

32/uu6(659)

zcx

Ruimtelijke patronen van zware metalen en PAK's in de Gemeente Utrecht

Uitbreiding Leidsche Rijn en weglating verdachte locaties

BIBLIOTHEEK "DE HAARF"

Droevendaalweg 34

6708 PB Wageningen

M.F.P. Bierkens

Rapport 659

DLO-Staring Centrum, Wageningen, 1999

REFERAAT

Bierkens, M.F.P., 1999. *Ruimtelijke patronen van zware metalen en PAK's in de Gemeente Utrecht.; Uitbreiding Leidsche Rijn en weglating verdachte locaties*. Wageningen, DLO-Staring Centrum. Rapport 659. 46 blz.15 fig.; 3 tab.; 12 ref.; 2 aanh.

Kaarten van de Gemeente Utrecht met gehalten aan koper, lood, zink, PAK's, humus en lutum, alsmede de bijbehorende betrouwbaarheidskaarten, zijn uitgebreid met het gebied Leidsche Rijn, ten westen van Utrecht. Naast kaarten op basis van alle monsterlocaties (feitelijke bodemkwaliteit), zijn ook kaarten gemaakt gebaseerd op monsters van onverdachte locaties (gebiedseigen bodemkwaliteit). De gebruikte geostatistische 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, percentielenkaarten en betrouwbaarheidskaarten kan bodembeleid worden uitgevoerd dat rekening houdt met de onzekerheid van de geschatte gehalten.

Trefwoorden: bodemkwaliteit, bodemkwaliteitskaart, bodemverontreiniging, geostatistiek.

ISSN 0927-4499

Dit rapport kunt u bestellen door NLG 35,- over te maken op banknummer 36 70 34 612 ten name van DLO-Staring Centrum, Wageningen, onder vermelding van Rapport 659. Dit bedrag is inclusief BTW en verzendkosten.

© 1999 DLO Staring Centrum, Instituut voor Onderzoek van het Landelijk Gebied (SC-DLO),
Postbus 125, NL-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

Woord vooraf	7
Samenvatting	9
1 Inleiding	11
1.1 Achtergrond	11
1.2 Doel van het onderzoek	11
1.3 Resultaten	11
2 Materialen en methoden	15
2.1 Gebruikte gegevens	15
2.2 Problemen en eisen	16
2.3 Beknopt beschrijving van de interpolatiemethode	17
3 Resultaten	19
3.1 Inleiding	19
3.2 Stratificatie	19
3.3 Mediaankaarten: gemiddelden en varianties per stratum	23
3.4 Gehaltekaarten	23
3.5 Betrouwbaarheidskaarten	24
3.6 Percentielenkaarten	25
4 Conclusies en discussie	33
Literatuur	35
<i>Aanhangsels</i>	
A Theoretische onderbouwing van de statistische interpolatiemethode	37
B Tabellen met statistieken en semivariogram-parameters	43

Woord vooraf

In 1996 heeft DLO–Staring Centrum (SC-DLO) een geostatistische methode ontwikkeld om voor de Gemeente Utrecht kaarten te maken met gehalten van zware metalen, PAK's, humus en lutum (Bierkens, 1997). In 1997 heeft het Bureau Bodem van de Dienst Stadsontwikkeling van de Gemeente Utrecht aan SC-DLO opdracht verleend om de kaarten uit te breiden voor het gebied Leidsche Rijn, ten westen van Utrecht. Deze uitgebreide kaarten moesten gemaakt worden op basis van alle monsters (feitelijke bodemkwaliteit) en op basis van monsters van onverdachte locaties (gebiedseigen bodemkwaliteit).

Het project is uitgevoerd in 1998 en heeft voor de opdrachtgever de volgende resultaten opgeleverd.

- kaarten met gehalten aan zware metalen, PAK's, humus en lutum, betrouwbaarheidskaarten en 90-percentielenkaarten voor blokken en wijken. Deze kaarten zijn digitaal geleverd in ARC/INFO formaat;
- dit rapport, waarin de gebruikte berekeningsmethoden worden beschreven en de resulterende kaarten worden toegelicht.

Het is de bedoeling dat de applicatie, bestaande uit Fortran77-programma's en ARC/INFO-AML-routines, waarmee bovengenoemde kaarten vanuit ARC/INFO kunnen worden berekend bij de Gemeente Utrecht wordt geïnstalleerd. De opdrachtgever is echter recent overgestapt van Unix naar Windows-NT. Dit vereist een vergaande aanpassing van de ARC/INFO-applicatie, die niet in dit project was begroot en dus in een volgend project zal moeten plaatsvinden.

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. Het onderscheiden van monsters naar verdachte en onverdachte locaties is verricht door Chemielinco op basis van historisch onderzoek. R. Schuiling (Centrum voor Geoinformatie, SC-DLO) leverde een belangrijke bijdrage aan het project door het maken van de ARC/INFO bestanden.

Samenvatting

In 1996 heeft DLO-Staring Centrum in opdracht van de Gemeente Utrecht (Bureau Bodem van de Dienst Stadsontwikkeling van de Gemeente Utrecht) kaarten gemaakt met gehalten aan koper (Cu) lood (Pb), zink (Zn) en de som van 10 PAK's volgen het RIVM (10PAKs), als ook kaarten van het humus- en lutumgehalte (Bierkens, 1997). De kaarten tonen gemiddelde gehalten voor blokken van 50 x 50 x 0,5 m³ voor vier lagen: 0-0,5; 0,5-1,0; 1,0-1,5 en 1,5-2,0 m beneden het maaiveld. Naast een schatting van de gemiddelde gehalten zijn voor elk blok ook betrouwbaarheidsintervallen berekend, waarmee voor alle blokken ook de kansen op overschrijding van normwaarden kunnen worden bepaald.

Doel van het onderzoek dat in dit rapport wordt beschreven is het uitbreiden van boven beschreven bodemkwaliteitskaarten met het stadsuitbreidingsgebied Leidsche Rijn en het maken van deze bodemkwaliteitskaarten op basis van alleen de monsters die op onverdachte locaties zijn genomen.

De kaarten die gemaakt zijn op basis van alle monsters geven een indruk van de feitelijke bodemkwaliteit, terwijl de kaarten gebaseerd op de monsters van onverdachte locaties een indruk geven van de gebiedseigen bodemkwaliteit (zie Werkdocument Achtergrondgehalten, 1997). De gebiedseigen bodemkwaliteit is het resultaat van diffuse vervuilingen en puntvervuilingen die het gevolg zijn van onbekende bronnen. Omdat de monsters op bekende vervuilde locaties zijn verwijderd (de zogenaamde hot spots), vertonen deze (gebiedseigen) bodemkwaliteitskaarten een rustiger (gladder) beeld met gemiddeld lagere gehalten, dan die gebaseerd op alle monsters

De bodemkwaliteitskaarten zijn gemaakt met behulp van de geostatistische methode die is ontwikkeld ten behoeve van het vorige project (Bierkens, 1997). Deze methode biedt een oplossing voor de volgende, veel voorkomende, problemen met bodemkwaliteitsgegevens:

- 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 en rond verontreinigde locaties en daardoor vaak geclusterd.

Daarnaast voldoet de methode aan de volgende aanvullende eisen:

- Aanvullende informatie, zoals bodemkaarten en landgebruikskaarten moet kunnen worden gebruikt om de bodemkwaliteitskaarten te verbeteren.
- De bodemkwaliteitskaarten moeten gemaakt kunnen worden voor verschillende diepten beneden het maaiveld.
- De nauwkeurigheid van de 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.

Met behulp van de methode zijn de volgende kaarten gemaakt in ARC/INFO formaat (voor vier lagen: 0,0-0,5; 0,5-1,0; 1,0-1,5; 1,5-2,0 m beneden het maaiveld; voor Cu, Pb, Zn, 10PAKs, humus en lutum gebaseerd op alle monsters (feitelijke bodemkwaliteit); voor Cu, Pb, Zn en 10PAKs ook gebaseerd op alleen monsters van onverdachte locaties (gebiedseigen bodemkwaliteit)):

- a *Mediaankaarten*: kaarten met strata (homogene deelgebieden op basis van landgebruik of bodemtype) waarbij per stratum de mediane concentratie wordt gegeven.
- b *Gehaltekaarten*: kaarten met blokgemiddelde gehalten (blokken van 50 x 50 x 0,5 m³).
- c *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 bemonsteringslokaties te selecteren.
- d *Blokpercentielenkaarten*. Bijvoorbeeld: De 90-Blokpercentielenkaart geeft voor elk blok de waarde waar het blokgemiddelde gehalte met 90% zekerheid onder ligt.
- e *Wijkpercentielenkaarten*. Bijvoorbeeld: De 90-Wijkpercentielenkaart geeft voor elke wijk in de gemeente Utrecht het 90-percentiel van de ruimtelijke frequentieverdeling. Dat wil zeggen dat 90% van de blokken in die wijk een gemiddeld gehalte heeft dat lager is dan deze waarde.

Ten aanzien van het gebruik van de kaarten kan het volgende worden opgemerkt:

- De gehaltekaarten voor de feitelijke bodemkwaliteit kunnen gebruikt worden om vragen te beantwoorden over de werkelijke bodemkwaliteit op een zekere locatie (voorlichting).
- De betrouwbaarheidskaarten voor de feitelijke bodemkwaliteit kunnen gebruikt worden om de aanvullende monsterlocaties zodanig te selecteren dat dit leidt tot de grootste reductie in onzekerheid.
- Zowel de 90-blokpercentielenkaart als de 90-wijkpercentielenkaart voor de gebiedseigen bodemkwaliteit kunnen gebruikt worden als achtergrond-gehaltekaart (Werkdocument Achtergrondgehalten, 1997). De achtergrond-gehaltekaart kan onder meer worden gebruikt voor ruimtelijke-ordening-vraagstukken, terugsanering en vergunningverlening voor grondstromen. Vergelijking van de 90-blokpercentielenkaarten met de 90-wijkpercentielenkaarten leert dat deze vergelijkbare patronen opleveren, maar dat de blokpercentielenkaarten deze patronen met een veel hogere resolutie kunnen tonen.

1 Inleiding

1.1 Achtergrond

In 1996 heeft DLO - Staring Centrum, Instituut voor Onderzoek van het Landelijk Gebied (SC-DLO) in opdracht van het Bureau Bodem van de Dienst Stadsontwikkeling van de Gemeente Utrecht (in het vervolg 'Gemeente Utrecht') kaarten gemaakt met gehalten aan koper (Cu) lood (Pb), zink (Zn) en de som van 10 PAK's volgen het RIVM (10PAKs), als ook kaarten van het humus en lutumgehalte (Bierkens, 1997). De kaarten tonen gemiddelde gehalten voor blokken van 50 x 50 x 0,5 m³ voor vier lagen: 0-0,5; 0,5-1,0; 1,0-1,5 en 1,5-2,0 m beneden het maaiveld. Naast een schatting van de gemiddelde gehalten zijn voor elk blok ook betrouwbaarheidsintervallen berekend, waarmee voor alle blokken ook de kansen op overschrijding van normwaarden kunnen worden bepaald.

Bij het maken van bovenbeschreven kaarten is gebruik gemaakt van concentratiemetingen van alle monsters in het onderzoeksgebied, ook degene die op zogenaamde verdachte locaties zijn genomen. De kaarten geven dus een beeld van de *feitelijke bodemkwaliteit* (los van die gebieden die sinds de monsternamen reeds zijn gesaneerd). In het kader van het zogenaamde 'actief bodembeheer' is er echter ook behoefte aan informatie over de zogenaamde gebiedseigen bodemkwaliteit: de verdeling van gehalten voor gebieden (of blokken) voor zover die bestaat uit monsters genomen van onverdachte locaties (Werkdocument Achtergrondgehalten, 1997; zie ook voetnoot 1 op pagina 15). Daarnaast is er bij de Gemeente Utrecht behoefte aan een uitbreiding van de bodemkwaliteitskaarten met het gebied dat het stadsuitbreidingsproject Leidsche Rijn ten westen van Utrecht bevat.

1.2 Doel van het onderzoek

Het onderzoek dat in dit rapport wordt beschreven heeft twee doelen.

1. Het maken van kaarten met gehalten en bijbehorende betrouwbaarheidsmaten voor Cu, Pb, Zn, 10PAKs, humus en lutum voor de gemeente Utrecht. De kaarten worden gemaakt op basis van alle monsters (*feitelijke bodemkwaliteit*) en op basis van het gedeelte van de monsters dat genomen is op onverdachte locaties (*gebiedseigen bodemkwaliteit*).
2. Het uitbreiden van deze kaarten met het gebied ten westen van Utrecht dat de stadsuitbreiding Leidsche Rijn bevat.

1.3 Resultaten

Het onderzoek levert de volgende resultaten:

1. De volgende kaarten in ARC/INFO formaat (voor Cu, Pb, Zn, 10PAKs, humus en lutum gebaseerd op alle monsters (*feitelijke bodemkaart*) en voor Cu, Pb, Zn

en 10PAKs ook gebaseerd op de monsters van onverdachte locaties (gebiedseigen bodemkwaliteit)):

- a Mediaankaarten: kaarten met strata (homogene deelgebieden) waarbij per stratum de mediane concentratie wordt gegeven.
- b Gehaltekaarten: kaarten met blokgemiddelde (blokken van 50 x 50 x 0.5 m³) 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.
- c 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.
- d Blokpercentielenkaarten. Bijvoorbeeld: De 90-Blokpercentielenkaart geeft voor elk blok de waarde waar het blokgemiddelde gehalte met 90% zekerheid onder ligt. De 90-Blokpercentielenkaart voor de gebiedseigen bodemkwaliteit (alleen onverdachte monsterlocaties) kan gebruikt worden als achtergrondgehaltekaart (Werkdocument Achtergrondgehalten, 1997).
- e Wijkpercentielenkaarten. Bijvoorbeeld: De 90-Wijkpercentielenkaart geeft voor elke wijk in de gemeente Utrecht het 90-percentiel van de ruimtelijke frequentieverdeling. Dat wil zeggen dat 90% van de blokken in die wijk een gemiddeld gehalte heeft dat lager is dan deze waarde. De 90-wijkpercentielenkaart voor de gebiedseigen bodemkwaliteit (alleen onverdachte monsterlocaties) kan gebruikt worden als achtergrondgehaltekaart (Werkdocument Achtergrondgehalten, 1997).

Elk van deze kaarten kan beschouwd worden als een thema van de bodemkwaliteitskaart van de Gemeente Utrecht (Bierkens, 1997). Om alle typen kaarten samen aan te duiden zal in het vervolg van dit rapport de term 'bodemkwaliteitskaarten' gebruikt worden.

4. Een *onderzoeksrapport* (i.c. dit rapport) waarin de verschillende kaarten worden beschreven, als ook de geostatistische methode die is gebruikt om de kaarten te maken.

1.4 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 bodemkwaliteitskaarten. Daarna volgt een beknopte beschrijving van de geostatistische methoden die gebruikt zijn om deze kaarten te maken. De resultaten van de geostatistische analyses, alsmede de

resulterende kaarten worden beschreven in hoofdstuk 3. In hoofdstuk 4 worden conclusies en aanbevelingen gegeven. 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 bodemkwaliteitskaarten te maken. Aanhangsel B geeft tabellen waarin per stof en per homogeen deelgebied de statistische parameters worden gegeven, die zijn gebruikt in de toegepaste geostatistische methoden.

2 Materialen en methoden

2.1 Gebruikte gegevens

De volgende gegevens waren per 1 september 1998 aanwezig en vormen het uitgangspunt voor de bodemkwaliteitskaarten (alle gegevens verstrekt door de Dienst Stadsontwikkeling 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);
- Een ASCII-bestand met 8409 locaties waar monsters (puntmonsters en mengmonsters) zijn genomen en waar het gehalte aan Cu, Pb, Zn, 10 PAK's, humus en lutum (één of meer van deze stoffen) is bepaald.
- Een subset van dit bestand waarin alleen gehalten staan van monsters die op (voor de verschillende stoffen) onverdachte¹ locaties zijn genomen.

De kaarten betreffen de gemeente Utrecht, de direct aanliggende buitengebieden en de geplande uitbreiding Leidsche Rijn. Dit gebied, vanaf nu 'onderzoeksgebied' genoemd, heeft een rechthoekige vorm en wordt begrensd door de RDM-coördinaten (127.900, 451.300) en (141.900, 461.050). Het onderzoeksgebied heeft dus een oppervlakte van 136.5 km².

In de bestanden met monstergegevens worden de volgende attributen gebruikt: monsternummer, x-coördinaat, y-coördinaat, z-coördinaat (midden tussen bovenkant monster en onderkant monster), kopergehalte, loodgehalte, zinkgehalte, gehalte aan 10PAKs, humusgehalte, lutumgehalte, mengcode. 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 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 'niet-gemengde monsters' en 'gemengde monsters' (in totaal dus vier bestanden: niet-gemengde monsters en gemengde monsters voor respectievelijk alle locaties en voor de onverdachte locaties). In het bestand

¹ Een locatie is verdacht voor een bepaalde stof als op basis van historische informatie blijkt dat op deze locatie een activiteit heeft plaatsgevonden die het voorkomen van verhoogde gehalten voor deze stof zeer waarschijnlijk maakt. Bijvoorbeeld, als er op een bepaalde terrein een loodwitfabriek heeft gestaan, worden alle gemeten loodgehalten van de monsters die op dit terrein liggen uit het bestand verwijderd (i.e. gescreend). Als er op deze locaties bijvoorbeeld ook 10PAKs is bepaald en deze activiteit is hiervoor niet verdacht, dan blijven deze 10PAKs metingen in het bestand bestaan. Deze screening is verricht door het onderzoeksbureau Chemielinco.

'gemengde monsters' zijn de mengcodes groter dan 1. Een mengmonster met een mengcode '2' wordt twee keer meegeteld bij het berekenen van gemiddelden, monsters met een mengcode '3' drie keer etc. Tabel 1 geeft voor het bestand met alle locaties per 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 2 geeft dezelfde informatie voor het bestand met onverdachte locaties.

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. '); alle monsterlocaties beschikbaar per 1-9-98.

	Cu		Pb		Zn		10PAKs		Humus		Lutum	
	ng	g	Ng	g	ng	g	ng	g	ng	g	ng	g
Boven	3482	147	3389	147	3563	1724	2357	100	1628	378	1331	465
		7		6				8				
Onder	137	260	166	259	13	10	547	268	123	107	7	31
Totaal	3619	173	3555	173	3576	1734	2904	127	1751	485	1338	496
		7		5				6				
Ontbr.	2895	158	2959	160	2938	161	3610	619	4763	1410	5176	1399
Detl.	5.0		10.0		5.0		0.20		1.0		1.0	

Tabel 2 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. '); onverdachte monsterlocaties beschikbaar per 1-9-98.

	Cu		Pb		Zn		10PAKs		Humus		Lutum	
	ng	g	ng	g	ng	g	ng	g	ng	g	ng	g
Boven	3069	100	2895	953	3148	1197	1917	630	1233	353	1191	440
		2										
Onder	125	194	153	189	13	8	529	236	53	104	6	30
Totaal	3194	119	3048	114	3161	1205	2446	866	1286	457	1197	470
		6		2								
Ontbr.	383	81	529	135	416	72	1131	411	2291	820	2380	870
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 kaarten gemiddeld te hoog uit vallen.
- *Gemengde monsters.* Een aanzienlijk gedeelte van de monsters is gemengd (Tabellen 1 en 2). De gemengde monsters kunnen 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 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.

Naast het vinden van een oplossing voor bovenstaande problemen moet de methode ook voldoen aan de volgende eisen (zie ook Bierkens, 1997):

- Aanvullende informatie, zoals bodemkaarten en landgebruikskaarten moet kunnen worden gebruikt om de bodemkwaliteitskaarten te verbeteren.
- De bodemkwaliteitskaarten moeten gemaakt kunnen worden voor verschillende diepten beneden het maaiveld.
- De nauwkeurigheid van de verkregen kaarten moet 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 Beknopt beschrijving van de interpolatiemethode

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 geostatistische methode ontwikkeld die de naam ‘gestratificeerde residuele kriging’ heeft gekregen (Bierkens, 1997). 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 (gebaseerd op software van Deutsch en Journel, 1992) gekoppeld aan ARC/INFO, bestaat per stof uit de volgende stappen (zie Aanhangsel A en Bierkens (1997) voor een uitgebreide beschrijving):

- 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 bij benadering normaal verdeeld zijn.
- 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.
- 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’.
- 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 dan aan solitaire monsters. 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 gestandaardiseerde residuen.* Als voor elk stratum het gemiddelde en de variantie zijn geschat kunnen alle gehalten van de niet-gemengde monsters worden omgezet in zogenaamde gestandaardiseerde 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 gestandaardiseerde residuen.* Uit de waarden van de gestandaardiseerde residuen kunnen nu gemiddelde waarden van deze gestandaardiseerde 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 gestandaardiseerde residuen.
- (g) *Berekening van de mediaankaart, de gehalteskaart en de betrouwbaarheidskaarten.* Uit de stratagemiddelden, de stratavarianties en de resultaten van de block-kriging (schattingen en schattingsvarianties) kunnen de mediaankaart, de kaart met blokgemiddelde gehalten en de betrouwbaarheidskaarten worden berekend.
- (h) *Berekening van blokpercentielen kaarten en wijkpercentielenkaarten.* Uit de gehalteskaart en de betrouwbaarheidskaarten kunnen blokpercentielenkaarten voor elk opgegeven percentiel worden berekend. Op basis van een kaart van de wijkindeling van de Gemeente Utrecht kunnen met behulp van een simulatie-algoritme uit de gehalteskaart en de betrouwbaarheidskaarten wijkpercentielenkaarten voor elk opgegeven percentiel worden berekend.

Wellicht ten overvloede wordt hier nogmaals gesteld dat bovenbeschreven procedure voor de zware metalen en de 10PAK's voor zowel het bestand met alle monsters als het bestand met monsters van onverdachte locaties wordt uitgevoerd.

3 Resultaten

3.1 Inleiding

De ruimtelijke interpolatiemethode van § 2.3 is toegepast op gehalten van Cu, Pb, Zn, 10PAKs, humus en lutum. Dit is gedaan met gebruik van alle monsters en met gebruik van de monsters die op onverdachte locaties liggen. Humus en lutum zijn alleen verwerkt voor alle monsterlocaties. In de volgende paragrafen worden de bodemkwaliteitskaarten die uit de ruimtelijke interpolatiemethode volgen beschreven. Ter illustratie zal er telkens een voorbeeld van elk type kaart worden gegeven voor Pb, zowel verkregen met alle monsters (de feitelijke bodemkwaliteit) als met de monsters op onverdachte locaties (gebiedseigen bodemkwaliteit).

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 § 2.3). Tabel 3 geeft voor elke stof deze representatieve waarde, zoals bepaald voor alle monsters en voor de monsters op onverdachte locaties.

Tabel 3 Representatieve waarden voor gehalten onder de detectielimiet

Stof	Effectieve waarde alle monsters	Effectieve waarde Onverdachte locaties
Cu	2,70 mg/kg ds.	1,45 mg/kg ds.
Pb	5,30 mg/kg ds.	3,80 mg/kg ds.
Zn	5,00 mg/kg ds.	0,15 mg/kg ds.
10PAKs	0,078 mg/kg ds.	0,046 mg/kg ds.
Humus	0,25 %	0,17 %
Lutum	0,20 %	0,020 %

Als voorbeeld worden in figuren 1 (alle monsters) en 2 (onverdachte locaties) de monsterlocaties (gemengd en niet-gemengd) getoond waar het loodgehalte is bepaald. Ter oriëntatie is de ook wijkindeling weergegeven. Deze kaarten tonen duidelijk het gebrek aan monsters in het buitengebied, behalve voor de geplande uitbreiding Leidsche Rijn. Ook de sterke clustering van de monsters is opvallend, zelfs voor de set met onverdachte locaties. Dit maakt eens te meer duidelijk dat declusterings-algoritmen voor het berekenen van statistieken van homogene deelgebieden onontbeerlijk zijn.

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 alleen gebruik gemaakt van de landgebruikkaart, omdat verwacht mag worden dat verhoogde gehalten aan zware metalen PAK's voornamelijk het gevolg zijn van menselijke activiteiten. Uit het onderzoek van Bijl (1994) bleek er geen verband te bestaan tussen het humus- en lutumgehalte van de monsters en de gemeten gehalten

Cu, Pb, Zn en 10PAKs. De geomorfogenetische kaart is daarom niet gebruikt voor de stratificatie ten behoeve van deze stoffen.

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, 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 Boomgaarden, boomkwekerijen en glastuinbouw.
- 6 Water.

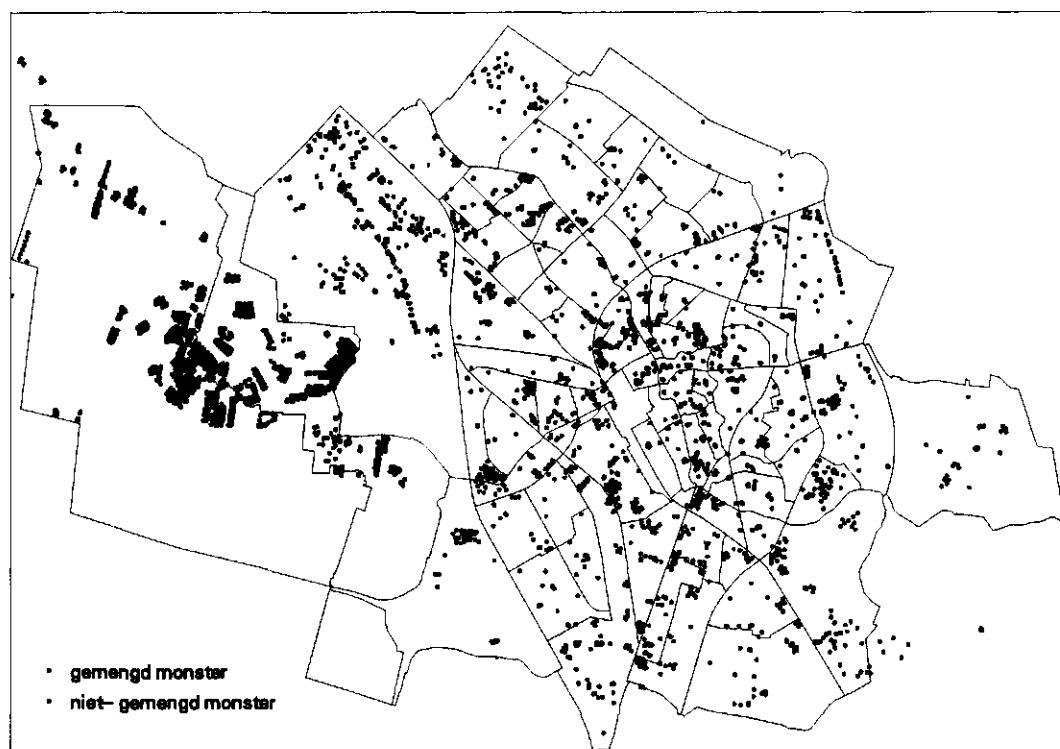
Figuur 3 toont de resulterende kaart met de boven beschreven stratificatie. Dezelfde stratificatie is gebruikt voor alle vier de lagen. Verder is er niet extra naar laag gestratificeerd: voor blokken die liggen in het stratum 'open landelijk gebied' worden dus voor alle diepten dezelfde gemiddelden en 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 vertonen met de opbouw van de ondergrond. De geomorfogenetische kaart (Berendsen, 1982) en de bodemkaart 1:50000 (de Bakker en Schelling, 1966) geven de verwachte textuurvolgving tot 2,0 m -mv. Deze kaarten geven alleen de natuurlijke textuurvolgving. De meeste wijken van Utrecht zijn echter opgehoogd ten behoeve van de woningbouw. Hiermee moet dus rekening gehouden worden.

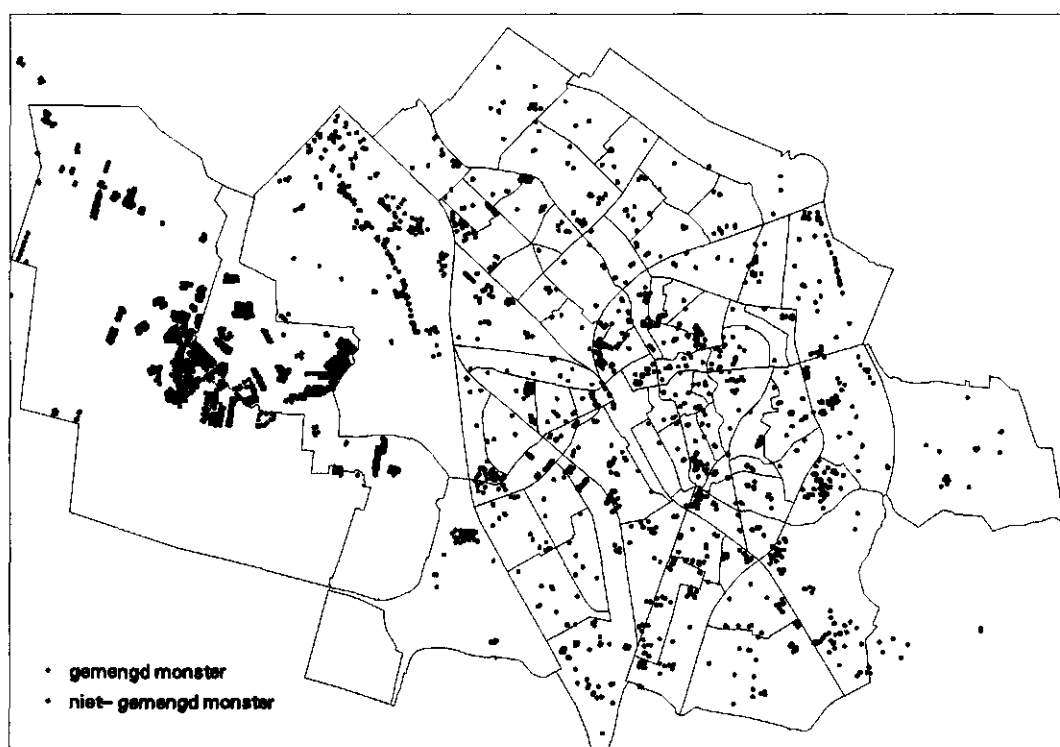
Met behulp van de geomorfogenetische kaart van Utrecht, de bodemkaart 1:50000 en informatie over de gemiddelde ophoging per woonwijk is voor elk van de vier lagen een kaart gemaakt van textuurklassen. De volgende klasse-indeling is gehanteerd.

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

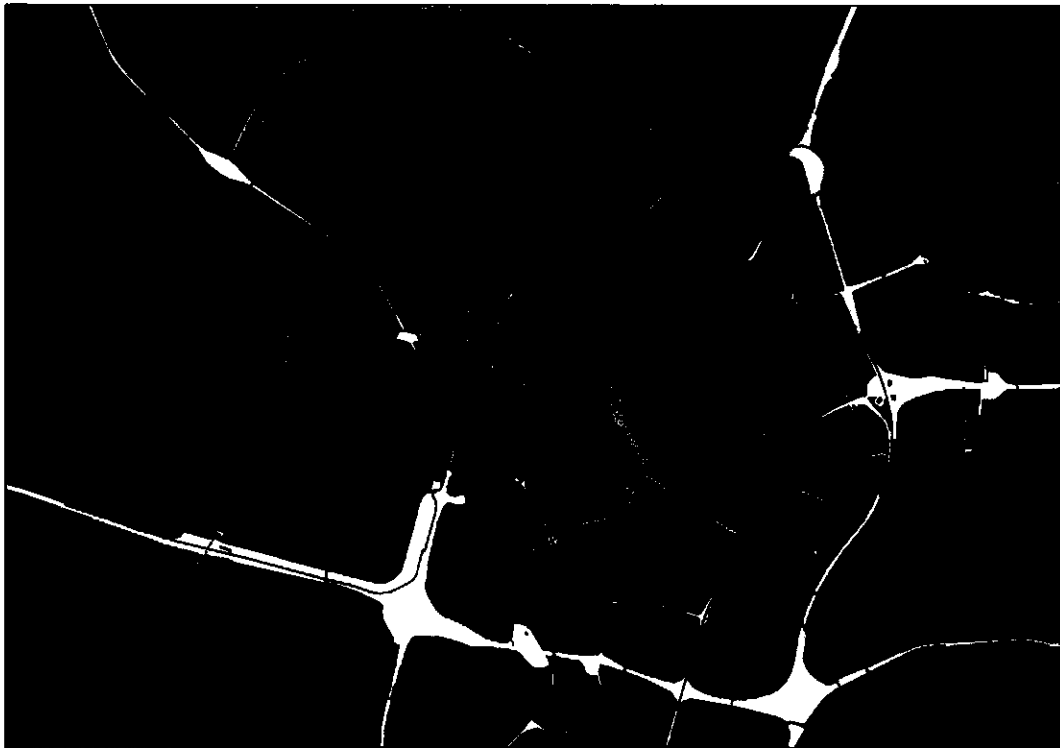
Figuur 4 toont de textuurkaart voor de bovenste 50 cm. Vanwege de ophoging zijn in de kaarten van de bovenste lagen de contouren van de stad Utrecht te herkennen. Omdat de textuur met de diepte verandert vindt men op één locatie in het horizontale vlak verschillende klassen voor verschillende diepten. 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.



Figuur 1 *Monsterlocaties waar het loodgehalte is bepaald; alle monsters, gebruikt voor feitelijke bodemkwaliteit*



Figuur 2 *Monsterlocaties waar het loodgehalte is bepaald; monsters op onverdachte locaties, gebruikt voor gebiedseigen bodemkwaliteit*



legenda landgebruik

- bebouwd gebied, woongebied voor 1880
- bebouwd gebied, woongebied 1880-1945
- bebouwd gebied, woongebied na 1945
- snelwegen en doorgaande wegen
- spoorwegen en industrieterreinen
- landelijk gebied, voornamelijk onbewoond
- kassen, boomgaarden, boomkwekerijen
- water

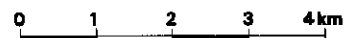
Figuur 3 Stratificatie naar landgebruik zoals gebruikt voor gehalten van Cu, Pb, Zn en 10PAKs



legenda textuur

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

schaal 1 : 100 000



Figuur 4 Stratificatie naar textuur zoals gebruikt voor humus- en lutum gehalte; 0-50 cm - mv

3.3 Mediaankaarten: gemiddelden en varianties per stratum

De volgende procedure is achtereenvolgens uitgevoerd voor alle monsters en voor de monsters op onverdachte locaties. 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 (zie aanhangsel A) met alle gemengde en niet-gemengde monsters waarbij een N maal gemengd monster N maal meetelde. Voor elk stratum en voor elke stof is met de niet-gemengde monsters de gedeclusterde variantie berekend (zie aanhangsel A). De resultaten voor alle locaties en voor de onverdachte locaties zijn respectievelijk te zien in tabellen B1 en B2 in aanhangsel B. Deze tabellen tonen voor elk stratum en voor elke stof het geschatte gemiddelde en de geschatte variantie van het loggehalte (zoals beschreven in § 2.3 is er gewerkt met de natuurlijke logaritme van de gehalten, omdat deze bij benadering normaal is verdeeld). 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 § 3.2. Optelling van de niet-gemengde monsters voor elke stof leert dat hun totale aantal kleiner is dan de aantallen vermeld in tabellen 1 en 2. 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).

Het mediane gehalte van de monsters binnen een stratum wordt geschat door de e -macht te nemen van het gemiddelde loggehalte. Het mediane gehalte van een stratum geeft de waarde waar 50% van de gehalten binnen het stratum onder ligt en 50% erboven). Figuren 5 en 6 tonen de kaarten met mediane gehalten per stratum, de zogenaamde *mediaankaarten*, voor Pb zoals berekend uit alle monsters en uit de monsters op onverdachte locaties. De mediaankaarten geven een globale indruk van de feitelijke en gebiedseigen bodemkwaliteit als functie van het landgebruik (of de textuurklasse). Op het eerste gezicht lijkt het of de mediane gehalten van de strata sterk beïnvloed worden door het al of niet verwijderen van de verdachte locaties. De klassenbreedten van de gepresenteerde kaarten zijn echter erg klein, zodat dit ook geldt voor de verschuivingen van mediane gehalten.

3.4 Gehaltekaarten

Uit de gehalten van niet-gemengde monsters worden zogenaamde gestandaardiseerde residuen berekend: het gehalte van een niet-gemengd monster dat in een bepaald stratum ligt wordt verminderd met het gemiddelde van dat stratum en het resultaat wordt vervolgens gedeeld door de wortel van de bijbehorende stratumvariantie (zie aanhangsel A). Uit de gestandaardiseerde residuen wordt vervolgens het semivariogram geschat. Door de experimentele semivariogrammen worden semivariogrammodellen (gladde functies) aangepast. In aanhangsel B worden voor alle stoffen de parameters gegeven van deze aangepaste semivariogrammodellen. Als het semivariogram bekend is kunnen uit block-kriging van de gestandaardiseerde residuen

(aanhangsel A) de *gehaltekaarten* worden gemaakt . De gehaltekaart geeft voor elk 50 x 50 x 0,5 m³ blok de beste schatting van het blokgemiddelde gehalte.

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 te vermenigvuldigen met een correctiefactor voor de variatie van de gehalten binnen het blok.

Figuren 7 en 8 geven de gehaltekaarten voor Pb voor de bovenste laag (0-50 cm – mv) voor respectievelijk alle monsters en de monsters op onverdachte locaties. 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. Vergelijking van beide kaarten laat zien dat de kaart voor de gebiedseigen bodemkwaliteit een veel rustiger kaartbeeld geeft met minder uitschieters naar boven.

3.5 Betrouwbaarheidskaarten

Uit de resultaten van de block-kriging van de gestandaardiseerde residuen en de varianties van de strata (tabellen B1 en B2) kan de variantie van de fout in de schatting van het gemiddelde *log*gehalte (σ_B^2) worden geschat. Deze variantie is een maat voor de onzekerheid² omtrent de blokgemiddelde gehalten. Hoe groter deze variantie des te groter is de verwachte schattingsfout en des te groter onze onzekerheid omtrent het blokgemiddelde gehalte. In figuren 9 (alle monsters) en 10 (onverdachte locaties) worden voor het Pb-gehalte en voor de bovenste laag de varianties van de schattingsfouten weergegeven. Net als bij de gehaltekaart is de invloed van de stratificatie duidelijk te zien. De kleinste varianties worden aangetroffen rond de monsterlokaties. Gemiddeld zijn deze varianties voor de monsters van onverdachte locaties wat lager dan die voor de set met alle monsters. Dit is te verwachten omdat de gehalten van de monsters van onverdachte locaties door het uifilteren van de uitschieters een geringere ruimtelijke variatie vertonen, zodat deze nauwkeuriger zijn te interpoleren. De *variantiekaarten* kunnen gebruikt worden om de locaties voor aanvullende bemonstering te bepalen, namelijk die locaties waar de waarden van de variantiekaarten het hoogst zijn.

Uit de variantie σ_B^2 kunnen de grenzen van het 95%- betrouwbaarheidsinterval van de blokgemiddelde gehalten worden berekend (zie aanhangsel A). Het 95%-betrouwbaarheidsinterval is een andere maat voor de onzekerheid omtrent de blokgemiddelde gehalten. Dit interval, waarbinnen we verwachten dat het (onbekende) blokgemiddelde gehalte met 95% zekerheid zal liggen, is breder wanneer we onzekerder zijn over het blokgemiddelde gehalte. Figuur 11 toont de resultaten voor het Pb-gehalte

² Bij deterministische (dwz niet statistische) interpolatiemethoden is er natuurlijk ook sprake van onzekerheid. Deze wordt echter niet gekwantificeerd of expliciet gemaakt, wat neerkomt op net doen of deze onzekerheid er niet is.

voor de bovenste laag (0-50 cm – mv.), berekend op basis van alle monsters. Om vergelijking met de gehaltekaart te vergemakkelijken is dezelfde legenda gebruikt als in Figuur 7. 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.

3.6 Percentielenkaarten

De meeste complete informatie over de onzekerheid of betrouwbaarheid van de blokgemiddelde gehalten wordt gegeven door de *kansverdeling* van het blokgemiddelde gehalte. Net als de betrouwbaarheidsintervallen kunnen kansverdelingen worden berekend uit de gehaltekaarten en de variantiekaarten. De kansverdeling van een blok geeft voor elke waarde de kans dat het gemiddelde gehalte van dat blok kleiner (of groter) is dan deze waarde. De onzekerheid omtrent het blokgemiddelde gehalte weerspiegelt zich in de breedte van de kansverdeling (en dus ook in het betrouwbaarheidsinterval). De kansverdeling is niet alleen geschikt om de onzekerheid te kwantificeren, maar kan met name gebruikt worden voor *normering* in termen van risico's. Als men bijvoorbeeld zou stellen dat saneren is vereist als de kans dat het blokgemiddelde gehalte de interventiewaarde overschrijdt groter is dan 10%, dan zal men een risico van 10% toelaten: de kans dat men onterecht niet saneert is ten hoogste 10%. De kans dat men onterecht wel saneert is dan ten minste 90%.

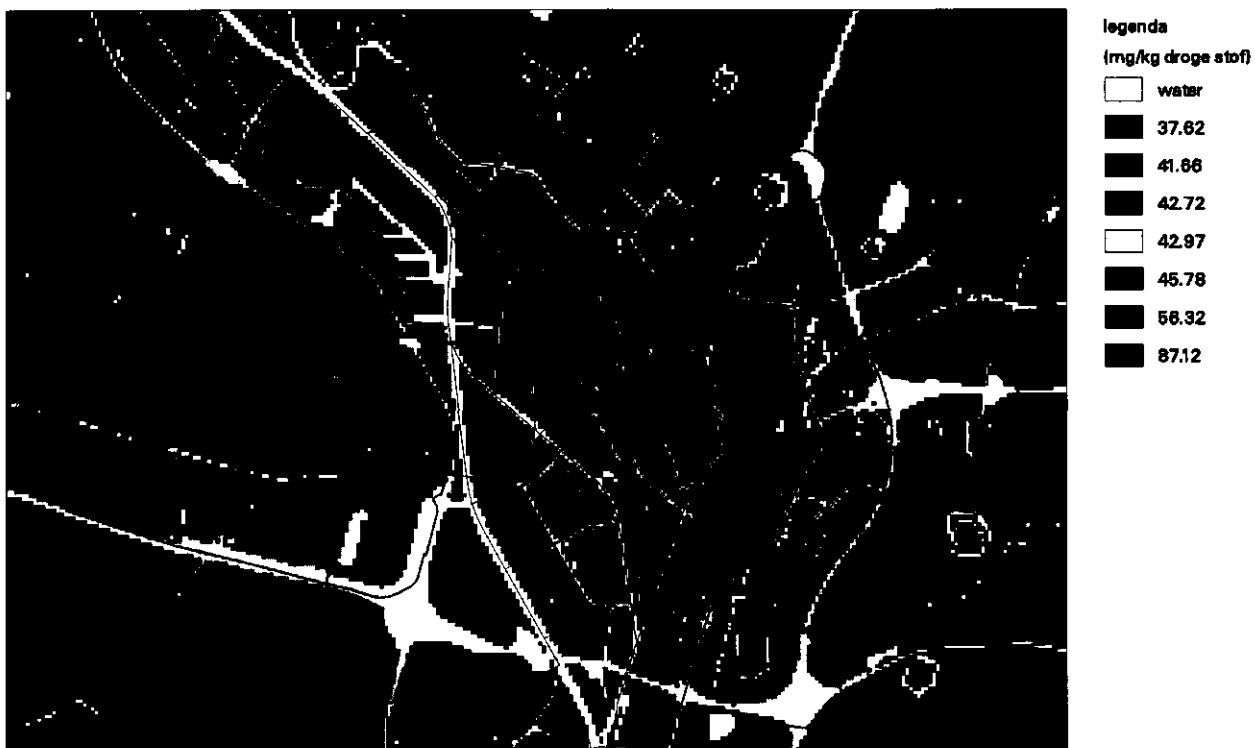
Uit kansverdeling kunnen kaarten met percentielen worden berekend (zie aanhangsel A). Een *90-blokpercentielenkaart* geeft voor elk blok dat gehalte weer waar het blokgemiddelde gehalte met een kans van 90% onder ligt. Net als overschrijdingskansen kunnen percentielen worden gebruikt voor *normering*: bijv. saneren als het 90-blokpercentielen voor een blok hoger is dan de interventiewaarde. Figuren 12 en 13 geven de 90-blokpercentielenkaarten, respectievelijk voor alle monsters en voor de onverdachte locaties voor de bovenste laag (0-50 cm – mv.). Zoals verwacht geeft de 90-blokpercentielkaart van de kaart voor de onverdachte locaties een rustiger beeld met lagere waarden, met name in het buitengebied. De 90-blokpercentielenkaart gebaseerd op de monsters van onverdachte locaties kan worden gebruikt als '*achtergrondgehaltekaart*' (Werkdocument Achtergrondgehalten, 1997).

Als voor elk blok binnen een wijk de kansverdeling van het blokgemiddelde gehalte bekend is dan kan hiermee ook een schatting van de *ruimtelijke frequentieverdeling* van deze wijk worden gedaan (zie aanhangsel A). De ruimtelijke frequentieverdeling van een wijk geeft voor elke waarde het percentage blokken binnen de wijk met een gemiddeld gehalte kleiner dan deze waarde. De ruimtelijke frequentieverdeling is dus

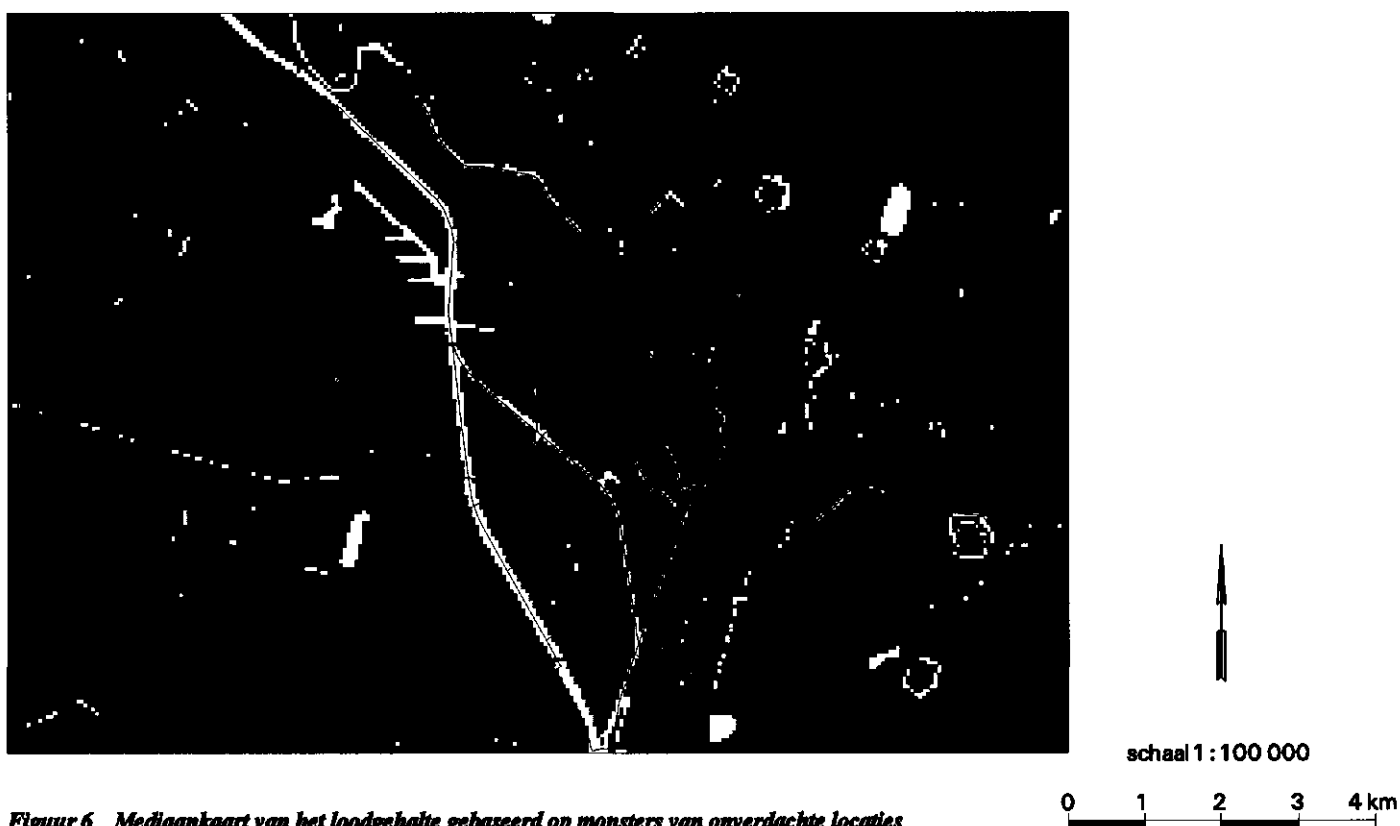
een maat voor de ruimtelijke variatie binnen het gebied³. In deze studie is de ruimtelijke frequentieverdeling van blokgemiddelde gehalten van de verschillende wijken apart geschat voor elke laag (dus vier ruimtelijke frequentieverdelingen per wijk). Van de ruimtelijke frequentieverdelingen kunnen ook de percentielen worden berekend. De 90-wijkpercentielenkaart geeft voor elke wijk per laag het 90-percentiel van de ruimtelijke frequentieverdeling. Dat wil zeggen dat van de blokken in die wijk 90% een gemiddeld gehalte heeft dat lager is dan de waarde op deze kaart. De 90-wijkpercentielenkaart voor de gebiedseigen bodemkwaliteit (alleen onverdachte monsterlocaties) is vergelijkbaar met de *achtergrondgehaltekaart* zoals die wordt gedefinieerd in het Werkdocument Achtergrondgehalten (1997).

Figuren 14 en 15 tonen de 90-wijkpercentielen kaarten voor Pb in de bovenste laag (50 cm -mv), op basis van respectievelijk alle monsters en de monsters van onverdachte locaties. Vergelijking met figuren 12 en 13 de laat zien dat de 90-wijkpercentielenkaarten eigenlijk een laag resolute versie zijn van de 90-blokpercentielenkaarten.

³ Het is belangrijk het verschil te zien tussen de ruimtelijke frequentieverdeling van een gebied en de kansverdeling van een blok binnen dat gebied. De kansverdeling van een blok geeft de onzekerheid omtrent het gemiddelde gehalte van dat blok weer: we weten niet het exacte blokgemiddelde gehalte, maar wel de kans dat deze kleiner (of groter) is dan een zekere waarde. De ruimtelijke frequentieverdeling van een gebied geeft het aantal blokken in dat gebied waarvan het gemiddelde gehalte beneden een zekere waarde ligt. De ruimtelijke frequentieverdeling kunnen we dus ook maken als we de echte gemiddelde gehalten van alle blokken binnen dat gebied zouden kennen en heeft dus niets te maken met onzekerheid, maar met ruimtelijke variatie. Omdat we hier te maken hebben met onzekere blokgemiddelde gehalten kunnen we de ruimtelijke frequentieverdeling van niet exact berekenen, maar moeten we deze schatten (zie Aanhangsel A).



Figuur 5 Mediaankaart van het loodgehalte gebaseerd op alle monsters (feitelijke bodemkwaliteit)



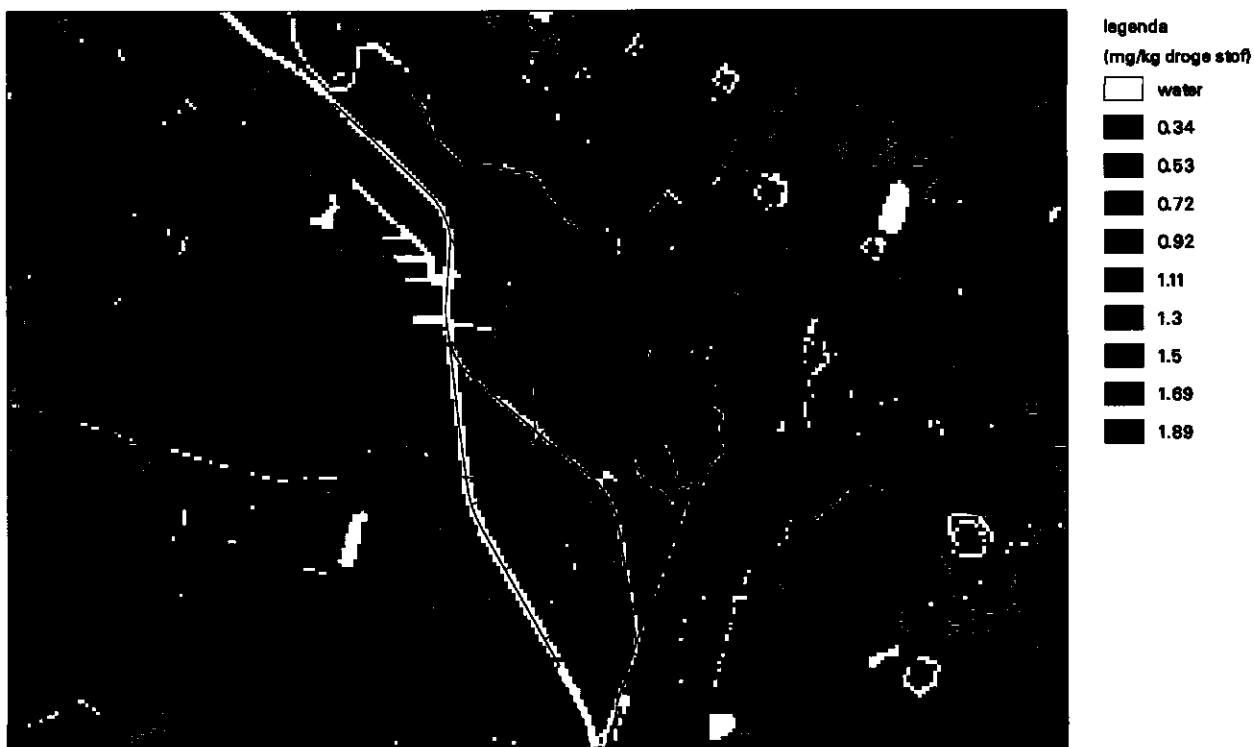
Figuur 6 Mediaankaart van het loodgehalte gebaseerd op monsters van onverdachte locaties (gebiedseigen bodemkwaliteit)



Figuur 7 Gehaltekaart voor lood; 0-50 cm-nv; gebaseerd op alle monsters (feitelijke bodemkwaliteit)



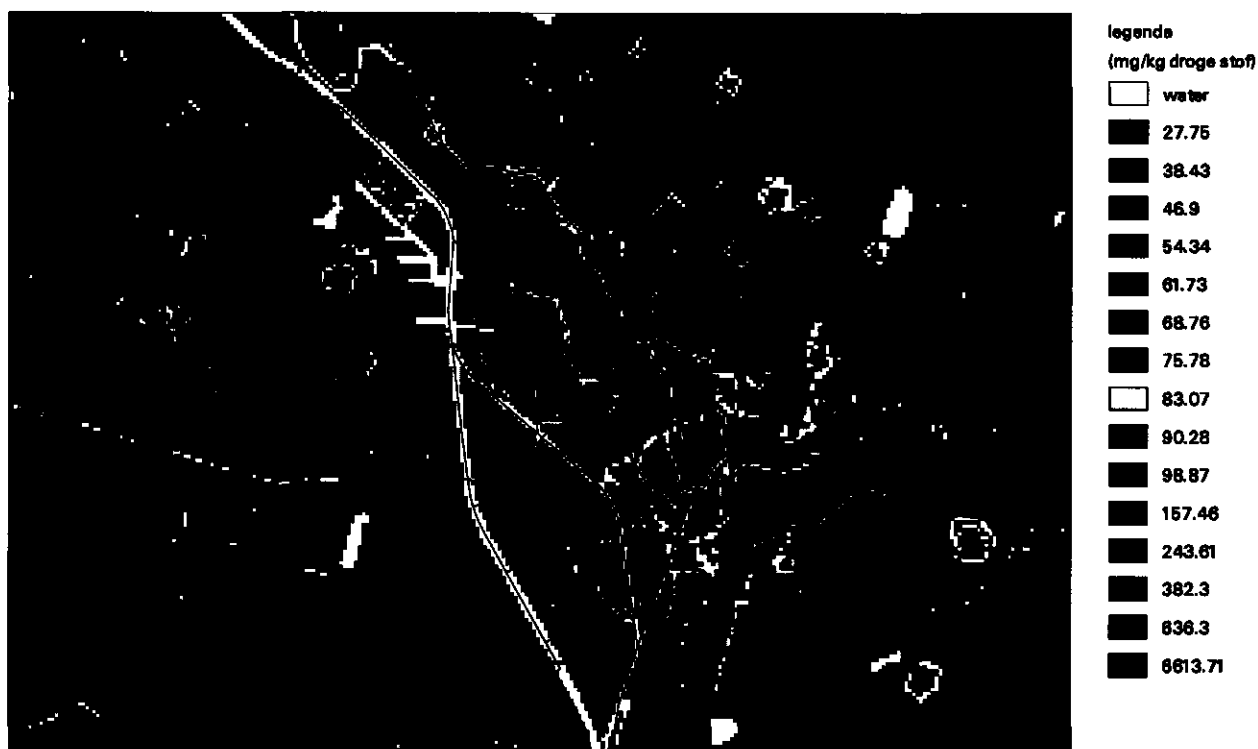
Figuur 8 Gehaltekaart voor lood; 0-50 cm-nv; gebaseerd op monsters van onverdachte locaties (gebiedseigen bodemkwaliteit)



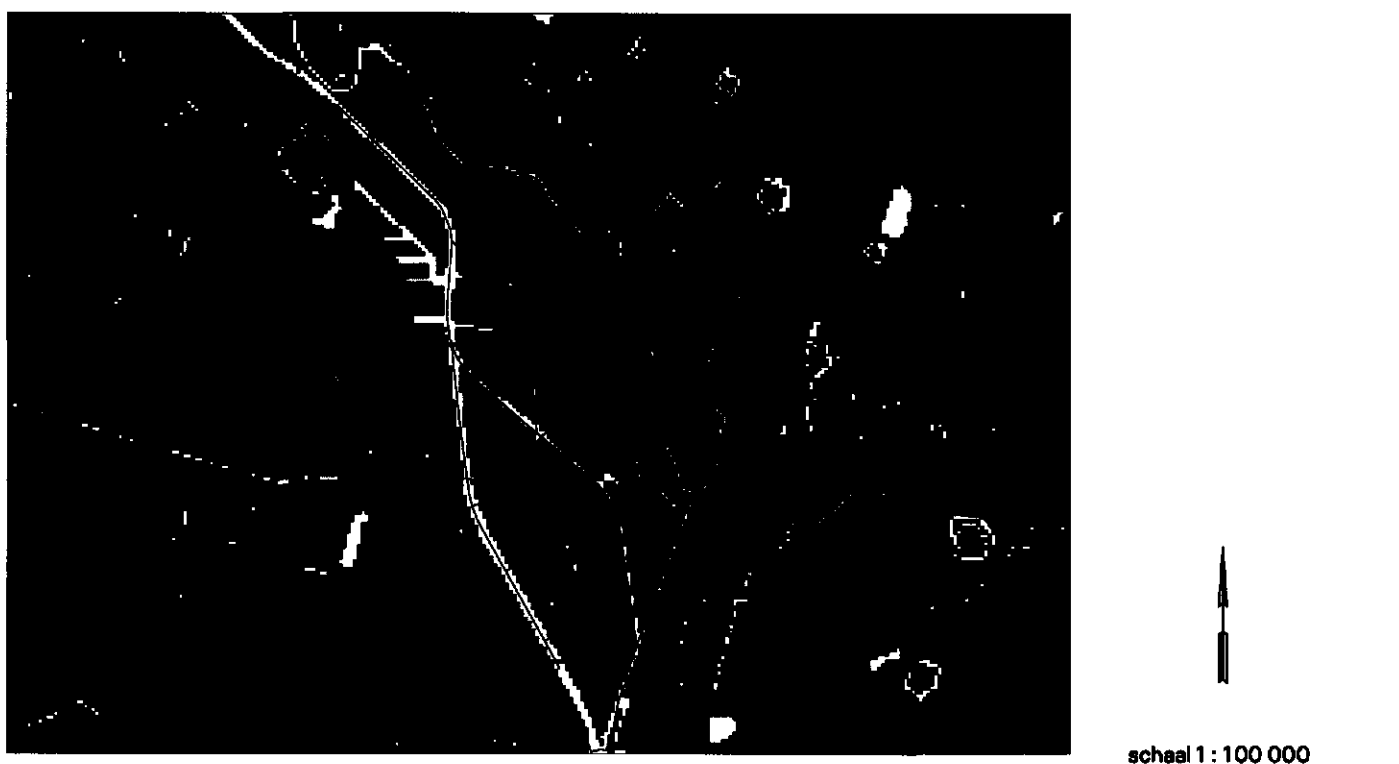
Figuur 9 Kaart met varianties van de schattingsfout van de blokgemiddelde loodgehalten van lood 0-50 cm-mv; gebaseerd op alle monsters (feitelijke bodemkwaliteit)



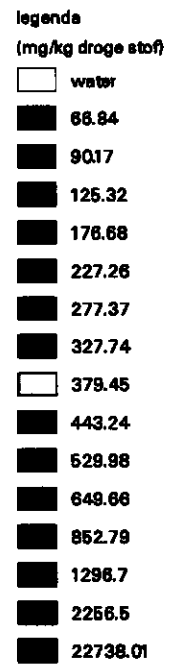
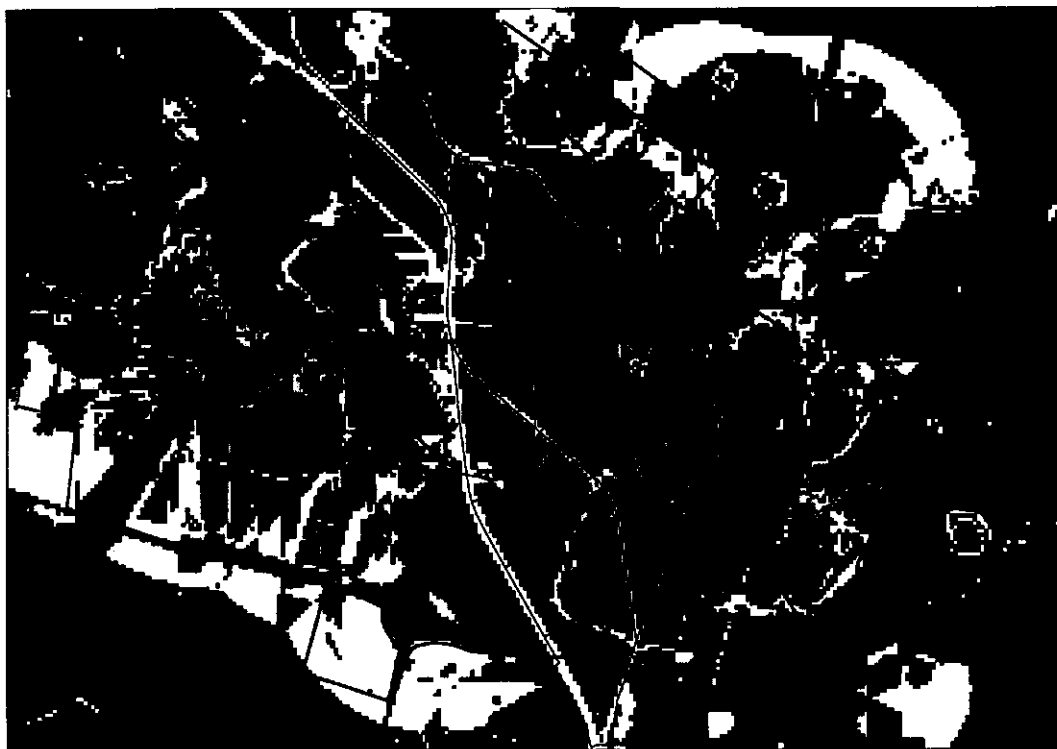
Figuur 10 Kaart met varianties van de schattingsfout van de blokgemiddelde loodgehalten van lood 0-50 cm-mv; gebaseerd op monsters van onverdachte locaties (gebiedseigen bodemkwaliteit)



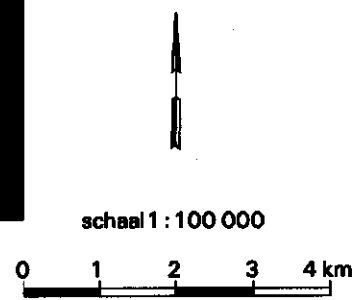
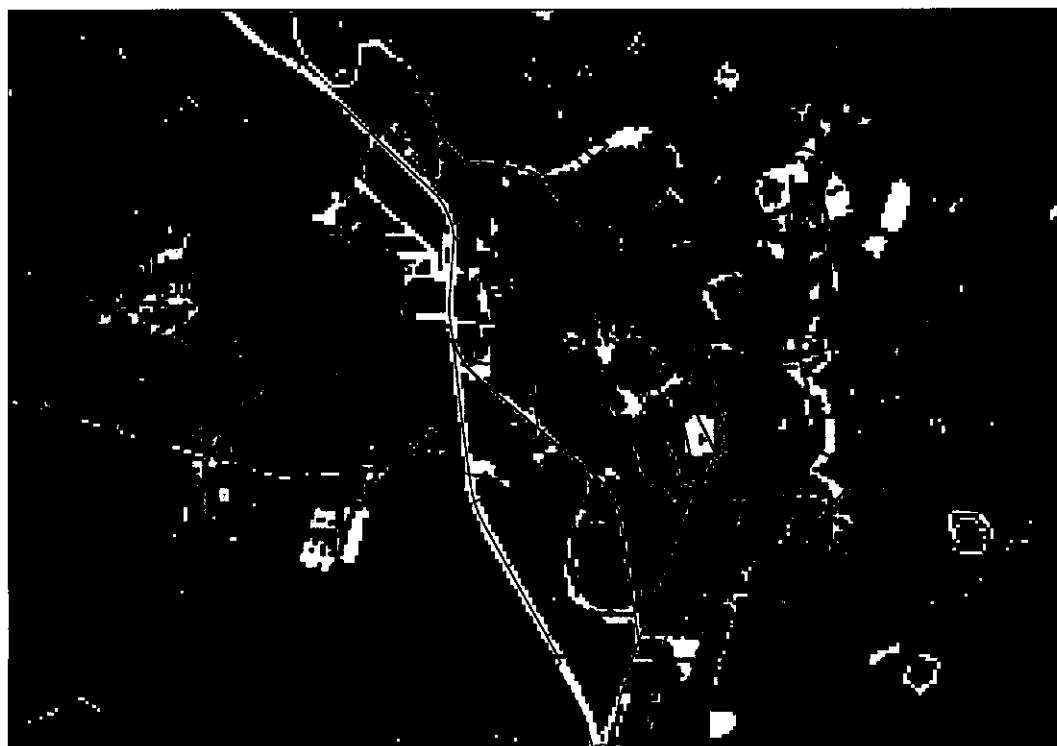
Figuur 11a Ondergrens van het 95%-betrouwbaarheidsinterval van blokgemiddelde gehalten van lood; 0-50 cm-mv; gebaseerd op alle monsters (feitelijke bodemkwaliteit)



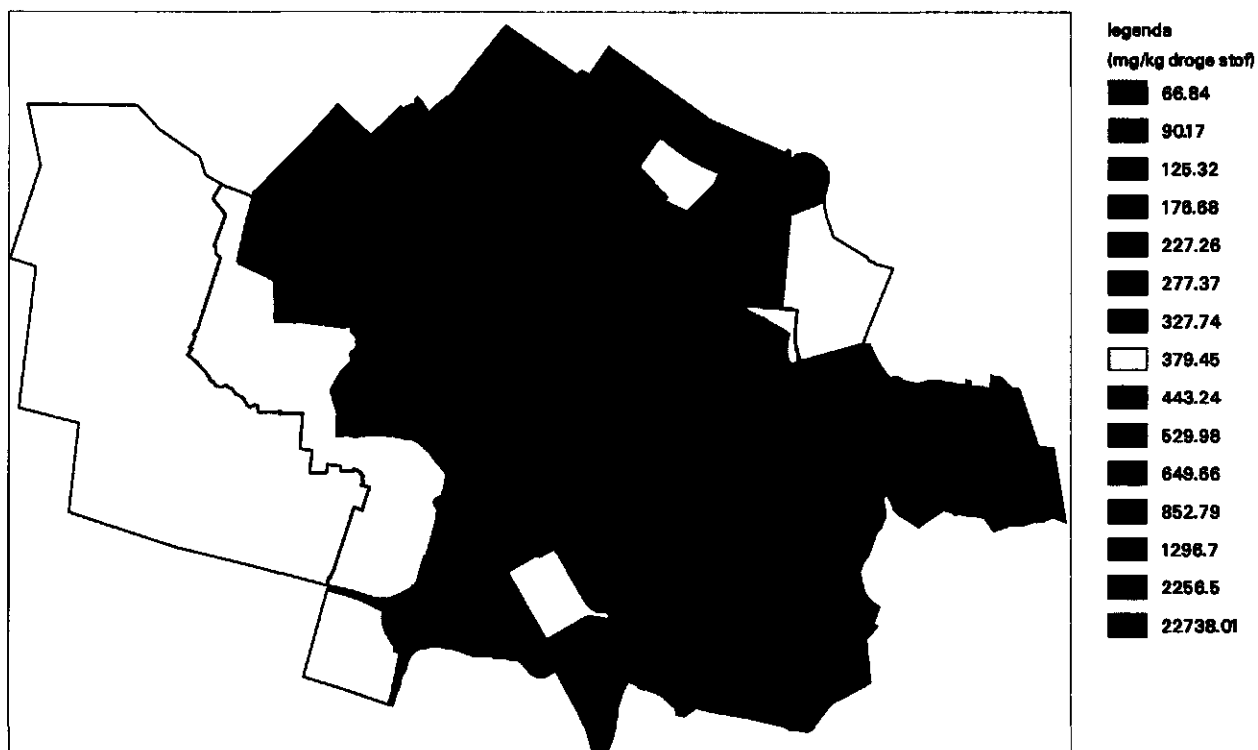
Figuur 11b Bovengrens van het 95%-betrouwbaarheidsinterval van blokgemiddelde gehalten van lood 0-50 cm-mv; gebaseerd op alle monsters (feitelijke bodemkwaliteit)



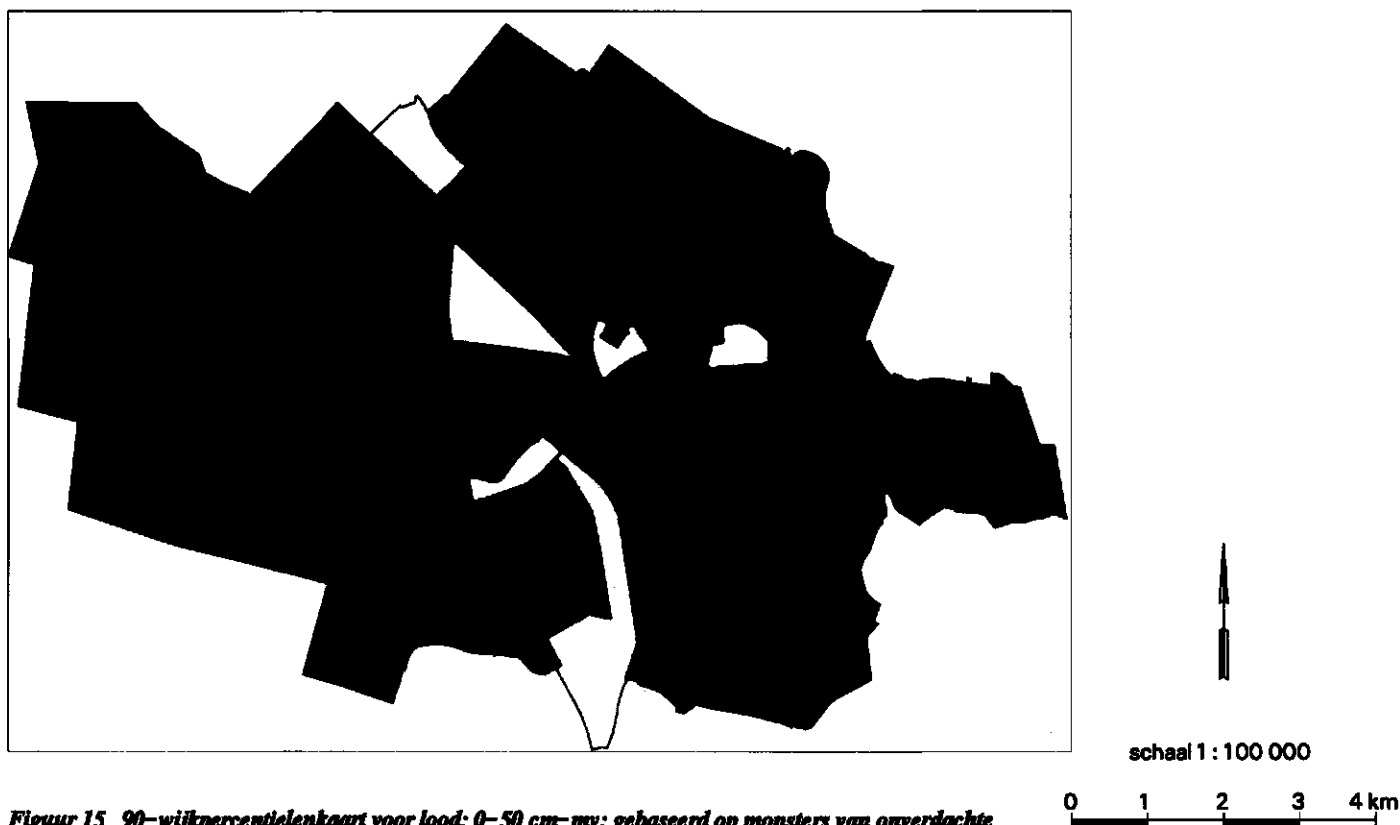
Figuur 12 90-blokpercentielenkaart voor lood; 0-50 cm-mv; gebaseerd op alle monsters (feitelijke bodemkwaliteit)



Figuur 13 90-blokpercentielenkaart voor lood; 0-50 cm-mv; gebaseerd op monsters van onverdachte locaties (gebiedseigen bodemkwaliteit)



Figuur 14 90-wijkpercentielenkaart voor lood; 0-50 cm-mv; gebaseerd op alle monsters
(feitelijke bodemkwaliteit)



Figuur 15 90-wijkpercentielenkaart voor lood; 0-50 cm-mv; gebaseerd op monsters van onverdachte
locaties (gebiedseigen bodemkwaliteit)

4 Conclusies en discussie

Met de geostatistische methode die in dit project is toegepast, is men in staat om uit problematisch waarnemingsmateriaal, zoals gemengde monsters, waarnemingen onder de detectielimiet, en geclusterde monsterlocaties, kaarten met blokgemiddelde gehalten te schatten, alsmede kaarten van bijbehorende schattingsvarianties, betrouwbaarheidsintervallen en percentielen. De methode bestaat uit een volledige 3D-interpolatie en houdt door middel van stratificatie rekening met voorinformatie zoals bodemtype en landgebruik.

De geostatistische methode is ontwikkeld en voor het eerst toegepast in een project ten behoeve van de bodemkwaliteitskaart Utrecht (Bierkens, 1997). In dat project zijn voor de Gemeente Utrecht gehalteskaarten, betrouwbaarheidskaarten en percentielenkaarten geschat voor gehalten van Cu, Pb, Zn, de som van 10 PAK's volgen het RIVM, alsmede voor het lutum- en humus gehalte. In dit project zijn deze kaarten uitgebreid met het gebied dat de stadsuitbreiding Leidsche Rijn bevat, ten westen van de stad Utrecht. Om de resultaten beter vergelijkbaar te maken met bodemkwaliteitskaarten van andere gemeenten zijn deze kaarten niet alleen geschat op basis van alle monsters, maar ook op basis van de monsters genomen op onverdachte locaties. Verder zijn hiertoe de percentielenkaarten niet alleen berekend op basis van de kansverdeling van de blokgemiddelde gehalten (blokpercentielenkaarten), maar ook op basis van de ruimtelijke frequentieverdeling van de wijken (wijkpercentielenkaarten).

De bodemkwaliteitskaarten gebaseerd op alle monsters geven een indruk van de feitelijke bodemkwaliteit (los van de plekken die sinds de bemonstering inmiddels zijn gesaneerd). De gehalteskaart voor de feitelijke bodemkwaliteit is dan ook het instrument waarmee vragen over de bodemkwaliteit op een zekere locatie kunnen worden beantwoord (voorlichting). De bijbehorende betrouwbaarheidskaarten kunnen gebruikt worden om de aanvullende monsterlocaties zodanig te selecteren dat dit leidt tot de grootste reductie in onzekerheid.

De bodemkwaliteitskaarten gebaseerd op monsters op alleen onverdachte locaties geven een indruk van de zogenaamde gebiedseigen bodemkwaliteit (Werkdocument Achtergrondgehalten, 1997). De gebiedseigen bodemkwaliteit is het resultaat van diffuse vervuilingen en het patroon van puntvervuilingen dat het gevolg is van onbekende bronnen. Omdat de monsters op bekende vervuilde locaties zijn verwijderd (de zogenaamde hot spots), vertonen deze (gebiedseigen) bodemkwaliteitskaarten een rustiger (gladder) beeld met gemiddeld lagere gehalten, dan die gebaseerd op alle monsters. De 90-blokpercentielenkaart voor de gebiedseigen bodemkwaliteit kan gebruikt worden als een alternatief voor de achtergrondgehalteskaart zoals die is gedefinieerd in het Werkdocument Achtergrondgehalten (1997). De achtergrondgehalteskaart kan onder meer gebruikt worden voor ruimtelijke ordening vraagstukken, terugsanering en vergunningverlening voor grondstromen.

De percentielenkaarten kunnen ook berekend worden op het niveau van de wijkindeling van de gemeente Utrecht. De 90-wijkpercentielenkaart komt het meest overeen met de achtergrondgehaltenkaarten die voor vele gemeenten gemaakt zijn op basis van het Werkdocument Achtergrondgehalten (1997). Het verschil is dat de methode gevolgd in dit rapport werkt op basis van blokgemiddelden en rekening houdt met gemengde monsters en clustering van meetlocaties. Vergelijking van de 90-blokpercentielenkaarten met de 90-wijkpercentielenkaarten leert dat deze vergelijkbare patronen opleveren, maar dat de blokpercentielenkaarten deze patronen met een veel hogere resolutie kunnen tonen.

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.
- Bakker, H. de en J. Schelling, 1966. *Systeem van bodemklassificatie voor Nederland, de hogere niveaus*. Wageningen, Pudoc.
- 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.
- 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.
- Bijl, F.J.C., 1994. *Achtergrondgehalten van immobiele bodemverontreinigingen in Utrecht*. Utrecht, Chemiewinkel.
- Delhomme J.P., 1978. 'Kriging in the hydrosociences'. *Advances in Water Resources* 1, 5: 251-266.
- 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.
- 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.
- Werkdocument Achtergrondgehalten, 1997. *Technisch werkdocument; Achtergrondgehalten in de bodem: schattingsmethode en toepassingen*. Inter Provinciaal Overleg.

Aanhangsel A Theoretische onderbouwing van de statistische interpolatiemethode

A.1 Inleiding

Omdat één van de eisen van de Gemeente Utrecht is, dat de nauwkeurigheid van de geïnterpoleerde kaarten met blokgemiddelde gehalten moet worden gekwantificeerd, is een statistische interpolatiemethode gebruikt. De statistische interpolatiemethode moet ook een oplossing bieden voor preferente bemonstering en gemengde monsters. Verder moet de 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 declusterings-eigenschappen 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 een belangrijk deel van de dataset uitmaken. De statistische interpolatiemethode die in dit project is toegepast kan dit wel. De methode, die wordt aangeduidt met 'gestratificeerde residuele kriging' (Bierkens, 1997), 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, en de variantie van de gehalten te stabiliseren, 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 (bijv. Pb voor onverdachte locaties). Verder wordt er vanuit gegaan dat er reeds een representatieve waarde is gekozen voor de gehalten onder de detectielimiet (zie § 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:

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

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

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 declusteringsgewichten. Deze gewichten zijn bepaald met behulp celdeclustering (Isaaks en Srivastava, 1989). 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 declusteringscellen zodanig gekozen dat het geschatte stratumgemiddelde (vergelijking A1) minimaal is (Isaaks en Srivastava, 1989). Deze celgrootte wordt ook gebruikt bij het schatten van de gedecclusterde stratumvariantie (vergelijking A2). Tabellen B1 en B2 geven de resultaten van de stratumgemiddelden en varianties voor alle stoffen voor respectievelijk alle monsters en de monsters van onverdachte locaties.

A.3 Schatting van semivariogrammen van gestandaardiseerde residuen

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

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

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

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

In deze vergelijking is $n(\mathbf{h})$ het aantal paren van monsters dat op een afstand \mathbf{h} van elkaar ligt. In de ideale situatie bevat $n(\mathbf{h})$ alleen niet-gemengde monsters die niet preferent op locaties met hogere gehalten zijn genomen. In dit project waren dergelijke monsters niet in voldoende aantal aanwezig, zodat $n(\mathbf{h})$ 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 (alleen onverdachte locaties) samen met het aangepaste semivariogrammodel (zie Tabellen B3 en B4 in Aanhangsel B voor de parameters van alle aangepaste semivariogrammodellen). Een anisotroop exponentieel model is aangepast met een sill van 1.0 en een relatieve nuggetwaarde van 0.22. De belangrijkste anisotropie-richtingen met bijbehorende rangeparameter zijn: horizontaal 750 m; verticaal: 0.40 m.

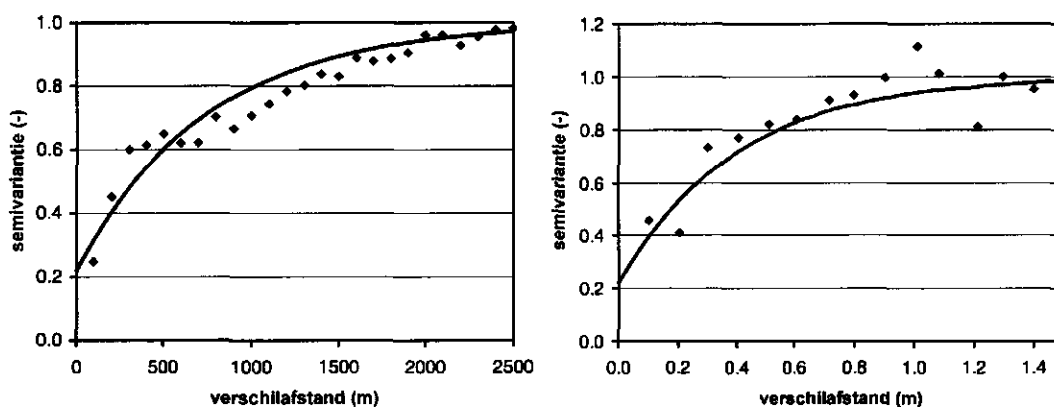


Fig. A1 Semivariogram van gestandaardiseerde residuen voor Pb (onverdachte locaties) in de belangrijkste anisotropierichtingen; linker figuur: horizontaal (range parameter 750 m); rechter figuur: verticale richting (range parameter 0.4 m)

A.4 Blokgemiddelde loggehalten en varianties van voorspellingsfouten

Er wordt verondersteld dat de gestandaardiseerde residuen y'_i partiële realisaties $y'(\mathbf{x})$ 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 gestandaardiseerde residuen, kunnen de waarden van de blokgemiddelde gestandaardiseerde 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 gestandaardiseerde residu voor een blok met middelpunt \mathbf{x} (in de 3D-ruimte) en m het aantal niet-gemengde monsters. De λ_j zijn de kriginggewichten die worden berekend door het oplossen van het stelsel vergelijkingen dat hoort bij simple block-kriging (Isaaks en Srivastava, 1989).

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 variantie van 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 het semivariogram van de

gestandaardiseerde residuen $\gamma(\mathbf{h})$, de variantie σ_h^2 van het stratum h , de n_h declusteringsgewichten w_{hi} en de m kriginggewichten λ_j :

$$\hat{\sigma}_B^2(\mathbf{x}) = \hat{\sigma}_h^2(\mathbf{x}) \left[1 - \sum_{i=1}^{n_h} \sum_{j=1}^{n_h} w_{hi} w_{hj} \gamma(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + \sum_{j=1}^m \lambda_j \bar{\gamma}(\mathbf{x}_j, B) - \bar{\bar{\gamma}}(B, B) - \right. \\ \left. 2 \sum_{i=1}^{n_h} \sum_{j=1}^m w_{hi} \lambda_j \gamma(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + 2 \sum_{i=1}^{n_h} w_{hi} \bar{\gamma}(\mathbf{x}_i, B) \right] \quad (\text{A7})$$

waarin $\bar{\gamma}(\mathbf{x}, B)$ en $\bar{\bar{\gamma}}(B, B)$ respectievelijk de eenmaal- en tweemaal geregulariseerde (=blokgemiddelde) semivariogrammen (van de gestandaardiseerde residuen) 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 $y_B(\mathbf{x})$:

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

waarbij $S_{bb}^2(\mathbf{x})$ 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 $S_{bb}^2(\mathbf{x})$ binnen het blok voor de beschouwde realisatie is onbekend, maar deze kan voor een blok in stratum h benaderd worden door $\hat{\sigma}_h^2(\mathbf{x}) \bar{\bar{\gamma}}(B, B)$, waarin $\bar{\bar{\gamma}}(B, B)$ staat voor de blokgemiddelde semivariantie van de gestandaardiseerde residuen. Een benaderende voorspelling van het blokgemiddelde gehalte wordt dan gegeven door:

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

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:

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

en de bovengrens door:

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

A6 Overschrijdingskansen en percentielen per blok

Onder de veronderstelling van een normaal verdeelde voorspellingsfout van het loggehalte ($\hat{Y}_B(\mathbf{x}) - Y_B(\mathbf{x})$) kunnen voor de blokgemiddelde gehalten de kans van overschrijding van een zekere kritische waarde z_c worden berekend uit de formule van de normale verdeling:

$$\text{Prob}[Z_B(\mathbf{x}) \leq z_c] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hat{\sigma}_B^2}} \int_{-\infty}^{z_c} \exp\left[-\frac{(\ln(z) - \hat{Y}_B(\mathbf{x}))^2}{\hat{\sigma}_B^2}\right] dz \quad (\text{A12})$$

met $\hat{Y}_B(\mathbf{x})$ en $\hat{\sigma}_B^2(\mathbf{x})$ geschat uit respectievelijk A6 en A7. Het p -percentiel van de kansverdeling voor $Z_B(\mathbf{x})$ is de waarde z_p waarvoor geldt dat $\text{Prob}[Z_B(\mathbf{x}) \leq z_p] = p$. Dus het 90-percentiel van een blok is die waarde waar het blokgemiddelde gehalte met 90% kans onder ligt. Met A12 kan deze waarde voor elk blok van een laag worden berekend. Op deze wijze ontstaat een 90-blokpercentielenkaart voor die laag.

A7 Percentielen per wijk

Het 90-percentiel van een wijk geeft de waarde waar 90% van de blokgemiddelde gehalten binnen die wijk onder ligt. Dit percentiel is dus niet het percentiel van de kansverdeling maar van de ruimtelijke frequentieverdeling van de blokgemiddelde gehalten binnen die wijk⁴. In dit onderzoek worden deze percentielen voor elke wijk per laag apart berekend. Zo kunnen dus bijvoorbeeld per laag een 90-wijkpercentielenkaart worden gemaakt. Als de blokgemiddelde gehalten exact bekend zouden zijn zouden we voor elke wijk het gewenste percentiel exact kunnen berekenen. We kennen echter alleen een kansverdeling per blok. Een percentiel (bijvoorbeeld het 90-percentiel) voor wijk x en laag y wordt in onderzoek als volgt geschat:

1. Selecteer alle blokken die in wijk x en laag y liggen.
2. Trek uit de kansverdeling van elk van de geselecteerde blokken (A12) een groot aantal blokgehalten. Dit gebeurt aselect door middel van een Psuedo-random number generator.
3. Gooi alle getrokken blokgehalten van alle blokken op een hoop en sorteer deze van klein naar groot. De waarde waar 90% van de getrokken gehalten onder liggen is het 90-wijkpercentiel.

Wijkpercentielen op deze wijze verkregen incorporeren zowel de ruimtelijk variatie van de blokgemiddelde gehalten binnen de wijk, als ook de onzekerheid over deze blokgemiddelde gehalten.

⁴ Voor een korte uitleg over het verschil tussen een kansverdeling en een ruimtelijke frequentieverdeling wordt verwezen naar voetnoot 3 in §3.6.

Aanhangsel B Tabellen met statistieken en semivariogramparameters

Tabel B1 Gedecclusterde gemiddelden $\hat{\mu}_h$ en varianties $\hat{\sigma}_h^2$ van loggehalten per stof en per stratum h ; alle monsters (feitelijke bodemkwaliteit); 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	440	107	3,464	1,058
	1b	2302	558	3,024	1,447
	1c	1786	400	2,758	2,072
	2	113	20	2,776	3,490
	3	906	209	3,045	2,205
	4	1811	1120	3,104	1,399
	5	867	766	3,217	0,322
Pb	1a	520	176	4,467	1,869
	1b	2311	556	4,031	2,518
	1c	1768	372	3,627	1,861
	2	108	15	3,760	1,468
	3	905	206	4,755	2,787
	4	1690	1047	3,824	1,700
	5	857	756	3,729	0,584
Zn	1a	447	124	4,398	0,645
	1b	2205	453	4,434	1,822
	1c	1788	382	4,090	1,610
	2	110	17	4,107	1,548
	3	914	208	4,376	1,813
	4	1817	1160	4,416	1,210
	5	900	796	4,494	0,481
10PAKs	1a	293	55	0,468	6,615
	1b	1500	353	0,357	5,535
	1c	1004	291	0,181	4,498
	2	115	14	0,105	3,489
	3	771	145	0,537	5,733
	4	1407	961	0,029	4,868
	5	759	693	-0,466	2,875
Humus	1	751	224	0,633	1,232
	2	290	245	1,111	0,515
	3	1258	926	1,107	0,810
	4	30	8	0,863	0,174
Lutum	1	731	172	1,344	2,351
	2	230	185	2,395	0,513
	3	1124	777	2,117	1,822
	4	33	6	2,122	0,777

Tabel B2 Gedecclusterde gemiddelden $\hat{\mu}_h$ en varianties $\hat{\sigma}_h^2$ van loggehalten per stof en per stratum h: monsters van onverdachte locaties (gebiedseigen bodemkwaliteit); 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	313	77	3,186	0,707
	1b	1582	423	2,853	1,373
	1c	1363	318	2,522	1,378
	2	88	17	2,482	1,218
	3	698	145	2,677	1,577
	4	1466	1062	2,975	0,804
	5	775	750	3,204	0,309
Pb	1a	340	115	4,043	1,039
	1b	1370	363	3,754	1,904
	1c	1316	300	3,372	1,669
	2	81	13	3,431	1,363
	3	707	145	3,396	1,871
	4	1351	982	3,626	1,113
	5	765	740	3,768	0,538
Zn	1a	377	112	4,326	0,462
	1b	1413	308	4,229	1,257
	1c	1392	310	3,957	1,078
	2	86	15	3,789	5,726 ⁵
	3	672	146	4,133	1,134
	4	1502	1099	4,274	1,830 ⁵
	5	801	776	4,491	0,410
10PAKs	1a	218	32	-0,124	3,916
	1b	849	212	0,009	3,534
	1c	693	215	-0,268	3,204
	2	93	12	-0,575	3,365
	3	565	91	-0,074	3,786
	4	1106	876	-0,355	3,846
	5	693	680	-0,801	3,066

⁵ Bij berekeningen vervangen door 1,213, de gemiddelde variantie binnen strata, omdat het zeer onwaarschijnlijk is dat de variantie van de residuen toeneemt na verwijdering van de verdachte locaties.

Tabel B3 Parameters van de semivariogrammodellen aangepast aan de experimentele semivariogrammen van de gestandaardiseerde residuen: zie voetnoot⁶ voor de uitleg van de functievormen; SPH sferisch model; EXP exponentieel model; ϕ hoek van richting langste anisotropie-as; C_0 relatieve nugget (de sill is gelijk aan 1); a_L range parameter in richting langste anisotropie-as; a_T range parameter in richting kortste anisotropie-as; a_V range parameter in verticale richting; experimentele semivariogrammen uit alle monsters (feitelijke bodemkwaliteit)

Stof	Model	C_0	ϕ (grad)	a_L (m)	a_T (m)	a_V (m)
Cu	EXP	0,57	0	700	500	0,30
Pb	EXP	0,36	0	750	750	0,70
Zn	EXP	0,34	157,5	600	400	0,30
10PAKs	EXP	0,27	45	150	75	0,25
Humus	SPH	0,34	157,5	4000	2800	0,80
Lutum	SPH	0,29	22,5	5000	3000	1,50

Tabel B4 Parameters van de semivariogrammodellen aangepast aan de experimentele semivariogrammen van de gestandaardiseerde residuen: zie voetnoot⁶ voor de uitleg van de functievormen; SPH sferisch model; EXP exponentieel model; ϕ hoek van richting langste anisotropie-as; C_0 relatieve nugget (de sill is gelijk aan 1); a_L range parameter in richting langste anisotropie-as; a_T range parameter in richting kortste anisotropie-as; a_V range parameter in verticale richting; experimentele semivariogrammen uit monsters onverdachte locaties (gebiedseigen bodemkwaliteit)

Stof	Model	C_0	ϕ (grad)	a_L (m)	a_T (m)	a_V (m)
Cu	EXP	0,35	0	800	800	0,35
Pb	EXP	0,22	0	750	750	0,40
Zn	EXP	0,14	157,5	750	500	0,40
10PAKs	EXP	0,35	45	250	100	0,30

⁶ De volgende twee modellen worden toegepast (h_L , h_T , h_V zijn respectievelijk de verschilafstanden in de richting van de langste anisotropie-as, de richting van de kortste anisotropie-as en de verticale richting):

EXP: exponentieel model: $\gamma(\mathbf{h}) = C_0 \delta(h') + (1 - C_0)(1 - e^{-h'})$

SPH: sferisch model: $\gamma(\mathbf{h}) = \begin{cases} C_0 \delta(h') + (1 - C_0) \left(\frac{3}{2} h' - \frac{1}{2} (h')^3 \right) & \text{als } h' \leq 1 \\ 1 & \text{als } h' > 1 \end{cases}$

met

$$\delta(h') = \begin{cases} 0 & \text{als } h' = 0 \\ 1 & \text{als } h' > 1 \end{cases}$$

en

$$h' = \sqrt{\left(\frac{h_L}{a_L}\right)^2 + \left(\frac{h_T}{a_T}\right)^2 + \left(\frac{h_V}{a_V}\right)^2}$$