

32/446(514) 200X

**BIBLIOTHEEK  
STARINGGEBOUW**

**Ruimtelijke interpolatie van zware metalen en PAK's ten  
behoefte van de bodemkwaliteitskaart van de Gemeente  
Utrecht**

**M.F.P. Bierkens**

**Rapport 514**

**26 JUNI 1997**

**DLO-Staring Centrum, Wageningen, 1997**

isn 942021

## REFERAAT

Bierkens, M.F.P., 1997. *Ruimtelijke interpolatie van zware metalen en PAK's ten behoeve van de bodemkwaliteitskaart van de Gemeente Utrecht*. Wageningen, DLO-Staring Centrum. Rapport 514. 73 blz.; 11 fig.; 4 tab.; 21 ref.; 2 aanh.

Voor de gemeente Utrecht is een geostatistische methode ontwikkeld om gehaltekaarten en achtergrondgehaltekaarten te maken voor koper, lood, zink, polycyclische aromatische koolwaterstoffen (PAK's), humus en lutum, alsmede kaarten van de bijbehorende schattingsvarianties (betrouwbaarheidskaarten). De methode houdt rekening met voorinformatie zoals bodemtype of landgebruik en gaat op een statistisch correcte wijze om met problematisch waarnemingsmateriaal, zoals waarden onder de detectielimiet, gemengde monsters, en monsters die preferent op vervuilde plaatsen zijn genomen. Aan de hand van de gehaltekaarten en betrouwbaarheidskaarten kan bodembeleid worden uitgevoerd dat rekening houdt met de onzekerheid van de geschatte gehalten.

Trefwoorden: bodembeheer, bodemverontreiniging, geostatistiek, milieubescherming

ISSN 0927-4499

©1997 DLO-Staring Centrum, Instituut voor Onderzoek van het Landelijk Gebied (SC-DLO)  
Postbus 125, 6700 AC Wageningen.  
Tel.: (0317) 474200; fax: (0317) 424812; e-mail: postkamer@sc.dlo.nl

Niets uit deze uitgave mag worden verveelvoudigd en/of openbaar gemaakt door middel van druk, fotokopie, microfilm of op welke andere wijze ook zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van DLO-Staring Centrum.

DLO-Staring Centrum aanvaardt geen aansprakelijkheid voor eventuele schade voortvloeiend uit het gebruik van de resultaten van dit onderzoek of de toepassing van de adviezen.

# Inhoud

	blz.
Woord vooraf	7
Samenvatting	9
<b>1 Inleiding</b>	<b>13</b>
1.1 Achtergrond	13
1.2 De bodemkwaliteitskaart	13
1.3 Doel van het onderzoek	14
1.4 Resultaten	15
1.5 Randvoorwaarden	15
1.6 Opbouw van het rapport	16
<b>2 Materialen en methoden</b>	<b>17</b>
2.1 Gebruikte gegevens	17
2.2 Problemen en eisen	18
2.3 Globale beschrijving van de interpolatiemethode	19
<b>3 Resultaten</b>	<b>25</b>
3.1 Inleiding	25
3.2 Stratificatie	25
3.3 Mediaankaarten; gemiddelden en varianties per stratum	30
3.4 Gehaltekaarten	32
3.5 Betrouwbaarheidskaarten	32
3.6 Kaarten met percentielen	33
3.7 Analyse variantiereductie door aanvullende metingen	33
<b>4 Voorstel voor gebruik van resultaten voor actief bodembeheer</b>	<b>39</b>
4.1 Inleiding	39
4.2 Indeling in schone- en vuile-grondklassen	39
4.3 Toepassing van thematische kaarten in het actief bodembeheer	42
4.4 Aanvullende bemonstering ter verbetering van gehaltekaarten	45
<b>5 Conclusies en aanbevelingen</b>	<b>47</b>
Literatuur	49
<b><i>Aanhangsels</i></b>	
A Theoretische onderbouwing van de statistische interpolatiemethode	51
B Beschrijving van de programmatuur	57

## Woord vooraf

In april 1995 kreeg de Afdeling Landinventarisatiemethoden van DLO-Staring Centrum de opdracht om voor de stad Utrecht kaarten te maken met gehalten van zware metalen, PAK's, humus en lutum. Zo mogelijk moest ook de betrouwbaarheid van deze kaarten worden gekwantificeerd. De opdracht werd verleend door het Bureau Bodem van de Afdeling Milieu van de Dienst Ruimtelijke Ordening van de Gemeente Utrecht.

Het project is uitgevoerd in 1995 en 1996 en heeft voor de opdrachtgever de volgende resultaten opgeleverd:

- Kaarten met gehalten aan zware metalen, PAK's, humus en lutum, kaarten met achtergrondgehalten van deze stoffen en betrouwbaarheidskaarten. Deze kaarten zijn digitaal geleverd in ARC/INFO-formaat.
- Fortran77-programma en ARC/INFO-AML-routines om de berekeningen uit te voeren die leiden tot bovengenoemde kaarten.
- Dit rapport, waarin de gebruikte berekeningsmethode wordt beschreven. Voor dit project is een nieuwe geostatistische interpolatiemethode ontwikkeld. De bijlagen van het rapport bevatten tevens een beschrijving van de FORTRAN77-programma's en de AML-routines.

Voor de succesvolle uitvoering en afronding van dit project is de prettige samenwerking met Ing. P.J. Derks van het Bureau Bodem van de Gemeente Utrecht zeer belangrijk geweest. R. Schuiling (afdeling Thematische Kartografie, SC-DLO) leverde een belangrijke bijdrage aan het project door te zorgen voor de koppeling met ARC/INFO. Ing. M. Knotters (afdeling Landinventarisatiemethoden, SC-DLO) wordt bedankt voor zijn commentaar op een eerdere versie van dit rapport.

## Samenvatting

Door de verscherpte regelgeving, een grotere behoefte tot informatie bij de burger en de noodzaak tot prioriteitstelling van bodemsaneringen, bestaat er bij de gemeenten de wens om meer structureel ruimtelijke informatie te verkrijgen over de kwaliteit van de bodem. Deze informatie kan worden geleverd door een zogenaamde bodemkwaliteitskaart. De bodemkwaliteitskaart wordt gevormd door een aantal thematische kaarten, waaronder een achtergrondgehaltekaart, een kaart met verdachte locaties en een kwetsbaarheidskaart. Bij vele grotere gemeenten worden deze thematische kaarten nu vervaardigd.

Ook bij de gemeente Utrecht bestaat een behoefte aan kaarten met informatie over de bodemkwaliteit. De Afdeling Landinventarisatiemethoden van DLO-Staring Centrum heeft derhalve, in opdracht van het Bureau Bodem van de Afdeling Milieu van de Dienst Ruimtelijke Ordening van de Gemeente Utrecht, een aantal thematische kaarten voor de bodemkwaliteitskaart gemaakt. Dit betreft kaarten van gehalten van zware metalen en PAK's (Poly-Aromatische-Koolwaterstoffen) tot twee meter beneden het maaiveld. Dit project heeft de volgende thematische kaarten opgeleverd (digitaal in ARC/INFO-formaat):

- *Gehaltekaarten*: kaarten met blokgemiddelde (blokken van 50 x 50 x 0,5 m<sup>3</sup>) gehalten van Cu (koper), Pb (lood), Zn (zink), de som van 10 PAK's (volgens het RIVM vanaf nu '10PAKs' genoemd), lutum en organische stof voor vier lagen: 0,0-0,5; 0,5-1,0; 1,0-1,5; 1,5-2,0 m beneden het maaiveld.
- *Betrouwbaarheidskaarten*. De betrouwbaarheidskaarten geven voor elke stof en voor alle vier de lagen de volgende attributen:
  - de waarden van de onderzijde van het 95%-betrouwbaarheidsinterval van de geschatte blokgemiddelde gehalten;
  - de waarden van de bovenzijde van het 95%-betrouwbaarheidsinterval van de geschatte blokgemiddelden gehalten;
  - de variantie van de geschatte blokgemiddelde loggehalten (de natuurlijke logaritme van de gehalten); deze variantie is een goede maat om nieuwe bemonsteringslocaties te selecteren.
- *Mediaankaarten*: kaarten met (min of meer) homogene deelgebieden waarbij per gebied de mediane concentratie wordt gegeven. Deze kaarten kunnen de rol vervullen van de achtergrondwaardenkaart.

Bij het maken van deze kaarten is gebruik gemaakt van de volgende gegevens die per 1 april 1995 beschikbaar waren:

- een landgebruikskaart;
- een geomorfogenetische kaart (Berendsen, 1982);
- een wijkenkaart van de stad Utrecht met leeftijden van elke wijk en de gemiddelde hoeveelheid opgebracht zand;
- 2349 monsters genomen in het kader van (sanerings)projecten;
- 300 monsters die verspreid genomen zijn om een completer beeld van de gehalten in de stad Utrecht te verkrijgen.

De kaarten omvatten de gemeente Utrecht en de direct aanliggende buitengebieden. Dit gebied, vanaf nu 'onderzoeksgebied' genoemd, wordt begrensd door de RDM-coördinaten (130 800,451.200) en (142.000,461.200).

De interpolatiemethode die gebruikt is om de bodemkwaliteitskaarten te maken moet onder meer een oplossing bieden voor de volgende problemen:

- metingen onder de detectielimiet;
- gemengde monsters; een groot aantal gehalten zijn bepaald aan monsters die bestaan uit mengsels van meerdere monsters;
- preferente bemonstering en clustering; veel monsters zijn preferent genomen op verontreinigde locaties en daardoor ook vaak geclusterd.

Verder dient de methode te voldoen aan de volgende eisen:

- Aanvullende informatie, zoals bodemkaarten en landgebruikskaarten, moet kunnen worden gebruikt om de schattingen van de gehaltenkaarten te verbeteren.
- De nauwkeurigheid van de verkregen kaarten moet ieder jaar verbeterd kunnen worden door gericht te bemonsteren op locaties waar de onzekerheid over de concentraties het grootst is. De methode moet dus ook betrouwbaarheidskaarten opleveren.
- De methode moet gekoppeld kunnen worden aan het GIS-programma ARC/INFO.

Op basis van de bovenbeschreven problemen met de basisgegevens en de eisen die aan de interpolatiemethode worden gesteld, is gekozen voor een statistische interpolatiemethode. Om aan alle eisen en problemen het hoofd te bieden is een nieuwe geostatistische methode ontwikkeld die de naam 'gestratificeerde residuele kriging' heeft gekregen. De methode heeft veel overeenkomsten met krigingmethoden die beschreven zijn door Delhomme (1978), Ahmed en De Marsily (1987), Stein et al. (1988), Van Tooren (1993) en Heuvelink (1996). De methode, die geïmplementeerd is in een set Fortran77-programma's gekoppeld aan ARC/INFO, bestaat uit de volgende stappen (zie Aanhangel A voor een uitgebreide beschrijving).

- (a) *Neem de natuurlijke logaritme van de gehalten.* Gehalten kunnen veelal goed beschreven worden met een lognormale verdeling. Het is dan gemakkelijk om te werken met de natuurlijke logaritme van de gehalten (zogenaamde loggehalten), omdat deze dan normaal verdeeld zijn.
- (b) *Bepaal een representatieve waarde voor de gehalten onder de detectielimiet.* Met behulp van de eigenschappen van de normale verdeling is het mogelijk een representatieve waarde te kiezen voor alle gehalten die onder de detectielimiet liggen.
- (c) *Verdeel het onderzoeksgebied in homogene deelgebieden.* Op basis van kaarten met aanvullende informatie (bodemkaart, landgebruikskaart) wordt het onderzoeksgebied verdeeld in min of meer homogene deelgebieden. Deze deelgebieden worden in het vervolg aangeduid met de statistische term 'strata'.
- (d) *Schat voor elk stratum het gemiddelde en de variantie van het loggehalte.* Voor elk stratum wordt het gemiddelde en de variantie van de loggehalten geschat uit de monsters die in dat stratum liggen. Hierbij wordt gebruik gemaakt van declusteringstechnieken. Deze corrigeren voor preferente bemonstering op locaties met hogere gehalten door bij de berekening van het gemiddelde en de variantie aan monsters die dicht bij andere monsters liggen kleinere gewichten

toe te kennen. Bij de berekening van het gemiddelde worden alle monsters (gemengd en niet-gemengd) meegenomen, waarbij de  $N$  maal gemengde monsters ook  $N$  maal worden meegeteld. De variantie wordt alleen berekend met de niet-gemengde monsters.

- (e) *Bereken de genormaliseerde residuen.* Als voor elk stratum het gemiddelde en de variantie zijn geschat kunnen alle gehalten van de niet-gemengde monsters worden omgezet in zogenaamde genormaliseerde residuen. Dit gebeurt door het gehalte van een niet-gemengd monster dat in een bepaald stratum ligt te verminderen met het gemiddelde van dat stratum en het resultaat vervolgens te delen door de wortel van de bijbehorende stratumvariantie.
- (f) *Block-kriging van genormaliseerde residuen.* Uit de waarden van de genormaliseerde residuen kunnen nu gemiddelde waarden van deze genormaliseerde residuen worden geschat voor alle blokken in het onderzoeksgebied. Dit gebeurt met een geostatistische techniek die bekend staat als block-kriging (Journel en Huijbregts, 1978). De block-kriging wordt hier gebruikt als een drie-dimensionale interpolatietechniek. Block-kriging levert voor elk blok ook een krigingvariantie op. Deze is een maat voor de grootte van de fout die gemaakt wordt bij het schatten van de blokgemiddelde genormaliseerde residuen.
- (g) *Berekening van de mediaankaart, de gehaltekaart en de betrouwbaarheidskaarten.* Uit de stratagemiddelden, de stratavarianties en de resultaten van de block-kriging (schattingen en schattingsvarianties) kunnen tenslotte de mediaankaart, de kaart met blokgemiddelde gehalten en de betrouwbaarheidskaarten worden berekend.

Voor de stratificatie ten behoeve van Cu, Pb, Zn en 10PAKs is gebruik gemaakt van de landgebruikskaart van de gemeente Utrecht. De resulterende gehaltekaarten tonen een kaartbeeld waarin de stratificatie duidelijk is terug te zien met daarop gesuperponeerd de plaatsen waar uit metingen blijkt dat de gehalten hoger of lager zijn dan het gemiddelde. Zoals verwacht nemen de gehalten af met de diepte beneden het maaiveld. Vergelijking van de gehaltekaarten en betrouwbaarheidskaarten met de kaarten die men krijgt als niet wordt gestratificeerd toont dat door de stratificatie op locaties waar weinig monsters zijn genomen veel meer detail is te zien. Ten behoeve van het humus- en lutumgehalte is gestratificeerd naar textuur op basis van de geomorfogenetische kaart van de gemeente Utrecht (Berendsen, 1982) en informatie over de gemiddelde zandophoging van de wijken in de gemeente Utrecht. Bij het maken van de gehaltekaarten en betrouwbaarheidskaarten voor humus en lutum is geen block-kriging toegepast vanwege het ontbreken van voldoende niet-gemengde monsters. De resulterende kaartbeelden lijken daarom sterk op de mediaankaarten van humus en lutum.

Met behulp van de gehaltekaarten en betrouwbaarheidskaarten kunnen ook percentielenkaarten worden berekend. Deze geven voor elk blok de waarde waaronder het blokgemiddelde gehalte met een bepaalde kans zal liggen. Door de combinatie van deze percentielenkaarten en drempelwaarden (zoals streefwaarden en interventiewaarden) zijn kaarten met 'schone-grondklassen' en 'vuile-grondklassen' vervaardigd. Deze kaarten kunnen een belangrijke functie vervullen bij het nemen van geïnformeerde beslissingen op het gebied van actief bodembeheer (Werkgroep

Bodemsanering, 1993) waarbij expliciet rekening kan worden gehouden met de onzekerheid van de gehalteskaarten. Er is aangegeven hoe de gehalteskaarten, betrouwbaarheidskaarten en kaarten met schone-grondklassen en vuile-grondklassen gebruikt kunnen worden voor een groot aantal gemeentelijke taken op het gebied van actief bodembeheer (CIT, 1995). Deze taken omvatten onder andere de prioriteitstelling van saneringen, de prioriteitstelling en selectie van monsterlocaties, vergunningverlening en voorlichting van het publiek.

Met de geostatistische methode die voor dit project is ontwikkeld zijn we in staat om uit problematisch waarnemingsmateriaal, zoals gemengde monsters en monsters die preferent op vervuilde plaatsen zijn genomen, kaarten met blokgemiddelde gehalten te schatten, alsmede kaarten van bijbehorende schattingsvarianties. De methode bestaat uit een volledige 3D-interpolatie en houdt door middel van stratificatie rekening met voorinformatie zoals bodemtype of landgebruik. Om de methode te verbeteren wordt het volgende aanbevolen.

- Bemonstering onder de gebouwen. Uit vergelijkbaar onderzoek in de gemeente Arnhem blijkt dat de grond onder de gebouwen in het algemeen minder is verontreinigd dan bijvoorbeeld in de tuinen (Van der Valk et al., 1996). Het is dus wenselijk om onder de gebouwen monsters te nemen en de grond onder de gebouwen als aparte strata te behandelen. Dit vereist echter wel een hogere resolutie van het grid (bijvoorbeeld  $10 \times 10 \times 0,5 \text{ m}^3$ ).
- Inzoomen op projectlocatie. Dit wil zeggen dat men voor kleinere blokken gemiddelde gehalten kan schatten voor een beperkt gebied rond een locatie. Wanneer hierbij dezelfde stratificatie wordt gebruikt als in dit project (dus ook met dezelfde resolutie) is dit betrekkelijk eenvoudig te realiseren. Wanneer men echter wil dat ook de stratificatie op een kleinere resolutie plaatsvindt, bijvoorbeeld om de grond onder gebouwen te onderscheiden van de overige grond, dan is het inbouwen van de inzoomoptie weliswaar realiseerbaar maar een stuk bewerklijker.

Tenslotte bevelen we aan om, naast de bemonstering voor het nemen van projectbeslissingen, aanvullende bemonstering te verrichten ter:

- verbetering van de nauwkeurigheid van de gehalteskaarten;
- verbetering van de schatting van de structuurfuncties (i.c. semivariogrammen) die gebruikt worden bij de block-kriging-interpolatie;
- validatie van de gebruikte geostatistische interpolatiemethode.

De aanvullende bemonstering zou eventueel ook informatie kunnen verschaffen over gehalten onder de gebouwen.



# 1 Inleiding

## 1.1 Achtergrond

Gemeenten hebben de afgelopen jaren in toenemende mate te maken gehad met bodemverontreinigingen. Een groot aantal vervuilingen zijn min of meer toevallig ontdekt en, veelal onder druk van verontruste bewoners en geplande stadsuitbreiding en stadsvernieuwing, in het kader van de Interimwet Bodemsanering gesaneerd. Dit heeft tot gevolg gehad dat de meeste informatie over bodemvervuiling sterk projectgebonden is verzameld. Bij de gemeenten bestaat echter de wens om meer structureel ruimtelijke informatie te verkrijgen over de kwaliteit van de bodem. Redenen hiervoor zijn ondermeer de volgende ontwikkelingen (CSO, IWACO en Tauw Milieu, 1995) (in het volgende CIT (1995) genoemd):

- De aanscherping van de landelijke regelgeving (Woningwet en Wet Bodembescherming) leidt tot de behoefte aan een algemener beeld van de bodemkwaliteit.
- Steeds meer burgers hebben behoefte aan informatie over de bodemkwaliteit op een bepaalde plaats.
- Omdat steeds meer vervuilingen zijn/worden ontdekt zal met beperkte financiële middelen een prioriteitsstelling van saneren nodig zijn.
- Vanwege diffuse vervuiling is het terugsaneren van bodems tot beneden de referentieniveaus in stedelijke gebieden niet haalbaar en ook niet noodzakelijk omdat stedelijke bodems niet multifunctioneel behoeven te zijn. Een saneringsbeleid dat meer gericht is op de lokale functie van de bodem is dan een gewenst alternatief (Bijl, 1994). Hiertoe moet men echter wel beschikken over een ruimtelijk beeld van de meer diffuse verontreiniging binnen de gemeente (i.e. de achtergrondgehalten).

Om goed op deze ontwikkelingen te kunnen inspelen is door de Werkgroep Bodemsanering (1993) gepleit voor een 'Actief Bodembeheer', gedefinieerd als

*het totaal aan activiteiten in een gebied gericht op het adequaat en efficiënt omgaan met structureel aanwezige bodemverontreiniging en de gevolgen hiervan.*

## 1.2 De bodemkwaliteitskaart

De basis voor actief bodembeheer moet gevormd worden door de zogenaamde 'Bodemkwaliteitskaart'. Het is de bedoeling dat de bodemkwaliteitskaart de benodigde structurele ruimtelijke informatie over de bodemkwaliteit levert die nodig is voor een doelmatig actief bodembeheer door de gemeenten. Bij de Gemeente Utrecht bestaat de bodemkwaliteitskaart uit de volgende thematische kaarten:

- De kaart met potentieel verontreinigde locaties. Deze kaart geeft locaties die op grond van historisch onderzoek verontreinigd zouden kunnen zijn maar nog

- niet verder zijn onderzocht.
- De kaart met onderzochte locaties. Op deze kaart staan de locaties die vanwege een vermeende bodemverontreiniging of vanwege een vergunningverlening zijn onderzocht en eventueel zijn gesaneerd.
  - De kwetsbaarheidskaart. Deze geeft voor elke locatie, overeenkomstig de functie van die locatie, aan hoe ernstig een eventuele vervuiling moet worden ingeschat.
  - Gehaltekaarten: kaarten met blokgemiddelde gehalten van een aantal bodemvervuilende stoffen.
  - Betrouwbaarheidskaarten: kaarten waarop voor deze stoffen de onzekerheid van de blokgemiddelden wordt weergegeven.
  - Mediaankaarten: kaarten met (min of meer) homogene deelgebieden waarbij voor deze stoffen per deelgebied de mediane concentratie wordt gegeven. De mediane concentratie kan opgevat worden als een 'achtergrondgehalte' zoals beschreven in CIT (1995).

De beoogde thematische kaarten verschillen enigszins van de kaarten die worden beschreven in CIT (1995). In Bierkens (1995) wordt uitgebreid ingegaan op deze verschillen en beargumenteerd waarom door de Gemeente Utrecht gekozen is voor een afwijkende set thematische kaarten.

### **1.3 Doel van het onderzoek**

Het onderzoek dat in dit rapport wordt beschreven heeft betrekking op het vervaardigen van gehaltekaarten, betrouwbaarheidskaarten en mediaankaarten. Het onderzoek is uitgevoerd in opdracht van het Bureau Bodem van de Afdeling Milieu van de Dienst Ruimtelijke Ordening van de Gemeente Utrecht. Dit onderzoek beoogt het volgende:

- 1 Het ontwikkelen van een methode om via ruimtelijke interpolatie van bodemmonsters te komen tot gehaltekaarten, betrouwbaarheidskaarten en mediaankaarten van koper (Cu), Lood (Pb), zink (Zn), de som van 10 PAK's volgens het RIVM (vanaf hier '10PAKs' genoemd), humus en lutum. De methode moet voldoen aan de volgende eisen:
  - Het moet mogelijk zijn aanvullende informatie bij de interpolatie te betrekken. Men kan hierbij bijvoorbeeld denken aan bodemkaarten en landgebruiksgegevens.
  - Het moet mogelijk zijn om locaties voor aanvullende bemonstering te selecteren om de nauwkeurigheid van de gehaltekaarten op voorbedachte locaties in de gemeente Utrecht te verbeteren.
  - De methode moet gekoppeld zijn aan het GIS-programma ARC/INFO.
- 2 Het maken van gehaltekaarten, betrouwbaarheidskaarten en mediaankaarten van Cu, Pb, Zn, 10PAKs, humus en lutum. Deze kaarten worden gemaakt met behulp van de ontwikkelde methode en de monsters en aanvullende informatie, voor zover deze tijdens het verrichten van het onderzoek aanwezig zijn.

## 1.4 Resultaten

Het onderzoek levert de volgende resultaten:

- 1 De volgende thematische kaarten in ARC/INFO-formaat.
  - a *Gehaltekaarten*: kaarten met blokgemiddelde (blokken van 50 x 50 x 0,5 m<sup>3</sup>) gehalten van Zn, Pb, Cu, 10PAKs, lutum en organische stof voor vier lagen: 0,0-0,5; 0,5-1,0; 1,0-1,5; 1,5-2,0 m beneden het maaiveld.
  - b *Betrouwbaarheidskaarten*. De blokgemiddelde gehalten op de gehaltekaart worden verkregen via interpolatie. Hierbij wordt een interpolatiefout gemaakt. In statistische termen kan men stellen dat de blokgemiddelde gehalten worden *geschat* en de gehaltekaarten behept zijn met schattingsfouten. Ze zijn dus onzeker. Het doel van de betrouwbaarheidskaarten is om deze onzekerheid weer te geven. De betrouwbaarheidskaarten geven voor elke stof en voor alle vier de lagen de volgende attributen:
    - de waarden van de onderzijde van het 95%-betrouwbaarheidsinterval van de geschatte blokgemiddelde gehalten;
    - de waarden van de bovenzijde van het 95%-betrouwbaarheidsinterval van de geschatte blokgemiddelde gehalten;
    - de variantie van de geschatte blokgemiddelde loggehalten (de natuurlijke logaritme van de gehalten); deze variantie is een goede maat om nieuwe bemonsteringslocaties te selecteren.
  - c *Mediaankaarten*: kaarten met strata (homogene deelgebieden) waarbij per stratum de mediane concentratie wordt gegeven. Deze kaarten kunnen de rol vervullen van de achtergrondwaardekaart.
- 2 Een set *Fortran77-programma's* om:
  - a Uit gemeten gehalten op bemonsteringslocaties en aanvullende informatie de gehaltekaarten, betrouwbaarheidskaarten en mediaankaarten te berekenen.
  - b Uit de gehaltekaarten en betrouwbaarheidskaarten percentielenkaarten te berekenen. De 70% percentielkaart bijvoorbeeld geeft voor elke locatie het gehalte waaronder de gehalten met 70% zekerheid zullen liggen.
  - c Het effect van aanvullende bemonstering op de betrouwbaarheid van de gehaltekaarten te bepalen.
- 3 *ARC/INFO AML-routines* om de benodigde ARC/INFO-bestanden om te zetten in de invoerbestanden voor de Fortran77-programmatuur en de resultaten van de berekeningen om te zetten in ARC/INFO-bestanden.
- 4 Een *onderzoeksrapport* (i.c. dit rapport) waarin de de geostatistische methode wordt beschreven die is ontwikkeld om de kaarten te maken, alsmede de ontwikkelde Fortran77-programma's en AML-routines. Verder geeft het rapport aan hoe de kaarten gebruikt kunnen worden in het actief bodembeheer.

## 1.5 Randvoorwaarden

De kaarten die gemaakt worden in dit onderzoek betreffen alleen de min of meer diffuus voorkomende stoffen die weinig mobiel zijn. Ze zijn dus niet gericht op zeer toxische (vaak mobiele) stoffen die acute sanering vereisen zoals benzenen of gechloreerde koolwaterstoffen. Gehalten van dergelijke stoffen zijn niet ruimtelijk

te voorspellen op de schaal van de stad Utrecht met gemeten gehalten op reeds ontdekte vervuilde locaties. Voor de ontdekte locaties rest alleen de vraag wat hun saneringsprioriteit is en hoe deze sanering technisch moet worden uitgevoerd. Hierbij spelen met name de toxiciteit van de stoffen en de geohydrologische, bodemfysische en bodemchemische omstandigheden van de locatie een rol (Leidraad Bodembescherming, 1990; Koolenbrander, 1995).

## **1.6 Opbouw van het rapport**

In hoofdstuk 2 van dit rapport worden eerst de beschikbare gegevens beschreven die als basis dienen voor het maken van de gehalteskaarten, betrouwbaarheidskaarten en mediaankaarten. Daarna volgt een globale beschrijving van de statistische analyses en -methoden die zijn gebruikt en ontwikkeld om vanuit de beschikbare gegevens te komen tot gehalteskaarten, betrouwbaarheidskaarten en mediaankaarten. De resultaten van de statistische analyses, alsmede de resulterende kaarten worden beschreven in hoofdstuk 3. In hoofdstuk 4 wordt getracht een handvat te geven voor het gebruik van de verschillende kaarten bij het bodembeleid. Speciale aandacht wordt gegeven aan de belangrijke rol die de betrouwbaarheidskaarten hierbij kunnen spelen. Hierin speelt het geïnformeerd beslissen onder onzekerheid een centrale rol. Hoofdstuk 5 besluit met de conclusies en aanbevelingen.

Dit rapport heeft twee aanhangsels. In Aanhangsel A wordt een theoretische beschrijving gegeven van de geostatistische methoden die zijn gebruikt en ten dele zijn ontwikkeld om de thematische kaarten te maken. Aanhangsel B bevat een beschrijving van de Fortran77-programmatuur en de ARC/INFO AML-routines.

## 2 Materialen en methoden

### 2.1 Gebruikte gegevens

De volgende gegevens waren per 1 april 1995 aanwezig en vormen het uitgangspunt voor de bodemkwaliteitskaarten (alle gegevens verstrekt door de Dienst Ruimtelijke Ordening van de Gemeente Utrecht):

- een landgebruikskaart (ARC/INFO-bestand);
- een geomorfogenetische kaart (Berendsen, 1982) (ARC/INFO-bestand);
- een wijkenkaart van de stad Utrecht met leeftijden van elke wijk en de gemiddelde hoeveelheid opgebracht zand (ARC/INFO-bestand);
- 2349 monsters genomen in het kader van (sanerings)projecten (ARC/INFO- en ASCII-bestand);
- 300 monsters die verspreid genomen zijn om een completer beeld van de gehalten in de stad Utrecht te verkrijgen (ARC/INFO- en ASCII-bestand).

De kaarten betreffen de gemeente Utrecht en de direct aanliggende buitengebieden. Dit gebied, vanaf nu 'onderzoeksgebied' genoemd, heeft een rechthoekige vorm en wordt begrensd door de RDM-coördinaten (130.800,451.200) en (142.000,461.200). Het onderzoeksgebied heeft dus een oppervlakte van 112 km<sup>2</sup>.

In de bestanden met monstergegevens worden de volgende attributen gebruikt: monsternummer, x-coördinaat, y-coördinaat, z-coördinaat bovenkant monster, z-coördinaat onderkant monster, kopergehalte, loodgehalte, zinkgehalte, gehalte aan 10PAKs, humusgehalte, lutumgehalte, mengcode. Het gemiddelde van de z-coördinaten van de bovenkant en de onderkant van de monsters wordt genomen als de z-coördinaat van de monsters. De gehalten aan zware metalen Cu, Pb, Zn en 10PAKs hebben als eenheid mg per kg droge stof. Humusgehalten en lutumgehalten zijn gegeven in massapercentages droge stof. Per monster zijn niet alle gehalten altijd gemeten. De bestanden bevatten veel 'ontbrekende waarnemingen'. Ook is voor een groot aantal gehalten alleen bekend dat deze kleiner zijn dan een bepaalde waarde, de zogenaamde 'detectielimiet'. De mengcode geeft aan of een monster gemengd is of niet. Een mengcode '1' betekent niet-gemengd, een mengcode van bijvoorbeeld '3' betekent dat het monster een mengsel is van drie monsters.

Op basis van de mengcodes zijn de monsters gesplitst in twee bestanden. Dit resulteert in een bestand met 1734 'niet-gemengde monsters' en 915 'gemengde monsters'. In het bestand 'gemengde monsters' zijn de mengcodes groter dan 1. Zoals we later zullen zien wordt een mengmonster met een mengcode '2' twee keer meegeteld bij het berekenen van gemiddelden, monsters met een mengcode '3' drie keer etc. De 300 verspreid genomen monsters vormen een complicatie. Deze monsters staan weliswaar apart vermeld (met eigen monsternummer en coördinaten) maar zijn om analysekosten te besparen helaas per drie monsters gemengd. Het zijn groepen van telkens drie monsters met verschillende boornummers en coördinaten maar met dezelfde gehalten. Deze 300 verspreid genomen monsters vormen dus eigenlijk 100 gemengde monsters met mengcode drie. Om ze evenredig mee te tellen bij het

berekenen van de gemiddelden zijn ze weliswaar alle 300 opgenomen in het bestand 'gemengde monsters' maar elk met een mengcode '1'. Tabel 1 geeft voor elke stof de hoeveelheid niet-gemengde monsters en de hoeveelheid gemengde monsters. Deze zijn verder verdeeld naar gehalten boven en onder de detectielimiet. Verder is het aantal ontbrekende waarnemingen per stof vermeld.

*Tabel 1 Aantallen gemengde ('g') en niet-gemengde monsters ('ng') per stof, uitgesplitst naar aantallen boven de detectielimiet ('boven') en onder de detectielimiet ('onder'). Het aantal ontbrekende waarnemingen is eveneens vermeld ('ontbr.'). Evenals de waarde van de detectielimiet per stof ('detl.');* beschikbaar per 1-5-95.

	Cu		Pb		Zn		10PAKs		Humus		Lutum	
	ng	g	ng	g	ng	g	ng	g	ng	g	ng	g
boven	787	720	751	737	760	852	368	452	24	235	29	281
onder	83	128	122	123	13	6	79	186	6	75	4	29
totaal	870	848	873	860	773	858	447	638	30	310	33	310
ontbr.	864	67	861	55	961	57	1287	277	1704	605	1701	605
detl.	5,0		10,0		5,0		0,20		1,0		1,0	

## 2.2 Problemen en eisen

De interpolatiemethode die gebruikt wordt om de bodemkwaliteitskaarten te maken moet onder meer een oplossing bieden voor de volgende problemen:

- *Metingen onder de detectielimiet.* Wanneer een concentratie te laag is om gemeten te worden moet hiervoor toch een getal gekozen worden, om te voorkomen dat waardevolle informatie niet wordt gebruikt. Dit getal moet ergens tussen de detectielimiet en 0 worden gekozen, omdat anders de geschatte concentraties op de bodemkwaliteitskaarten gemiddeld te hoog uit vallen.
- *Gemengde monsters.* Een groot gedeelte van de monsters is gemengd (tabel 1). De gemengde monsters kunnen bijvoorbeeld niet gebruikt worden om de varianties van gehalten te schatten, maar vormen een waardevolle bron van informatie voor het schatten van gemiddelden. Er moet dus een methode worden gevonden om ook deze gemengde monsters te gebruiken voor het maken van de bodemkwaliteitskaarten.
- *Preferente bemonstering en clustering.* Veel monsters zijn preferent genomen op verontreinigde locaties en daardoor ook vaak geclusterd. Bij het schatten van statistische parameters, zoals de verwachting en de variantie van de concentratieverdeling, moet hiermee rekening worden gehouden. Als dit niet gebeurt worden de concentraties gemiddeld te hoog geschat.

Uit het overleg met het Bureau Bodem van de Dienst Ruimtelijke Ordening van de Gemeente Utrecht (DLO-Staring Centrum, 1994) kwam naar voren dat de methode ook moet voldoen aan de volgende eisen (zie ook paragraaf 1.3):

- Aanvullende informatie, zoals bodemkaarten en landgebruikskaarten moet kunnen worden gebruikt om de schattingen op de gehalteskaarten te verbeteren.

- De bodemkwaliteitskaarten moeten gemaakt kunnen worden voor verschillende diepten beneden het maaiveld.
- De nauwkeurigheid van de verkregen kaarten moet ieder jaar verbeterd kunnen worden door gericht te bemonsteren op locaties waar de onzekerheid over de concentraties het grootst is. De methode moet dus ook betrouwbaarheidskaarten opleveren.
- De methode moet gekoppeld kunnen worden aan het GIS-programma ARC/INFO.

### **2.3 Globale beschrijving van de interpolatiemethode**

Omdat de interpolatiemethode ook een maat moet kunnen gegeven voor de betrouwbaarheid van de resultaten (een maat voor de grootte van de interpolatiefout) komen alleen statistische interpolatietechnieken in aanmerking. In dat geval worden gehalten op onbemeten locaties statistisch 'geschat'. Omdat de monsters op voorbedachte locaties zijn genomen is gekozen voor een geostatistische methode (DLO-Staring Centrum, 1994). Dit houdt in dat alle gehalten op niet-bezochte locaties worden gemodelleerd als stochastische variabelen (trekkingen uit een kansverdeling) en optimale schattingen worden gemaakt van de werkelijke waarden op die locaties, gegeven de gemeten gehalten op de monsterlocaties. Deze vorm van schatten noemt men 'kriging' (Journel en Huijbregts, 1978) en levert naast een optimale schatting ook de variantie van schattingsfout (=interpolatiefout) op. Deze variantie is dus een maat voor de betrouwbaarheid van de geschatte gehalten en vormt de basis voor de betrouwbaarheidskaarten. In dit project is gebruik gemaakt van een krigingvariant waarbij ook hulpinformatie zoals de bodemkaart kan worden gebruikt.

Met kriging is het in principe mogelijk om de gehalten op elke onbezochte locatie te schatten. Echter, de onzekerheid van zulke 'puntschattingen' is meestal zeer groot. Daarom is gekozen voor het schatten van gemiddelde gehalten voor blokken. Deze kunnen veelal wel met voldoende zekerheid worden geschat. In overleg met het Bureau Bodem van de Dienst Ruimtelijke Ordening van de Gemeente Utrecht is besloten gemiddelde gehalten te schatten voor 50 x 50 x 0,5 m<sup>3</sup> blokken voor vier lagen: 0,0-0,5; 0,5-1,0; 1,0-1,5 en 1,5-2,0 m beneden het maaiveld.

In het projectvoorstel (DLO-Staring Centrum, 1994) wordt uitgebreid beschreven waarom deze methode is verkozen (en gedeeltelijk ontwikkeld) boven andere statistische interpolatiemethoden. Aanhangsel A van dit rapport geeft een theoretische beschrijving van de methode en Aanhangsel B beschrijft hoe deze is geïmplementeerd in computerprogramma's en is gekoppeld met ARC/INFO.

De methode voor geostatistische ruimtelijke interpolatie bestaat, voor elke stof, globaal uit de volgende stappen:

**(a) Neem de natuurlijke logaritme van de gehalten**

De gehalten kunnen alleen tussen bepaalde grenzen liggen. Ze kunnen niet kleiner zijn dan 0 en niet groter dan 1 000 000 mg/kg voor Cu, Pb, Zn en 10PAKs of 100% voor humus en lutum. Wanneer een geschikte kansverdeling voor dergelijke typen gegevens gekozen moet worden, komen op theoretische gronden alleen continue kansverdelingen in aanmerking die gelden op een eindig interval (bijvoorbeeld een beta-verdeling). Als de waarden echter voornamelijk aan de onderzijde van het interval voorkomen, zoals in dit geval, vormt de lognormale verdeling een zeer goed alternatief. We nemen bij de volgende stappen dus aan dat de gehalten *lognormaal* verdeeld zijn. Het is dan gemakkelijk om te werken met de natuurlijke logaritme van de gehalten (zogenaamde loggehalten), omdat deze dan normaal verdeeld zijn. Deze kansverdeling kan beschreven worden met slechts twee parameters: de verwachting (het gemiddelde van de gehalten) en de variantie.

**(b) Bepaal een representatieve waarde voor de gehalten onder de detectielimiet**

De vraag is nu welke waarde we hiervoor moeten kiezen. We weten in ieder geval dat deze waarde ergens moet liggen tussen 0 en de detectielimiet. Verder weten we bij benadering wat de kans is dat een waarde onder de detectielimiet ligt. Bijvoorbeeld bij het loodgehalte is dit (voor de niet-gemengde monsters) gelijk aan (zie tabel 1)  $122/873 = 0,14$ . De procedure voor het loodgehalte is dan als volgt: We kiezen een waarde tussen 0 en de detectielimiet en kennen die toe aan alle monsters ( $122 + 123 = 245$ ) die onder de detectielimiet liggen. Vervolgens wordt met alle monsters het gemiddelde geschat van de loggehalten.  $N$  maal gemengde monsters tellen hierbij  $N$  maal mee. Met de 873 niet-gemengde monsters wordt de variantie van de loggehalten geschat. Omdat we veronderstellen dat het loggehalte normaal verdeeld is kunnen we de kansverdeling met dit gemiddelde en de variantie volledig beschrijven. We kunnen dan met deze kansverdeling berekenen wat de kans is dat het loggehalte kleiner dan of gelijk is aan  $2,203 (= \ln(10))$ . Als de waarde voor gehalten onder de detectielimiet consistent gekozen is moet de aldus berekende kans gelijk zijn aan 0,14. Is dit niet het geval dan wordt een nieuw gehalte tussen 0 en de detectielimiet gekozen en het proces herhaald. Dit gaat door totdat de berekende kans precies gelijk is aan 0,14. Het bijbehorende gehalte is dan een representatief gehalte voor de monsters met gehalten onder de detectielimiet.

**(c) Splits het onderzoeksgebied in homogene deelgebieden of strata**

Op basis van kaarten met aanvullende informatie (bodemkaart, landgebruikskaart) wordt het onderzoeksgebied opgesplitst in min of meer homogene deelgebieden. Deze deelgebieden behoeven niet aaneengesloten te zijn. Wat ze gemeen hebben is niet zozeer hun geografische ligging als wel thematische eigenschappen zoals bodemgebruik of bodemtype. In de statistiek wordt dit onderscheiden in deelgebieden 'stratificatie' genoemd, en de homogene deelgebieden noemt men 'strata'. De stratificatie is een veelgebruikte methode om niet kwantitatieve hulpinformatie (zoals thematische kaarten) als hulpinformatie te gebruiken bij ruimtelijke interpolatie. Door te stratificeren hopen we de nauwkeurigheid van de geschatte gehalten aanzienlijk te verbeteren (Brus en De Grijter, 1993; Stein et al., 1988). De verbetering van de nauwkeurigheid is groter naarmate de variatie van de gehalten tussen de strata groter is en de variatie binnen de strata kleiner is.



**(d) Schat voor elk stratum het gemiddelde en de variantie van de kansverdeling**

Bij geostatistische interpolatie worden de gehalten gemodelleerd als stochastische variabelen ofwel trekkingen uit een kansverdeling. Er wordt verondersteld dat de loggehalten normaal verdeeld zijn. De normale verdeling wordt volledig beschreven door twee parameters: het gemiddelde  $\mu$  en de variantie  $\sigma^2$ . Als  $y$  het loggehalte is van een bepaalde stof dan kunnen het gemiddelde  $\mu$  en variantie  $\sigma^2$  van het loggehalte in de regel als volgt worden geschat uit  $n$  onafhankelijke waarnemingen  $y_i, i=1, \dots, n$ :

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \quad (1)$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\mu})^2 \quad (2)$$

De dakjes geven aan dat het hier om schatters van het gemiddelde en de variantie gaat.

Zoals reeds beschreven in paragraaf 2.2 zijn veel monsters preferent genomen op verontreinigde locaties en daardoor ook vaak geclusterd. Bij het schatten van statistische parameters, zoals het gemiddelde en de variantie van een kansverdeling, moet hiermee rekening worden gehouden. Als dit niet gebeurt wordt bijvoorbeeld het gemiddelde te hoog geschat. Om hiervoor te corrigeren wordt een declusteringsmethode toegepast. Hierbij worden bij de berekening van het gemiddelde en de variantie de waargenomen gehalten gewogen meegenomen. De grootte van de gewichten van elke waarneming hangt af van de mate van clustering. Naarmate de locaties van de monsters dichter bij die van andere monsters liggen krijgen ze een lager gewicht bij de berekening. Omdat monsters die sterk geclusterd liggen veelal ook op verontreinigde locaties liggen (daar is vaak meer onderzoek gedaan) en dus hogere gehalten hebben, krijgen juist deze monsters minder gewicht bij het berekenen van de gemiddelden en varianties. Voor het berekenen van de declusteringsgewichten bestaan verschillende methoden (Isaaks en Srivastava, 1989). De methode die hier gebruikt is heet cel-declustering en is met name geschikt als monsters preferent genomen zijn op locaties met hogere gehalten. De toepassing van deze methode om de declusteringsgewichten te berekenen wordt beschreven in Aanhangsel A. De vergelijkingen voor het schatten van het gemiddelde en de variantie van het loggehalte voor bijvoorbeeld stratum  $h$  worden dan:

$$\hat{\mu}_h = \sum_{i=1}^{n_h} w_{hi} y_{hi} \quad (3)$$

$$\hat{\sigma}_h^2 = \sum_{i=1}^{m_h} v_{hi} (y_{hi} - \hat{\mu}_h)^2 \quad (4)$$

Hierbij is  $n_h$  het totaal aantal gemengde en niet-gemengde monsters die in stratum  $h$  liggen (waarbij  $N$  maal gemengde monsters ook  $N$  maal meetellen) en  $m_h$  is het aantal niet-gemengde monsters in stratum  $h$ . Verder zijn  $y_{hi}$  de loggehalten op monsterlocaties in stratum  $h$  en  $w_{hi}$  en  $v_{hi}$  de bijbehorende declusteringsgewichten. De sommen van de declusteringsgewichten  $w_{hi}$  en  $v_{hi}$  tellen op tot 1.

**(e) Bereken de genormaliseerde residuen**

Als voor elk stratum het gemiddelde en de variantie zijn geschat kunnen alle gehalten van de niet-gemengde monsters worden omgezet in zogenaamde genormaliseerde residuen volgens:

$$y_i' = \frac{y_{hi} - \hat{\mu}_h}{\hat{\sigma}_h} \quad (5)$$

Deze genormaliseerde residuen van het loggehalte zijn nu standaard normaal verdeeld (gemiddelde 0 en variantie 1).

**(f) Block-kriging van genormaliseerde residuen**

Uit de waarden van de genormaliseerde residuen kunnen nu gemiddelde waarden van deze genormaliseerde residuen worden geschat voor alle blokken in het onderzoeksgebied. Dit gebeurt met de volgende vergelijking:

$$\hat{y}_B'(x) = \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i' \quad (6)$$

Hierin is  $y_B'(x)$  het blokgemiddelde genormaliseerde residu voor het blok met middelpunt (in de 3D ruimte)  $x$  en  $m$  is het totaal aantal niet-gemengde monsters in het onderzoeksgebied (bijvoorbeeld voor lood geldt dat  $m = 873$ ). De waarden van de gewichten  $\lambda_i$  hangen af van de afstand tussen de monsterlocaties van de  $y_i'$  en de locatie  $x$ . Naarmate de monsterlocaties verder van het blok liggen krijgen de daar berekende genormaliseerde residuen een kleiner gewicht. De wijze waarop de gewichten met de afstand afnemen hangt af van de gebruikte schattingsmethode. In dit geval wordt gebruik gemaakt van block-kriging. Hierbij wordt aangenomen dat alle genormaliseerde residuen (ook die in verschillende strata liggen) gecorreleerde stochastische variabelen zijn met dezelfde standaard normale kansverdeling. In dat geval hangen de waarden van de gewichten  $\lambda_i$  af van de mate waarin de correlatie tussen de genormaliseerde residuen afneemt met de afstand. Een functie die dit beschrijft heet het semivariogram (Journel en Huijbregts, 1978). Bij block-kriging worden de gewichten  $\lambda_i$  met behulp van dit semivariogram zo berekend dat de variantie van de schattingsfout  $[\hat{y}_B'(x) - y_B'(x)]$  minimaal is. Hiermee is vergelijking 6 de beste lineaire schatter van  $y_B'(x)$ .

**(g) Berekening van de mediaankaart, de gehalteskaart en de betrouwbaarheidskaarten**

Uit de vorige stappen is nu voor elk blok met willekeurig middelpunt  $x$  van het grid de schatting  $\hat{y}_B'(x)$  (uit block-kriging) bekend, alsmede de schatting van het gemiddelde  $\hat{\mu}_h$  en de variantie  $\hat{\sigma}_h^2$  voor alle strata  $h$ . Hiermee kunnen de gewenste thematische kaarten worden berekend.

### **De mediaankaart**

Voor een blok ( $50 \times 50 \times 0,5 \text{ m}^3$ ) met middelpunt  $x$  dat ligt in het stratum  $h$  wordt de waarde  $m(x)$  op de mediaankaart geschat volgens:

$$\hat{m}(x) = e^{\hat{\mu}_h(x)} \quad (7)$$

### **De gehaltekaart**

Voor een blok met middelpunt  $x$  dat ligt in het stratum  $h$  wordt het blokgemiddelde gehalte  $z_B(x)$  geschat volgens:

$$\hat{z}_B(x) = \delta e^{[\hat{\mu}_h(x) + \hat{\sigma}_h(x) \hat{y}'_B(x)]} \quad (8)$$

Het gedeelte  $[\hat{\mu}_h(x) + \hat{\sigma}_h(x) \hat{y}'_B(x)]$  in bovenstaande vergelijking is een schatter van het blokgemiddelde loggehalte  $y_B(x)$ . De constante  $\delta$  is een correctiefactor (groter dan 1) om uit dit blokgemiddelde loggehalte het blokgemiddelde gehalte te berekenen. De waarde van deze correctiefactor hangt af van de vorm van het semivariogram en de grootte van het blok (zie Aanhangel A). Deze correctiefactor is in het algemeen benaderend. Alleen als we aannemen dat de gehalten binnen het blok lognormaal verdeeld zijn kunnen we deze factor exact berekenen.

### **De betrouwbaarheidskaarten**

Met de beschreven geostatistische methode kunnen onder andere de volgende betrouwbaarheidskaarten worden geschat:

- De variantiekaart. Zoals gezegd wordt het blokgemiddelde loggehalte voor een blok met middelpunt  $x$  geschat door  $\hat{y}'_B(x) = [\hat{\mu}_h(x) + \hat{\sigma}_h(x) \hat{y}'_B(x)]$ . Op de variantiekaart wordt voor elk blok de variantie van de schattingsfout van het blokgemiddelde loggehalte  $\text{var}[\hat{y}'_B(x) - y_B(x)] = \sigma_B^2(x)$  weergegeven. Bij de berekening van de variantie  $\sigma_B^2(x)$  wordt rekening gehouden met de schattingsfout van het gemiddelde  $\mu_h(x)$  van het stratum waarin het blok ligt en met de schattingsfout van het blokgemiddelde genormaliseerde residu  $y'_B(x)$ . De variantie  $\sigma_B^2(x)$  voor een blok met middelpunt  $x$  in een stratum  $h$  kan dan worden geschat met behulp van de declusteringsgewichten (zie vergelijking 3), de kringgewichten (zie vergelijking 6), de variantie voor het stratum (uit vergelijking 4) en het semivariogram. De vergelijking om deze variantie te schatten wordt gegeven in Aanhangel A.
- De kaart met de onderzijde van het 95% betrouwbaarheidsinterval. Voor een blok met middelpunt  $x$  dat ligt in het stratum  $h$  kan nu de onderzijde van het betrouwbaarheidsinterval voor het blokgemiddelde gehalte  $z_B(x)$  geschat worden volgens:

$$\hat{z}_B^o(x) = \delta e^{[\hat{\mu}_h(x) + \hat{\sigma}_h(x) \hat{y}'_B(x) - 2\hat{\sigma}_B(x)]} \quad (9)$$

- De kaart met de bovenzijde van het 95% betrouwbaarheidsinterval. Voor een blok met middelpunt  $x$  dat ligt in het stratum  $h$  kan nu de bovenzijde van het

betrouwbaarheidsinterval voor het blokgemiddelde gehalte  $z_B(x)$  geschat worden volgens:

$$\hat{z}_B^b(x) = \delta e^{[\hat{\mu}_h(x) + \hat{\sigma}_h(x)\hat{y}_B(x) + 2\hat{\sigma}_B(x)]} \quad (10)$$

Ook hier wordt dezelfde (benaderende) correctiefactor gebruikt  $\delta$  als bij het berekenen van de gehalteskaart. Ook hier geldt dat alleen als we aannemen dat de gehalten binnen het blok lognormaal verdeeld zijn kunnen we deze factor exact berekenen. Verder geldt dat vergelijkingen (9) en (10) alleen de grenzen van het 95% betrouwbaarheid geven wanneer wordt aangenomen dat de schattingsfout van het blokgemiddelde loggehalte normaal verdeeld is.

Resumerend kunnen we nu stellen dat het blokgemiddelde gehalte geschat wordt door  $\hat{z}_B(x)$  en we met 95% zekerheid kunnen stellen dat het werkelijke blokgemiddelde gehalte  $z_B(x)$  ligt in het interval  $[\hat{z}_B^o(x), \hat{z}_B^b(x)]$ . Met behulp van de gehalteskaart en de variantiekaart kunnen we ook andere betrouwbaarheidsintervallen (bijvoorbeeld het 70 % betrouwbaarheidsinterval) schatten, alsmede de kans dat het blokgemiddelde gehalte onder of boven een bepaalde waarde ligt.

### 3 Resultaten

#### 3.1 Inleiding

De methoden van paragraaf 2.3 zijn toegepast op gehalten van Cu, Pb, Zn, 10PAKs, humus en lutum. In dit hoofdstuk worden de resultaten beschreven. Alvorens met de ruimtelijke interpolatie (d.w.z. het schatten van blokgemiddelde gehalten) kan worden begonnen, moeten eerst representatieve gehalten worden gevonden voor monsters onder de detectielimiet (stap 1 par. 2.3). Tabel 2 geeft voor elke stof deze representatieve waarde.

*Tabel 2 Representatieve waarden voor gehalten onder de detectielimiet*

Stof	Effectieve waarde
Cu	3,55 mg/kg ds.
Pb	5,20 mg/kg ds.
Zn	5,00 mg/kg ds.
10PAKs	0,052 mg/kg ds.
humus	0,60 %
lutum	0,34 %

#### 3.2 Stratificatie

Aanvullende informatie is gebruikt om het onderzoeksgebied te stratificeren (te verdelen in homogene subgebieden).

Voor Cu, Pb, Zn en 10PAKs is hiervoor gebruik gemaakt van de landgebruikskaart. De geomorfogenetische kaart is hierbij niet gebruikt. Omdat de gehalten aan vervuilende stoffen in de stad Utrecht voornamelijk het gevolg zijn van menselijke activiteiten is er geen sterk verband te verwachten tussen de natuurlijke opbouw van de ondergrond en de concentraties aan zware metalen en 10PAKs. Uit het onderzoek van Bijl (1994) bleek ook geen verband te bestaan tussen het humus- en lutumgehalte van de monsters en de gemeten gehalten Cu, Pb, Zn en 10PAKs.

De volgende klasse-indeling is gebruikt voor de stratificatie ten behoeve van PAK's en zware metalen:

- 1 Woongebied (woningen, straten, trottoirs, parken, tuinen, begraafplaatsen, kassen, sportterreinen). Met behulp van de ouderdom van de verschillende wijken is deze klasse verder opgesplitst naar:
  - 1a woonwijken gebouwd voor 1880;
  - 1b woonwijken gebouwd tussen 1880 en 1945;
  - 1c woonwijken gebouwd na 1945.
- 2 Snelwegen en grote doorgaande wegen (inclusief het aangrenzend groen van de snelwegen).

- 3 Bedrijfsterreinen en spoorwegtracés.
- 4 Open landelijk gebied.
- 5 Water.

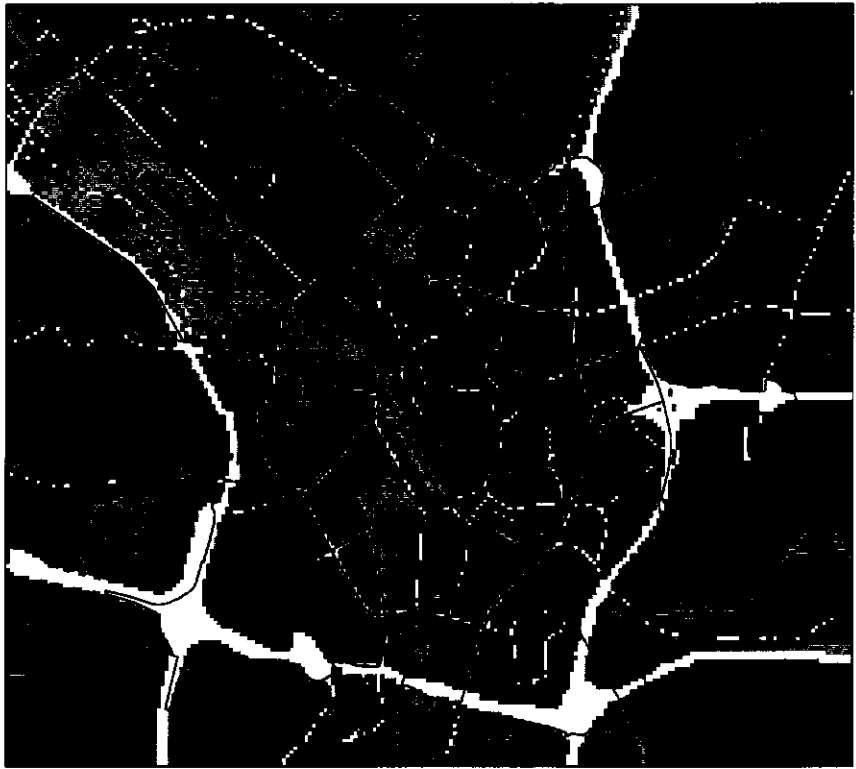
Figuur 1 toont de resulterende kaart met de boven beschreven stratificatie. Dezelfde stratificatie is gebruikt voor alle vier de lagen. Verder is er niet extra naar laag gestratificeerd: voor blokken die liggen in het stratum 'open landelijk gebied' worden dus voor alle diepten dezelfde gemiddelden en varianties geschat. Anders gezegd: bij het schatten van de gemiddelden en de varianties van een stratum worden alle monsters gebruikt die in hetzelfde stratum liggen, onafhankelijk van hun diepte.

Het is te verwachten dat het humus- en lutumgehalte een relatie vertoont met de opbouw van de ondergrond. De geomorfogenetische kaart (Berendsen, 1982) geeft onder meer aan wat voor textuurvolgving er tot 2,0 m - mv. is te verwachten. De geomorfogenetische kaart van Utrecht geeft alleen de natuurlijke textuurvolgving. De meeste wijken van Utrecht zijn echter opgehoogd ten behoeve van de woningbouw. Hiermee moet dus rekening gehouden worden.

Met behulp van de geomorfogenetische kaart en informatie over de gemiddelde ophoging per woonwijk is voor elk van de vier lagen een kaart gemaakt van textuurklassen. De volgende klasse-indeling is gehanteerd:

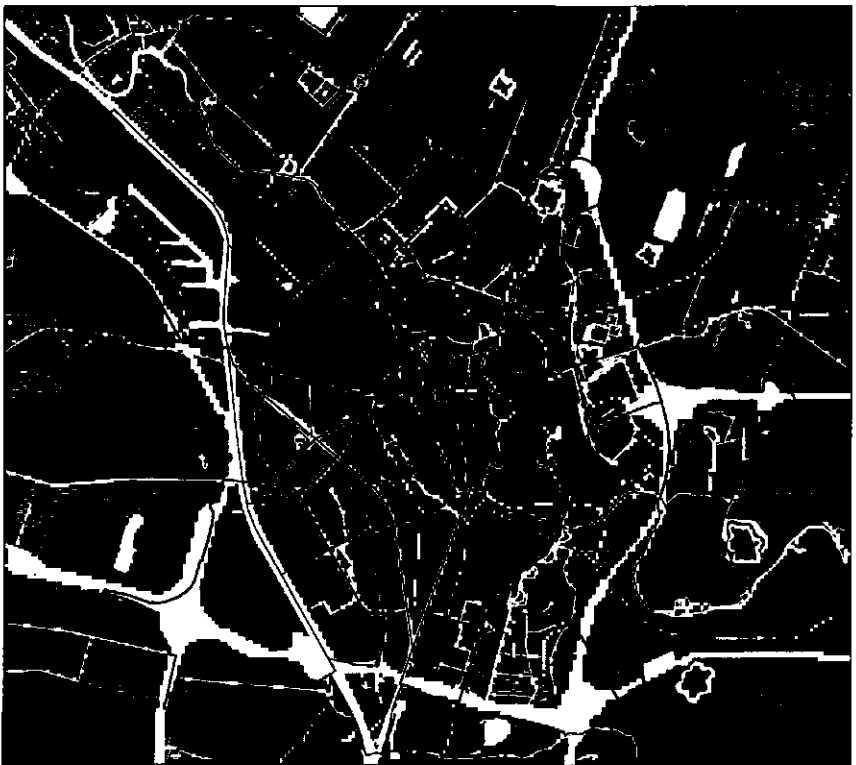
- 1 Zand;
- 2 Lichte klei en zavel;
- 3 Matige en zware klei;
- 4 Moerig materiaal en veen.

De resulterende kaarten worden weergegeven in de figuren 2a t/m 2d. Vanwege de ophoging zijn in de kaarten van de bovenste lagen de contouren van de stad Utrecht te herkennen. Omdat de textuur met de diepte verandert vindt men op één locatie in het horizontale vlak verschillende klassen voor verschillende diepten. Net als bij de stratificatie aan de hand van het landgebruik is niet verder naar de diepte gestratificeerd. Voor een blok in de bovenste laag dat ligt in het stratum 'zand' wordt dus hetzelfde gemiddelde geschat als voor een blokken in diepere lagen die in hetzelfde stratum 'zand' liggen.



- legenda landgebruik
- bebouwing ; woongebied voor 1880
  - bebouwing ; woongebied 1880 – 1945
  - bebouwing ; woongebied na 1945
  - snelwegen en doorgaande wegen
  - spoorwegen en industrieterreinen
  - landelijk gebied ; voornamelijk onbebouwd
  - water

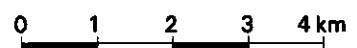
*Fig. 1 Stratificatie naar landgebruik zoals gebruikt voor gehalten van Cu, Pb, Zn en 10PAKs*



- legenda  
(mg/kg droge stof)
- < 0
  - 24.78
  - 45.48
  - 48.04
  - 61.07
  - 72.14
  - 76.72
  - water



schaal 1 : 100 000



*Fig. 3 Mediaankaart van het loodgehalte*



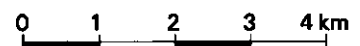
legenda textuur

- zand
- zavel
- klei
- veen en moerig materiaal
- water

*Fig. 2a Stratificatie naar textuur zoals gebruikt voor humus- en lutumgehalte; 0-0,5 m - mv.*



schaal 1 : 100 000



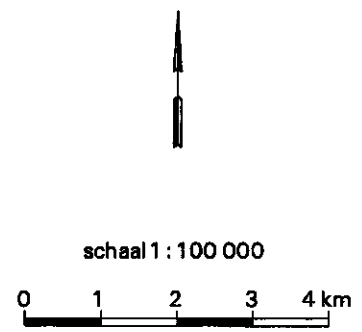
*Fig. 2b Stratificatie naar textuur zoals gebruikt voor humus- en lutumgehalte; 0,5-1,0 m - mv.*





- legenda textuur
- zand
  - zavel
  - klei
  - veen en moerig materiaal
  - water

**Fig. 2c** Stratificatie naar textuur zoals gebruikt voor humus- en lutumgehalte; 1,0-1,5 m - mv.



**Fig. 2d** Stratificatie naar textuur zoals gebruikt voor humus- en lutumgehalte; 1,5-2,0 m - mv.

### 3.3 Mediaankaarten; gemiddelden en varianties per stratum

Uit de bestanden met gemengde en niet-gemengde monsters (met representatieve waarden voor gehalten onder de detectielimiet) zijn aparte bestanden gemaakt voor elk stratum en voor elke stof. Voor elk stratum en voor elke stof is het gedeclusterde gemiddelde berekend (vergelijking 3) met alle gemengde en niet-gemengde monsters waarbij een  $N$  maal gemengd monster ook  $N$  maal meetelde. Voor elk stratum en voor elke stof is met de niet-gemengde monsters de gedeclusterde variantie berekend. Tabel 3 toont voor elk stratum en voor elke stof het geschatte gemiddelde en de geschatte variantie van het loggehalte. Ook is aangegeven hoeveel monsters zijn gebruikt. Bij het aantal monsters dat is aangegeven voor de berekening van het gemiddelde is meegenomen dat gemengde monsters meerdere malen worden meegeteld. De nummering van de strata is in overeenstemming met de nummering gebruikt in paragraaf 3.2. Voor elke stof is ook weergegeven wat de ratio (F-ratio in de tabel) is van de variantie tussen de strata en de gemiddelde variantie binnen strata. Hoe hoger deze ratio, des beter wordt de ruimtelijke variatie in gehalten door de stratificatie verklaard.

Optelling van de niet-gemengde monsters voor elke stof leert dat hun totale aantal kleiner is dan de aantallen vermeld in tabel 1. Dit komt omdat alle monsters die vallen in blokken die het landgebruiks-stratum 'water' niet zijn gebruikt (voor deze blokken worden geen gehalten en medianen geschat).

De gemiddelde waarden die per stratum gevonden zijn voor de zware metalen en de 10PAKs voldoen redelijk aan de verwachting. Zo zijn de gehalten aan zware metalen groter naarmate de wijk ouder is. De hoogste waarden van Pb, Cu en 10PAKs worden gevonden op industrieterreinen en langs spoorwegtracés. Hoge 10PAKs-gehalten worden ook gevonden langs de snelwegen en grote doorgaande wegen. Zoals verwacht worden de laagste gehalten aan zware metalen en 10PAKs gevonden in het open landelijke gebied. De F-ratio's duiden erop dat de stratificatie slechts een zeer gering deel van de totale variatie in gehalten verklaard. Dit zou het gevolg kunnen zijn van de relatief grote variantie binnen de strata. Deze resultaten betekenen echter niet dat stratificatie geen zin zou hebben. De varianties tussen de strata verschillen namelijk aanzienlijk. Dit betekent dat de stratificatie wel degelijk een grote invloed heeft. Ten eerste hangt het geschatte blokgemiddelde gehalte zelf af van de variantie van het stratum waarin het blok ligt (zie vergelijking 8). Verder hebben de varianties van de strata invloed op de berekening van de betrouwbaarheidskaarten (vergelijkingen 9 en 10). We kunnen op basis van tabel 3 bijvoorbeeld verwachten dat het zinkgehalte voor blokken in het 'bebouwd gebied van voor 1880' veel nauwkeuriger is te schatten dan voor 'het open landelijke gebied'.

Tabel 3 toont ook dat er voor het humus- en lutumgehalte in strata 2 en 4 geen niet-gemengde monsters aanwezig zijn. Dit betekent dat we voor deze strata geen varianties kunnen schatten, en dus ook geen F-ratio. Bij de berekening van de gehaltekaarten en betrouwbaarheidskaarten zijn deze varianties echter wel nodig. Daarom zijn bij de berekening van deze kaarten de strata 1 en 2 samen genomen, als ook de strata 3 en 4. De varianties van deze gecombineerde strata zijn respectievelijk 0,594 en 1,102 voor het humusgehalte en 0,654 en 1,294 voor het lutumgehalte.

Tabel 3 Gedeclusterde gemiddelden  $\hat{\mu}_h$  en varianties  $\hat{\sigma}_h^2$  van loggehalten per stof en per stratum;  $n_h$  is het aantal gemengde + niet-gemengde monsters,  $m_h$  het aantal niet-gemengde monsters

	Stratum	$n_h$	$m_h$	$\hat{\mu}_h$	$\hat{\sigma}_h^2$
Cu	1a	274	83	3,323	1,051
	1b	898	369	3,202	1,854
	1c	528	159	2,970	1,686
	2	171	44	2,883	1,119
	3	197	55	3,465	1,220
	4	409	112	2,553	2,096
F-ratio = 0,044					
Pb	1a	324	123	4,279	2,097
	1b	895	347	4,112	2,382
	1c	518	149	3,817	2,976
	2	172	45	3,872	2,979
	3	193	51	4,340	1,723
	4	413	107	3,210	2,224
F-ratio = 0,053					
Zn	1a	315	117	4,413	0,818
	1b	790	244	4,414	1,963
	1c	530	159	4,227	1,913
	2	171	44	4,248	1,612
	3	195	53	4,664	0,896
	4	406	109	3,746	2,263
F-ratio = 0,040					
IOPAKs	1a	186	44	-0,352	3,583
	1b	462	147	0,458	5,784
	1c	375	110	0,299	7,274
	2	118	25	0,627	5,033
	3	139	32	0,787	7,201
	4	272	59	-0,627	5,448
F-ratio = 0,037					
Humus	1	220	17	0,597	0,608
	2	29	-	0,302	-
	3	136	13	0,731	1,101
	4	8	-	0,636	-
Lutum	1	223	20	1,364	1,342
	2	29	-	0,777	-
	3	135	13	1,310	1,287
	4	8	-	1,447	-

Als voor elk van de strata het gemiddelde gehalte bekend is kan met behulp van vergelijking 7 de mediaankaart worden berekend. Als voorbeeld wordt in figuur 3 (zie p. 27) de mediaankaart voor het loodgehalte getoond. Zoals te zien is de stratificatie naar landgebruik hier 1 op 1 in terug te vinden.

### 3.4 Gehaltekaarten

Na block-kriging van de genormaliseerde residuen (vergelijkingen 5 en 6) kunnen de gehaltekaarten worden gemaakt (vergelijking 8). Bij de berekening van de gehaltekaarten voor humus en lutum is geen block-kriging gebruikt. De reden hiervoor is dat er zo weinig niet-gemengde waarnemingen van het humus- en het lutumgehalte zijn dat er geen zinnig kaartbeeld ontstaat voor de gehaltekaart. Het blokgemiddelde gehalte wordt dan berekend uit de mediaankaart door het mediane gehalte van het stratum waarin het blok ligt (vergelijking 7) te vermenigvuldigen met de correctiefactor.

Figuur 4 geeft de gehaltekaarten voor de vier lagen van het Pb-gehalte. We zien in het kaartbeeld de stratificatie terug met daarop gesuperponeerd de plaatsen waar uit metingen blijkt dat het Pb-gehalte hoger of lager is dan het gemiddelde. Zoals verwacht neemt het Pb-gehalte af met de diepte beneden het maaiveld. Ondanks de kleine F-ratio in tabel 3 is de stratificatie duidelijk terug te zien in het patroon. Hoewel verwacht mag worden dat de stratificatie op plaatsen met weinig monsterpunten betere schattingen van de blokgemiddelde gehalten oplevert, is dit pas goed na te gaan wanneer extra monsters worden genomen om de schattingen te valideren. Validatie van de geschatte blokgehalten zou dan ook een rol moeten spelen bij de selectie van toekomstige monsterlocaties.

### 3.5 Betrouwbaarheidskaarten

Uit de resultaten van de block-kriging<sup>1</sup> van de genormaliseerde residuen en de varianties van de strata uit tabel 3 kan de variantie van de fout in de schatting van het gemiddelde loggehalte ( $\sigma_B^2$ ) worden geschat. De variantie  $\hat{\sigma}_B^2$  is een maat voor de nauwkeurigheid van de schattingsmethode. In figuur 5 wordt voor het Pb-gehalte en voor de bovenste laag deze variantie weergegeven. Net als bij de gehaltekaart is de invloed van de stratificatie duidelijk te zien. De kleinste varianties worden aangetroffen rond de monsterlocaties.

Uit de variantie  $\sigma_B^2$  kunnen met vergelijkingen 9 en 10 de grenzen van het 95%-betrouwbaarheidsinterval van de blokgemiddelde gehalten worden berekend. Figuur 6 toont de resultaten voor het Pb-gehalte voor de bovenste laag. Om vergelijking met de gehaltekaart te vergemakkelijken is dezelfde legenda gebruikt als in figuur 4. Op de kaart met de ondergrens van het betrouwbaarheidsinterval zijn de plaatsen met de hoogste gehalten ('hot spots') goed te zien, terwijl op de kaart van de bovengrens de plaatsen met de lagere gehalten (voor zover door metingen ontdekt) goed zijn te onderscheiden.

---

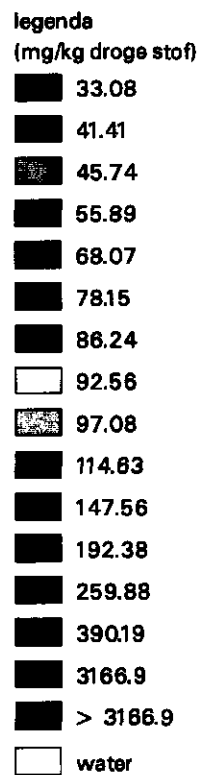
<sup>1</sup> Voor het humus- en lutumgehalte, waar geen block-kriging plaatsvindt, is de variantie van de schattingsfout in het blokgemiddelde gehalte gelijk aan de som van de (geschatte) stratum-variantie  $\hat{\sigma}_h^2$  en de variantie van de fout die gemaakt wordt bij het schatten van het gemiddelde.

### 3.6 Kaarten met percentielen

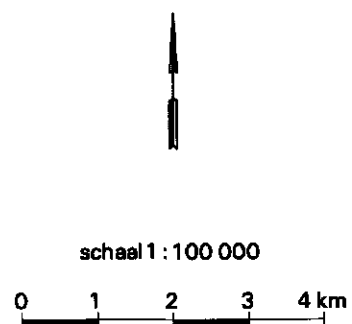
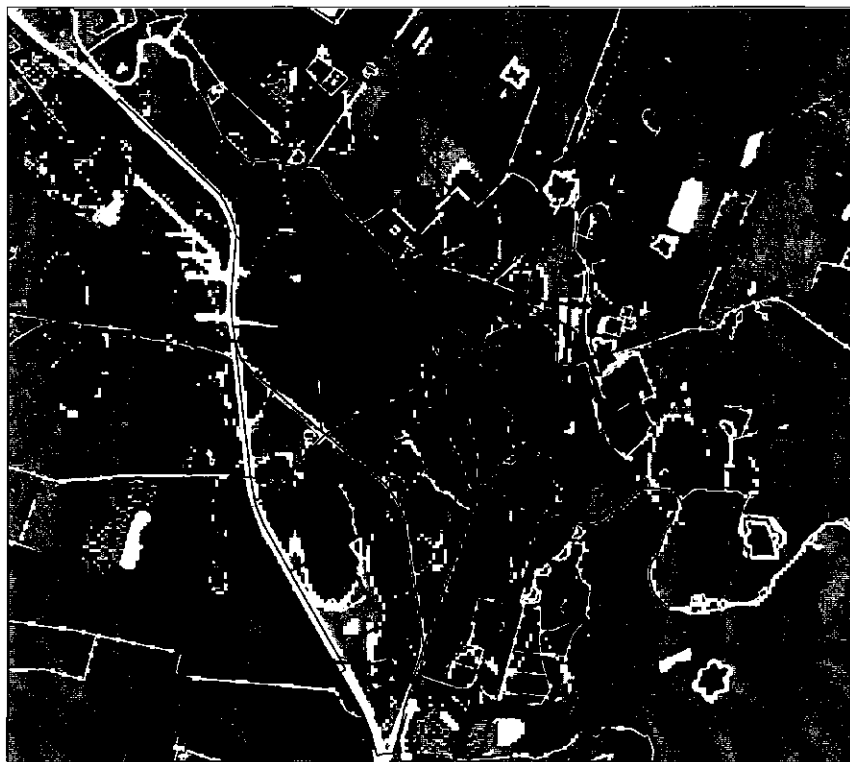
Uit de gehaltekaarten en de variantiekaarten kunnen ook kaarten met percentielen worden berekend (zie Aanhangsel A). Een 10% percentielenkaart geeft voor elk blok dat gehalte weer waar het blokgemiddelde gehalte met een kans van 10% onder ligt. Deze kaarten kunnen bijvoorbeeld gebruikt worden bij normering. Als bijvoorbeeld een waarde op de 10% percentielenkaart voor een blok hoger is dan de interventiewaarde kunnen we stellen dat de kans dat het gemiddelde gehalte hoger is dan de interventiewaarde tenminste 90% is. Figuur 7 toont kaarten van het 10% en het 70% percentiel van het blokgemiddelde Pb-gehalte voor de bovenste laag.

### 3.7 Analyse variantiereductie door aanvullende metingen

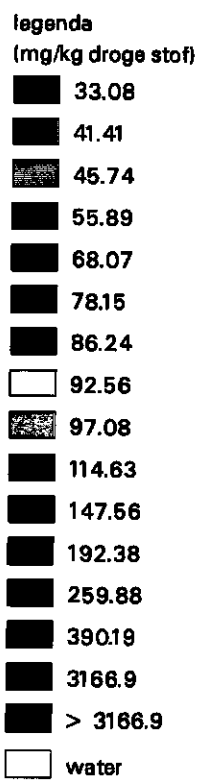
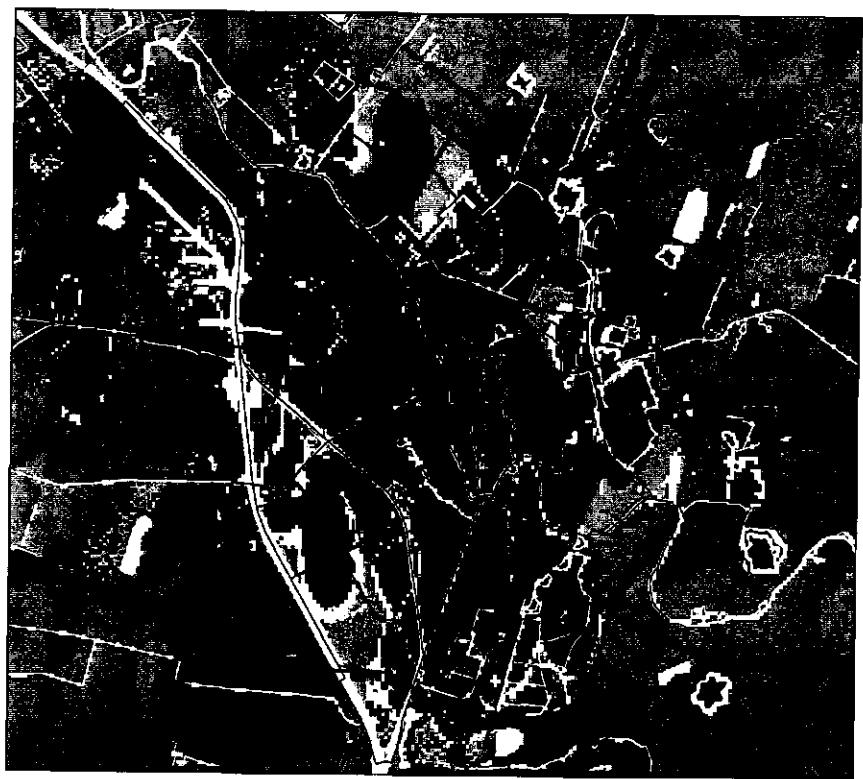
Met behulp van methoden die in hoofdstuk 2 zijn beschreven is het ook mogelijk te analyseren wat de reductie is in de variantie van het geschatte blokgemiddelde loggehalte  $\sigma_B^2$  wanneer extra monsters worden genomen. Hiervoor zijn voor iedere stof de stratungemiddelden en varianties uit tabel 3 nodig, de semivariogrammen van de genormaliseerde residuen, de locaties (x,y,z-coördinaten) van de reeds aanwezige monsters en de beoogde locaties van de nog te nemen aanvullende monsters. Figuur 8 (zie p. 36) toont het resultaat. Deze figuur geeft de percentuele afname in de variantie van de schattingsfout van het blokgemiddelde gehalte van Pb voor de bovenste laag. Deze afname is een maat voor de afname van de onzekerheid. Te zien is dat een bemonsteringsschema is geanalyseerd met verspreide monsters en een concentratie van monsterpunten op een punt waar men een verontreiniging vermoedde (rechtsboven). Door de percentuele variantie-afname af te zetten tegen de kosten van bemonstering kan men tot een optimalisatie van de bemonsteringslocaties komen.



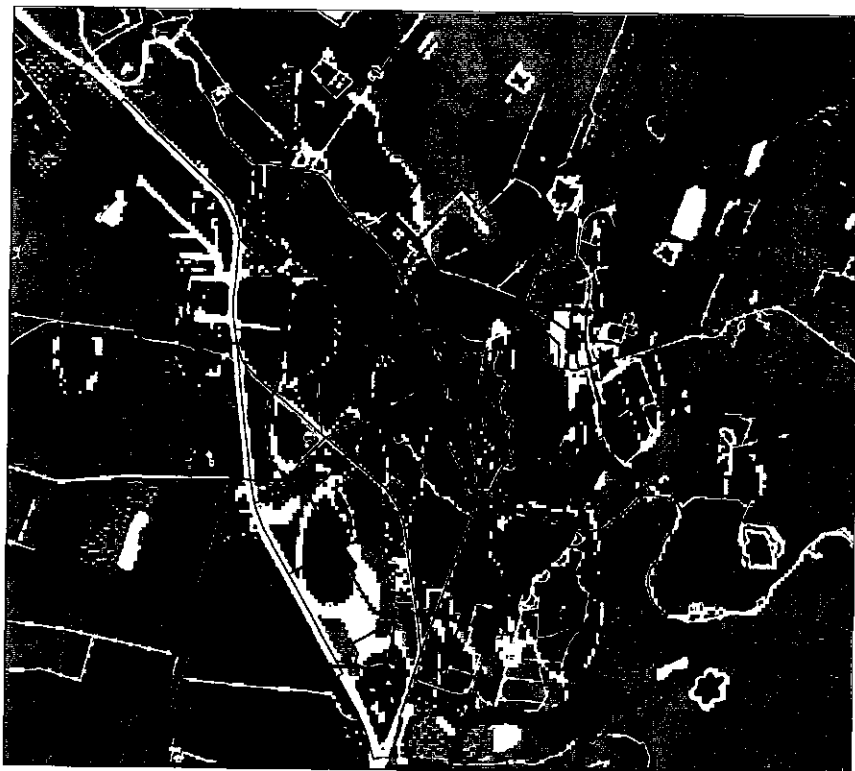
*Fig. 4a* Gehaltenkaart voor lood; 0-0,5 m -mv.



*Fig. 4b* Gehaltenkaart voor lood; 0,5-1,0 m -mv.



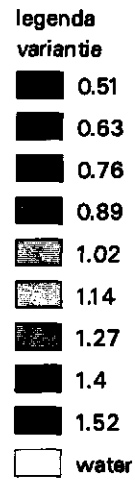
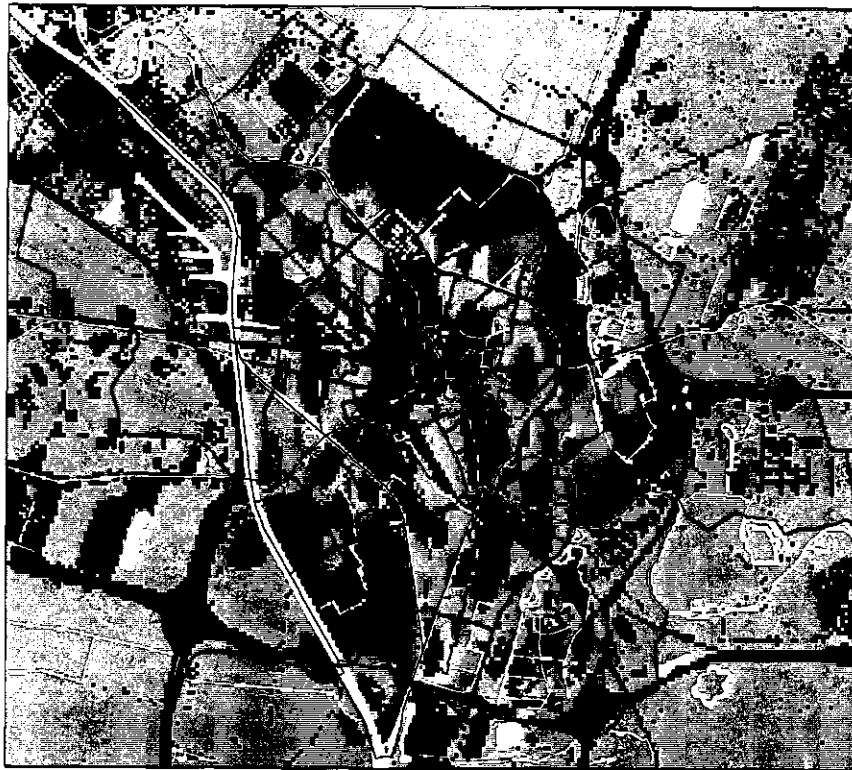
*Fig. 4c Gehaltenkaart voor lood; 1,0-1,5 m -mv.*



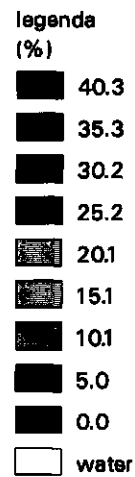
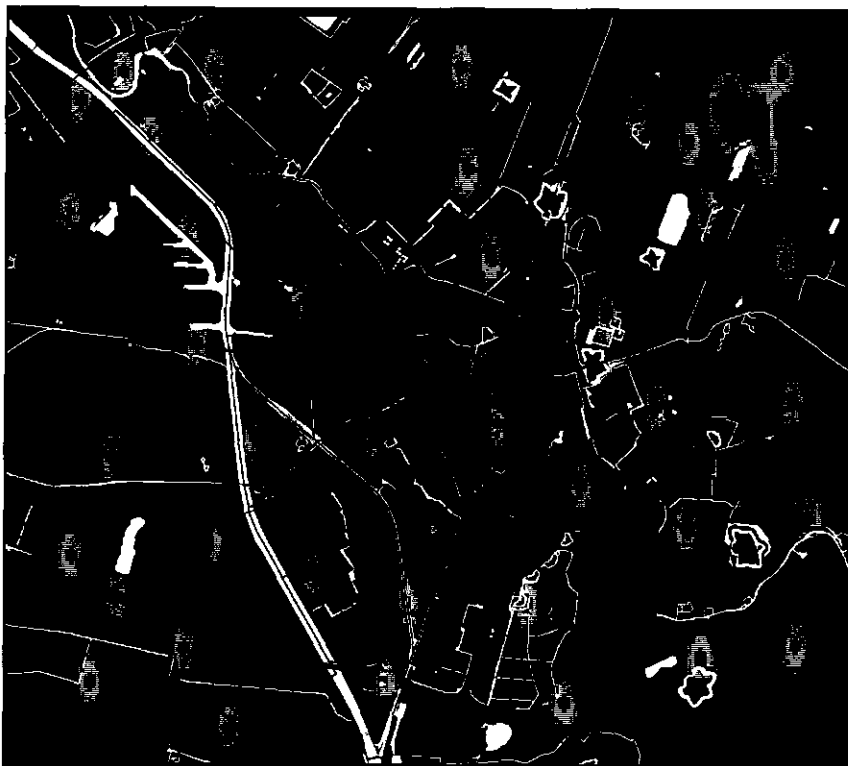
schaal 1 : 100 000



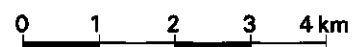
*Fig. 4d Gehaltenkaart voor lood; 1,5-2,0 m -mv.*



**Fig. 5** Kaart met varianties van de schattingsfout van blokgemiddelde loggehalten van lood voor de laag 0-0,5 m -mv.

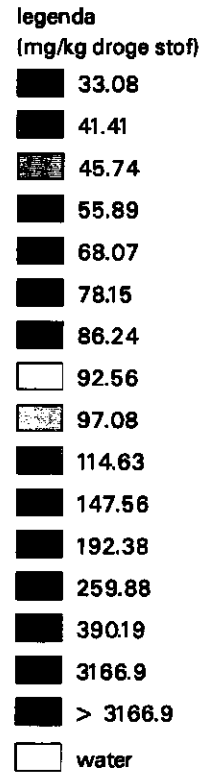
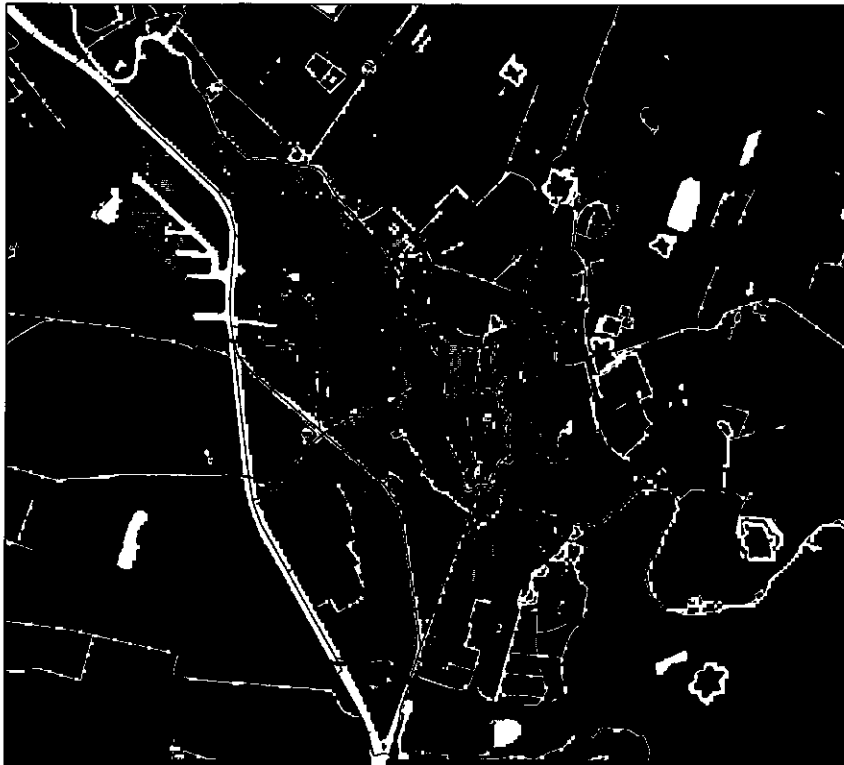


schaal 1 : 100 000

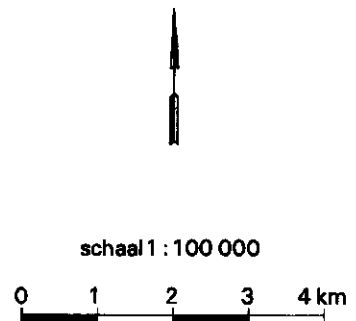
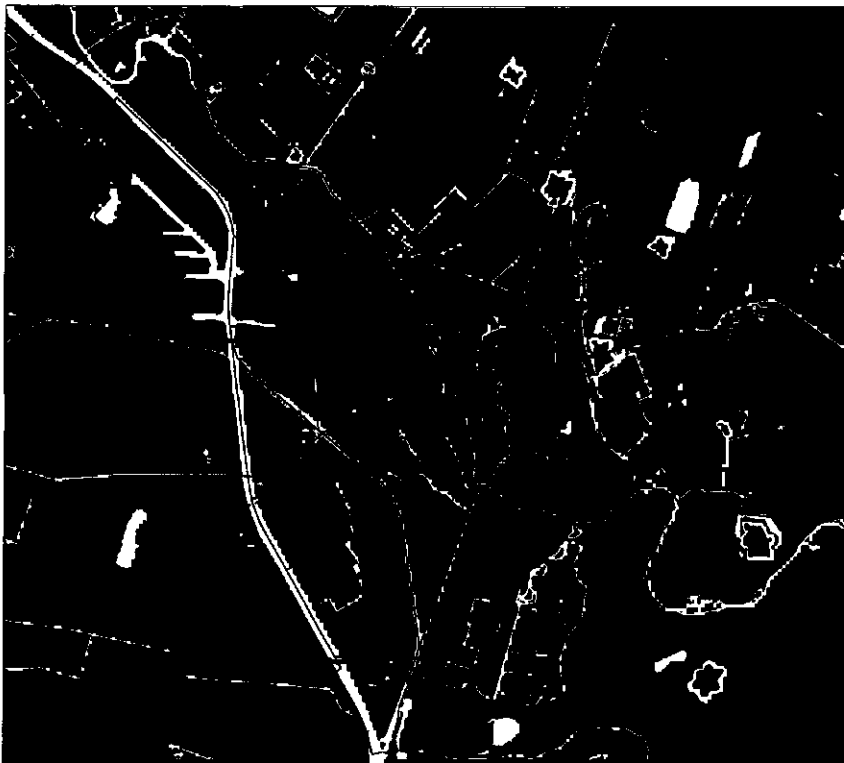


**Fig. 8** Percentuele afname van de schattingsvariancie van het blokgemiddelde loggehalte van lood voor de laag 0-0,5 m -mv. voor een schema van aanvullende bemonstering. Alle aanvullende monsters zijn genomen in deze laag

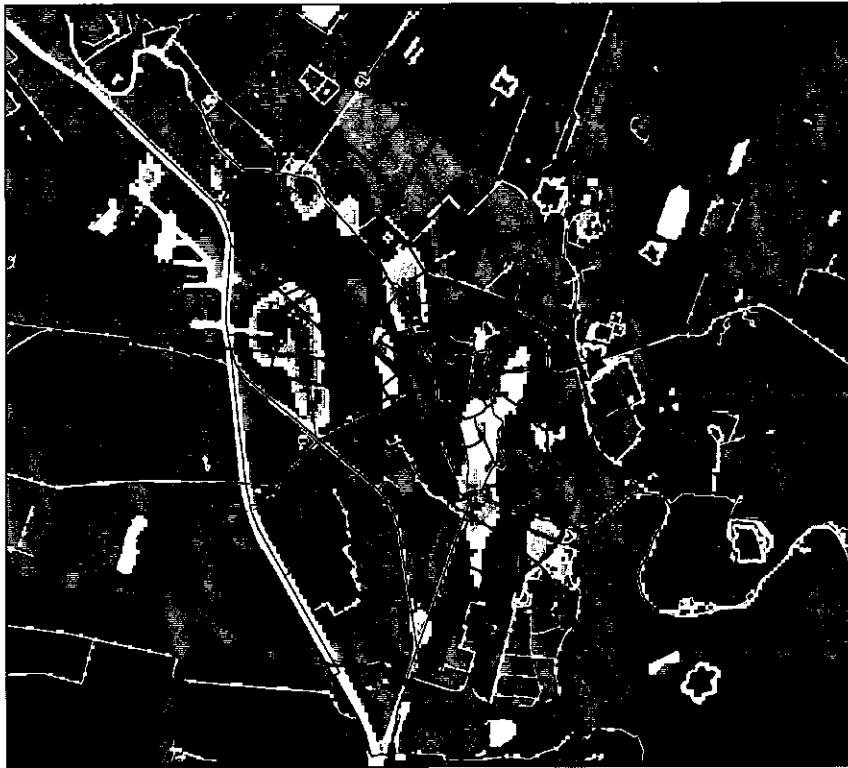




**Fig. 6a** Kaart met grenzen van het 95%-betrouwbaarheidsinterval van blokgemiddelde gehalten van lood voor de laag 0-0,5 m -mv. ; ondergrens



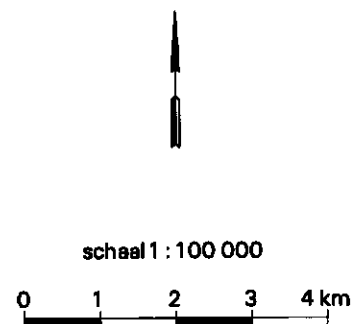
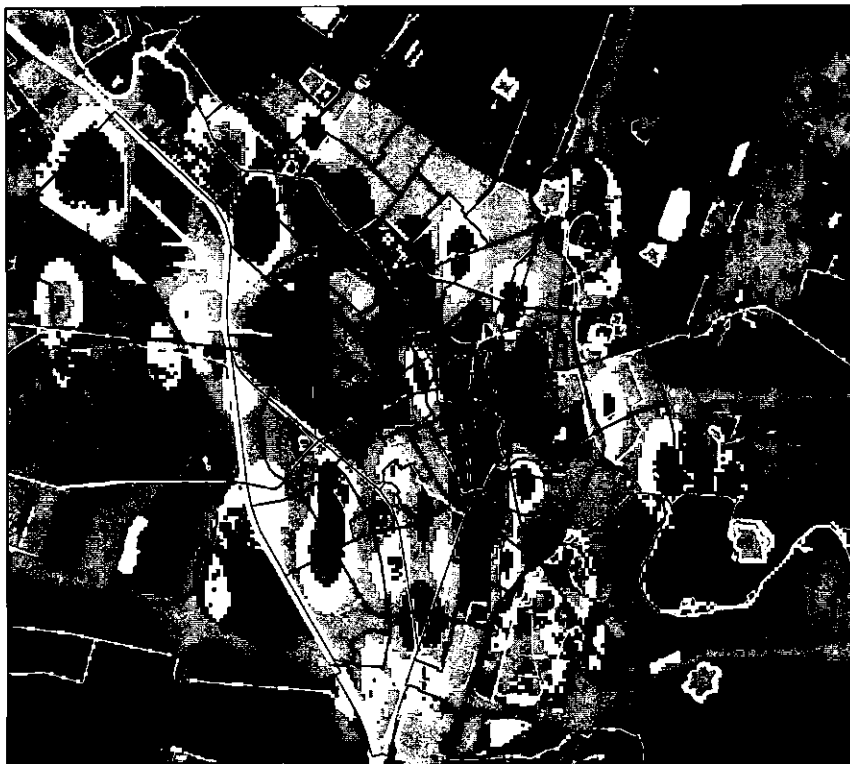
**Fig. 6b** Kaart met grenzen van het 95%-betrouwbaarheidsinterval van blokgemiddelde gehalten van lood voor de laag 0-0,5 m -mv. ; bovengrens



legenda  
(mg/kg droge stof)

- 10.6
- 19.53
- 29.42
- 43.03
- 56.72
- 75.19
- 95.4
- 163.91
- 250.2
- 375.9
- 499.15
- 660.63
- 874.74
- 1612.8
- 41166.01
- water

**Fig. 7a** Kaart met percentielen van het blokgemiddelde loodgehalte voor de laag 0-0,5 m -mv.; 10% percentiel



**Fig. 7b** Kaart met percentielen van het blokgemiddelde loodgehalte voor de laag 0-0,5 m -mv.; 70% percentiel

## **4 Voorstel voor gebruik van resultaten voor actief bodembeheer**

### **4.1 Inleiding**

Bij de ruimtelijke interpolatie van gehalten aan vervuilende stoffen ontstaan interpolatiefouten. Men moet immers uit een beperkt aantal gemeten gehalten op monsterlocaties schattingen maken van gehalten op onbezochte locaties. Deze schattingen gaan nu eenmaal gepaard met onzekerheid. In dit project is er voor gekozen deze onzekerheid niet te veronachtzamen maar expliciet te maken. Er is dus gekozen voor een statistische interpolatiemethode die niet alleen gehalteskaarten oplevert maar ook de onzekerheid kwantificeert in de vorm van betrouwbaarheidskaarten. Dit heeft als groot voordeel boven een deterministische beschrijving dat de onzekerheid over de geschatte gehalten meegewogen kan worden bij beleidsbeslissingen op het gebied van actief bodembeheer. Het idee is dat het in acht nemen van de onzekerheid leidt tot beter afgewogen beslissingen.

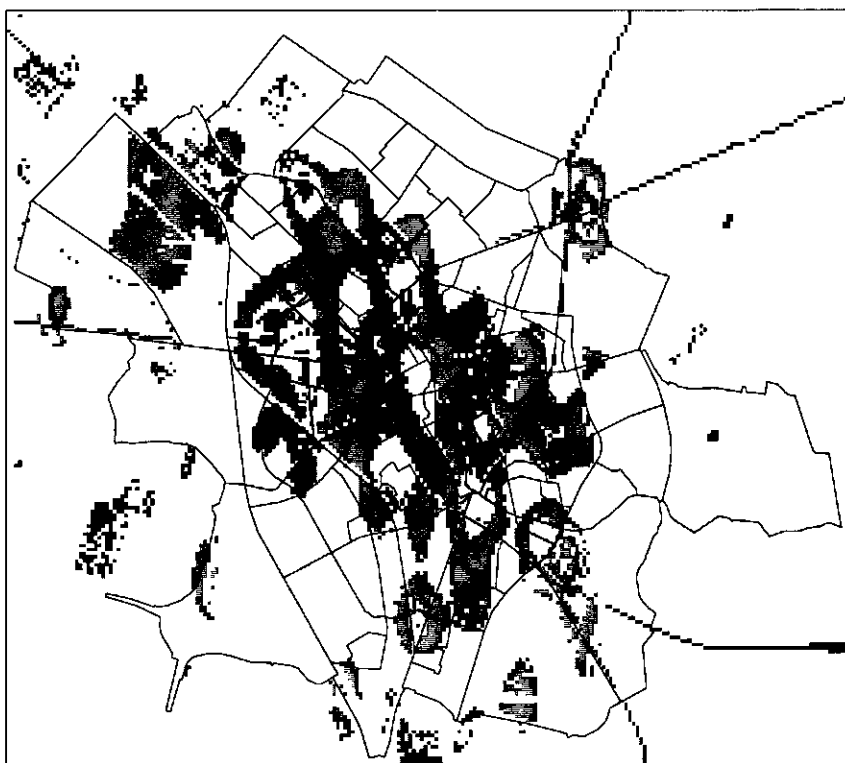
In dit hoofdstuk worden voorstellen gedaan hoe de geschatte mediaankaarten, gehalteskaarten en betrouwbaarheidskaarten gebruikt kunnen worden bij beslissingen in het kader van actief bodembeheer, zoals de prioriteitstelling van onderzoek en sanering, vergunningverlening, het bepalen van hergebruiks-mogelijkheden, en bij het selecteren van bemonsteringslocaties ten behoeve van het verbeteren van de gehalteskaarten. Allereerst wordt op basis van de gehalteskaart en de betrouwbaarheidskaarten een voorstel gedaan voor het maken van kaarten met schone- en vuile-grondklassen. Vervolgens wordt aangegeven hoe deze kaarten, alsmede de gehalteskaarten en de betrouwbaarheidskaarten, gebruikt kunnen worden voor de verschillende gemeentelijke taken op het gebied van actief bodembeheer. Tenslotte zal worden uitgewerkt hoe deze kaarten gebruikt kunnen worden bij het opzetten van bemonsteringsplannen voor de verbetering van de gehalteskaarten.

### **4.2 Indeling in schone- en vuile-grondklassen**

Op basis van de gehalteskaarten en de variantiekaarten kunnen percentielenkaarten worden gemaakt (zie par. 3.6). Ook kan op deze wijze die gedeelten van de grond worden geselecteerd waarvoor geldt dat ze met een zekere kans boven een bepaalde waarde liggen. Voorgesteld wordt om uit de percentielenkaarten op basis van overschrijdingskansen van streefwaarden en interventiewaarden voor elke stof de volgende klassen te definiëren.



**Fig. 9a** Kaart met S2- en S3-gebieden voor het loodgehalte in de laag 0-0,5 m -mv.  
 Inkleuring geeft de natuurlijke logaritme van de geschatte blokgemiddelde gehalten



**Fig. 9b** Kaart met V3-gebieden voor het loodgehalte in de laag 0-0,5 m -mv.  
 Inkleuring geeft de natuurlijke logaritme van de geschatte blokgemiddelde gehalten

(a) *Schone-grondklassen*

- S1  $50\% < P(\text{gehalte} \leq \text{streefwaarde}) \leq 70\%$  mogelijk schoon - verder onderzoek nodig  
S2  $70\% < P(\text{gehalte} \leq \text{streefwaarde}) \leq 90\%$  waarschijnlijk schoon - verder onderzoek nodig  
S3  $P(\text{gehalte} \leq \text{streefwaarde}) > 90\%$  schoon

(b) *Vuile-grondklassen*

- V1  $5\% < P(\text{gehalte} \geq \text{interventiewaarde}) \leq 50\%$  mogelijk verontreinigd - verder onderzoek nodig  
V2  $50\% < P(\text{gehalte} \geq \text{interventiewaarde}) \leq 70\%$  waarschijnlijk verontreinigd - verder onderzoek urgent  
V3  $P(\text{gehalte} \geq \text{interventiewaarde}) > 70\%$  verontreinigd - sanering nodig

Op basis van bovenstaande classificatie kunnen we het onderzoeksgebied verdelen in verschillende klassen. De S-classificatie is dus om te bepalen in hoeverre grond als 'schoon' kan worden aangemerkt, en de V-classificatie om te bepalen in hoeverre een grond 'vuil' genoemd kan worden. Zoals is te zien is deze classificatie gebaseerd op kansuitspraken, zodat bovenstaande klassen ook wel als betrouwbaarheidsklassen kunnen worden aangemerkt. De classificatie is zodanig dat de klassen S1 t/m S3 elkaar uitsluiten en dat de klassen V1 t/m V3 elkaar uitsluiten. De voorgestelde classificatie is slechts één van vele mogelijke. Er kunnen ook meer of minder klassen worden gedefinieerd of andere percentages kunnen gehanteerd worden. De streefwaarden en interventiewaarden voor een stof kunnen gekozen worden overeenkomstig landelijke normen, of desgewenst zelf worden gekozen overeenkomstig de functie van een bepaald gebied. Bij de keuze van de percentages en de streef- en interventiewaarden is het echter wel raadzaam zo te werk te gaan dat de S-klassen en de V-klassen ruimtelijke klassen opleveren die elkaar niet overlappen, i.c. dat grond niet tegelijkertijd als vuil of schoon wordt aangemerkt. Dit zou namelijk een daadkrachtige besluitvorming in de weg staan. Het grote voordeel van een dergelijke classificatie onder onzekerheid is dat men vrij is in het kiezen van het aantal klassen. Bij een deterministische classificatie heeft men slechts twee klassen: boven of onder de norm. Er wordt dan geen rekening gehouden met de altijd aanwezige onzekerheid.

Figuur 9 toont twee kaarten, de kaart met daarop de S2- en de S3-gebieden en de kaart met de V3-gebieden voor het Pb-gehalte in de bovenste laag. Er is een verdere detaillering aan deze gebieden gegeven door het geschatte blokgemiddelde Pb-gehalte toe te kennen aan de blokken die binnen deze klassen vallen. Als streefwaarde is gekozen de landelijke norm voor Pb van 85 mg/kg ds. (Notitie Milieukwaliteitsdoelstellingen Bodem en Water, 1992) en als interventiewaarde de landelijke norm van 530 mg/kg ds. (Circulaire Interventiewaarden Bodemsanering, 1994). Te zien is dat de S1/S2 en V3 gebieden elkaar niet overlappen.

### **4.3 Toepassing van thematische kaarten in het actief bodembeheer**

CIT (1995) beschrijven een groot aantal gemeentelijke taken die voortkomen uit het voeren van actief bodembeheer. Een tabel wordt gepresenteerd waarin per gemeentelijke taak wordt aangegeven welke thematische kaarten van de bodemkwaliteitskaart hierbij gebruikt moeten worden. Tabel 4 is vergelijkbaar met het CIT (1995) voorstel, maar nu in plaats van een achtergrondgehaltekaart de mediaankaart, de gehaltekaart en de betrouwbaarheidskaarten. In deze paragraaf wordt voor elke gemeentelijke taak een voorbeeld gegeven hoe deze kaarten als hulpmiddel kunnen worden gebruikt. Zoals gezegd gaat het hier slechts om voorbeelden. Vanzelfsprekend is de uiteindelijke vertaling van de thematische kaarten naar beleid op het gebied van actief bodembeheer aan de Gemeente Utrecht. Verder beschouwen de thematische kaarten uit dit onderzoek alleen de min of meer diffuus voorkomende stoffen die bovendien weinig mobiel zijn. Voor toxische (vaak mobiele) stoffen die acute sanering vereisen (bijvoorbeeld benzenen) rest alleen de vraag wat de saneringsprioriteit is en hoe deze sanering technisch moet worden uitgevoerd. Hierbij spelen ook de geohydrologische en bodemfysische omstandigheden een rol (Koolenbrander, 1995).

Bij het maken van de mediaankaarten, gehaltekaarten en betrouwbaarheidskaarten zijn alle bruikbare monsters meegenomen, ook die monsters die liggen in gebieden die reeds gesaneerd zijn of worden. De reden hiervoor is dat vanwege de ruimtelijke correlatie in gehalten deze monsters meer zeggen over gehalten in gebieden rond de saneringsplek dan de concentraties van monsters genomen na de sanering. De laatste monsters moeten dan ook eigenlijk niet in het bestand van monsters voor het maken van de kaarten worden opgenomen. Voordat de thematische kaarten gebruikt worden bij actief bodembeheer moet echter eerst een overlay gemaakt worden van deze kaarten met een kaart van reeds gesaneerde plaatsen. Op de gehaltekaart krijgen de blokken die in een reeds gesaneerde locatie vallen dan de waarde van de gehalten na sanering. Op de betrouwbaarheidskaarten krijgen deze blokken dan het predikaat 'niet van toepassing'. Na deze GIS-operatie zijn de gehaltekaart en de betrouwbaarheidskaarten klaar voor gebruik bij het actief bodembeheer.

Er volgt nu een opsomming van de gemeentelijke taken uit Tabel 4 met voorbeelden hoe de verschillende bodemkwaliteitskaarten hierbij gebruikt kunnen worden. Hierbij gaan we er vanuit dat de bovenbeschreven correctie voor reeds gesaneerde locaties is doorgevoerd.

#### ***Loketfunctie***

Met behulp van de gehaltekaart en de kaart met potentieel verontreinigde locaties kan men het publiek voorlichten over mogelijk verontreinigde locaties en voor welke stof welke gehalten daar verwacht mogen worden. Op basis van de kaarten met schone- en vuile-grondklassen kan men aangeven of sanering nodig is.

*Tabel 4 Relatie tussen gemeentelijke taken en benodigde kaarten voor de Gemeente Utrecht*

	Pot. veront. locaties	Onderzochte locaties	Gehalten- kaart	Betrouwb. kaarten	Mediaan- kaart	Kwetsbh. kaart
<b>Projectbeslissingen op basis locatiegegevens</b>						
- loketfunctie	X	X	X	X	-	-
- handhaving WM	X	X	X	X	-	-
- uitvoeren onderzoek	X	X	X	X	-	-
- inschatten saneringskosten	X	X	X	X	X	X
<b>Projectbeslissingen op basis van gebiedsgegevens</b>						
- terugsaneerwaarde vaststellen	-	-	-	-	X	X
- hergebruiksmogelijkheden bepalen	-	X	X	X	-	X
<b>Beslissingen/taken op gebiedsniveau</b>						
- prioriteitsstelling	X	X	X	X	-	X
- vrijstelling bodemonderzoeksplicht	X	X	X	X	-	X
- ondersteuning RO	X	X	X	X	-	X
<b>Onderhoud</b>						
- aanvullende bemonstering voor verbetering kaarten	X	X	X	X	-	X

### ***Handhaving Wet Milieubeheer***

Op grond van de classificatie in vuile-grond en schone-grondklassen kan men voor elke stof besluiten nemen: niets doen, verder onderzoek nodig/urgent of sanering nodig.

### ***Uitvoeren onderzoek***

Als besloten is op een locatie verder bodemonderzoek te verrichten kan met behulp van de methode die is beschreven in paragraaf 3.7 worden geanalyseerd waar men voor de kartering van een bepaalde stof het beste de aanvullende bemonsteringslocaties kan plannen.

### ***Inschatting saneringskosten***

Wanneer de terugsaneerwaarde bekend is kan voor elke stof uit de gehaltekaart berekend worden wat de verwachte saneringskosten zijn, terwijl men uit de betrouwbaarheidkaarten of de percentielenkaarten kan zeggen dat de saneringskosten met bijvoorbeeld 90% zekerheid zullen liggen tussen bepaalde grenzen. Hierdoor wordt expliciet rekening gehouden met tegenvallers ten gevolge van onzekerheid.

### ***Terugsaneerwaarde vaststellen***

In het CIT (1995) rapport wordt beschreven hoe de kaart met achtergrondgehalten gebruikt kan worden om daaruit gebiedspecifieke terugsaneerwaarden te halen. Binnen de methode die gevolgd is in dit onderzoek zouden terugsaneerwaarden dan kunnen worden afgeleid uit de mediaankaarten. Terugsanering kan natuurlijk ook functiespecifiek gebeuren. De kwetsbaarheidskaart of het bestemmingsplan vormen hierbij geschikte beleidsinstrumenten.

### ***Hergebruiksmogelijkheden bepalen***

Hergebruiksmogelijkheden van grond kunnen ook worden bepaald uit de schone-grond- en vuile-grondklassen voor elke stof. Zo zou men kunnen eisen dat grond uit de klasse S1 van een stof (of een combinatie van stoffen) alleen op andere S1-locaties van deze stof (of een combinatie van stoffen) kan worden gebruikt mits op de nieuwe locaties de functie dit toelaat. Eenzelfde redenatie kan worden gebruikt voor de andere S- en V-klassen.

### ***Prioriteitstelling***

1 *Prioriteit onderzoek.* Deze prioriteitstelling zou per stof kunnen plaatsvinden in de volgende stappen.

Stap 1. Selecteer de gebieden met een hoge mate van kwetsbaarheid (met de kwetsbaarheidskaart) en/of gebieden waarin men is geïnteresseerd in verband met uitbreidingsplannen of vergunningverlening.

Stap 2. Selecteer op basis van de vuile- schone-grondklassen:

- hoogste prioriteit vuile grond: de locaties die verdacht zijn (i.e. potentieel verontreinigd) en waar een klasse V2 wordt aangetroffen;
- één-na-hoogste prioriteit vuile grond: de locaties die verdacht zijn (i.e. potentieel verontreinigd), met een hoge mate van kwetsbaarheid op de kwetsbaarheidskaart en waar een klasse V1 wordt aangetroffen;
- hoogste prioriteit schone grond: de S2-locaties (waarschijnlijk schoon);
- één-na-hoogste prioriteit schone grond: de S1-locaties (mogelijk schoon).

Stap 2 in de prioriteitstelling van het onderzoek is gebaseerd op het uitzoeken van die locaties waarvan het met minimale meetinspanning verwacht mag worden dat er duidelijkheid ontstaat of dit risicolocaties zijn (in het geval van vuile-grondlocaties) of locaties waar grond van goede kwaliteit is te vinden (in het geval van schone-grondlocaties).

Stap 3. Een verdere prioriteitstelling kan plaatsvinden door op locaties van hoge prioriteit zodanig te bemonsteren dat de percentuele afname van de variantie (zie par. 3.7) het grootst is.

Stap 4. Nadat per stof een prioriteitstelling voor onderzoek is vastgesteld (en mogelijke monsterlocaties) moeten deze voor alle stoffen worden gecombineerd om tot een uiteindelijke prioriteitstelling voor alle stoffen te komen. Hierbij wordt er vanuit gegaan dat op toekomstige monsterlocaties de gehalten aan Cu, Pb, Zn en 10Paks worden bepaald.

2 *Prioriteit sanering.* Locaties die verdacht zijn (i.e. potentieel verontreinigd), die in kwetsbare gebieden liggen en waar een klasse V3 voor een bepaalde stof wordt aangetroffen.



### ***Vrijstelling bodemonderzoek***

Afhankelijk van de beoogde functie kan men voor hergebruik van grond of voor nieuwbouw besluiten alleen vrijstelling te verlenen voor locaties die voor Cu, Pb, Zn en 10Paks in klassen S2 en S3 vallen.

### ***Ondersteuning Ruimtelijke Ordening***

Functies die zeer afhankelijk zijn van schone grond kunnen worden toegekend aan gebieden waar Cu, Pb, Zn en 10Paks in klasse S3 vallen, functies waarvoor het belang van schone grond minder is kunnen plaatsvinden op S2-, S1- of zelfs V1-locaties. Ook kan bij uitbreidingsplannen met behulp van de gehalteskaarten, de betrouwbaarheidskaarten en de terugsaneerwaarde een inschatting gemaakt worden van de meerkosten ten gevolge van saneringen of het vervoer van vuile/schone grond.

## **4.4 Aanvullende bemonstering ter verbetering van gehalteskaarten**

Eén van de doelstellingen van dit project is een methode te ontwikkelen waarmee de gehalteskaarten elk jaar verbeterd kunnen worden door aanvullende bemonstering. De methode van prioriteitstelling van de onderzoeksinspanning (vier stappen) zoals beschreven in paragraaf 4.2 is hiervoor uitermate geschikt en kan ook gebruikt worden voor het uitzoeken van monsterlocaties ter verbetering van de gehalteskaarten.

Aanvullende bemonstering dient echter ook de volgende twee doelen.

- Schatting van semivariogrammen van genormaliseerde residuen. De semivariogrammen van genormaliseerde residuen die voor het maken van de bodemkwaliteitskaarten zijn gebruikt, zijn geschat uit alle gemengde en niet-gemengde waarnemingen, waarvan een groot gedeelte preferent op locaties met hoge gehalten zijn genomen. Een belangrijke verbetering van de methode is te verwachten als deze semivariogrammen beter geschat kunnen worden. Vooral in de eerste jaren na het gereed komen van dit project zal een deel van de bemonsteringsinspanning van de gemeente Utrecht hierop gericht moeten zijn. Voor het schatten van semivariogrammen is bemonstering op een regelmatig grid geschikt, waarbij lokaal verdicht wordt om de korte-afstandsvariatie te kunnen bepalen (Stein, 1991).
- Validatie van de gehalteskaarten en de betrouwbaarheidskaarten. Gedurende de eerste jaren is het belangrijk om na te gaan of de gebruikte interpolatiemethode gemiddeld de juiste gehalten op onbezochte locaties oplevert en of de geschatte betrouwbaarheidsintervallen (of percentielen) gemiddeld de juiste waarden hebben. In dit project is weliswaar crossvalidatie uitgevoerd (Journel en Huijbregts, 1978) maar voor een ondubbelzinnige test van het succes van de methode dient deze gevalideerd te worden op een onafhankelijke set waarnemingen. De locaties van de testlocaties dienen dan bij voorkeur aselekt (of aselekt per stratum) te worden gekozen (Cochran, 1977).

Het is duidelijk dat in de eerste jaren van het onderhoud van de gehalteskaarten aanvullende bemonstering drie verschillende doelen dient die in het algemeen tot

verschillende bemonsteringsstrategieën zullen leiden. Men zal bij het ontwerp van een plan voor aanvullende bemonstering dus tot een nauwkeurige afweging van deze doelen dienen te komen.

## 5 Conclusies en aanbevelingen

Met de geostatistische methode die voor dit project is ontwikkeld zijn we in staat om uit problematisch waarnemingsmateriaal, zoals gemengde monsters en monsters die preferent op vervuilde plaatsen zijn genomen, kaarten met blokgemiddelde gehalten te schatten, alsmede kaarten van bijbehorende schattingsvarianties. De methode bestaat uit een volledige 3D-interpolatie en houdt door middel van stratificatie rekening met voorinformatie zoals bodemtype of landgebruik. Het nieuwe aan deze methode is dat bij de berekening van de schattingsvarianties van blokgemiddelden de fouten in de schatting van de stratagemiddelden expliciet wordt meegenomen. Het grote voordeel van de methode is dat nu alle gemengde monsters meegenomen kunnen worden bij het schatten van de stratagemiddelden. Bij methoden die impliciet de stratagemiddelden en de bijbehorende schattingsvarianties schatten (zoals universal kriging (Heuvelink, 1996)) kunnen alleen niet-gemengde monsters worden gebruikt. Methoden waarin stratagemiddelden of één of andere functie voor het gemiddelde worden aangenomen, maar die geen rekening houden met de onzekerheid hiervan (Van Tooren, 1993), zijn minder geschikt omdat ze per definitie de onzekerheid van de geschatte blokgemiddelden onderschatten.

De gehaltekaarten en betrouwbaarheidskaarten die volgen uit de geostatistische interpolatiemethode vormen de basis om, rekening houdend met de onzekerheid over de werkelijke gehalten, afgewogen beslissingen te nemen op het gebied van het actief bodembeheer. Door uit de gehaltekaarten en de betrouwbaarheidskaarten een beperkt aantal schone-grond- en vuile-grondklassen te definiëren kunnen prioriteiten worden gesteld van saneringen en onderzoeksinspanningen. Verder zijn we met de betrouwbaarheidsintervallen in staat om in te schatten tussen welke grenzen de saneringskosten met een bepaalde zekerheid zullen liggen.

Bij dit project is het bebouwd gebied niet verder gestratificeerd naar grond onder gebouwen en grond onder tuinen, straten en openbaar groen. De reden hiervoor is dat er nauwelijks monsters genomen zijn onder de gebouwen. Uit onderzoek in Arnhem (Van der Valk et al., 1996) blijkt echter dat de grond onder de gebouwen in het algemeen minder is verontreinigd dan bijvoorbeeld in de tuinen. Het verdient derhalve de aanbeveling om in de toekomst ook onder de gebouwen monsters te nemen en de grond onder de gebouwen als aparte strata te behandelen. Dit vereist echter wel een hogere resolutie van het grid (bijvoorbeeld  $10 \times 10 \times 0,5 \text{ m}^3$ ).

Naast de bemonstering voor het nemen van projectbeslissingen is aanvullende bemonstering noodzakelijk vanwege:

- de verbetering van de nauwkeurigheid van de gehaltekaarten;
- de verbetering van de schatting van de semivariogrammen die gebruikt worden bij de block-kriging-interpolatie;
- de validatie van de gebruikte geostatistische interpolatiemethode.

Deze drie redenen leiden echter tot verschillende bemonsteringsstrategieën. Hieruit volgt de aanbeveling dat bij verder onderzoek een bemonsteringsplan moet worden

opgesteld dat zoveel mogelijk al deze doelen kan dienen. Dit bemonsteringsplan zou eventueel ook informatie kunnen verschaffen over gehalten onder de gebouwen.

Als de bodemkwaliteitskaarten gebruikt gaan worden als basis voor projectbeslissingen moet men in staat zijn rond de projectlocaties 'in te zoomen'. Dat wil zeggen dat men voor kleinere blokken gemiddelde gehalten kan schatten voor een beperkt gebied rond een locatie. Het inbouwen van een inzoomoptie is eveneens een aanbeveling voor verder onderzoek. Wanneer hierbij dezelfde stratificatie wordt gebruikt als in dit onderzoek (dus ook met dezelfde resolutie) is dit betrekkelijk eenvoudig te realiseren. Wanneer men echter wil dat ook de stratificatie op een kleinere resolutie plaatsvindt, bijvoorbeeld om binnen de strata 'bebouwd gebied' de grond onder gebouwen te onderscheiden van de overige grond, dan is het inbouwen van de inzoomoptie weliswaar realiseerbaar, maar een stuk bewerkelijker.

## Literatuur

Ahmed, S. en G. De Marsily, 1987. 'Comparison of geostatistical methods for estimating transmissivity using data on transmissivity and specific capacity'. *Water Resources Research* 23, 9: 1717-1737.

Berendsen, H.J.A., 1982. *De Genese van het landschap in het zuiden van de Provincie Utrecht, een fysisch-geografische Studie*. Utrecht, Proefschrift Rijksuniversiteit Utrecht, UGS 25.

Bijl, F.J.C., 1994. *Achtergrondgehalten van immobiele bodemverontreinigingen in Utrecht*. Utrecht, Chemiewinkel.

Brus, D.J. en J.J. de Gruijter, 1993. 'Design-based versus model-based estimates of spatial means: theory and application in environmental soil science'. *Environmetrics* 4, 2: 123-152.

Circulaire interventiewaarden bodemsanering, 1994. *Staatscourant* 95, 24 mei.

Cochran, W.G., 1977. *Sampling techniques*. New York, John Wiley and Sons, Inc.

Delhomme J.P., 1978. 'Kriging in the hydrosociences'. *Advances in Water Resources* 1, 5: 251-266.

Deursen, W.P.A. van, 1995. *Geographical information systems and dynamic models; development and application of a prototype spatial modelling language*. Utrecht, Proefschrift Universiteit Utrecht, NGS 190.

Deutsch, C.V. en A.G. Journel, 1992. *GSLIB, Geostatistical software library and user's guide*. New York, Oxford University Press.

Heuvelink, G.B.M., 1996. 'Identification of field attribute error under different models of spatial variation'. *International Journal of Geographical Information Systems* 10, 8: 921-935.

Isaaks E.H. en R.M. Srivastava, 1989. *Applied geostatistics*. New York, Oxford University Press.

Journel, A.G. en Ch. J. Huijbregts, 1978. *Mining geostatistics*. London, Academic Press.

Koolenbrander, J.G.M., 1995. *Urgentie van bodemsanering; de handleiding*. 's Gravenhage, Staatsuitgeverij.

Leidraad Bodembescherming, 1990. *Deel 2: Sanering*. 's Gravenhage, Staatsuitgeverij.

Notitie Milieukwaliteitsdoelstellingen Bodem en Water, 1992. 's Gravenhage, Tweede Kamer, vergaderjaar 1991-1992, 21 990 en 21 250, nr. 3, 5 februari 1990.

Stein, A., 1991. *Spatial interpolation*. Wageningen, proefschrift Landbouwniversiteit Wageningen.

Stein, A., Hoogerwerf, M. en J. Bouma, 1988. 'Use of soil-map delineations to improve (co-)kriging of point data on moisture deficits'. *Geoderma* 43: 163-177.

Tooren, C.F. van, 1993. 'Guess-field methode; gebruik van voorkennis bij bodemverontreinigingsonderzoek'. In J.C. Hooghart (Ed.). *Proceskennis en Statistiek in Bodem en Water*, Delft, CHO-TNO.

Valk, W.J.M. van der, H. van Ammers, M. in 't Veld, A.J. Meijer en A. Bot, 1996. 'Diffuse bodemverontreiniging in de gemeente Arnhem'. *Bodem* 6, 1: 24-25.

#### ***Niet-gepubliceerde bronnen***

Bierkens, M.F.P., 1995. *De relatie tussen de gehaltekaart van de Gemeente Utrecht en de gemeentelijke bodemkwaliteitskaarten zoals voorgesteld door CSO, IWACO en TAUW Milieu*. Wageningen. Nota voor VNG.

CIT - CSO, IWACO en TAUW Milieu, 1995. *Gemeentelijke bodemkwaliteitskaarten als basis voor actief bodembeheer*. Eindrapportage fase 1 & 2.

DLO-Staring Centrum, 1994. *Ruimtelijke interpolatie van zware metalen en PAK's ten behoeve van de bodemkwaliteitskaart van de Gemeente Utrecht*. Wageningen. Projectbeschrijving.

Werkgroep Bodemsanering, 1993. *Saneren zonder stagneren*. Rapport.

## **Aanhangsel A Theoretische onderbouwing van de statistische interpolatiemethode**

### **A.1 Inleiding**

Omdat één van de eisen van de Gemeente Utrecht was, dat de nauwkeurigheid van de geïnterpoleerde kaarten met blokgemiddelde gehalten moest worden gekwantificeerd, is besloten een statistische interpolatiemethode te gebruiken. De statistische interpolatiemethode moest ook een oplossing bieden voor preferente bemonstering en gemengde monsters. Verder moest deze methode in staat zijn om gebruik te maken van aanvullende informatie, zoals bodemkaarten en landgebruikskaarten. Er is derhalve gekozen voor een methode waarbij eerst het onderzoeksgebied wordt opgedeeld in min of meer homogene subgebieden (i.c. strata) en daarna een statistische interpolatiemethode wordt toegepast. Een voor de hand liggende krigingmethode is ‘universal kriging’ waarbij zowel de stratagemiddelden en de gemiddelde concentraties van de blokken tegelijkertijd kunnen worden geschat (Heuvelink, 1996). Een andere voor de hand liggende methode is ‘stratified kriging’ waarbij voor elk van de strata een aparte kriging-interpolatie wordt toegepast (Stein et al., 1988). De declusteringeigenschappen van kriging zouden dan automatisch corrigeren voor de preferente bemonstering.

Het probleem met deze methoden is echter dat zij geen gebruik kunnen maken van gemengde monsters, welke in dit geval toch meer dan de helft van de dataset uitmaken. De statistische interpolatiemethode die voor dit project is ontwikkeld kan dit wel. De methode heeft in de literatuur nog geen naam gekregen, maar ik zal deze in het volgende aanduiden als ‘gestratificeerde residuele kriging’. De methode lijkt nog het meest op de methode die bekend staat als ‘kriging met een guess field’ (Delhomme, 1978; Ahmed en De Marsily, 1987; Van Tooren, 1993), maar is algemener zoals we later zullen zien. Hieronder volgt een beschrijving van gestratificeerde residuele kriging zoals deze is toegepast in dit project. Om de voorspelling van negatieve gehalten te voorkomen worden alle data loggetransformeerd. In de volgende beschrijving wordt het symbool  $z$  gebruikt voor het gehalte en  $y$  ( $= \ln(z)$ ) voor het loggehalte. Voor de duidelijkheid heeft de beschrijving betrekking op de behandeling van één stof tegelijkertijd. Verder wordt er vanuit gegaan dat er reeds een representatieve waarde is gekozen voor de gehalten onder de detectielimiet (zie par. 2.3).

### **A.2 Stratificatie en schatting van stratagemiddelden en -varianties**

Met behulp van de landgebruikskaart of de bodemkaart wordt het onderzoeksgebied verdeeld in een beperkt aantal strata. Het gemiddelde en de variantie van het loggehalte  $y$  voor een stratum  $h$  worden als volgt geschat:

$$\hat{\mu}_h = \sum_{i=1}^{n_h} w_{hi} y_{hi} \quad (\text{A1})$$

$$\sigma_h^2 = \sum_{i=1}^{m_h} v_{hi} (y_{hi} - \hat{\mu}_h)^2 \quad (\text{A2})$$

waarbij  $n_h$  de som is van de gemengde en niet-gemengde monsters in stratum  $h$  (monsters die zijn samengesteld uit een mengsel van  $N$  monsters worden hierbij ook  $N$  maal geteld) en  $m_h$  is het aantal niet-gemengde monsters in stratum  $h$ . De  $y_{hi}$  zijn loggehalten op monsterlocaties in stratum  $h$  en  $w_{hi}$  en  $v_{hi}$  zijn de cel-declustering-gewichten. De som van de  $w_{hi}$  en de som van de  $v_{hi}$  zijn gelijk aan 1. Zoals gebruikelijk is bij preferente bemonstering op locaties met hogere gehalten wordt voor elke stof de grootte van de declusteringcellen zodanig gekozen dat het geschatte stratumgemiddelde (vergelijking A1) minimaal is (Isaaks en Srivastava, 1989). Deze celgrootte wordt ook gebruikt bij het schatten van de gedeclusterde stratumvariantie (vergelijking A2). Tabel 3 geeft de resultaten van de stratagemiddelen en varianties voor alle stoffen.

### A.3 Schatting van semivariogrammen van genormaliseerde residuen

Als de stratagemiddelen geschat zijn kunnen de genormaliseerde residuen  $y_i'$  berekend worden voor monsters  $y_{hi}$  in stratum  $h$ :

$$y_i' = \frac{y_{hi} - \hat{\mu}_h}{\sigma_h} \quad (\text{A3})$$

Voor het uitvoeren van de block-kriging van de genormaliseerde residuen moet het semivariogram ervan geschat worden:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2n(h)} \sum_{i=1}^{n(h)} [y'(x_i) - y'(x_i \pm h)]^2 \quad (\text{A4})$$

In deze vergelijking is  $n(h)$  het aantal paren van monsters dat op een afstand  $h$  van elkaar ligt. In de ideale situatie bevat  $n(h)$  alleen niet-gemengde monsters die niet preferent op locaties met hogere gehalten zijn genomen. In dit project waren dergelijke monsters helaas niet aanwezig, zodat  $n(h)$  gekozen is uit alle beschikbare monsters (gemengd en niet-gemengd).

Omdat we in dit project driedimensionale kriging toepassen moet er driedimensionaal semivariogram worden geschat en ook een driedimensionaal model worden aangepast. Figuur A1 toont het geschatte semivariogram voor het Pb-gehalte samen met de aangepaste semivariogramfunctie. Een anisotroop sferisch model is aangepast met een sill van 1,0 en een relatieve nuggetwaarde van 0,5. De belangrijkste anisotropierichtingen met bijbehorende range zijn: horizontaal, noord-zuidrichting met range 1000 m; horizontaal, oost-westrichting met range 500 m; verticale richting met range 1,0 m.



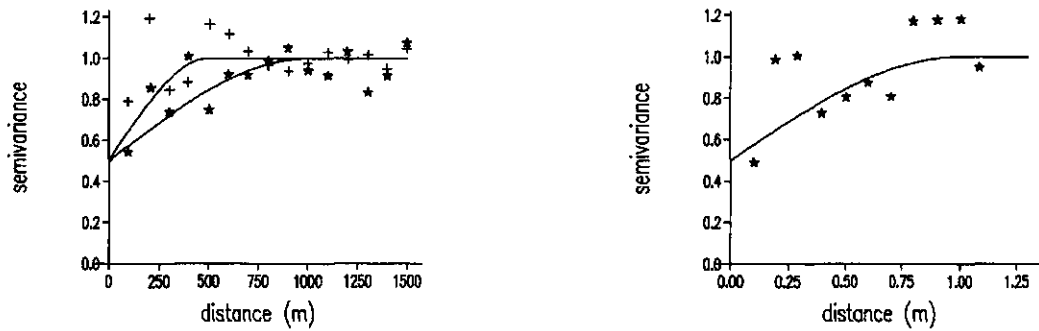


Fig. A1 Semivariogram van genormaliseerde residuen in de belangrijkste anisotropie-richtingen; linker figuur: noord-zuidrichting (doorgetrokken lijn en sterren, range 1000 m), oost-westrichting (stippellijn en kruisjes, range 500 m); rechter figuur: verticale richting (range 1,0 m)

#### A.4 Blokgemiddelde loggehalten en varianties van voorspellingsfouten

Er wordt verondersteld dat de genormaliseerde residuen  $y_i$  partiële realisaties  $Y'(\mathbf{x}_i)$  zijn van een stationair stochastisch veld  $Y'(\mathbf{x})$  met verwachting 0 and variantie 1. Dus na aanpassing van een semivariogrammodel (met een sill gelijk aan 1) aan het experimentele semivariogram van genormaliseerde residuen kunnen de waarden van de blokgemiddelde genormaliseerde residuen van loggehalten worden geschat met behulp van simple block-kriging:

$$\hat{Y}'_B(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^m \lambda_j Y'(\mathbf{x}_j) \quad (\text{A5})$$

waarin  $Y'_B(\mathbf{x})$  gelijk is aan het blokgemiddelde genormaliseerde residu voor een blok met middelpunt  $\mathbf{x}$  (in de 3D-ruimte) en  $m$  het aantal niet-gemengde monsters. De  $\lambda_j$  zijn de kriginggewichten die worden berekend door het oplossen van het stelsel vergelijkingen dat hoort bij simple block-kriging (Journel en Huijbregts, 1978).

Vervolgens kan het blokgemiddelde loggehalte  $y_B(\mathbf{x})$  voor een blok met middelpunt  $\mathbf{x}$  dat in stratum  $h$  ligt worden voorspeld als:

$$\hat{Y}_B(\mathbf{x}) = \hat{\mu}_h(\mathbf{x}) + \hat{\sigma}_h(\mathbf{x}) \hat{Y}'_B(\mathbf{x}) \quad (\text{A6})$$

Er wordt verondersteld dat de totale voorspellingsfout  $[\hat{Y}_B(\mathbf{x}) - Y_B(\mathbf{x})]$  is opgebouwd uit de som van de fout die gemaakt wordt bij het schatten van het gemiddelde van stratum  $h$  en de voorspellingsfout van de simple block-kriging. De variantie van de totale voorspellingsfout is dan gelijk aan: de variantie van de schattingsfout van het stratumgemiddelde + de block-kriging voorspellingsfout + 2 maal de covariantie tussen de schattingsfout van het stratumgemiddelde en de block-kriging voorspellingsfout. Voor een blok met middelpunt  $\mathbf{x}$  in stratum  $h$  kan de variantie van de totale voorspellingsfout worden berekend uit de covariantiefunctie van de

genormaliseerde residuen  $C(\mathbf{h}) = 1 - \gamma(\mathbf{h})$ , de variantie  $\sigma_h^2$  van het stratum  $h$ , de  $n_h$  declusteringsgewichten  $w_{hi}$  en de  $m$  kriginggewichten  $\lambda_j$ :

$$\begin{aligned} \sigma_B^2(\mathbf{x}) = \sigma_h^2(\mathbf{x}) [ & \sum_{i=1}^{n_h} \sum_{j=1}^{n_h} w_{hi} w_{hj} C(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + \bar{C}(V, V) - \sum_{j=1}^m \lambda_j \bar{C}(\mathbf{x}_j, V) + \\ & 2 \sum_{i=1}^{n_h} \sum_{j=1}^m w_{hi} \lambda_j C(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) - 2 \sum_{i=1}^{n_h} w_{hi} \bar{C}(\mathbf{x}_i, V) ] \end{aligned} \quad (\text{A7})$$

waarin  $\bar{C}(\mathbf{x}, V)$  en  $\bar{C}(V, V)$  respectievelijk de eenmaal- en tweemaal geregulariseerde (=blokgemiddelde) covariantiefunctie zijn.

## A.5 Benaderde blokgemiddelde gehalten en betrouwbaarheidsgrenzen

Uit de voorspelde blokgemiddelde loggehalten (vergelijking A6) en de varianties van de voorspellingsfouten (vergelijking A7) kunnen benaderende voorspellingen van blokgemiddelde gehalten worden afgeleid. Voor een blok met middelpunt  $\mathbf{x}$  geldt, wanneer voor één realisatie  $z(\mathbf{x})$  de gehalten binnen dit blok lognormaal verdeeld zijn, de volgende relatie tussen het blokgemiddelde gehalte  $z_B(\mathbf{x})$  en het blokgemiddelde loggehalte  $y_B(\mathbf{x})$ :

$$z_B(\mathbf{x}) = e^{\left[ y_B(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} S_{\square}^2(\mathbf{x}) \right]} \quad (\text{A8})$$

waarbij  $S_{\square}^2(\mathbf{x})$  gelijk is aan de variantie van de loggehalten binnen het blok (voor de beschouwde realisatie). Het blokgemiddelde loggehalte  $y_B(\mathbf{x})$  voor de beschouwde realisatie wordt voorspeld met  $\hat{Y}_B(\mathbf{x})$  (vergelijking A5). De variantie  $S_{\square}^2(\mathbf{x})$  binnen het blok voor de beschouwde realisatie is onbekend, maar deze kan voor een blok in stratum  $h$  benaderd worden door  $\hat{\sigma}_h^2(\mathbf{x}) \bar{\gamma}(V, V)$ , waarin  $\bar{\gamma}(V, V)$  staat voor de blokgemiddelde semivariantie van de genormaliseerde residuen. Een benaderende voorspelling van het blokgemiddelde gehalte wordt dan gegeven door:

$$\hat{Z}_B(\mathbf{x}) = e^{\left[ \hat{Y}_B(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \hat{\sigma}_h^2(\mathbf{x}) \bar{\gamma}(V, V) \right]} \quad (\text{A9})$$

Een voorspelling met vergelijking A9 is niet alleen benaderend maar hij is ook onzuiver:  $E[\hat{Z}_B(\mathbf{x}) - Z_B(\mathbf{x})] \neq 0$ .

Als wordt aangenomen dat de totale voorspellingsfout van het loggehalte ( $\hat{Y}_B(\mathbf{x}) - Y_B(\mathbf{x})$ ) normaal verdeeld is kunnen de grenzen van het 95% betrouwbaarheidsinterval van het blokgemiddelde gehalte worden geschat. De ondergrens wordt geschat door:

$$\hat{z}_B^l(\mathbf{x}) = e^{\left[ \hat{Y}_B(\mathbf{x}) - 2\hat{\sigma}_B(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \hat{\sigma}_h^2(\mathbf{x}) \bar{\gamma}(V, V) \right]} \quad (\text{A10})$$

en de bovengrens door:

$$\hat{z}_B^u(\mathbf{x}) = e^{[\hat{Y}_B(\mathbf{x}) + 2\sigma_B(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\sigma_h^2(\mathbf{x})\bar{\gamma}(V,V)]} \quad (\text{A11})$$

## A.6 Analyse van strategieën van aanvullende bemonstering

Vergelijking A7 kan gebruikt worden om het effect van aanvullende bemonstering te analyseren. De variantiekaarten kunnen gebruikt worden om monsters te plaatsen op locaties waar de varianties van de totale voorspellingsfout (en dus de onzekerheden) het grootst zijn. Omdat vergelijking A7 alleen afhangt van de locaties van de monsters kan van tevoren ingeschat worden wat de aanvullende bemonstering voor effect heeft op de variantiereductie, voor zover deze het gevolg is van verbeterde block-kriging voorspellingen.

## A.7 Herhaalde schatting en voorspelling

Wanneer aanvullende monsters eenmaal genomen zijn worden deze bij de dataset gevoegd. Met de nieuwe (grotere) dataset kunnen dan eerst de stratagemiddelen en -varianties opnieuw worden geschat (vergelijkingen A1 en A2), alsmede het semivariogram van genormaliseerde residuen (vergelijkingen A3 en A4). Vervolgens wordt de block-kriging herhaald (vergelijking A5) en de blokgemiddelde loggehalten opnieuw voorspeld (vergelijking A6). Tenslotte kunnen de totale voorspellingsvarianties opnieuw worden geschat (vergelijking A7), de blokgemiddelde gehalten opnieuw voorspeld (vergelijking A9) en de betrouwbaarheidsgrenzen opnieuw worden geschat (vergelijkingen A10 en A11). Telkens wanneer aanvullende monsters beschikbaar zijn kunnen deze gebruikt worden om de kaarten met blokgemiddelde gehalten te verbeteren. Op deze wijze kunnen beleidsbeslissingen genomen worden op basis van alle beschikbare informatie.

## **Aanhangsel B Beschrijving van de programmatuur**

### **B.1 Inleiding**

De methoden die gebruikt zijn bij het berekenen van de gehaltekaarten, mediaankaarten, betrouwbaarheidskaarten en percentielenkaarten zijn geïmplementeerd in Fortran77-programma's. De kern van een aantal van deze programma's wordt gevormd door de broncode die geleverd wordt bij het geostatistisch pakket GSLIB (Deutsch en Journel, 1992). Alle invoer en uitvoer van deze programma's is in ASCII-formaat. Omdat bij de Gemeente Utrecht een bodeminformatiesysteem is opgezet in het geografisch informatie systeem ARC/INFO is er eveneens een set ARC/INFO AML-routines geschreven waardoor de programmatuur aan ARC/INFO wordt gekoppeld. Het is dan ook mogelijk om met zogenaamde 'pull-down' menu's de verschillende programma's vanuit ARC/INFO te starten en de resultaten om te zetten in kaarten die binnen ARC/INFO kunnen worden bekeken. Indien een gebruiker niet beschikt over ARC/INFO is het mogelijk de programma's 'stand alone' te gebruiken en de uitvoer van de programma's in een formaat weg te schrijven dat eenvoudig kan worden ingelezen in programma's zoals SURFER of een eenvoudig en goedkoop geografisch informatie systeem zoals PCRaster (Van Deurzen, 1995).

Figuur B1 toont een stroomschema van de informatie en programmatuur die gebruikt is om de verschillende kaarten te maken. Te zien is dat de Fortran77-programma's volledig onafhankelijk opereren op het gebruikte besturingssysteem (hier Unix) en dat de ARC/INFO-omgeving er als een soort schil omheen zit. Binnen ARC/INFO kan men:

- ARC/INFO-bestanden bekijken, plotten en veranderen;
- ARC/INFO-bestanden omzetten/uitvoeren in de vorm van ASCII-bestanden die als invoer moeten dienen voor de Fortran77-programma's;
- de Fortran77-programma's starten;
- de ASCII-uitvoer van de Fortran77-programma's invoeren/omzetten in ARC/INFO-bestanden.

In het vervolg van dit aanhangsel worden eerst de stappen beschreven om de verschillende kaarten te maken. Hierbij wordt het stroomschema van figuur B1 gevolgd. De verschillende stappen komen overeen met de cijfers in het stroomschema. Wanneer een stap bestaat uit het opstarten van een Fortran77-programma wordt aangegeven wat het doel is van dit programma en welk resultaat het programma oplevert. Na de beschrijving van het stroomschema volgt een specificatie van de Fortran77-programma's: doel, Fortran77-bronbestanden, invoerbestanden, uitvoerbestanden en parameterbestanden. Tenslotte volgt een specificatie van de gebruikte menustructuur van de pull-down menu's en de bijbehorende AML-routines.

ARC / INFO

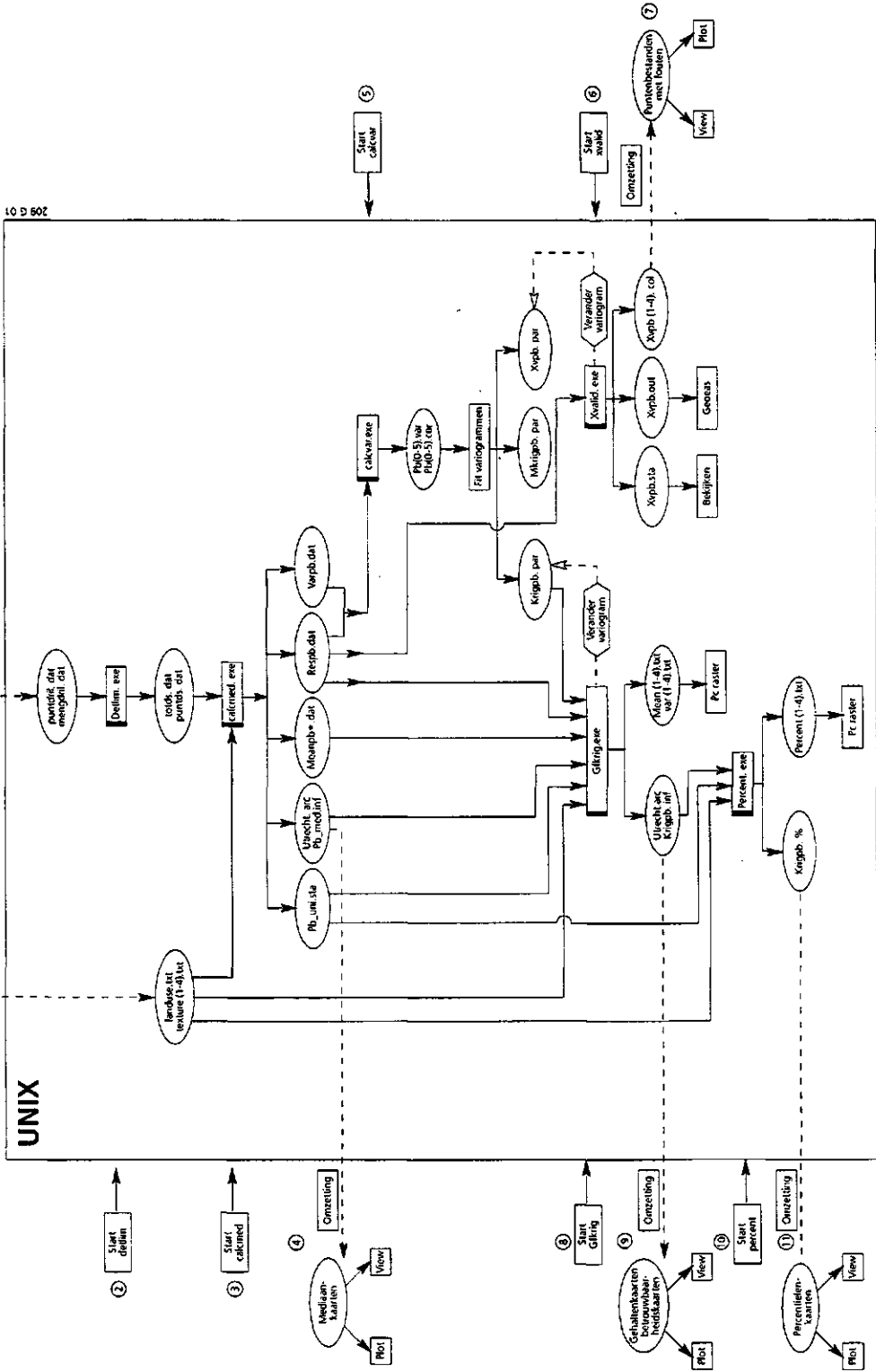
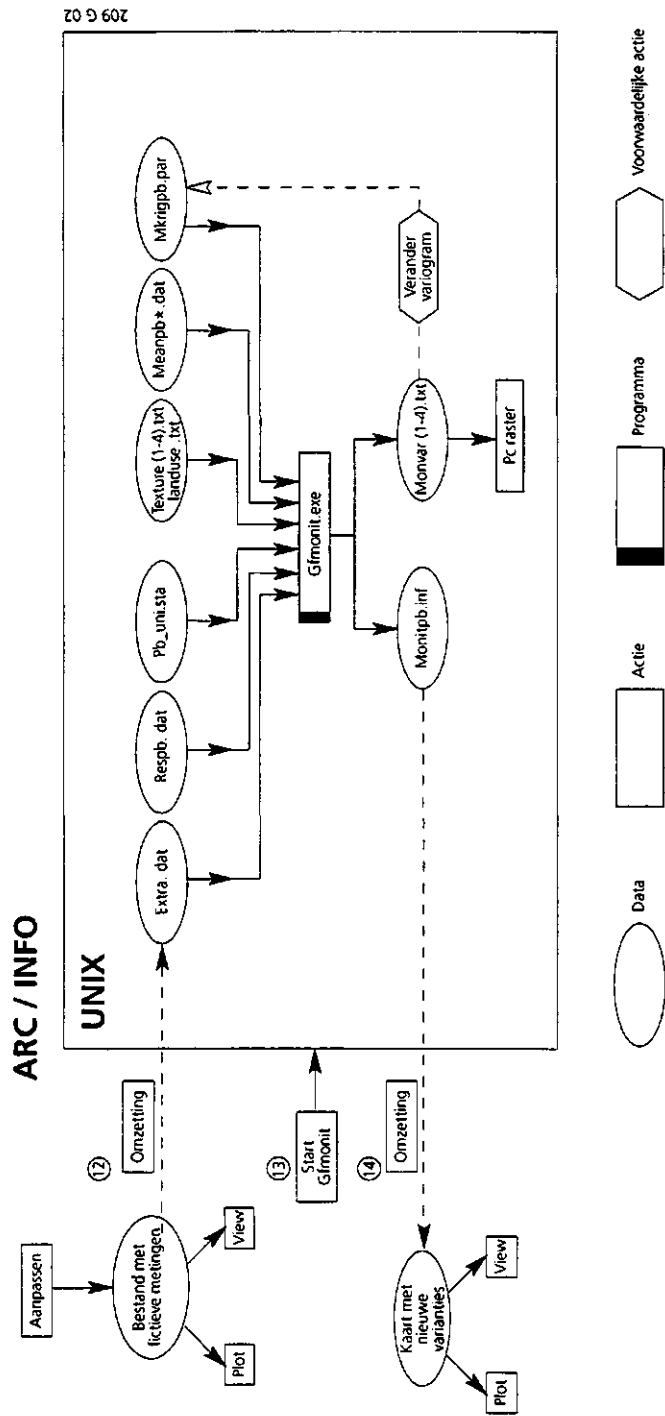


Fig. B1 Siroomschema van de informatie en programmatuur die gebruikt is om de mediaankaarten, gehalteskaarten, betrouwbaarheidskaarten en percentienkaarten te maken



Stroomschema van de informatie en programmatuur die gebruikt is om de mediaankaarten, gehaltekaarten, betrouwbaarheidskaarten en percentielenkaarten te maken

Fig. B1 Vervolg

## B.2 Beschrijving van het stroomschema

### **Stap 1: Uitvoer ARC/INFO basisbestanden**

Twee basisbestanden zijn aanwezig in ARC/INFO. Een polygoonbestand met de stratificatie (naar bodem of naar landgebruik) en een puntenbestand met de gemengde en niet-gemengde monsters. Deze bestanden kunnen binnen ARC/INFO bekeken en geplot worden als ook worden veranderd. Wanneer de gebruiker zich er van heeft overtuigd dat de analyse moet worden uitgevoerd met de gekozen stratificatie en geselecteerde monsters worden de bestanden uitgevoerd naar ASCII-formaat. De stratificatie naar landgebruik wordt uitgevoerd naar het ASCII-bestand *landuse.txt* (hetzelfde voor alle vier de lagen) en de stratificatie naar textuur naar *texture(1..4).txt* (een bestand voor elke laag). Het ARC/INFO-bestand met monsterlocaties wordt uitgevoerd als twee ASCII-bestanden: *puntdril.dat* voor alle niet-gemengde monsters en *mengdril.dat* voor alle gemengde monsters. Naast monsternummer en coördinaten (x,y,z) geven deze files de gemeten loggehalten voor elke stof (-9.999 betekent 'niet gemeten') en voor de gemengde monsters een mengcode die aangeeft uit hoeveel submonsters een mengmonster bestaat. Wanneer voor een monster het gemeten gehalte van een bepaalde stof onder de detectielimiet ligt is voor het gehalte de waarde van de natuurlijke logaritme van de detectielimiet ingevuld.

### **Stap 2: Start DETLIM**

Het programma DETLIM heeft tot doel om voor elke stof een representatieve waarde van de detectielimiet te berekenen. Het resultaat van het programma zijn twee bestanden. In *puntds.dat* staan dezelfde gegevens als *puntdril.dat*, maar nu voor de monsters met gehalten onder de detectielimiet de natuurlijke logaritme van een representatieve waarde voor de detectielimiet. Het bestand *totds.dat* bevat zowel de niet-gemengde monsters als de gemengde monsters, waarbij een *N*-maal gemengd monster *N*-maal voorkomt. Op deze wijze wordt het monster ook later *N*-maal meegeteld bij het berekenen van de gemiddelden. Ook voor *totds.dat* geldt dat voor de monsters met gehalten onder de detectielimiet de natuurlijke logaritme van een representatieve waarde voor de detectielimiet is gekozen.

Vanaf nu wordt elke stof apart behandeld. Ik zal daarom vanaf hier alleen de beschrijving geven voor Pb.

### **Stap 3: Start CALCMED**

Met het programma CALCMED worden de stratumgemiddelden en de stratumvarianties berekend. Het uitvoerbestand *pb\_uni.sta* bevat een tabel waarin per stratum het gemiddelde, de variantie, de scheefheid en de kurtosis van het loggehalte van Pb is weergegeven. De files *pb\_med.inf* bevat in ASCII-formaat de mediaankaart. In de bestanden *meanpb\*.dat* (\* = stratumnummer) staan per stratum de loodgehalten van de gemengde en niet-gemengde monsters plus de declusteringsgewichten. Deze files zijn later weer nodig om de schattingsvarianties van de blokgemiddelde gehalten te berekenen. Het bestand *respb.dat* bevat alle gestandaardiseerde residuen, berekend uit de stratumgemiddelden en -varianties en de niet-gemengde monsters. Dit bestand

bevat de punten die gebruikt worden bij de block-kriging. Eigenlijk zou het daarvoor benodigde variogram ook met de gegeven uit dit bestand moeten worden berekend. Echter bij gebrek aan voldoende niet-gemengde monsters wordt bij de variogramschatting het bestand *varpb.dat* gemaakt dat de gestandaardiseerde residuen bevat van zowel de gemengde als niet-gemengde monsters.

#### **Stap 4: Omzetten mediaankaart**

Het bestand *pb\_med.inf* kan samen met *utrecht.arc* worden geïmporteerd in ARC/INFO om een mediaankaart in ARC/INFO op te bouwen. Deze kan dan binnen ARC/INFO worden bekeken en geplot.

Stappen 5 en 6 staan in het stroomschema iets apart. De reden hiervoor is dat het berekenen van variogrammen en het verrichten van een crossvalidatie slechts incidenteel zal gebeuren, bijvoorbeeld een maal per jaar als er een grote hoeveelheid nieuwe gegevens beschikbaar is. De reden hiervoor is dat het schatten van variogrammen en het aanpassen van geschikte variogramfuncties een bewerkelijk en subjectief proces is dat vaak enige geostatistische expertise vereist. Deze stappen zullen dus niet door alle gebruikers worden uitgevoerd. In het algemeen zal de gebruiker in de volgende stappen rekenen met de parameters van reeds aangepaste variogramfuncties. Deze staan in de file *krigpb.par*, *xvpb.par* en *mkrigpb.par*.

#### **Stap 5: Start CALVAR**

Het programma CALVAR berekent het experimentele variogram in 5 richtingen; horizontaal: noord:zuid (*pb1.var*), noord-oost:zuid-west (*pb2.var*), oost:west (*pb3.var*), zuid-oost:noord-west (*pb4.var*) en verticaal (*pb5.var*), alles met een tolerantie van 60° in het horizontale vlak en een verticale tolerantie van 45°. Verder wordt ook het totale variogram in het horizontale vlak berekend (*pb0.var*). Naast het experimentele variogram wordt ook het corellogram berekend in al deze richtingen (*pb(0..5).cor*). De uitvoerfiles *pb(0..5).var* en *pb(0..5).cor* kunnen vervolgens worden gebruikt in programma's om een driedimensionaal variogrammodel aan te passen. De parameters van de aangepaste variogramfunctie kunnen vervolgens worden ingevoerd in de parameterfiles voor kriging (*krigpb.par*), crossvalidatie (*xvpb.par*) en de analyse van aanvullende bemonstering (*mkrigpb.par*).

#### **Stap 6: Start XVALID**

Het programma XVALID verricht een crossvalidatie. Voordat de crossvalidatie begint vraagt het programma of de variogramparameters moeten worden veranderd. Zo ja, dan moeten de nieuwe parameters worden ingetypt, zo nee dan gaat het programma verder met de parameters in *xvpb.par*. Bij crossvalidatie wordt van de monsterlocaties waar een gestandaardiseerd residu bekend is er telkens een uitgelaten terwijl de overige worden gebruikt om op deze locatie via kriging het gestandaardiseerde residu te schatten. Op deze wijze verkrijgen we voor alle locaties met gestandaardiseerde residuen de werkelijke waarde van het gestandaardiseerde residu en de geschatte waarde ervan. Het verschil is de voorspellingsfout. Bij een gemiddelde juiste kriginginterpolatie moet de gemiddelde voorspellingsfout ongeveer gelijk zijn aan



0 en de variantie van de voorspellingsfout gelijk zijn aan de gemiddelde krigingvariantie. De samenvattende resultaten van de crossvalidatie staan in het bestand *xvpb.sta*. Het bestand *xvpb.out* bevat een lijst met alle schattingsfouten. Deze kunnen worden geanalyseerd met een statistisch pakket zoals GEOEAS. De bestanden *xvpb(1..4).col* bevatten tevens lijsten met schattingsfouten, maar nu gesorteerd naar laag: *xvpb1.col* voor laag 1 etc.

#### ***Stap 7: Omzetten foutenkaarten***

De ASCII-bestanden *xvpb(1..4).col* bevatten voor de vier lagen de coördinaten van de monsterlocaties met gestandaardiseerde residuen en de schattingsfouten uit de crossvalidatie. Deze kunnen worden geïmporteerd als ARC/INFO-puntenbestanden. Binnen ARC/INFO kan dan bekeken worden waar de grootste interpolatiefouten optreden. Op deze wijze kunnen gedeelten van het onderzoeksgebied worden onderscheiden waar het statistisch model niet goed werkt - dit kunnen ook outliers zien op sterk vervuilde locaties - of waar het aantal omgevingspunten te laag is om een goede schatting te geven. Ook kan worden bekeken of de aanname van stationariteit die aan de kriginginterpolatie ten grondslag ligt wel opgaat.

#### ***Stap 8: Start GFKRIG***

Het programma GFKRIG voert de residuele kriging uit, het berekent de gehaltekaart en de betrouwbaarheidskaarten (de kaart met varianties van de schattingsfouten van de blokgemiddelde loggehalten en de kaarten met de grenzen van het 95%-betrouwbaarheidsinterval van de geschatte blokgemiddelde gehalten). De informatie van deze kaarten staat (voor Pb) in het bestand *krigpb.inf* dat samen met *utrecht.arc* kan worden ingelezen in ARC/INFO om de kaarten te bekijken en te plotten. GFKRIG geeft de resultaten ook in ASCII-bestanden die in eenvoudige programma's zoals SURFER of PCRaster (van Deursen, 1995) kunnen worden ingelezen. De geschatte blokgemiddelde loggehalten (voor de vier lagen) worden weggeschreven in de bestanden *mean(1..4).txt*, en de varianties van de schattingsfouten van de blokgemiddelde loggehalten in de bestanden *var(1..4).txt*. Uit het stroomschema is te zien dat het programma GFKRIG een grote hoeveelheid invoer gebruikt. De berekeningen met GFKRIG zijn de meest intensieve van het stroomschema. Voor het grid van 200 bij 224 bij 4 blokken dat gebruikt is in de gemeente Utrecht rekent GFKRIG circa 5 uur op een DEC-ALPHA werkstation (dit geldt overigens ook voor GFMONIT). Alle overige programma's in het stroomschema rekenen hun resultaten in enkele minuten uit. Net als XVALID vraagt GFKRIG voordat de berekeningen beginnen of de gebruiker de variogramparameters in *krigpb.par* wil wijzigingen.

#### ***Stap 9: Omzetten gehaltekaarten en betrouwbaarheidskaarten***

De gehaltekaarten en betrouwbaarheidskaarten die met GFKRIG zijn berekend (*krigpb.inf*) kunnen worden omgezet in ARC/INFO bestanden. Deze bestanden kunnen desgewenst binnen ARC/INFO worden geplot of bekeken.

### **Stap 10: Start PERCENT**

Met behulp van de resultaten van GFKRIG (in *krigpb.inf*), de bestanden waarin de stratificatie staat (*landuse.txt* in geval van Pb) en de het gemiddelde en de variantie voor elk stratum (in *pb\_uni.sta*) kunnen de percentielenkaarten worden berekend. Het programma vraagt het gewenste percentiel van de gebruiker waarna de resultaten worden geschreven naar het bestand (voor pb) *krigpb.%*. Dit bestand kan worden ingelezen in ARC/INFO. Ook hier worden de resultaten weggeschreven in een alternatief ASCII-formaat voor SURFER of PCRaster en wel in de bestanden *percent(1..4).txt* (respectievelijk voor de 4 lagen).

### **Stap 11: Omzetten percentielenkaarten**

Het bestand *krigpb.%* kan worden omgezet in een ARC/INFO bestanden (voor elke laag één). Deze kunnen worden geplot of bekeken.

De stappen 1 t/m 11 (in mindere mate stappen 5 t/m 7) worden uitgevoerd wanneer er, bijvoorbeeld uit lopende projecten, nieuwe monsters beschikbaar komen en de gebruikers hiermee de gehaltekaarten en betrouwbaarheidskaarten willen verbeteren. Wanneer men wil voorspellen wat de verbetering in nauwkeurigheid zal zijn bij een gegeven bemonsteringsplan kan men stappen 12 t/m 14 uitvoeren.

### **Stap 12: Aanmaken bestand met beoogde monsterlocaties**

Binnen ARC/INFO kan men de punten selecteren die als toekomstige monsterlocaties worden aangemerkt. Dit ARC/INFO-puntenbestand kan natuurlijk worden geplot, bekeken en veranderd. Na selectie van de punten wordt het bestand met fictieve metingen omgezet in een ASCII-bestand *extra.dat* dat als invoer dient voor het programma GFMONIT.

### **Stap 13: Start GFMONIT**

Het programma GFMONIT voegt de lijst met beoogde monsterlocaties bij de bestaande monsterlocaties (alleen niet-gemengde monsters) en berekent vervolgens wat de nieuwe varianties van de schattingsfouten der blokgemiddelde logconcentraties zouden worden als het beoogde bemonsteringsplan zou worden uitgevoerd. Deze nieuwe schattingsvarianties worden weggeschreven (voor Pb) in *monitpb.inf* voor ARC/INFO en in *monvar(1..4).txt* in ASCII-formaat. GFMONIT vraagt eveneens of de berekening moet worden uitgevoerd met de bestaande variogramparameters (in *mkrigpb.par*) of dat de gebruiker deze parameters wil wijzigen.

### **Stap 14: Omzetting bestanden met nieuwe varianties**

De bestanden met nieuwe varianties in *monitpb.inf* kunnen worden omgezet in ARC/INFO-bestanden/kaarten en worden geplot. Ook kunnen deze vergeleken worden met de oude variantiekaarten zodat de verbetering in nauwkeurigheid ten gevolge van de beoogde extra monsters kan worden geanalyseerd.

### B.3 Specificatie van de Fortran77-programma's

In deze paragraaf wordt de gebruikte Fortran77-programmatuur beschreven. Voor elk van de programma's uit het stroomschema worden achtereenvolgens opgesomd: het doel van het hoofdprogramma, de Fortran77-bronbestanden, de benodigde invoerbestanden, de benodigde parameterbestanden en de uitvoerbestanden. Het formaat en de inhoud van de invoerbestanden en parameterbestanden wordt niet beschreven, maar kan eenvoudig worden opgemaakt uit de betreffende bestanden die gemaakt zijn voor de Gemeente Utrecht. De bestanden tussen haakjes worden aangemaakt door de programma's zelf. Deze bestanden zijn tussenproducten die alleen binnen het programma zelf (niet in andere programma's) nodig zijn.

programma: **DETLIM**  
doel: Berekenen van representatieve waarden voor monsters met gehalten beneden de detectielimiet en het maken van een bestand met alle niet-gemengde monsters en een bestand met gemengde en niet gemengde monsters.  
Fortran77: detlim.for, addpm.for, decpar.for, declus.for, minpar.for, calcmin.for, makedet.for  
invoer: puntdril.dat, mengdril.dat  
parameters: deccu1.par, deccu2.par, deczn1.par, deczn2.par, decpb1.par, decpb2.par, decpak1.par, decpak2.par, dechum1.par, dechum2.par, declut1.par, declut2.par, mincu.par, minzn.par, minpb.par, minpak.par, minhum.par, minlut.par, (calcmin.par)  
uitvoer: totds.dat, puntds.dat, (detlim.out, meancu.dco, varcu.dco, meanzn.dco, varzn.dco, meanpb.dco, varpb.dco, meanpak.dco, varpak.dco, meanhum.dco, varhum.dco, meanlut.dco, varlut.dco)

De volgende programma's werken met één stof tegelijk. In het navolgende worden alleen de bestanden voor Pb besproken. De namen van de bestanden voor andere stoffen zijn analoog, i.c. substitueer voor pb: cu, zn, pak, hum of lut.

programma: **CALCMED**  
doel: Het berekenen van de stratungemiddelden en stratumvarianties (met behulp van celdeclustering) en het maken van de mediaankaarten.  
Fortran77: calcmed.for, medpar.for, decpar2.for, decpar3.for, declus.for  
invoer: landuse.txt of texture(1..4).txt, totds.dat, puntds.dat  
parameters: decpb1.par, decpb2.par, medpb.par  
uitvoer: pb\_uni.sta, meanpb\*.dat, respb.dat, varpb.dat, pb\_med.inf, pb\_var.inf, utrecht.arc

programma: **CALCVAR**  
doel: Schatting van experimentele semivariogrammen en corellogrammen.  
Fortran77: calcvar.for, varpar.for, gamv3.for, gamv3.inc  
invoer: varpb.dat of respb.dat  
parameters: varpb.par, gampb.par  
uitvoer: pb(0..5).var, pb(0..5).cor

**programma:** XVALID  
**doel:** Crossvalidatie van het geostatistisch model.  
**Fortran77:** xvalid.for, xvpar.for, xvkt3d.for, kt3d\_xv.for, xvalid.inc  
**invoer:** respb.dat  
**parameters:** xvalpb.par, xvpb.par  
**uitvoer:** xvpb.sta, xvpb.out, xvpb(1..4).col

**programma:** GFKRIG  
**doel:** Schatten van blokgemiddelde gehalten en de grenzen van het betrouwbaarheidsinterval van de blokgemiddelde gehalten.  
**Fortran77:** gfkrig.for, gkpar.for, calcvm.for, ktb3d.for, makarc.for, kt3d.for, kt3d.inc  
**invoer:** landuse.txt of texture(1..4).txt, pb\_uni.sta, respb.dat, meanpb\*.dat  
**parameters:** gkpb.par, krigpb.par  
**uitvoer:** krigpb.inf, mean(1..4).txt, var(1..4).txt

**programma:** PERCENT  
**doel:** Berekenen van percentielenkaarten.  
**Fortran77:** percent.for, perpar.for, makper.for, kt3d.inc  
**invoer:** landuse.txt of texture(1..4).txt, pb\_uni.sta, krigpb.inf  
**parameters:** percpb.par  
**uitvoer:** krigpb.%, percent(1..4).txt

**programma:** GFMONIT  
**doel:** Analyseren van de onzekerheidsreductie ten gevolge van beoogde aanvullende bemonstering.  
**Fortran77:** gfmonit.for, gfmpar.for, calcvm.for, ktb3d.for, kt3d.for, makarc2.for, kt3d.inc  
**invoer:** landuse.txt of texture(1..4).txt, pb\_uni.sta, respb.dat, meanpb\*.dat, extra.dat  
**parameters:** gfmpb.par, mkrigpb.par  
**uitvoer:** monitpb.inf, monvar(1..4).txt

#### **B.4 Specificatie van de ARC/INFO-menustructuur en de AML-routines**

De stappen 1 t/m 14 die in het stroomschema staan beschreven kunnen vanuit ARC/INFO worden uitgevoerd door middel van een zogenaamde 'pull-down' menustructuur. Deze menustructuur en de AML-routines die vanuit de menustructuur worden uitgevoerd staan hieronder beschreven. De pull-down menu's en de AML-routines zijn ontwikkeld door R. Schuiling van de afdeling Thematische Kartografie van DLO-Staring Centrum. Onderstaande beschrijving is ook van zijn hand.

## Overzicht v/d menu's met hun acties:

### 0.0 Hoofdmenu

- 0.1 Menu basisbestanden
- 0.2 Menu fortran
- 0.3 Menu mediaankaart
- 0.4 Menu gehaltekaart
- 0.5 Menu percentielenkaart
- 0.6 Menu fictieve metingen
- 0.7 Menu nieuwe varianties

### 1.0 Menu basisbestanden

- 1.1 Nieuwe stratificatiekaarten
- 1.2 Nieuwe puntenkaarten
- 1.3 Plotten stratificatie
- 1.4 Plotten punten
- 1.5 Viewen
- 1.6 Exporteren

### 2.0 Menu fortran

- 2.1 Detlim
- 2.2 Calcmed
- 2.3 Gfkrig
- 2.4 Calcvar
- 2.5 Xvalid
- 2.6 Percent
- 2.7 Gfmonit

### 3.0 Menu mediaankaart

- 3.1 Nieuwe kaarten
- 3.2 Remaptables
- 3.3 Plotten
- 3.4 Viewen

### 4.0 Menu gehaltenkaart

- 4.1 Nieuwe kaarten
- 4.2 Remaptables
- 4.3 Plotten
- 4.4 Viewen

### 5.0 Menu percentielenkaart

- 5.1 Nieuwe kaarten
- 5.2 Plotten
- 5.3 Viewen

### 6.0 Menu fictieve metingen

- 6.1 Nieuwe punten

- 6.2 Plotten
- 6.3 Exporteren

- 7.0 Menu nieuwe varianties
  - 7.1 Nieuwe kaarten
  - 7.2 Plotten
  - 7.3 Viewen

Omschrijving van de menu's en hun acties:

1.0 MENU BASISBESTANDEN

1.1 Nieuwe stratificatiekaarten

input: arc/info polygoncoverage (landuse, texture(1-4))  
actie: &routine bku\_basis (actie nieuwstrat)  
output: pointcoverages (landuse, texture(1-4))  
omschrijving: de polygoncoverage wordt omgezet naar een grid; het grid wordt omgezet naar een pointcoverage

1.2 Nieuwe puntenkaarten

input: ascii-file (mengdril.dat of puntdril.dat)  
actie: &run bku\_nieuw\_punt.aml (inputfile als argument)  
bku\_nieuw\_punt.exe (fortran)  
output: pointcoverage mengdrill of puntdrill  
omschrijving: omzetten ascii-inputfile naar generate file en infofile; daarna pointcoverages opbouwen

1.3 Plotten stratificatie

input: pointcoverages landuse,texture(1-4)  
actie: &run bku\_plot\_strat.aml  
output: plot met kaarten landuse en textuur  
omschrijving: controle of coverages bestaan; controle of remappable en keyfile bestaan de pointcoverages worden omgezet naar een grid; deze worden geplot en weer verwijderd

1.4 Plotten punten

input: pointcover mengdrill en puntdrill  
actie: &run bku\_plot\_punt  
output: plot van de punten  
omschrijving: controle of de coverages bestaan pointcoverages; worden geplot met de wijk-indeling als achtergrond

## 1.5 Viewen

**input:** pointcover stratificatie of opnamepunten  
**actie:** &run bku\_view\_basis <cover> <GRIDIPOINT>  
<prefix rmt/keyfile>  
**output:** plot op het scherm  
**omschrijving:** controle of de coverage bestaat; controle of de keyfile en remaptable bestaan; de gekozen pointcoverage wordt omgezet naar grid; de gekozen pointcoverage wordt op het beeldscherm geplot met de wijk-indeling als topografie

## 1.6 Exporteren

**input:** pointcoverage stratificatie of opnamepunten  
**actie:** &run bku\_uitvoer  
**output:** ascii-file <cover>.out  
**omschrijving:** opvragen coverage maken van ascii-file die bestemd is voor invoer in programma's detlim, calcmed, gfkrig en/of percent; input variabelen: keuze via popup menu [getcover]

## 2.0 MENU FORTRAN

### 2.1 Detlim

**input:** puntdril.dat en mengdril.dat  
**actie:** &sys detlim  
**output:** totds.dat en puntds.dat  
**omschrijving:** opstarten fortran-programma detlim

### 2.2 Calcmed

**input:** landuse.txt/texture(1-4).tx2, totds.dat, puntds.dat  
**actie:** &sys calcmed  
**output:** <stof>\_uni.sta, mean<stof>\*.dat, res<stof>.dat, var<stof>.dat  
<stof>\_med.inf, <stof>\_var.inf, utrecht.arc  
**omschrijving:** opstarten fortran-programma calcmed

### 2.3 Gfkrig

**input:** landuse.txt/texture(1-4).tx2, <stof>\_uni.sta, res<stof>.dat  
mean<stof>\*.dat  
**actie:** &sys gfkrig (in achtergrond proces)  
**output:** krig<stof>.inf, mean(1-4).txt, var(1-4).txt  
**omschrijving:** controle of gfkrig proces al draait, zo niet, opstarten fortran-programma gfkrig

## 2.4 Calcvar

**input:** var<stof>.dat, res<stof>.dat  
**actie:** &sys calcvar  
**output:** <stof>(0-5).var, <stof>(0-5).cor  
**omschrijving:** opstarten fortran-programma calcvar

## 2.5 Xvalid

**input:** res<stof>.dat  
**actie:** &sys xvalid  
**output:** xv<stof>.sta, xv<stof>.out, xv<stof>(1-4).col  
**omschrijving:** opstarten fortran-programma xvalid

## 2.6 Percent

**input:** landuse.txt/texture(1-4).tx2, <stof>\_uni.sta, krig<stof>.inf  
**actie:** &sys percent  
**output:** krig<stof>.\*, percent(1-4).txt  
**omschrijving:** opstarten fortran-programma percent

## 2.7 Gfmonit

**input:** landuse.txt/texture(1-4).tx2, <stof>\_uni.sta, res<stof>.dat,  
mean<stof>\*.dat, extra.dat  
**actie:** &sys gfmonit  
**output:** monit<stof>.inf, monvar(1-4).txt  
**omschrijving:** opstarten fortran-programma gfmonit

## 3.0 MENU MEDIAANKAART

### 3.1 Nieuwe kaarten

**input:** cu\_med.inf, pak\_med.inf, pb\_med.inf, zn\_med.inf,  
hum(1-4)\_med.inf, lut(1-4)\_med.inf  
**actie:** &run bku\_gen\_mediaan.aml  
sh bku\_format\_arc.scr (Unix shell)  
sh bku\_format\_med.scr (Unix shell)  
**output:** pointcoverage mediaan (met 12 items)  
**omschrijving:** controle of coördinatenfile utrecht.arc aanwezig is; controle of  
de \*.inf files aanwezig zijn; utrecht.arc aanpassen --> utrecht.gen;  
\*.inf files aanpassen met ed; pointcoverage opbouwen met items  
cu, paks, pb, zn, hum(1-4) en lut(1-4)



### 3.2 Remaptables

input: pointcoverage mediaan  
actie: &run bku\_med\_rmt.aml  
output: cumed.rmt, pakmed.rmt, pbmed.rmt, znmed.rmt, cumed.key  
pakmed.key, pbmed.key, znmed.key  
omschrijving: controle of coverage mediaan bestaat; rmt en keyfiles aanmaken (cu, paks, pb en zn d.m.v. frequency per item, hum en lut over 4 lagen d.m.v. statistics)

### 3.3 Plotten

input: pointcoverage mediaan  
actie: &r bku\_plot-mediaan.aml  
output: plot met alle 12 mediaankaarten  
omschrijving: controle of rmt- en keyfile aanwezig zijn; van elk item wordt een grid gemaakt en geplot

### 3.4 Viewen

input: pointcoverage mediaan  
actie: &r bku\_view\_med <item>  
output: plot op het scherm  
omschrijving: controle of rmt- en keyfile aanwezig zijn; plotten mediaankaart van 1 stof op het scherm

## 4.0 MENU GEHALTEKAART

### 4.1 Nieuwe kaarten

input: krig<stof>.inf  
actie: &sys sh bku\_format\_gehalten (Unix shell)  
&run bku\_gen\_gehalten  
output: pointcoverage <stof>  
omschrijving: controle of krig\*.inf files aanwezig zijn; krig\*.inf files aanpassen met ed (unix); pointcovers opbouwen d.m.v. generate (arc/info)

### 4.2 Remaptables

input: pointcoverage <stof>  
actie: &r bku\_gehalten\_rmt  
output: <stof>lmu.rmt, <stof>var.rmt, <stof>lmu.key, <stof>var.key  
omschrijving: voor low mean en upper wordt 1 rmt en 1 keyfile gemaakt over de range van het laagste minimum tot de hoogste maximum over alle 4 de lagen; voor de variantie een aparte rmt en keyfile over 4 lagen

### 4.3 Plotten

input: pointcoverage <stof>  
actie: &r bku\_plot\_gehalten <stof>  
output: plot met 16 kaarten v/d stof  
omschrijving: controle of rtm- en keyfiles aanwezig zijn; plotten kaarten voor 4 lagen de lower, mean, upper en variantie

### 4.4 Viewen

input: pointcoverage <stof>  
actie: &r bku\_view\_gehalten  
output: plot op het scherm  
omschrijving: controle of rtm- en keyfiles aanwezig zijn; plotten van 1 laag van upper, mean ,lower of variantie op het scherm

## 5.0 MENU PERCENTIELENKAART

### 5.1 Nieuwe kaarten

input: krig<stof>.<percentiel> (bv krigpb.5)  
actie: &sys sh bku\_format\_perc.scr  
&r bku\_gen\_perc <stof>  
output: pointcoverage <stof>perc<percentiel> (4 lagen van gekozen percentiel)  
omschrijving: controle of krig<stof>.<percentiel> files bestaan; input file aanpassen met ed (unix); pointcover opbouwen met generate (arc/info)

### 5.2 Plotten

input: pointcoverage <stof>perc<percentiel>  
actie: &r bku\_plot\_perc <stof>  
output: plotten 4 lagen van pointcoverage <stof>perc<percentiel>  
omschrijving: alle unieke waarden vaststellen d.m.v. frequency per item en inlezen in 1 info-tabel; klasse-indeling maken m.b.v. CLASS (arc/info); elk item van de pointcoverage omzetten naar grid; alle grids plotten en verwijderen

### 5.3 Viewen

input: pointcoverage <stof>perc  
actie: &r bku\_view  
output: plot van 1 gekozen kaart op het beeldscherm  
omschrijving: controle of rmt- en keyfile bestaan, zonodig aanmaken. gekozen laag omzetten naar grid; plot op het scherm en grid weer verwijderen

## 6.0 MENU FICTIEVE METINGEN

### 6.1 Nieuwe punten

**input:** geen, of bestaande pointcover EXTRA met eerder ingevoerde fictieve meetpunten  
**actie:** &run bku\_edit.aml  
&menu bku\_edit\_p.menu  
**output:** pointcoverage EXTRA  
**omschrijving:** wanneer EXTRA niet bestaat wordt deze aangemaakt; arcredit wordt opgestart met de topografie (UTRM) in de achtergrond; met ADD worden nieuwe punten toegevoegd

### 6.2 Plotten

**input:** pointcoverage EXTRA  
**actie:** &run bku\_plot\_fict.aml  
**output:** plotfile EXTRA.GRA  
**omschrijving:** aanmaken plotfile met fictieve meetpunten en topografie in de achtergrond

### 6.3 Exporteren

**input:** pointcoverage EXTRA  
**actie:** &run bku\_fict\_exp.aml  
**output:** ascii-file extra.dat  
**omschrijving:** wegschrijven van de x,y,z-waarden van de fictieve meetpunten

## 7.0 MENU NIEUWE VARIANTIES

### 7.1 Nieuwe kaarten

**input:** monit<stof>.inf  
**actie:** &sys sh bku\_format\_variantie (unix shell)  
&run bku\_gen\_variantie.aml  
**output:** pointcoverage <stof>var  
**omschrijving:** controle of inputfile aanwezig is; aanpassen inputfile met unix shell; pointcoverage opbouwen m.b.v. generate (arc/info)

### 7.2 Plotten

**input:** pointcoverage <stof>var  
**actie:** &run bku\_plot\_variantie.aml  
**output:** plotfile met variantie van 4 lagen van <stof>  
**omschrijving:** aanmaken remappable en keyfile; plotfile maken met voor elke laag een kaart

### 7.3 Viewen

**input:** pointcoverage <stof>var  
**actie:** &run bku\_view\_variantie.aml  
**output:** plot van gekozen laag op het scherm  
**omschrijving:** aanmaken remaptable en keyfile; plotten van gekozen laag op het scherm