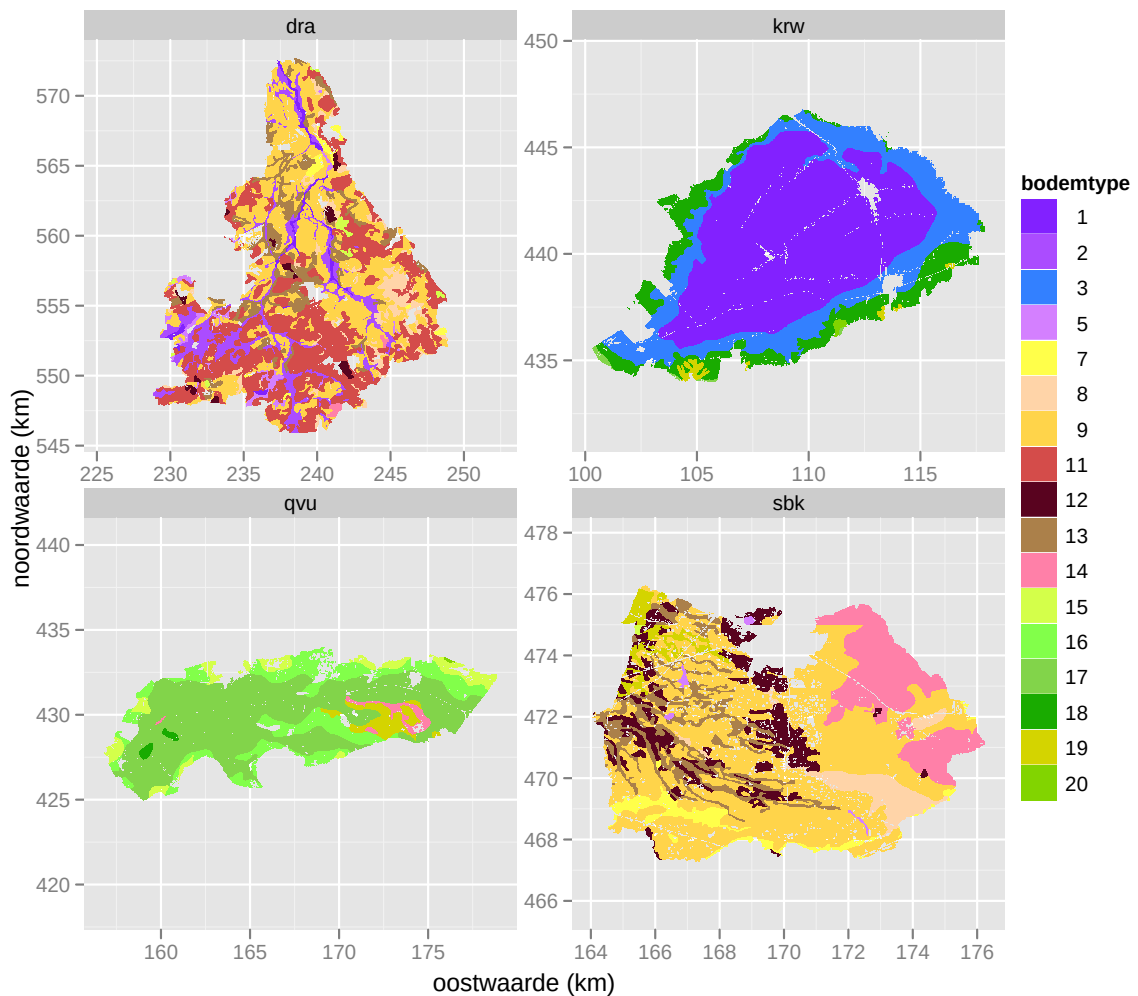


Figuur 3.5

Histogrammen van P_{ox} , $Fe_{ox}+Al_{ox}$, P_w , en ρ_d voor de vier stroomgebieden, opgesplitst per laag.

In figuur 3.5 zijn histogrammen van P_{ox} , $Fe_{ox}+Al_{ox}$, P_w , en ρ_d (rijen) voor de vier stroomgebieden (kolommen) gegeven. De meeste bodemeigenschappen hebben een asymmetrische (scheve) verdeling. Ter wille van de procedures in bijlage A zijn de bodemeigenschappen getransformeerd naar de standaard normale verdeling. Dit is gedaan met behulp van de 'normal score transform' (Deutsch & Journel (1992) en Goovaerts (1997, p.266-271)). Nadeel van deze transformatie (maar ook van andere niet-lineaire transformaties) is dat terugtransformatie kan leiden tot onzuivere schattingen. Om dit te beperken is gebruik gemaakt van de procedure in Saito & Goovaerts (2000).

De data zijn ook onderzocht op uitbijters (extreme waarden). Uitbijters kunnen duiden op meetfouten. Alleen bij de Krimpenerwaard is een zeer hoge P_w -meting verwijderd in de onderste bodemlaag die veel hoger is dan P_w in bovenliggende lagen. Dit is zeer waarschijnlijk een meetfout. Ook bij de Drentse Aa zijn enkele zeer hoge P_w -waarden gemeten. Omdat niet duidelijk is of dit ook meetfouten zijn, zijn deze metingen gehandhaafd.

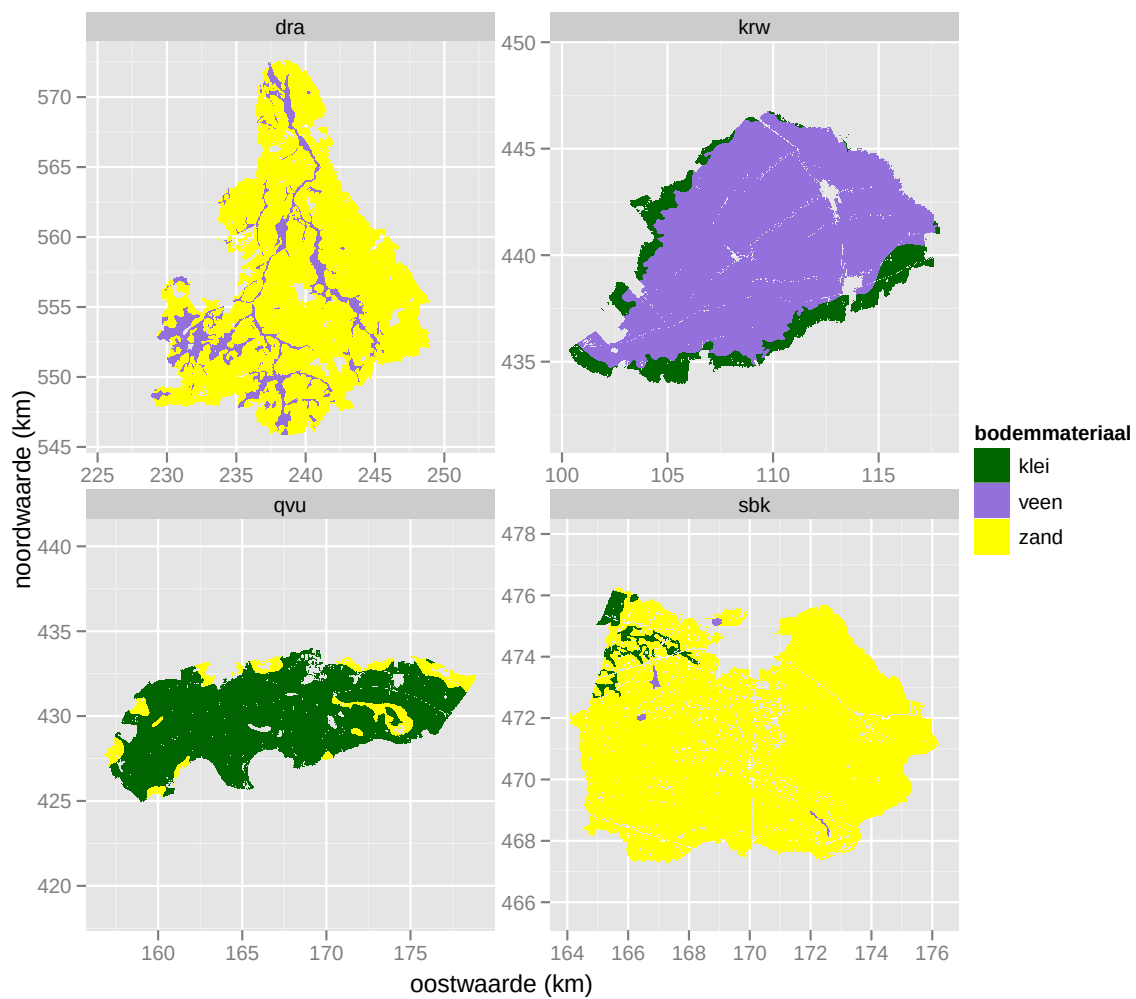


Figuur 3.6

Het bodemtype volgens de PAWN-indeling (Wösten et al., 1988) voor de vier stroomgebieden.

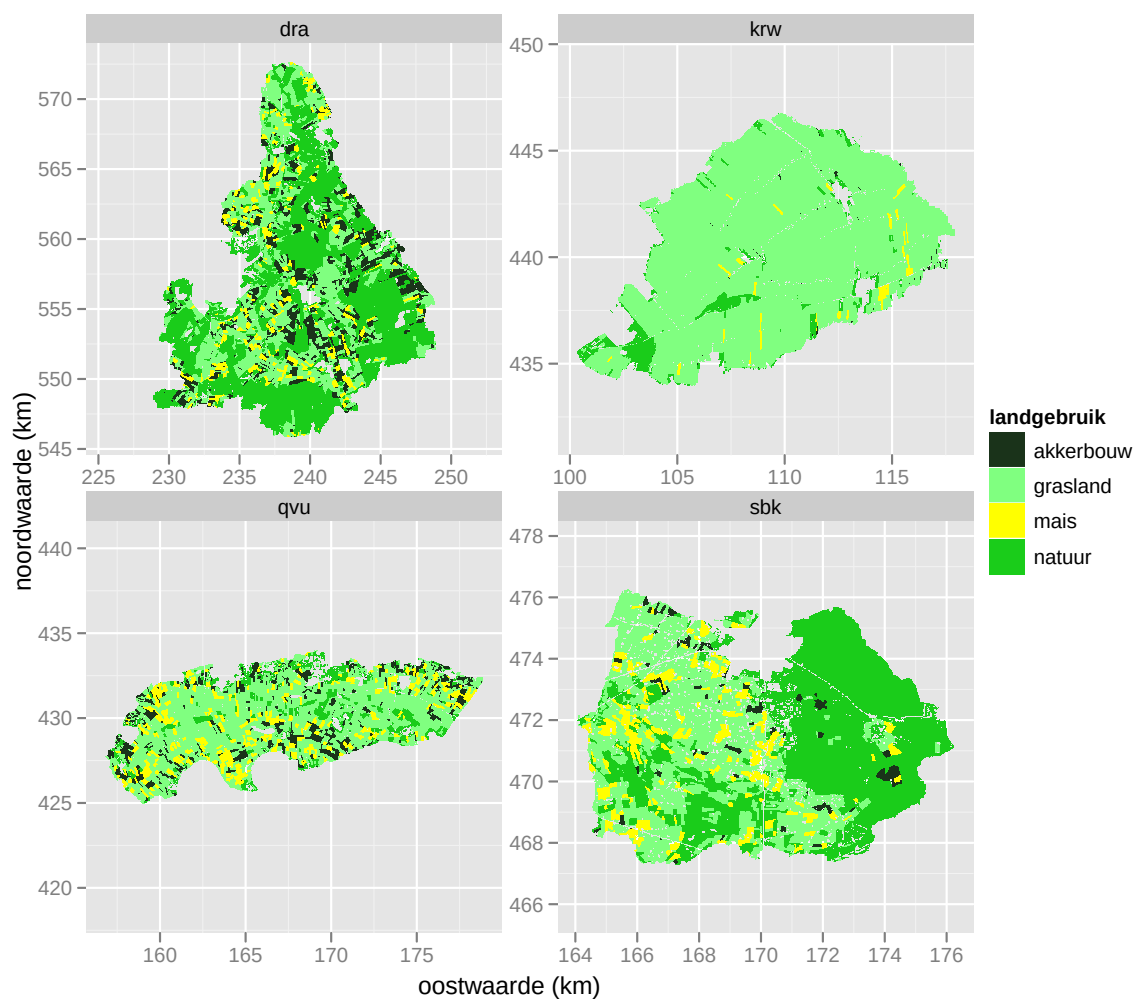
3.2 Ruimtelijke interpolatie

Universal kriging (bijlage A) maakt het mogelijk om bestaande informatielagen te gebruiken om de voorspellingen te verbeteren. In dit onderzoek is gebruik gemaakt van informatielagen die relevant zijn voor de fosfaattoestand van de bodem. Dit zijn de digitale bodemkaart volgens Wösten *et al.* (1988) (figuur 3.6), het landgebruik geclusterd op basis van LGN5 (Hazeu, 2005) (figuur 3.8) en de gemiddelde hoogste grondwaterstand volgens van der Gaast *et al.* (2006) (GHG, figuur 3.9). Tevens is geïnterpoleerd *zonder* gebruik te maken van bestaande informatielagen. Zie Jansen *et al.* (2006), Kroes *et al.* (2006), Roelsma *et al.* (2006a) en Roelsma *et al.* (2006b) voor een beschrijving van deze informatielagen.



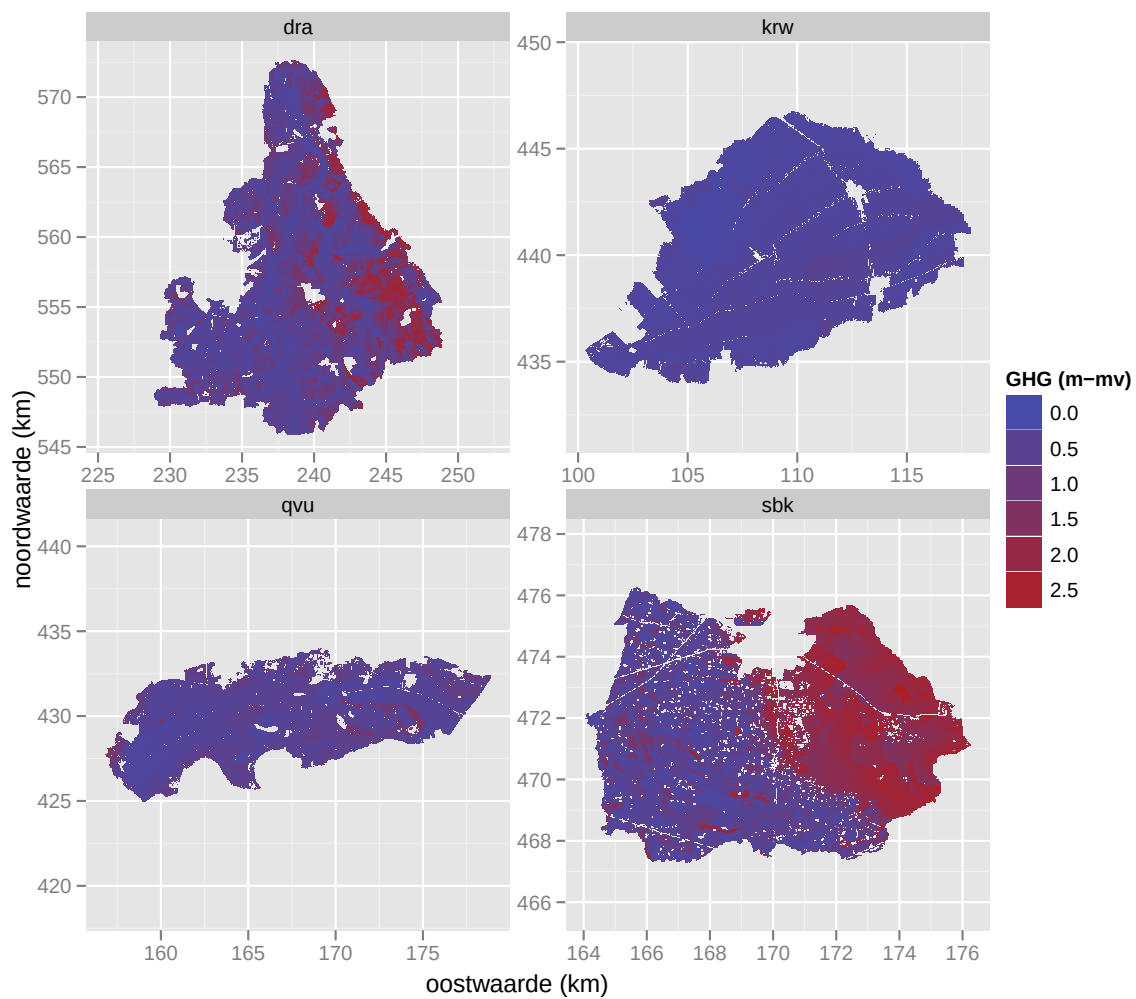
Figuur 3.7

De grondsoort afgeleid van de PAWN-indeling (Wösten et al., 1988) voor de vier stroomgebieden.

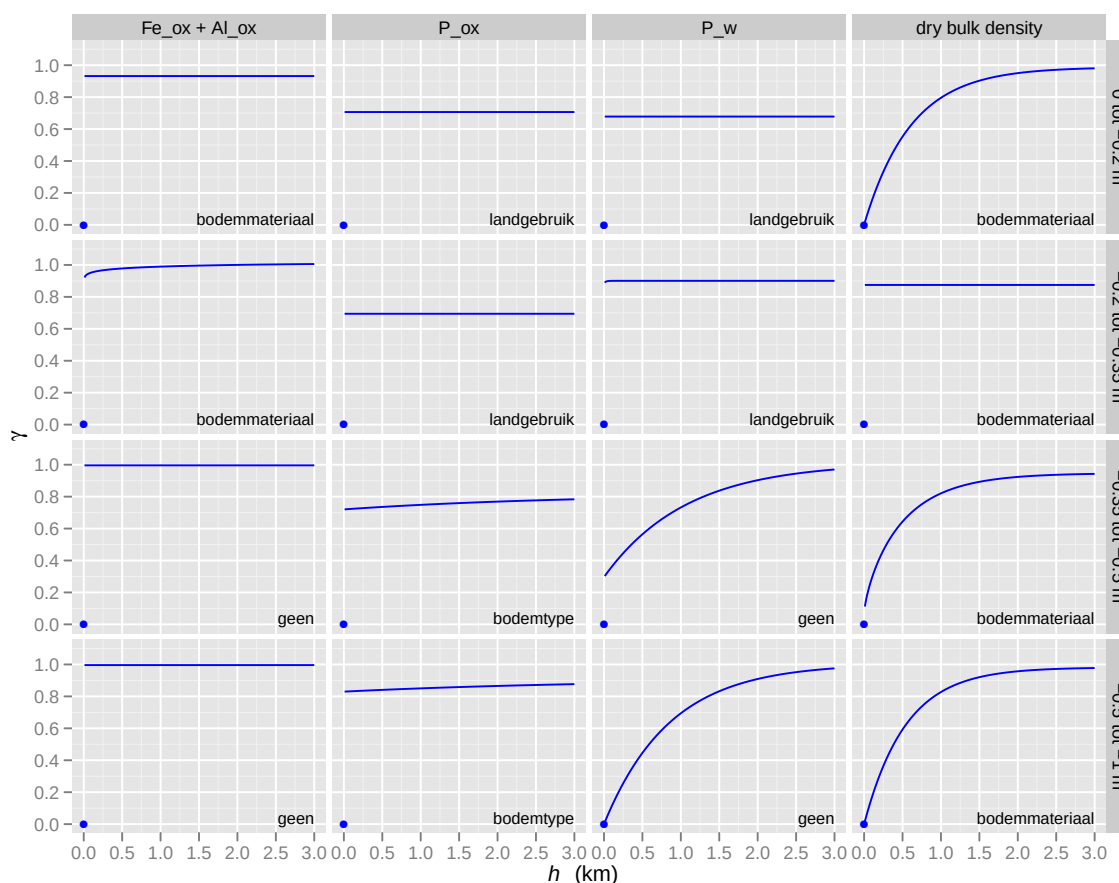


Figuur 3.8

Het landgebruik geclusterd op basis van LGN5 (Hazeu, 2005) voor de vier stroomgebieden.



Figuur 3.9
De GHG volgens van der Gaast et al. (2006) voor de vier stroomgebieden.

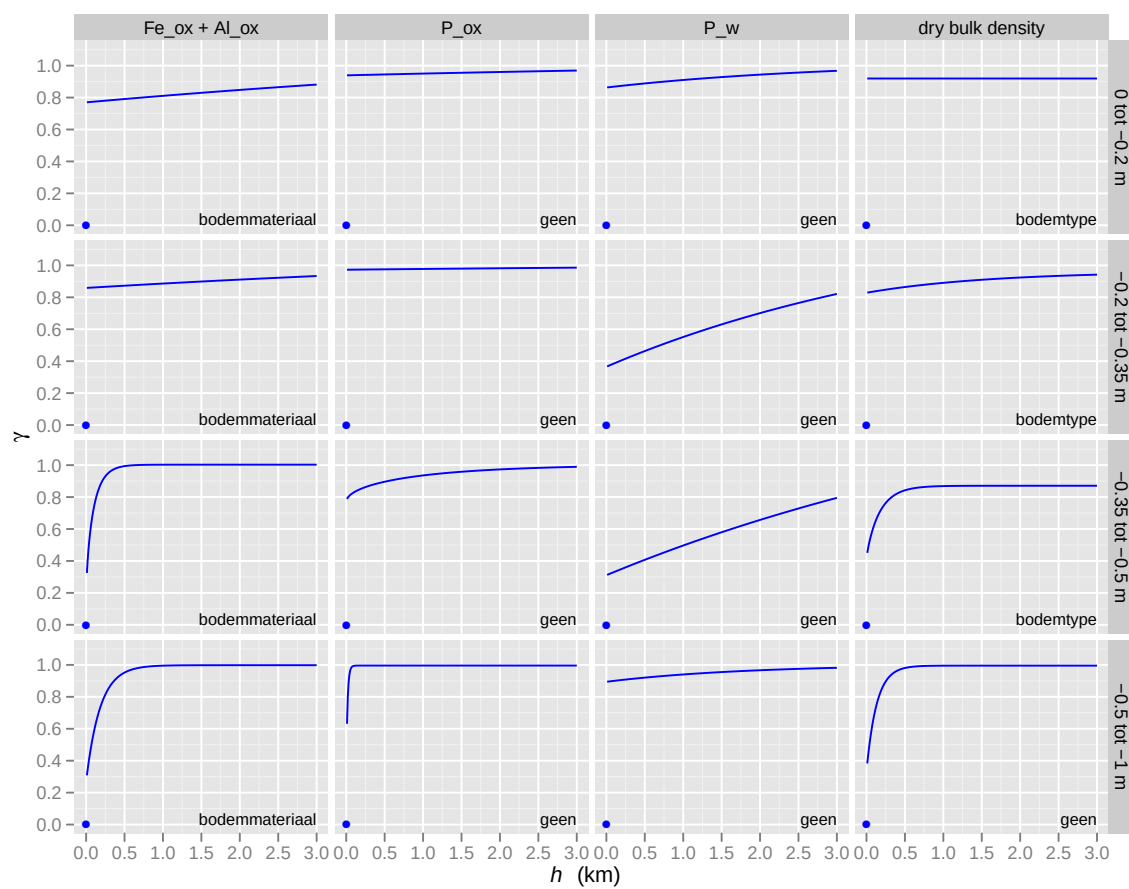


Figuur 3.10

Semivariogrammen voor de Drentse Aa voor verschillende bodemeigenschappen en bodemlagen. Rechtsonder staat telkens aangegeven welke hulpinformatie is gebruikt.

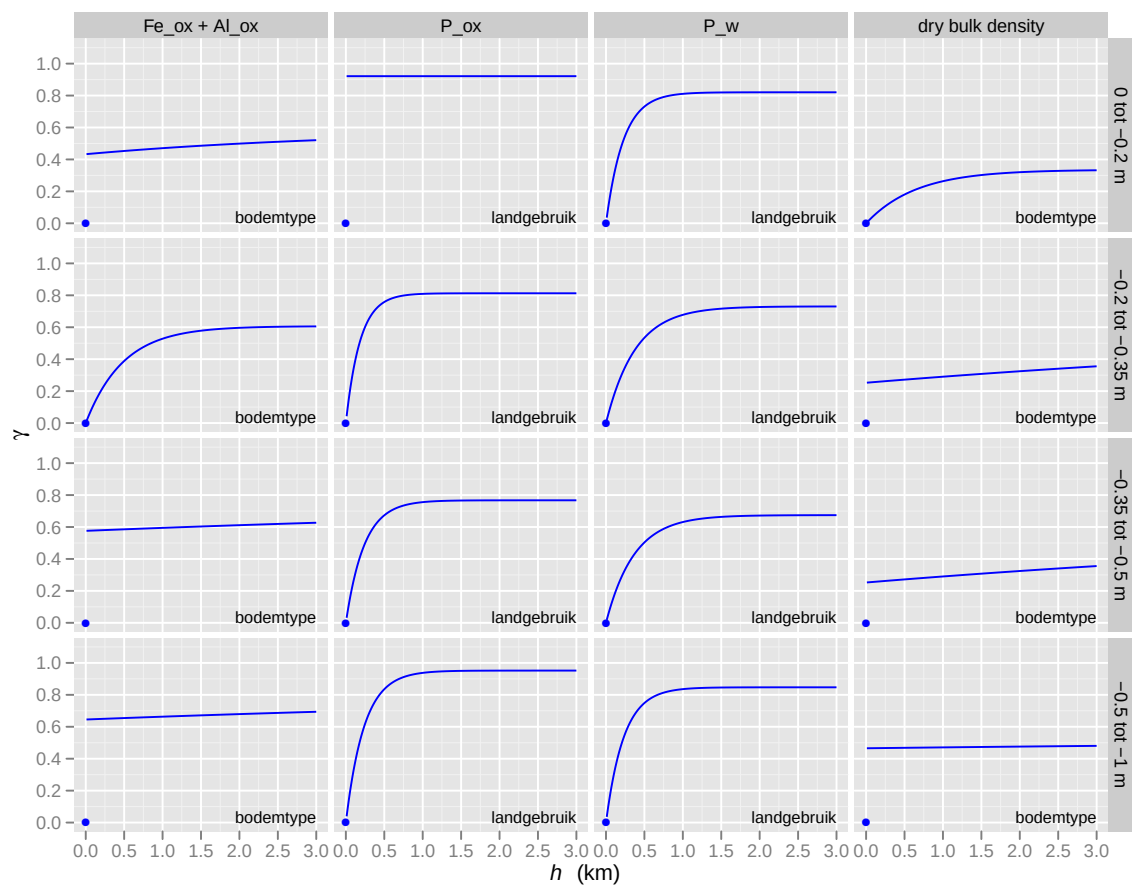
De ruimtelijke structuur is gemodelleerd met het Whittle-Matérn semivariogram (bijv. Minasny & McBratney, 2005) en gefit met *residual maximum likelihood* (REML, zie bijlage B). Dat is gedaan voor P_{ox} , P_w , $Fe_{ox}+Al_{ox}$, en ρ_d , voor elke bodemlaag (0 tot -0.20 m, -0.20 tot -0.35 m, -0.35 tot -0.50 m, en -0.50 tot 1.00 m), en voor alle relevante hulpinformatie (bodemtype, grondsoort, landgebruik, en GHG). Op basis van n -voudige kruisvalidatie (paragraaf 2.6) is vervolgens voor elke bodemeigenschap en bodemlaag het semivariogram geselecteerd dat tot de meest nauwkeurige kaart leidt en bovendien het ruimtelijke patroon zo goed mogelijk reproduceert. De geselecteerde semivariogrammen zijn weergegeven in figuur 3.10, 3.11, 3.12, en 3.13.

Door het geringe aantal bemonsterde locaties in de Drentse Aa, de Krimpenerwaard en Quarles van Ufford is de korte-afstandsvariatie lastig te modelleren. Veel semivariogrammen vertonen daardoor ook een hoge *nugget:sill* ratio. Voor $Fe_{ox}+Al_{ox}$ blijkt het bodemtype of -materiaal verklarend te zijn. Voor P_{ox} en P_w is het landgebruik een belangrijke verklarende factor, behalve bij de Krimpenerwaard waar weinig structuur in P_{ox} is waar te nemen. Voor ρ_d is wederom de bodemgesteldheid een belangrijke verklarende factor.



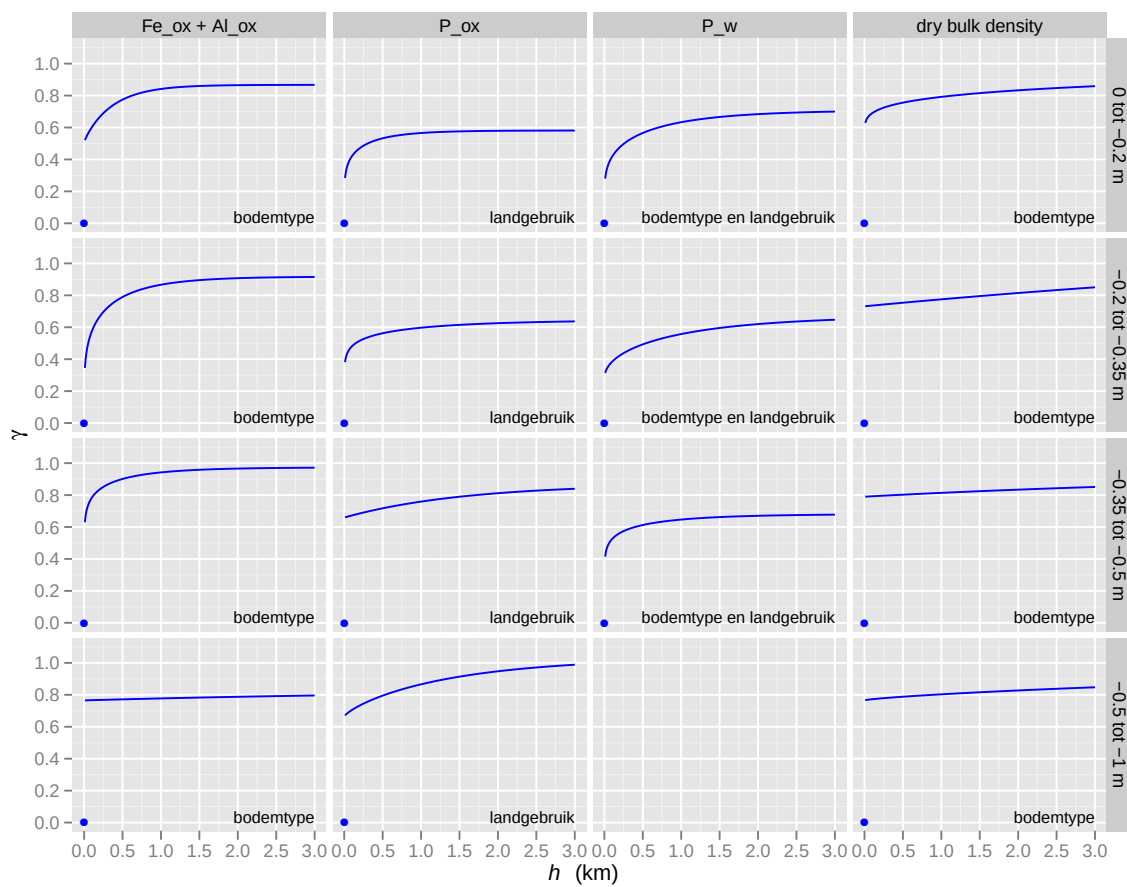
Figuur 3.11

Semivariogrammen voor de Krimpenerwaard voor verschillende bodemeigenschappen en bodemlagen. Rechtsonder staat telkens aangegeven welke hulpinformatie is gebruikt.



Figuur 3.12

Semivariogrammen voor Quarles van Ufford voor verschillende bodemeigenschappen en bodemlagen. Rechtsonder staat telkens aangegeven welke hulpinformatie is gebruikt.

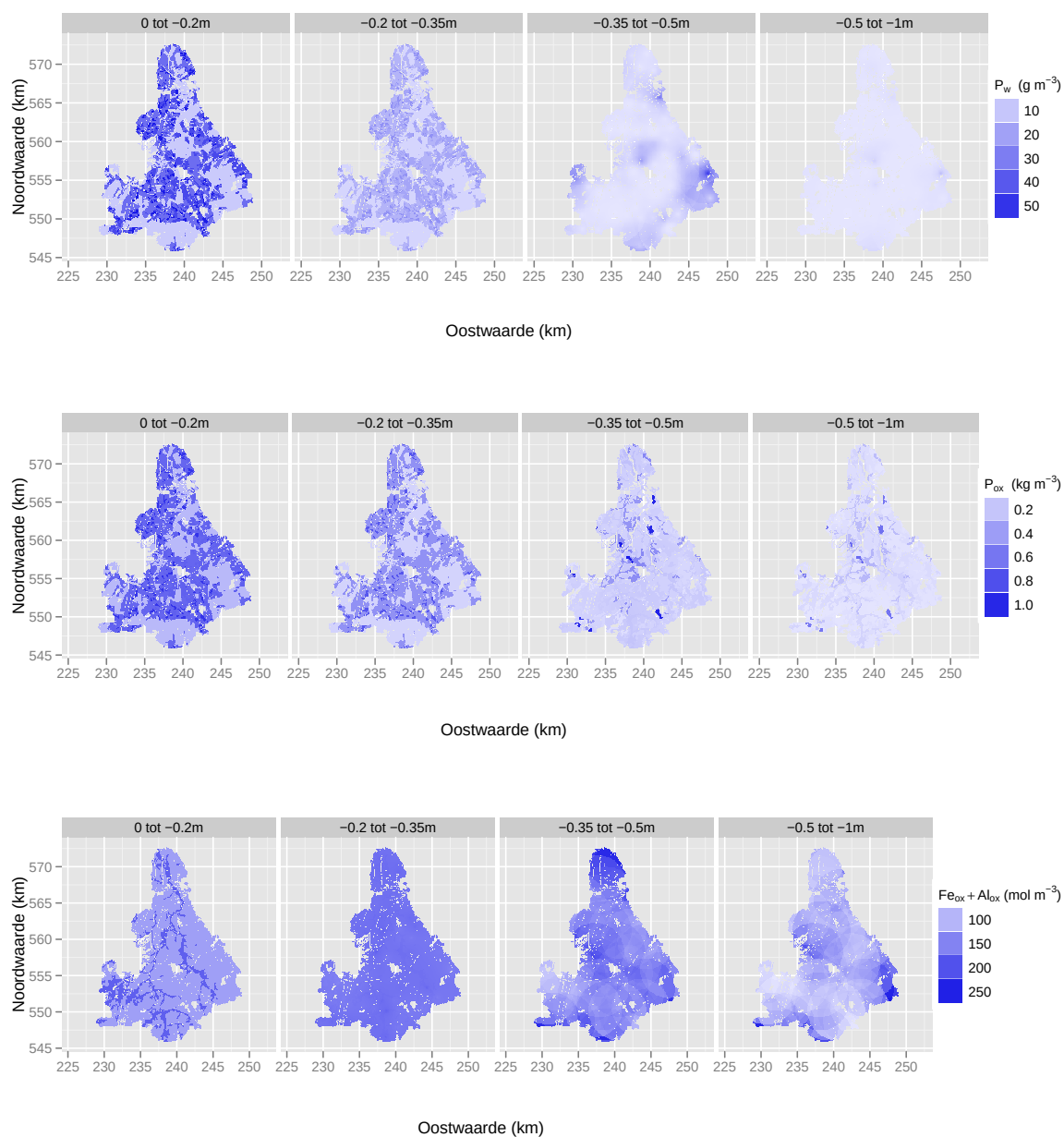


Figuur 3.13

Semivariogrammen voor de Schuivenbeek voor verschillende bodemeigenschappen en bodemlagen. Rechts- onder staat telkens aangegeven welke hulpinformatie is gebruikt.

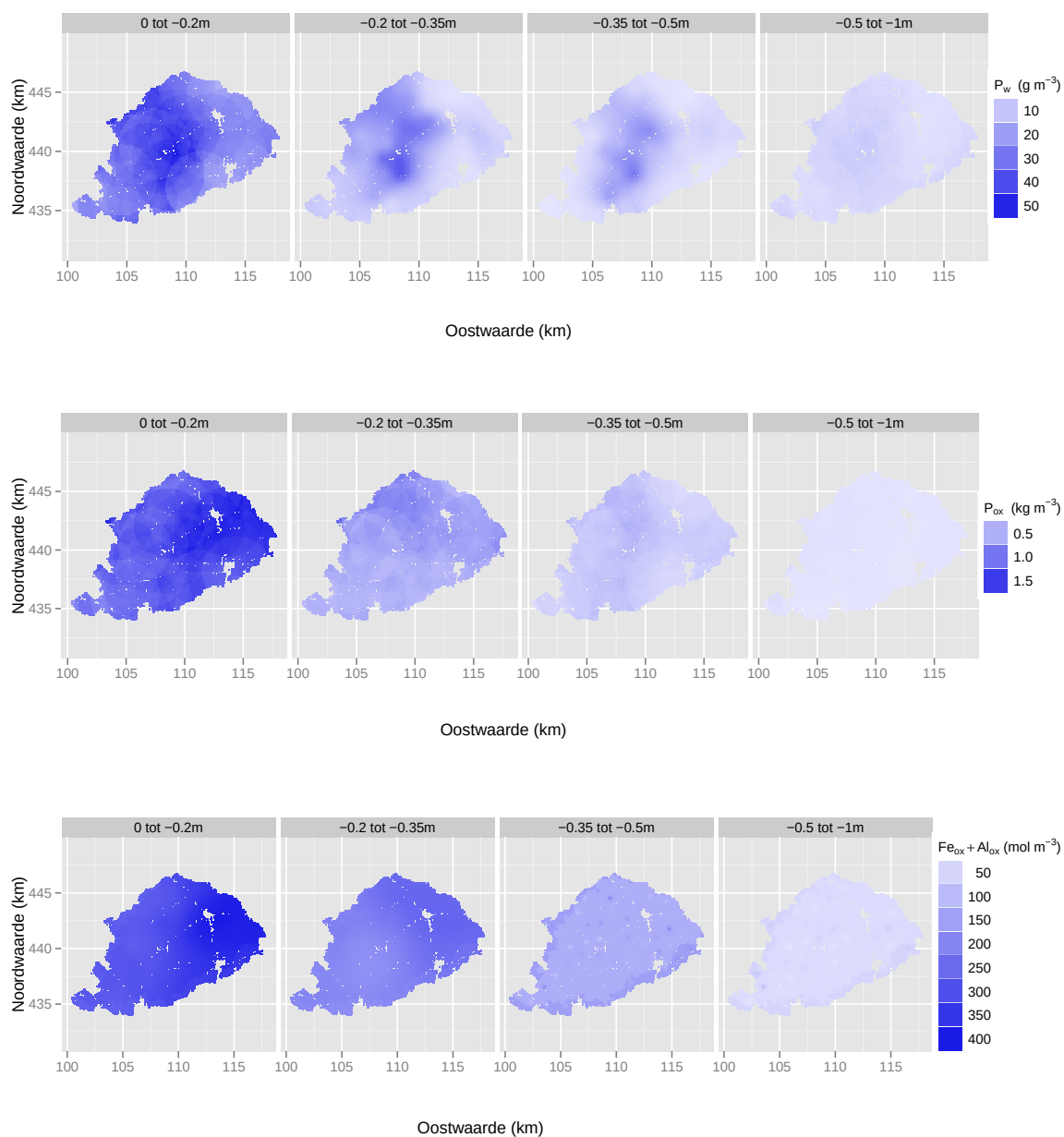
Op basis van de semivariogrammen, de meetgegevens, en de beschikbare hulpinformatie is vervolgens voor elke bodemeigenschap een kaart voor elke bodemlaag vervaardigd met behulp van universal kriging. De resultaten zijn gegeven in figuur 3.14, 3.15, 3.16, en 3.17. De patronen zijn vergelijkbaar met die van de bellenplots van figuur 3.1 tot en met 3.4. Een belangrijk verschil is dat door ruimtelijke interpolatie op alle locaties en dieptes tot 1 m beneden maaiveld nu een waarde beschikbaar is. De resultaten geven als het ware een driedimensionaal beeld van de fosfaattoestand te zien (figuur 3.18, 3.19, 3.20, en 3.21). De resultaten zijn geschikt om huidige en toekomstige schematisaties van het landsysteem te voeden.

De fosfaattoestand voor Quarles van Ufford is reeds gebruikt voor het verbeteren van het landsysteem van het fase 3 model (Siderius *et al.*, 2008). Volgens Siderius *et al.* (2008) hadden deze gebiedspecifieke data een verbetering van de uitspoeling van fosfaat naar het oppervlaktewatersysteem tot gevolg. Ook voor de andere stroomgebieden leidde dit tot een verbetering van de voorspelde uitspoeling (Van Tol-Leenders *et al.*, in prep., 'Eindrapportage Monitoring Stroomgebieden').



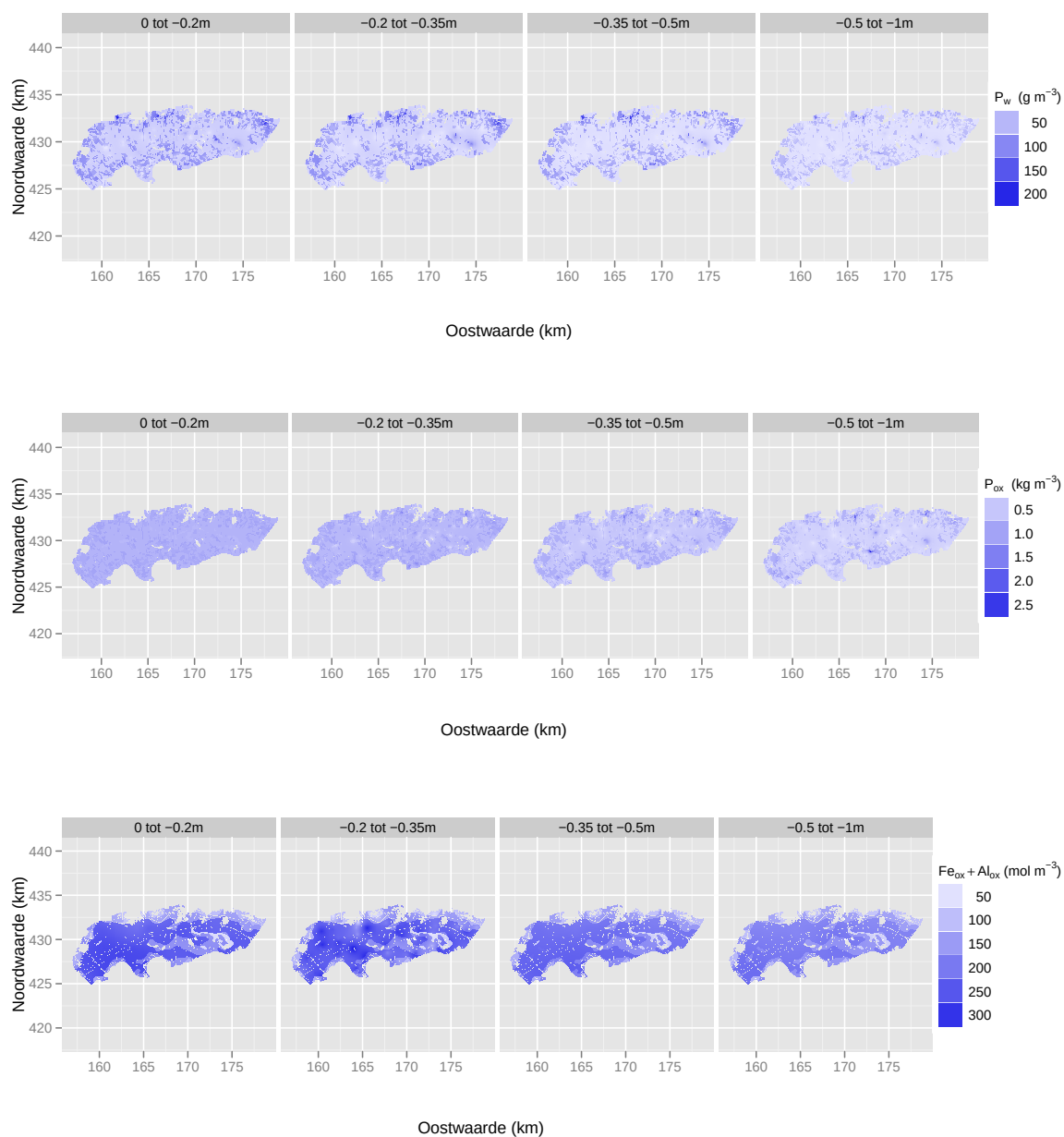
Figuur 3.14

Kaart van het geïnterpoleerde P_{ox} , P_w en $Fe_{ox} + Al_{ox}$ voor 4 dieptes voor de Drentse Aa.



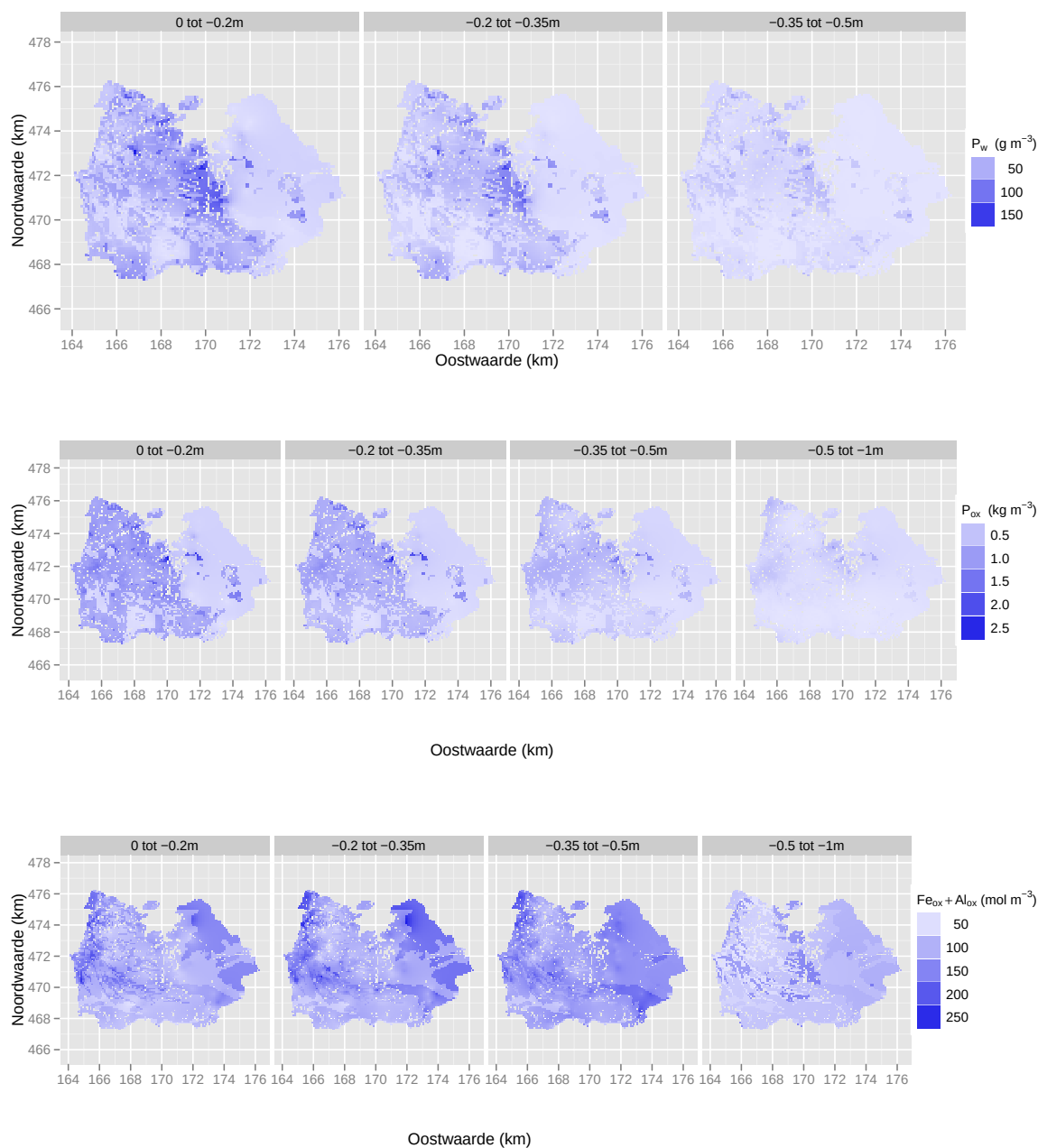
Figuur 3.15

Kaart van het geïnterpoleerde P_{ox} , P_w en $Fe_{ox} + Al_{ox}$ voor 4 dieptes voor de Krimpenerwaard.



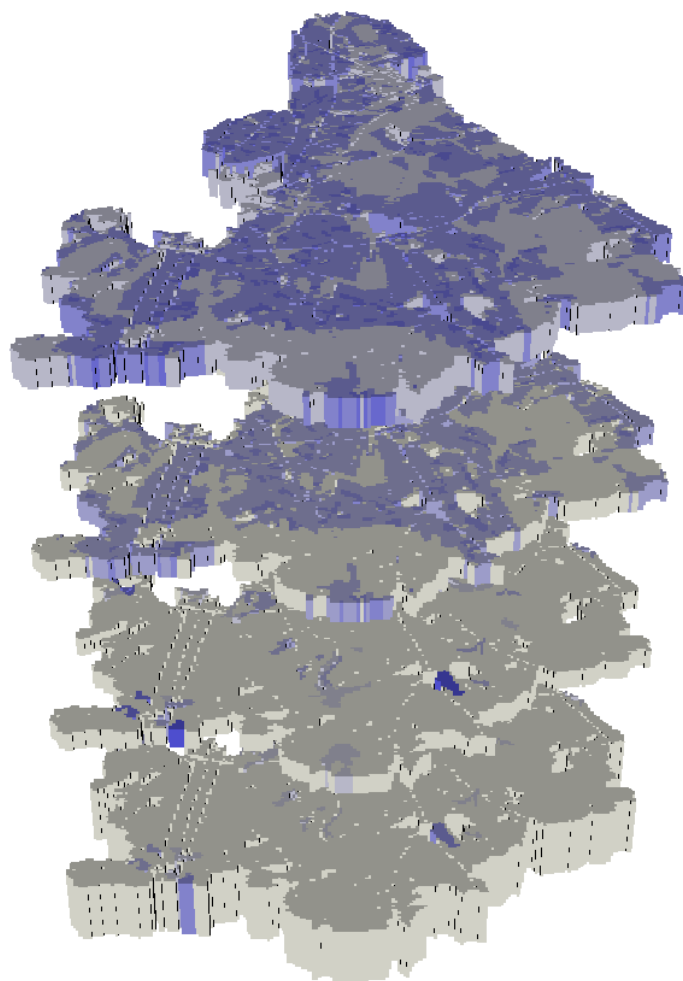
Figuur 3.16

Kaart van het geïnterpoleerde P_{ox} , P_w en $Fe_{ox} + Al_{ox}$ voor 4 dieptes voor Quarles van Ufford.

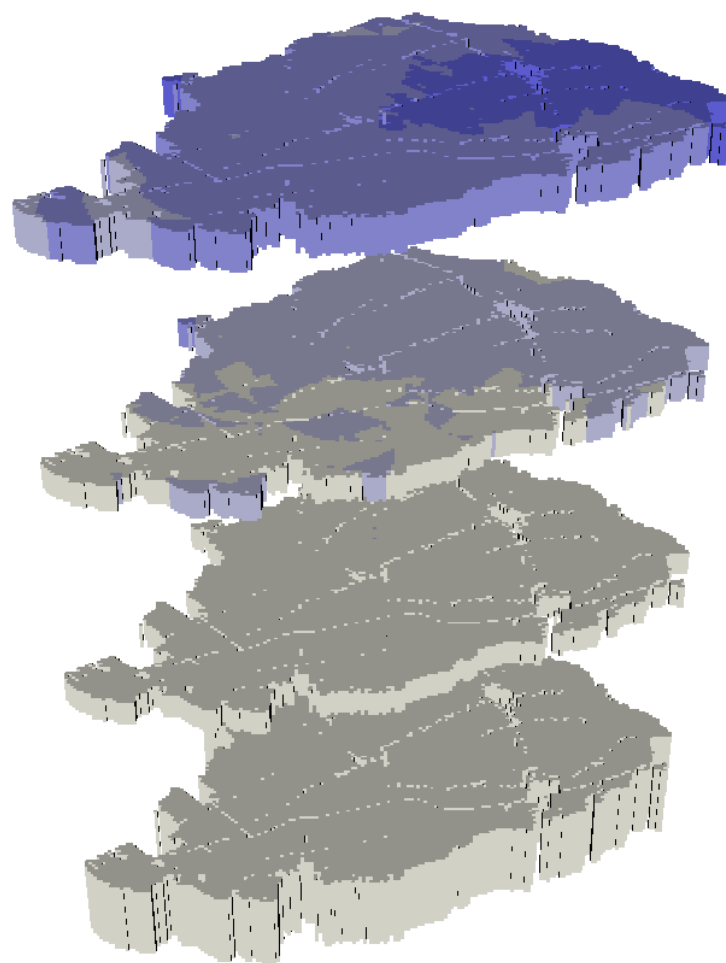


Figuur 3.17

Kaart van het geïnterpoleerde P_{ox} , P_w en $Fe_{ox} + Al_{ox}$ voor 4 dieptes voor de Schuitemeek.

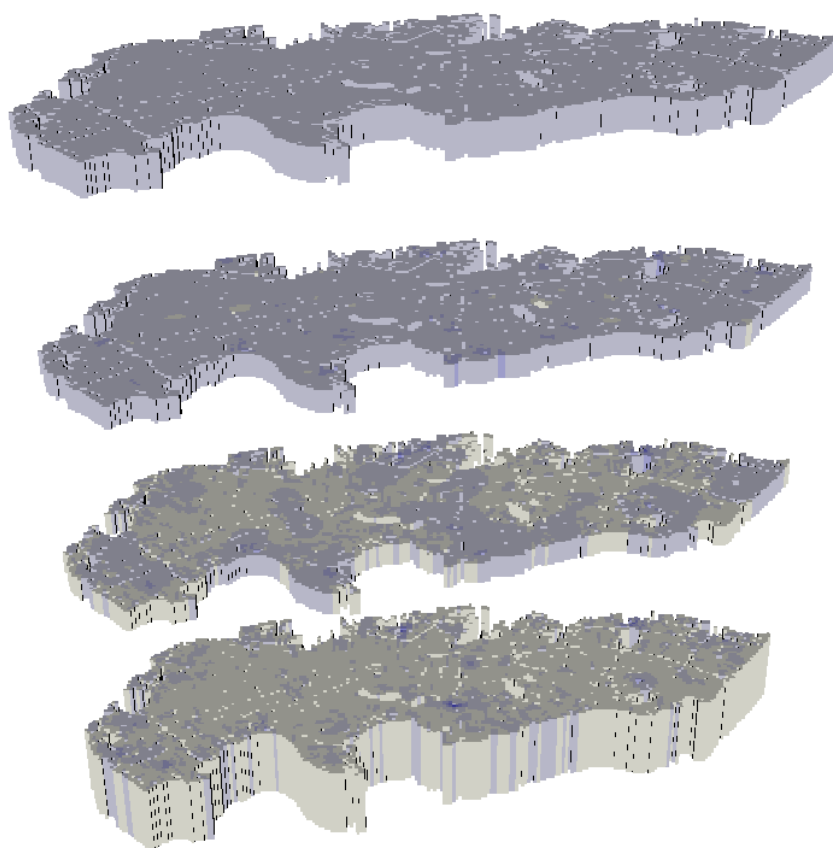


Figuur 3.18
Driedimensionaal beeld van P_{ox} (kg/m^3) voor de Drentse Aa.

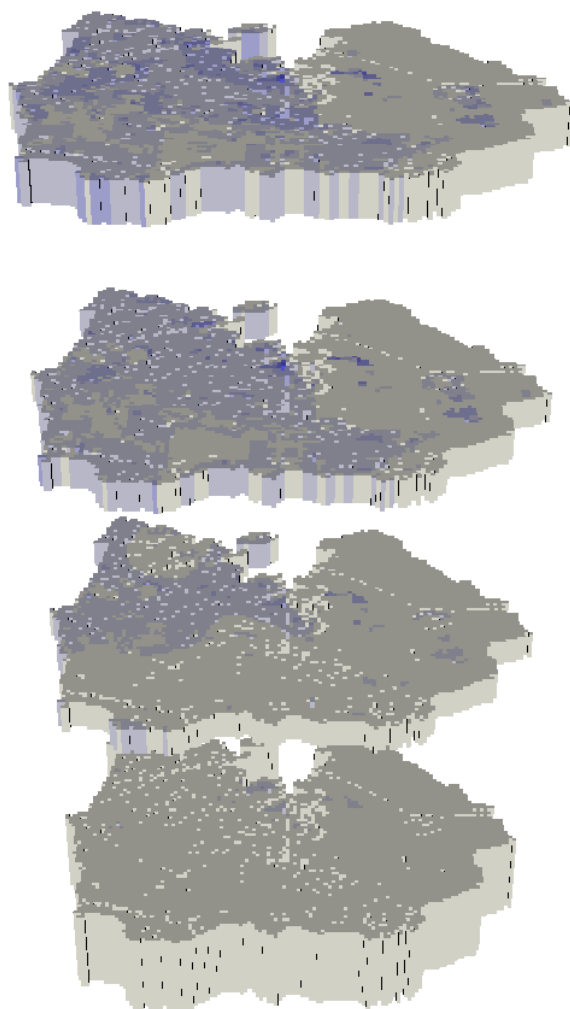


Figuur 3.19

Driedimensionaal beeld van P_{ox} (kg/m^3) voor de Krimpenerwaard.



Figuur 3.20
Driedimensionaal beeld van P_{ox} (kg/m³) voor Quarles van Ufford.



Figuur 3.21

Driedimensionaal beeld van P_{ox} (kg/m^3) voor de Schuitembeek.

4 Conclusies

In dit rapport is een methode gepresenteerd voor het verzamelen en statistisch verwerken van fosfaatgerelateerde gegevens met als doel het maken van een drie-dimensionaal beeld van de fosfaattoestand. De voorspellingen konden worden verbeterd door gebruik te maken van beschikbare vlakdekkende hulpinformatie zoals de bodemkaart. Doordat op elke gewenste locatie in een gebied de fosfaattoestand kan worden berekend, kunnen de resultaten worden gebruikt om de modelsystemen van het project 'Monitoring Stroomgebieden' te parameteriseren. Dit heeft voor alle stroomgebieden tot een verbetering van de modellering van de fosfaat af- en uitspoeling naar grond- en oppervlaktewater geleid.

5 Aanbevelingen

1. Voor dit project konden slechts 70 locaties per gebied worden bemonsterd. Daardoor liggen de punten relatief ver uit elkaar. Indien meer locaties mogen worden bemonsterd wordt aanbevolen om ook locaties te selecteren die op kortere afstand van elkaar liggen. Hierdoor kan de korteaafstandsvariatie beter worden gemodelleerd (bijlage B) waardoor de predicties verbeteren.
2. De interpolatiemethode die in dit rapport is toegepast resulteert niet alleen in een kaart, maar kwantificeert tevens de betrouwbaarheid daarvan. Informatie over de betrouwbaarheid kan worden gebruikt om te bepalen waar aanvullend moet worden gemeten om de kaart te verbeteren. Daarnaast is informatie over de betrouwbaarheid van wezenlijk belang voor onzekerheidsanalyse van de procesmodellen die de kaarten van de fosfaattoestand als invoer gebruiken. De invoer van de procesmodellen moet dan worden berekend met geostatistische simulatie (Deutsch & Journel, 1992; Goovaerts, 1997). Hierbij wordt uit de kansverdeling van alle mogelijke kaarten getrokken.
3. In dit rapport zijn de vier bodemlagen afzonderlijk geïnterpoleerd (2D-interpolatie, 'pseudo-3D'-interpolatie). De bodemlagen kunnen ook in relatie tot elkaar worden geïnterpoleerd (3D-interpolatie). Dit leidt mogelijk tot betere predicties.

6 Dankbetuiging

Maarten van der Werff (Centrum Bodem - Alterra) willen we bedanken voor het uitvoeren van het veldwerk in de Drentse Aa en de Krimpenerwaard. Ariënne Oortwijn, Jan Roelsma en Christian Siderius (allen Centrum voor Water & Klimaat - Alterra) willen we bedanken voor het kritisch doorlezen van een eerdere versie van het rapport.

Literatuur

- Abramowitz, M., & Stegun, I. A. 1972. *Handbook of Mathematical Functions. With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. 10 edn. Applied Mathematics Series 55. Washington, D. C.: National Bureau of Standards.
- Breeuwsma, A, Reijerink, J G A, Schoumans, O F, Brus, D J, & Loo, H van het. 1989. *Fosfaatbelasting van bodem, grond- en oppervlaktewater in het stroomgebied van de Schuitenbeek*. Tech. rept. 10. DLO Winand Staring Centre for Integrated Land, Soil and Water Research, Wageningen.
- Brus, D. J., & Heuvelink, G. B. M. 2007. Optimization of sample patterns for universal kriging of environmental variables. *Geoderma*, **138**(138), 86–95.
- Brus, D. J., Spätjens, L. E. E. M., & de Gruijter, J. J. 1999. A sampling scheme for estimating the mean extractable phosphorus concentration of fields for environmental regulation. *Geoderma*, **89**, 129–148.
- Brus, D. J., de Gruijter, J. J., & van Groenigen, J. W. 2007. *Digital Soil Mapping. An introductory perspective*. Amsterdam: Elsevier. Chap. 14: Designing spatial coverage samples using the *k*-means clustering algorithm, pages 183–192.
- Cochran, W. G. 1977. *Sampling Techniques*. third edn. New York: John Wiley & Sons.
- Davis, J. C. 1986. *Statistics and data analysis in geology*. second edn. New York: John Wiley & sons.
- Deutsch, C. V., & Journel, A. G. 1992. *GSLIB: Geostatistical software library and user's guide*. New York: Oxford University Press.
- Efron, B., & Gong, G. 1983. A Leisurely Look at the Bootstrap, the Jackknife, and Cross-Validation. *The American Statistician*, **37**(1), 36–48.
- Goovaerts, P. 1997. *Geostatistics for Natural Resources Evaluation*. New York: Oxford University Press.
- Hartigan, J. A. 1975. *Clustering Algorithms*. New York: Wiley.
- Hazeu, G. W. 2005. *Landelijk Grondgebruiksbestand Nederland (LGN5); Vervaardiging, nauwkeurigheid en gebruik*. Alterrapport 1213. Alterra, Wageningen.
- Hoekstra, C. en Poelman, J. N. B. 1982. *Dichtheid van gronden gemeten aan de meest voorkomende bodemeenheden in Nederland*. Tech. rept. 1582. Stiboka, Wageningen.
- Isaaks, E. H., & Srivastava, R. M. 1989. *An introduction to applied geostatistics*. New York: Oxford University Press.
- Jansen, H. C., Renaud, L. V., Leenders, T. P., & van der Bolt, F. J. E. 2006. *Systeemanalyse voor het stroomgebied van de Schuitenbeek Fase 1*. Tech. rept. 1272. Alterra, Wageningen.
- Jansen, H. C., Löschner-Wolleswinkel, R. J., Sicco Smit, M. E., van der Bolt, F. J. E., Roelsma, J., Schoumans, O. F., Siderius, C., & van Tol-Leenders, T. P. 2009. *Systeemanalyse voor het stroomgebied van de Schuitenbeek Fase 3*. Tech. rept. 1765. Alterra.
- Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D., & Vecchi, M. P. 1983. Optimization by simulated annealing. *Science*, **220**(4598), 671–680.
- Kroes, J. G., Van der Bolt, F. J. E., Leenders, T. P., & Renaud, L. V. 2006. *Systeemanalyse voor het stroomgebied van de Krimpenerwaard. Fase 1*. Tech. rept. 1273. Alterra, Wageningen.
- Kroes, J. G., Schaap, J. D., van der Bolt, F. J. E., Löschner-Wolleswinkel, R. J., Roelsma, J., Schoumans, O. F., Siderius, C., & van Tol-Leenders, T. P. 2008. *Systeemanalyse voor het stroomgebied van de Krimpenerwaard Fase 3*. Tech. rept. 1766. Alterra, Wageningen.
- Lark, R. M., & Cullis, B. R. 2004. Model-based analysis using REML for inference from systematically sampled data on soil. *European Journal of Soil Science*, **55**(December), 799–813.

- Lark, R. M., Cullis, B. R., & Welham, S. J. 2006. On spatial prediction of soil properties in the presence of a spatial trend: the empirical best linear unbiased predictor (E-BLUP) with REML. *European Journal of Soil Science*, **57**, 787–799.
- Matheron, G. 1969. *Le Krigeage Universel (recherche d'estimateurs optimaux en présence d'une dérive)*. Les Cahiers du Centre de Morphologie Mathématique de Fontainebleau Fascicule 1. l' Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Fontainebleau, France.
- Matheron, G. 1970. *Le Krigeage Universel. Recherche d'estimateurs optimaux en présence d'une dérive*. Tech. rept. Centre de Perfectionnement Technique (C. P. T.). Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- McBratney, A. B., & Webster, R. 1981. The design of optimal sampling schemes for local estimation and mapping of regionalized variables–II. Program and examples. *Computers & Geosciences*, **7**(4), 335–365.
- McBratney, A. B., Webster, R., & Burgess, T. M. 1981. The design of optimal sampling schemes for local estimation and mapping of regionalized variables–I. *Computers & Geosciences*, **7**(4), 331–334.
- Minasny, B., & McBratney, A. B. 2005. The Matérn function as a general model for soil variograms. *Geoderma*, **128**, 192–207.
- Pardo-Iguzquiza, E., & Chica-Olmo, M. 2008. Geostatistics with the Matern semivariogram model: A library of computer programs for inference, kriging and simulation. *Computers & Geosciences*, **34**, 1073–1079.
- Roelsma, J., van der Bolt, F. J. E., Leenders, T. P., & Renaud, L. V. 2006a. *Systeemanalyse voor het bemalingsgebied Quarles van Ufford Fase 1*. Tech. rept. 1274. Alterra, Wageningen.
- Roelsma, J., van der Bolt, F. J. E., Leenders, T. P., & Renaud, L. V. 2006b. *Systeemanalyse voor het stroomgebied van de Drentse Aa Fase 1*. Reeks Monitoring Stroomgebieden 5-I 1271. Alterra, Wageningen.
- Roelsma, J., van Tol-Leenders, T. P., van der Bolt, F. J. E., Löschner-Wolleswinkel, R. J., Renaud, L. V., Schaap, J. D., Schoumans, O. F., Siderius, C., van der Heide, H., & van der Molen, K. 2008. *Systeemanalyse voor het stroomgebied van de Drentse Aa Fase 3*. Tech. rept. 1764. Alterra, Wageningen.
- Saito, H., & Goovaerts, P. 2000. Geostatistical Interpolation of Positively Skewed and Censored Data in a Dioxin-Contaminated Site. *Environmental Science & Technology*, **34**(19), 4228–4235.
- Siderius, C., Wolleswinkel, R. J., van der Bolt, F. J. E., Roelsma, J., Schoumans, O. F., van Tol-Leenders, T. P., & de Ruiter, H. 2008. *Systeemanalyse voor het stroomgebied Quarles van Ufford Fase 3*. Tech. rept. 1767. Alterra, Wageningen.
- Storn, R., & Price, K. 1997. Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces. *Journal of Global Optimization*, **11**, 341–359.
- van der Gaast, J. W. J., Massop, H. Th. L., Vroon, H. R. J., & Staritsky, I. G. 2006. *Hydrologie op basis van karteerbare kenmerken*. Tech. rept. 1339. Alterra, Wageningen.
- van Groenigen, J. W., & Stein, A. 1998. Constrained optimisation of spatial sampling using continuous simulated annealing. *Journal of Environmental Quality*, **27**, 1078–1086.
- van Groenigen, J. W., Pieters, G., & Stein, A. 2000. Optimizing spatial sampling for multivariate contamination in urban areas. *Environmetrics*, **11**, 227–244.
- van Wallenburg, C. 1988. *De bodemdichtheid van koopveen-, weideveen- en waardveengronden in relatie met bodemkenmerken*. Tech. rept. 2040. Stiboka, Wageningen.
- Walvoort, D., Brus, D., & de Gruijter, J. 2009a. Spatial Coverage Sampling on Various Spatial Scales. *Pedometron*, **26**, 20–22.
- Walvoort, D. J. J. 2004 (version 0.2). *E{Z}-kriging: Exploring the world of ordinary kriging*. Wageningen University & Research Center, Wageningen, The Netherlands. Software and manual are available at the AI.GEOSTATS website: <https://wiki.52north.org/bin/view/AI.GEOSTATS/SWEZKriging>.

- Walvoort, D. J. J., Brus, D. J., & de Gruijter, J. J. 2009b. *Spatial Coverage Sampling and Random Sampling from Compact Geographical Strata*. Alterra, Wageningen University & Research Center. R package version 0.2-0.
- Walvoort, D. J. J., Brus, D. J., & de Gruijter, J. J. 2010a. An R package for spatial coverage sampling and random sampling from compact geographical strata by k-means. *Computers & Geosciences*, **36**, 1261–1267.
- Walvoort, D. J. J., Roelsma, J., & van Tol-Leenders, T. P. 2010b. *Validatie van modelsystemen voor het voorspellen van de oppervlaktewaterkwaliteit en -kwantiteit in het stroomgebied 'de Drentse Aa' : fases 1, 2 en 3*. Tech. rept. 1951. Alterra Wageningen University & Research Center, Wageningen.
- Walvoort, D. J. J., Bogaart, P. W., Kroes, J. G., & van Tol-Leenders, T. P. 2010c. *Validatie van modelsystemen voor het voorspellen van de oppervlaktewaterkwaliteit en -kwantiteit in het stroomgebied 'de Krimpenerwaard' : fases 1, 2 en 3*. Tech. rept. 1953. Alterra Wageningen University & Research Center, Wageningen.
- Walvoort, D. J. J., Roelsma, J., Löschner-Wolleswinkel, R. J., & van Tol-Leenders, T. P. 2010d. *Validatie van modelsystemen voor het voorspellen van de oppervlaktewaterkwaliteit en -kwantiteit in het stroomgebied 'de Schuitenbeek' : fases 1, 2 en 3*. Tech. rept. 1952. Alterra Wageningen University & Research Center, Wageningen.
- Walvoort, D. J. J., Siderius, C., & van Tol-Leenders, T. P. 2010e. *Validatie van modelsystemen voor het voorspellen van de oppervlaktewaterkwaliteit en -kwantiteit in het stroomgebied 'Quarles van Ufford' : fases 1, 2 en 3*. Tech. rept. 1954. Alterra Wageningen University & Research Center, Wageningen.
- Webster, R., & Oliver, M. A. 2007. *Geostatistics for Environmental Scientists*. 2 edn. Statistics in Practice. John Wiley & Sons.
- Wolf, J., Beusen, A. H. W., Groenendijk, P., Kroon, T., Rötter, R., & van Zeijts, H. 2003. The integrated modeling system STONE for calculating nutrient emissions from agriculture in the Netherlands. *Environmental Modelling & Software*, **18**, 597–617.
- Wösten, J. H. M., Vries, F. de, Denneboom, J., & Holst, A. F. van. 1988. *Generalisatie en bodemfysische vertaling van de bodemkaart van Nederland, 1: 250 000, ten behoeve van de PAWN-studie*. Tech. rept. 2055. Stiboka, Wageningen.

A Universal Kriging

In deze bijlage wordt beschreven hoe een bodemeigenschap kan worden voorspeld op locaties waar geen metingen zijn verricht met behulp van *universal kriging* (Matheron, 1969, 1970). Daarbij wordt uitgegaan van het volgende model:

$$y = \mathbf{X}\beta + \varepsilon_\theta \quad (\text{A.1})$$

Hierin is y een vector met n waarnemingen van een bodemeigenschap, $\mathbf{X}$ een $n \times (k + 1)$ matrix met k predictoren (elk element van de eerste kolom is gelijk aan één), β is een parametervector, ε_θ een vector met n ruimtelijk gecorreleerde residuen die afhankelijk zijn van parametervector θ (zie bijlage B).

De eerste term $\mathbf{X}\beta$ is een deterministische component met beschikbare kennis over bodemeigenschap y . Matrix $\mathbf{X}$ bevat bijvoorbeeld het bodemtype, het landgebruik, de grondwaterstand, en/of de resultaten van een (proces)model. Alles wat we niet weten wordt door de residuele component (ε_θ) gerepresenteerd.

Om een bodemeigenschap te kunnen voorspellen op een willekeurige locatie, moeten de parametervectoren β en θ bekend zijn. Bij ordinary kriging wordt hiervoor meestal de 'method-of-moments' schatter gebruikt (bijv. Isaaks & Srivastava, 1989). Voor universal kriging is deze methode niet geschikt omdat de parametervectoren met elkaar zijn gecorreleerd (Webster & Oliver, 2007). Lark *et al.* (2006) stellen voor om residual maximum likelihood (REML) te gebruiken om de parametervectoren van universal kriging te schatten. De parameters in θ kunnen worden geschat door het maximaliseren van de volgende conditionele log-likelihood functie (Lark & Cullis, 2004):

$$\ell(\theta|\hat{\beta}, \beta) = \text{constante} - \frac{1}{2} \log |\mathbf{C}| - \frac{1}{2} \log |\mathbf{U}| - \frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{H}) \mathbf{y} \quad (\text{A.2})$$

waarin

$$\mathbf{H} \equiv \mathbf{X}\mathbf{U}^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{C}^{-1}$$

en

$$\mathbf{U} = \mathbf{X}^T\mathbf{C}^{-1}\mathbf{X}$$

en $\mathbf{C}$ is de $n \times n$ covariantiematrix die een functie is van de parameters in θ , $|\cdot|$ is de determinant, matrixinversie is aangegeven met $^{-1}$, en vector-matrix transpositie met T . $\mathbf{H}$ wordt ook wel de 'hat-matrix' genoemd.

Om de kans te verkleinen dat maximalisatie van expressie A.2 resulteert in suboptimale parameterschattingen (ten gevolge van lokale maxima) is in dit rapport gebruik gemaakt van de optimalisatiemethode 'differential evolution' (Storn & Price, 1997).

Nu eenmaal de parameters in $\hat{\theta}$ bekend zijn, kunnen die in β worden berekend op basis van 'generalized least squares':

$$\hat{\beta} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{C}^{-1}\mathbf{y} \quad (\text{A.3})$$

met

$$\text{Cov}(\hat{\beta}) = \mathbf{U}^{-1}$$

Nu parametervectoren θ en β geschat zijn kan een bodemeigenschap op een willekeurige locatie worden voorspeld met:

$$\hat{y} = \mathbf{p}^T \hat{\beta} + \mathbf{c}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{y} \quad (\text{A.4})$$

waarin

$$\mathbf{p} = \mathbf{x} - \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{c} \quad (\text{A.5})$$

en $\mathbf{c}$, een vector met n covarianties tussen de waarde van y op de predictielocatie en de n waarnemingslocaties en $\mathbf{x}$ een vector van lengte $k + 1$ met k predictoren (bijvoorbeeld bodemtype, landgebruik) op de predictielocatie. Het eerste element van $\mathbf{x}$ is gelijk aan 1.

De eerste term aan de rechterkant van vergelijking A.4 is de bijdrage van de deterministische component aan de voorspelling. De tweede term aan de rechterkant van vergelijking A.4 geeft de bijdrage van de residuele component. Universal kriging geeft zuivere predicties van $\hat{y}$ (d.w.z. dat er geen systematische fout is), en minimaliseert de variantie van de predictiefout. Deze laatste wordt gegeven door:

$$\sigma_{UK}^2 = \mathbf{p}^T \mathbf{U}^{-1} \mathbf{p} + \sigma^2 - \mathbf{c}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{c} \quad (\text{A.6})$$

De eerste term aan de rechterzijde geeft de schattingsvariantie van de deterministische component, de tweede en derde term geven de predictievariantie m.b.t. de residuele component.

B Modelleren van de ruimtelijke structuur

Voor universal kriging moeten de covariantiematrix $\mathbf{C}$ en covariantievector $\mathbf{c}$ bekend zijn. In dit rapport zijn de elementen daarvan berekend met behulp van het Whittle-Matérn semivariogram. Deze is gegeven door (bijv. Pardo-Iguzquiza & Chica-Olmo, 2008):

$$\gamma(\mathbf{h}) = \sigma^2 \left(1 - \frac{2^{1-\nu}}{\Gamma(\nu)} \left(\frac{|\mathbf{h}|}{\alpha} \right)^\nu K_\nu \left(\frac{|\mathbf{h}|}{\alpha} \right) \right)$$

waarin $|\mathbf{h}|$ de afstand tussen twee locaties, σ^2 de (sill)variantie, α de range parameter, en ν de vormparameter. Γ is de gamma-functie en K_ν de aangepaste Bessel function van het tweede type (Abramowitz & Stegun, 1972). De parametervector $\boldsymbol{\theta}$ in bijlage A is dan gelijk aan $\boldsymbol{\theta} = [\sigma^2 \ \alpha \ \nu]^T$.

Vanwege het flexibele karakter presenteren Minasny & McBratney (2005) het Whittle-Matérn semivariogram als een algemeen semivariogrammodel voor bodemeigenschappen.

