



De FerryBox en het waterkwaliteitsmeetnet op de Noordzee

Jaap van der Meer



De *FerryBox* en het waterkwaliteitsmeetnet op de Noordzee

Jaap van der Meer

June 18, 2010

Abstract

Recentelijk heeft Rijkswaterstaat een autonome meetopstelling, de *FerryBox*, in gebruik genomen, waarmee onder andere temperatuur, zoutgehalte, fluorescentie en troebelheid van het zeewater gemeten kan worden. De opstelling is op verschillende op de Noordzee varende schepen, waaronder een veerboot, geplaatst. De vraag is of deze aanpak het huidige meetnet, waarin op 19 locaties tot 30 keer per jaar vergelijkbare metingen verricht worden, kan vervangen. Er van uitgaande dat in beide alternatieven hetzelfde type metingen gedaan wordt, is dit in essentie een vraag of de ruimtelijke en temporele dekking in beide programma's is voldoende is om tot betrouwbare interpolaties te komen. In dit rapport wordt gebruik gemaakt van *kriging*, een methode uit de ruimtelijke statistiek, om de betrouwbaarheid van interpolaties binnen het onderzochte gebied en binnen de waarnemingsperiode te bepalen. De *FerryBox* metingen bleken betrouwbaardere interpolaties op te leveren dan het huidige meetnet. Onder de voorwaarde dat inderdaad hetzelfde type metingen uitgevoerd wordt en de ruimtelijke en temporele dekking van de *FerryBox* metingen op peil blijft, kan de nieuwe aanpak tot een aanzienlijke kostenbesparing leiden.

1 Inleiding

Begin jaren zeventig van de vorige eeuw heeft Rijkswaterstaat een meetnet opgezet voor het volgen van de waterkwaliteit van de Noordzee. Het meetnet werd ontworpen volgens de klassieke raaienadering. Langs 10 raaien loodrecht op de kust werden ongeveer 75 locaties meerdere malen per jaar bemonsterd. Vanaf 1996 is het meetnet in gereduceerde vorm voortgezet en

worden nog maar 19 locaties verdeeld over 5 raaien 7-31 keer per jaar bezocht. Ondanks deze reductie drukken de kosten van het meetprogramma nog steeds zwaar op de begroting, met name doordat dure scheepstijd ingezet moet worden. Verdere reductie van het programma wordt daarom overwogen. Kustecosystemen zijn echter hoog dynamische systemen waar kortdurende en lokale gebeurtenissen een groot effect kunnen hebben op de ecosysteemdynamica. Dit geldt bijvoorbeeld voor fytoplanktonbloeien. De vraag is dan ook gerechtvaardigd of verdere reductie van het meetprogramma niet ten koste gaat van het kunnen waarnemen van een dergelijke dynamiek in het systeem. Deze vraag zou zelfs opgeworpen kunnen worden ten aanzien van de huidige meetinspanning.

Rijkswaterstaat is daarom de afgelopen decade begonnen alternatieve benaderingen voor het Noordzee-meetnet te onderzoeken, met als doel de ruimtelijke dekking en de temporele resolutie te verhogen, maar tegelijkertijd de kosten te beperken [3]. Autonome meetopstellingen worden op schepen gezet, die toch al zouden varen, zodat de dure scheepskosten komen te vervallen. Dergelijke schepen, bijvoorbeeld veerboten of de vaartuigen van de kustwacht, worden in het Engels *ships of opportunity* genoemd. De meetopstelling is een zogeheten Duitse *FerryBox* die onder andere temperatuur, zoutgehalte, fluorescentie als een indirecte maat voor chlorofyl-a, en troebelheid van het oppervlaktewater meet [2]. De verkennende studie wordt uitgevoerd in samenwerking met een aantal andere onderzoeksinstituten rondom het door de EU betaalde project *FerryBox* [1]. In 2005 is een *FerryBox* geïmplementeerd op de *Zirfaea* en in 2006 ook op de *Arca*. Beide schepen zijn van Rijkswaterstaat en worden voornamelijk ingezet op het Nederlandse deel van de Noordzee. In 2007 is de *FerryBox* van de *Arca* afgehaald en overgezet op de *Transcarrier* waarmee een regelmatige veerdienst onderhouden wordt tussen IJmuiden en het Noorse Bergen.

In dit rapport wordt in opdracht van Rijkswaterstaat dit verkennend gebruik van de *FerryBox* geevalueerd, waarbij met name gekeken zal worden wat de toegevoegde waarde is van het gebruik van de *FerryBox* ten opzichte van de huidige praktijk met 19 regelmatig bezochte locaties. Geeft de *FerryBox* betere ruimtelijke en temporele informatie? Aansluitend kan dan ook de vraag gesteld worden of door het gebruik van de *FerryBox* de traditionele aanpak verminderd of zelfs stopgezet kan worden zonder verlies aan informatie en betrouwbaarheid. Ook bij deze vraag draait het om ruimtelijk en temporele dekking. Er zal in deze evaluatie dus niet ingegaan worden op verschillen in het soort van metingen dat gedaan wordt in de klassieke opzet en in de *FerryBox* aanpak. Er zal dus niet ingegaan worden op bijvoorbeeld de vraag of de door de *FerryBox* gemeten fluorescentie wel een betrouwbare indirecte maat is voor het in het oorspronkelijke meetnet gemeten chlorofyl-a.

De kernvraag waar op ingegaan wordt is welke ruimtelijke en temporele informatie beide meetprogramma's opleveren. Geen van beide programma's meet overal en altijd. Ruimtelijke en temporele informatie zal dus verkregen moeten worden op basis van interpolatie, in dit geval dus interpolatie in zowel ruimte als tijd. In dit rapport wordt daarvoor een optimale interpolatiemethode uit de ruimtelijke statistiek gebruikt, die bekend staat onder de naam *kriging* [4]. De methode is genoemd naar de Zuidafrikaanse ingenieur D.G. Krige, die op basis van een aantal proefboringen de plaats moest bepalen waar het best naar goud geboord kon worden. De kern van de methode is de beschrijving van de mate van overeenkomst tussen twee waarnemingen als functie van de afstand tussen de waarnemingen. Oorspronkelijk werd de methode alleen gebruikt voor ruimtelijke interpolatie, maar recentelijk zijn ook ruimte-tijd interpolaties uitgevoerd. De mate van overeenkomst moet dan wel beschreven worden als functie van ruimte en tijd en hoe dit te doen is overigens nog niet goed ontwikkeld. Kriging levert niet alleen de interpolaties zelf, maar ook een indicatie van de betrouwbaarheid van elke geïnterpoleerde waarde in de vorm van de variantie van de voorspelde waarde.

Dit rapport bestaat uit twee delen. Het eerste deel is de in het Nederlands geschreven hoofdtekst. Het tweede deel is de als bijlage bij de hoofdtekst opgenomen en in het Engels geschreven concept versie van een wetenschappelijk artikel. De niet in de details geïnteresseerde lezer kan volstaan met de hoofdtekst, waarin de algemene werkwijze op hoofdlijnen beschreven wordt en waarin bij de bespreking van de resultaten ingegaan wordt op de betekenis voor Rijkswaterstaat en aanbevelingen gedaan worden over het meetnet in het algemeen en het *FerryBox* programma in het bijzonder. Degene die meer wil weten wordt verwezen naar de bijlage.

2 Materiaal en methoden

De *FerryBox* gegevens die door Rijkswaterstaat ter beschikking gesteld werden besloegen voor de Zirfaea de periode tussen 28 februari 2005 en 5 september 2008; voor de Arca/Transcarrier tussen 27 januari 2006 en 1 juni 2009. Naast plaats en tijd is gebruik gemaakt van de gemeten temperatuur in °C, het zoutgehalte in PSU, de fluorescentie, met behulp van een ijklijn omgezet in μg chlorofyl-a per liter, en de troebelheid in NTU. Gegevens uit het klassieke meetprogramma kwamen uit de periode lopend van 26 januari 2005 tot 4 januari 2009. Alleen oppervlaktewatergegevens zijn gebruikt en gegevens van dezelfde dag en dezelfde locatie zijn gemiddeld. Een overzicht van de beschikbare gegevens staat in Tabel 1 en Fig. 1.

Voor het kunnen toepassen van de kriging methode moeten de gegevens

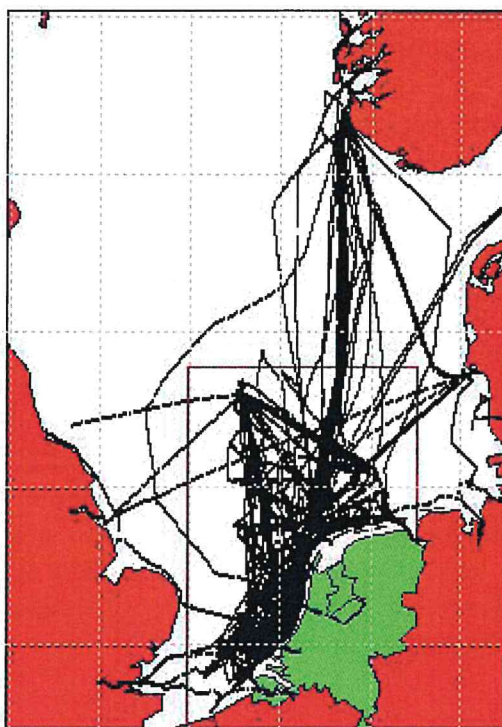


Figure 1: Kaart van de *FerryBox* gegevens van de Zirfaea en de Arca/Transcarrier, 2005-2009. Voor het roodomlijnde gebied zijn interpolaties gemaakt.

Table 1: De basisgegevens.

Platform	Jaar	Aantal
Zirfaea	2005	11791
Zirfaea	2006	14582
Zirfaea	2007	14947
Zirfaea	2008	10987
Arca/Transcarrier	2006	27202
Arca/Transcarrier	2008	20523
Arca/Transcarrier	2009	3126
Raaien	2005-2009	1108

min of meer symmetrisch verdeeld zijn. Alleen temperatuur voldeed aan deze eis. De andere drie variabelen waren scheef verdeeld. In alle drie gevallen kon echter een geschikte transformatie toegepast worden die tot een min of meer symmetrische verdeling leidde. Een grondige inspectie van de aangeleverde data liet overigens veel onnauwkeurigheden zien. Fluorescentie en troebelheid gaven soms negatieve waarden zien. De temperatuur kwam regelmatig boven de 30 °C (Fig. 2). De gemeten zoutgehaltes lagen gedurende meerdere tochten rond de 10 PSU in het midden van de Noordzee. De temperatuur gegevens van de Arca/Transcarrier uit 2008 en 2009 lieten een onverklaarde bimodaliteit zien. Fluorescentie zoals gemeten door de Zirfaea gaf om onverklaarbare redenen veel hogere waarden te zien in 2005 dan in andere jaren. Slechts de Zirfaea gegevens uit 2007 and 2008 leken betrouwbaar, hoewel de zoutgehaltes in 2008 wat hoger lagen dan in eerdere jaren. Ik heb daarom besloten om voor alle analyses alleen Zirfaea gegevens uit 2007 en 2008 te gebruiken. Daarnaast zijn estuariene gegevens, d.w.z. gegevens waar het zoutgehalte lager was dan 20 PSU, niet meegenomen. Van het oorspronkelijke aantal van meer dan 100 000 waarnemingen zijn daarom maar 21 226 gebruikt. Van deze set bleek in 2 gevallen geen temperatuurgegeven beschikbaar te zijn; geen zoutgehalte in 267, geen fluorescentie in 685, en geen troebelheid in 687 gevallen. Van de raaigegevens ontbraken 81 temperatuurwaarden.

De ruimtelijk-statistische aanpak waarvoor gekozen is bestond uit vier stappen. Allereerst is een trend in zowel ruimte als tijd geschat met behulp van een regressiemodel. In de klassieke statistiek wordt verondersteld dat de residuen, dat wil zeggen de verschillen tussen de waarnemingen en de bijbehorende modelvoorspellingen, onafhankelijk verdeeld zijn. In de ruimtelijke statistiek wordt deze veronderstelling niet gemaakt. De afhankelijkheid tussen de residuen wordt expliciet in beschouwing genomen door voor

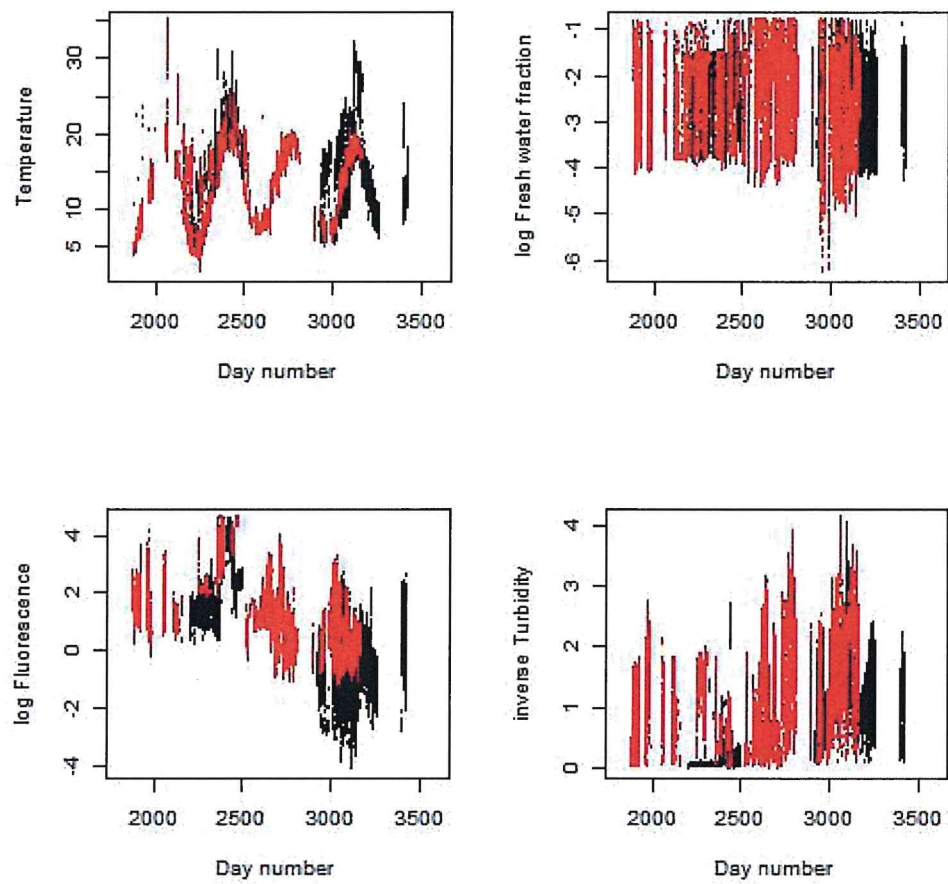


Figure 2: Tijdseries van de vier variabelen. Getransformeerde waarden. Rode stippen verwijzen naar de Zirfaea and zwarte naar de Arca. Dagnummer t.o.v. 1-1-2000.

elk paar waarnemingen de zogeheten semi-variantie te berekenen en deze vervolgens te beschrijven als functie van de afstand in de ruimte, en dit geval ook van het verschil in tijd. In de tweede stap is dus voor elk paar i and j de semi-variantie γ berekend, welke gedefinieerd is door

$$\gamma_{ij} = \frac{1}{2}(z_i - z_j)^2$$

waarbij z_i de residu is voor waarneming i . Als de residuen onafhankelijk zijn verwacht je dat de semi-variantie gelijk is aan de variantie van de residuen. Je verwacht daarentegen een lage semi-variantie wanneer de residuen positief gecorreleerd zijn. In de praktijk is de semi-variantie slechts berekend voor een geselecteerd aantal gepaarde waarnemingen. De selectie was nodig omdat er met meer dan 20 duizend waarnemingen in totaal maar liefst meer dan 200 miljoen mogelijke paren te vormen zijn. Om de rekentijd enigszins binnen de perken te houden zijn hieruit 1 miljoen paren aselekt gekozen. Normaal gesproken kent de semi-variantie een enorme spreiding en om het verband met afstand en tijd duidelijk weer te geven wordt meestal een variogram opgesteld. Hiervoor worden alle paren ingedeeld in een bepaalde afstand-tijd klasse. Ik heb klassen gekozen met een spreiding van 10 dagen en 10 km. Deze keuze is enigszins arbitrair. Te kleine klassen geven te veel spreiding, te grote klassen kunnen leiden tot een onnauwkeurig en vertekend beeld. De derde stap bestaat uit het fitten van een variogram model. Op basis van dit variogram model kan vervolgens de kriging, anders gezegd de interpolatieberekening, uitgevoerd worden. Zoals gezegd wordt kriging normaal gesproken toegepast voor ruimtelijke interpolatie. Daartoe wordt een keuze gemaakt uit een beperkte groep variogram-modellen, die aan bepaalde technische voorwaarden voldoen. Als niet aan deze voorwaarden voldaan is, kunnen numerieke problemen ontstaan bij de interpolatieberekeningen. Deze groep modellen beschrijft de semi-variantie als functie van de afstand in de ruimte. Een dergelijke groep van geselecteerde modellen bestaat nog niet voor het geval waarin de semi-variantie een functie is van zowel de afstand in de ruimte als het verschil in de tijd. Ik heb bekende variogram-modellen uitgebreid met de variabele tijd en simpelweg via een trial-and-error aanpak gekeken of numerieke problemen ontstonden bij de interpolaties. De vierde stap bestaat uit de werkelijke interpolatie met behulp van de kriging methode. Interpolatie bestaat uit het maken van locale voorspellingen en elke voorspelling is in principe een gewogen lineaire combinatie van alle metingen, waarbij de weegfactor afneemt naarmate de waarneming verder weg in ruimte en tijd ligt van het punt waarvoor de voorspelling gemaakt wordt. Kriging is dus niets meer dan het vinden van de optimale weegfactoren. In de praktijk spelen echter alleen de naburig gelegen punten een rol en om de

rekentijd binnen de perken te houden zijn alleen de 100 dichtsbijzijnde punten in beschouwing genomen, dat wil zeggen de 100 punten met de laagste semi-variantie. Op basis van de kriging voorspellingen met daarbij opgeteld de in de eerste stap geschatte trend kan voor elk willekeurig tijdstip een kaart gemaakt worden. Voorspellingen zijn gemaakt voor alle hoekpunten van een fijn grid dat zich uitstekte van de 2^e tot de 7^e lengtegraad en van de 51^e tot de 55^{1/2}^e breedtegraad. De gridlijnen lagen op 6 geografische minuten van elkaar, wat overeenkomt met een afstand van 11,1 km in de noord-zuid richting and ongeveer 5,5 km in de oost-west richting. Als tijdstip is 1 april 2008 gekozen.

3 Resultaten

De variogrammen voor temperatuur en (reciproke) troebelheid lieten een geleidelijke toename in semi-variantie zien zowel met toenemende afstand als met een toenemend verschil in tijd. Wat betreft de log van de zoetwaterfractie had vooral de afstand invloed op de semi-variantie terwijl voor log fluorescentie voor het verschil in tijd van belang was. Uiteraard is deze vergelijking relatief ten opzichte van het relatieve belang van tijd en ruimte voor de andere variabelen. In absolute zin kan je noch appels met peren, noch kilometers met dagen vergelijken (Fig. 3).

Het gebruikte variogram-model gaf goede voorspellingen van de gemeten semi-varianties (Fig. 4).

De voorspelde semi-variantie lag voor de vier variabelen in de buurt tussen de 0,1 en de 0,3 voor de laagste klasse, dat wil zeggen de klasse waar de afstand tussen de 0 en 10 km bedraagt en het tijdsverschil tussen de 0 en de 10 dagen. Voor de hoogste klasse, waar het tijdsverschil 50-60 dagen is en de afstand 50-60 km, liep de semi-variantie op tot een waarde van 0,7. De interpretatie van deze waarden wordt een stuk makkelijker wanneer eerst de wortel van de semi-variantie genomen wordt en deze vervolgens teruggetransformeerd wordt. Voor temperatuur hoeft alleen de wortel genomen worden en deze varieerde tussen de 0.51 en 0.85 °C. Dat wil zeggen dat waarnemingen binnen de 10 km en 10 dagen van elkaar af, gemiddeld zo'n 0,5 °C van elkaar verschillen in termen van hun afwijking van de ruimtelijke en temporele trend. Dit verschil loopt op tot 0,85 °C wanneer de afstand oploopt tot 60 km en het tijdverschil tot 60 dagen. Voor de zoetwaterfractie varieert de terug-getransformeerde waarde tussen de 1,4 en 2,3. Deze getallen moeten geïnterpreteerd worden (dit heeft te maken met de logaritmische transformatie) als een factor waarmee de afwijkingen van de trend gemiddeld van elkaar verschillen. Voor fluorescentie varieerde deze factor van 1,5 tot 2,3. Voor troebelheid is geen gemakkelijk interpreteerbare getal te geven, vanwege

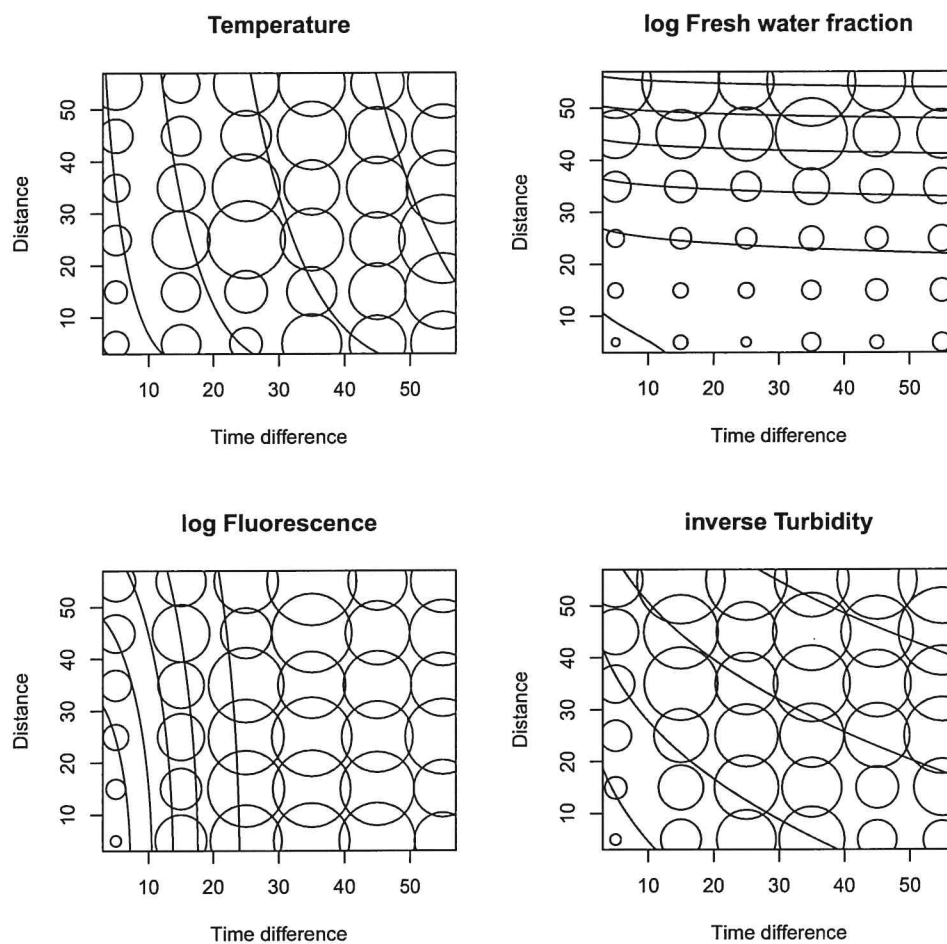


Figure 3: Drie-dimensionale variogrammen voor temperatuur, log zoetwaterfractie, log fluorescentie en reciproke troebelheid. The grootte van de cirkels geeft de grootte van de semi-variantie weer. De doorgetrokken lijnen zijn semi-variantie isolijnen met een stapgrootte van 0.1 tussen de lijnen. Zirfaea data 2007-2008.

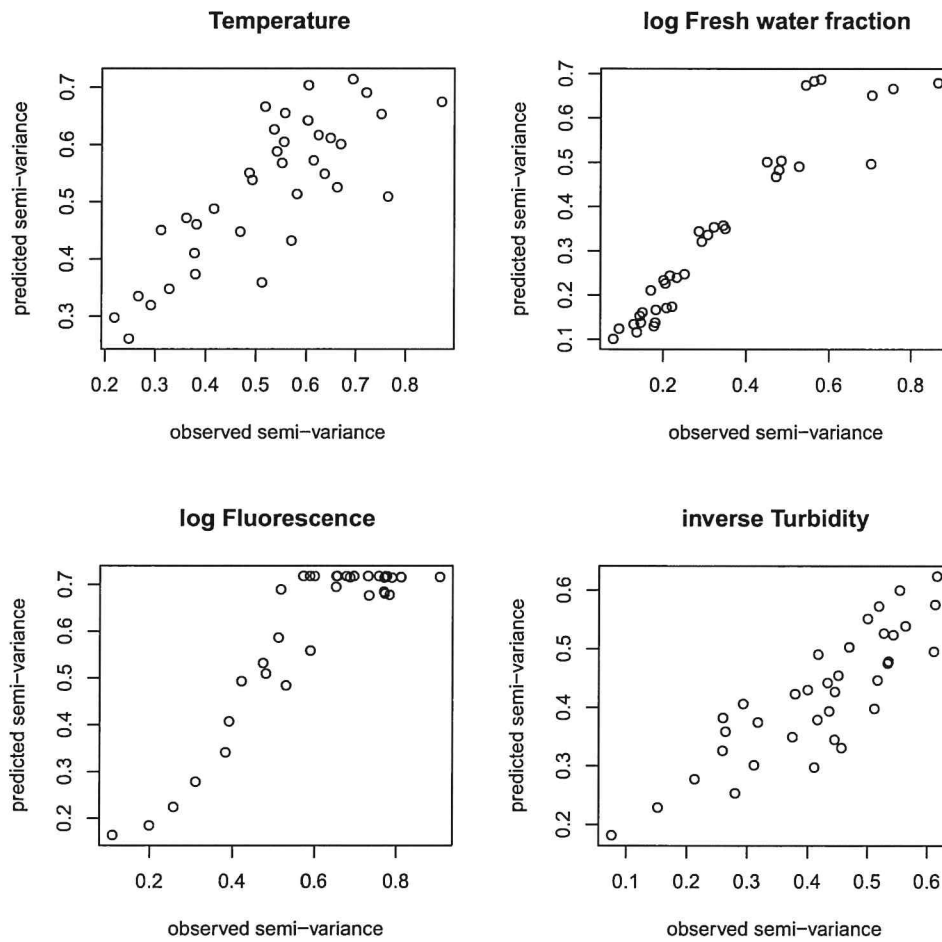


Figure 4: Voorspelde versus waargenomen semi-variantie voor temperatuur, log zoetwaterfractie, log fluorescentie en reciproke troebelheid. Zirfaea data 2007-2008.

de het type transformatie.

Als voorbeeld worden twee kaarten getoond van geïnterpoleerde temperatuurgegevens voor 1 april 2008 (Fig. 5). De ene kaart is gemaakt op basis van de gegevens van het traditionele meetnet, terwijl voor de andere kaart de *FerryBox* gegevens gebruikt zijn. De mate van onbetrouwbaarheid van beide kaarten wordt in de daar onder gepresenteerde kaarten weergegeven door middel van de kriging fouten, dat wil zeggen door middel van de kriging variantie. Deze kaarten laten zien dat de kriging fout in een groot deel van het kustwater onder de 0,6 °C ligt (het blauwe gebied) wanneer de *FerryBox* gegevens gebruikt worden. Op basis van het traditionele meetnet wordt bijna nergens een dergelijke betrouwbaarheid gehaald. Toch is het verschil in betrouwbaarheid over het geheel genomen niet erg groot.

4 Discussie en conclusies

Autonome meetopstellingen zouden niet gebruikt moeten worden zonder tenminste geautomatiseerde kwaliteitscontrole procedures. De door Rijkswaterstaat geleverde gegevens bevatten talloze foute dan wel twijfelachtige waarnemingen. De temperatuur kwam geregeld boven de 25 °C en het maximum kwam zelfs in de buurt van de 35 °C. Tijdens meerdere tochten kwam het zoutgehalte op de centrale Noordzee niet boven de 20 PSU, terwijl tijdens andere tochten het gehalte opliep tot wel 44.5 PSU. Eenvoudige tijdserie grafieken (Fig. 2) laten al de nodige onregelmatigheden zien. Mijn analyse heb ik daarom beperkt tot de 2007-2008 gegevens van de Zirfaea, en zelfs daar bleven nog vragen bestaan over de kwaliteit van de gegevens. De zoutgehaltes in 2008, bijvoorbeeld, gaven hogere waarden te zien dan in eerdere jaren en dan op de Arca/Transcarrier in 2008.

De variogrammen geven al het nodige inzicht in de betrouwbaarheid van interpolaties. Zo neemt de semi-variantie van bijvoorbeeld de log van de zoetwaterfractie snel toe bij afstanden groter dan 20 km. De semi-variantie voor temperatuur wordt de eerste 40 km niet veel hoger, mits het tijdsverschil niet groter is dan 20 dagen. De hier gemeten semi-variantie kwam overeen met een gemiddeld verschil van ongeveer een 0,5 °C. Ook de gepresenteerde kaarten geven al het nodige inzicht. Zo is de betrouwbaarheid van de temperatuur interpolaties nergens beter dan een 0,5 °C en nergens slechter dan 1 °C. Wat dit betekent voor de benodigde resolutie in tijd en ruimte kan alleen beantwoord worden als duidelijke richtlijnen gegeven voor waaraan de betrouwbaarheid van interpolaties moeten voldoen. Moet die overal 0,5 °C worden? Op dit moment zijn zulke richtlijnen niet voorhanden en kunnen geen aanbevelingen gegeven worden of de inspanning zoals geleverd middels

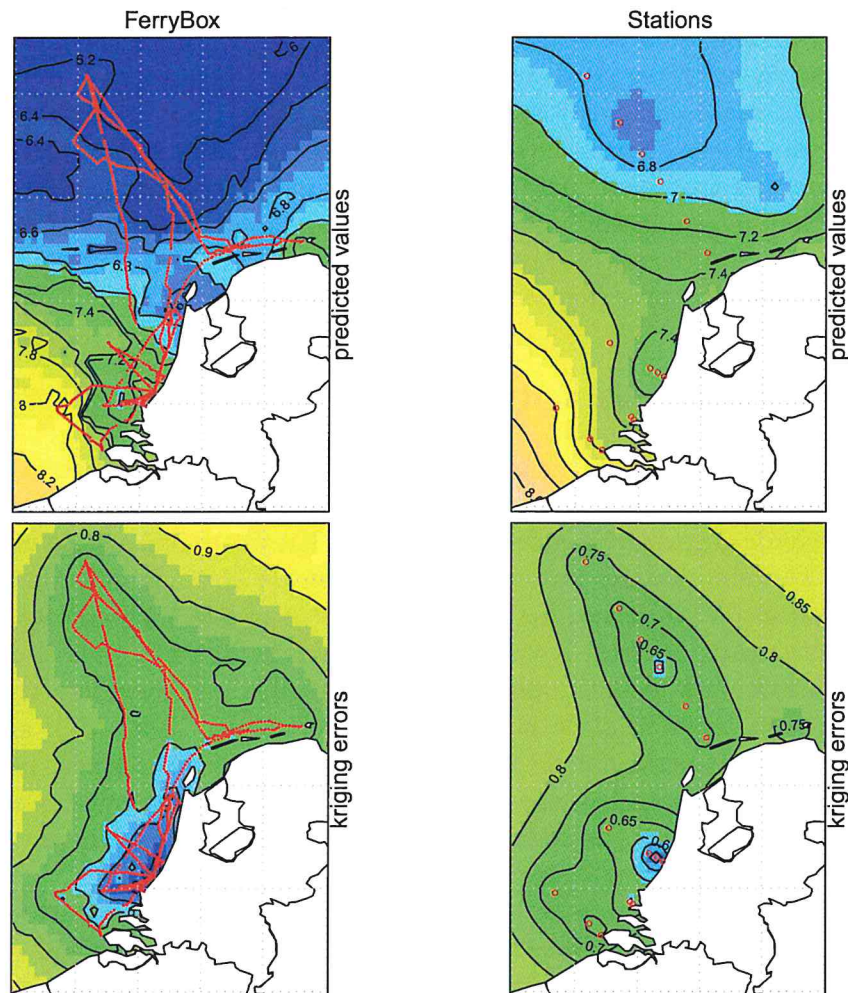


Figure 5: Kriging voorspellingen en fouten voor temperatuur, 1 april 2008, gebaseerd op de *FerryBox* gegevens van de Zirfaea (linker panelen) of op de raaigegevens uit het traditionele meetprogramma (rechter panelen). De waarnemingslocaties van 15 dagen voor tot 15 dagen na 1 april 2008 zijn geplot.

de *FerryBox* metingen op de Zirfaea rond 1 april 2008 voldoende zijn. Wel kan geconcludeerd worden dat de dekking beduidend beter was dan die van het traditionele meetnet. Een voorlopige conclusie is dan ook dat de *FerryBox* een verbetering kan zijn ten opzichte van het traditionale meetnet, maar alleen als de relevante variabelen gemeten worden, goede gegevenscontrole procedures gevolgd worden en garanties gegeven kunnen worden dat de dekking in ruimte en tijd ook beter blijft dan die van het traditionele meetnet. Hier zit een adder onder het gras. De ruimtelijke en temporele dekking van het *FerryBox* programma op de Zirfaea werd mede bewerkstelligd door de voor het traditionele meetnet benodigde vaartochten. Leidt het wegvallen van het traditionele meetnet ook tot een reductie van het *FerryBox* programma, dan gooi je het kind met het badwater weg.

References

- [1] Petersen, W., Colijn, F., et al. (2005) European *FerryBox* project: from online oceanographic measurements to environmental information. Proceedings of the Fourth International Conference on EuroGOOS, pp. 551-560.
- [2] Petersen, W., Wehde, H., Krasemann, H., Colijn, F., Schroeder, F. (2008) *FerryBox* and MERIS — Assessment of coastal and shelf sea ecosystems by combining *in situ* and remotely sensed data. Estuarine, Coastal and Shelf Science 77: 296-307
- [3] Swertz, O., Colijn, F., Hofstraat, H.W., Althuis, B.A. (1999) Temperature, salinity and fluorescence in the Southern North Sea: high resolution data sampled from a ferry. Environmental Management 23: 527-538
- [4] Webster, R., Oliver, M.A. (2001) Geostatistics for Environmental Scientists. Wiley, Chichester

APPENDIX

The *FerryBox* as a tool for long-term monitoring of coastal waters

Jaap van der Meer

March 30, 2010

Abstract

Autonomous measuring devices of the *FerryBox* type have recently been implemented on ships of opportunity to monitor among other things temperature, salinity, fluorescence and turbidity of the coastal seas surrounding The Netherlands. Ordinary kriging, using variogram models where the semi-variance is modelled as a function of both the difference in time and the distance, is applied to explore whether the data coverage suffices for reliable mapping of the measured variables.

1 Introduction

Traditional monitoring programmes of coastal waters usually consist of a limited number of sampling stations that are visited several times a year. The Dutch monitoring programme of the North Sea, for example, contains 19 sampling stations distributed over five transects. Each sampling station is visited 7-31 times a year. Before 1996 more than 70 stations were visited, but the number was reduced in order to cut down on expenses. The use of dedicated vessels still puts the programme to great costs, and at the moment a further reduction in the number of stations and the frequency of visits is considered. Coastal systems are, however, highly dynamic systems in which short-term and local events, such as intense phytoplankton blooms, may have a strong impact on ecosystem dynamics. One may already question whether the present monitoring programme has the spatial coverage and temporal resolution to adequately describe the state of the ecosystem.

The Dutch Rijkswaterstaat responsible for coastal monitoring, started to explore alternative approaches to monitor the coastal environment, with the

aim to increase coverage and resolution but at the same time decrease costs [8]. Autonomous measuring devices are implemented on ships of opportunity, such as ferries and coast guards. The present device is a so-called German *FerryBox* system and measures among other things temperature, salinity, fluorescence as a proxy for chlorophyll-a, and turbidity of the surface water [5]. The study is performed in cooperation with a variety of other European research groups within the EU funded project *FerryBox* [4]. From 2005 onwards the *FerryBox* was implemented on the *Zirfaea*, which surveys the Dutch coastal waters. Its sailing routes cover almost the whole Dutch part of the continental shelf (Fig. 1).

In this paper I explore whether the spatial coverage and temporal resolution of the *FerryBox* measurements were sufficient for reliable interpolations in both time and space, and I compare the results with those from the traditional monitoring programme with manual sampling at fixed stations. An optimal interpolation method, known as kriging [10], is applied as it provides estimates of the reliability of each interpolated value in the form of a variance of the predicted value. Kriging is traditionally applied for spatial interpolation only, but recently the method has been extended to spatio-temporal interpolation [1, 2, 7]. This extension requires the formulation and estimation of a variogram model, where the semivariance, which is a measure of the variability between sampling stations, is a function of both the difference in time and the spatial distance. A variogram model should obey certain technical requirements, that is it should be strictly conditionally negative definite, to ensure that the kriging equations have a unique solution. Within a spatial context only, a variogram model is usually chosen from a selected list of models, all satisfying this condition. Unfortunately, no such list is available of valid spatio-temporal variogram models. I have therefore extended various well-known spatial variogram models into spatio-temporal models and merely followed a trial-and-error approach to see whether unique kriging solutions were obtained and numerical problems avoided.

In this paper no attention is paid to problems related to the different type of measurements made in the two programmes. For example, whether or not fluorescence is a reliable approximation of chlorophyll-a is not discussed.

2 Material and methods

The *FerryBox* is an automated flow-through system with different sensors. Water is taken in from just below the surface. Data from the temperature and salinity sensor (FSI, USA), the fluorescence sensor (SCUFA-II, Turner Design, USA) and the turbidity sensor (Turner Design, USA and Endress

and Hauser, Germany) are used here. Other sensors, e.g. a pH sensor have been applied less frequently. Temperature is recorded in °C, salinity in PSU, fluorescence is re-expressed by means of a calibration function in μg chlorophyll-a per liter, and turbidity in NTU. The traditional monitoring measures temperature and salinity, but fluorescence and turbidity are not measured in the same way. Instead chlorophyll-a and suspended matter are measured [3].

FerryBox data, including time (day:hour:minute:second) and longitude and latitude (degree:minute:second), were only used from November, 2006 onwards. Due to a lack of proper data quality control procedures data from the first two years were left out. Estuarine data, i.e. when salinities were lower than 20, were also removed. A total of 21226 data points were used. From these observations 2 values were missing for temperature, 267 for salinity, 685 for fluorescence, and 687 for turbidity. From the traditional transect monitoring programme, the surface water data obtained between January 26, 2005 and January 4, 2009 were selected. Averages of all data taken at the same day and at the same station were used. A total of 1108 transect data were used and these data contained 81 missing values for temperature.

Kriging requires symmetrically distributed data, and temperature met this requirement. The other three variables of interest, i.e. salinity, fluorescence and turbidity, revealed highly skewed distributions (Fig. 2). Suitable transformations resulted in more or less symmetric distributions (Fig. 3). Salinity was first expressed in terms of the fraction of fresh water, by dividing each salinity figure by 35.8 (which is slightly higher than the maximum observed value of 35.729) and next subtracting this ratio from one. Subsequently, the natural logarithm was taken. Fluorescence was also log transformed, but turbidity required a stronger transformation, and the inverse of turbidity was taken to approach symmetry.

The geostatistical approach taken here contains four steps. First, a possible trend or drift is removed. The spatial trend was described by a multiple linear regression model using longitude and latitude as the independent variables. The temporal trends was removed by an annual sinus function. Hence the following model was fitted for each of the four variables

$$z_i = (a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2) + (b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2) \sin\left(\frac{2\pi(t_i - c)}{365}\right) + \epsilon$$

where z is the observation of the variable of interest, x_1 is longitude, x_2 is latitude, and t is time in days. Both longitude and latitude are scaled to have zero mean. The fitting procedure was a so-called Golub-Pereyra method, which is a mixture of non-linear and linear least-squares methods [9]. Note that the model is a simple linear regression model, once the parameter c

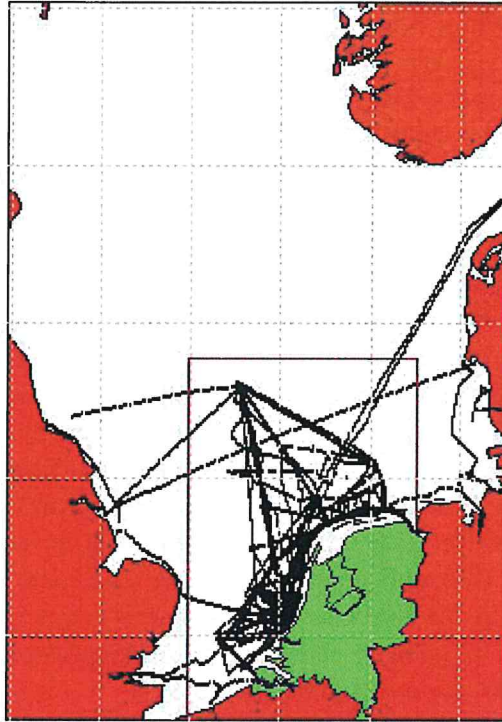


Figure 1: Map of *FerryBox* data from the Zirfaea, 2005-2009. Red square indicates the area for which predictions are provided.

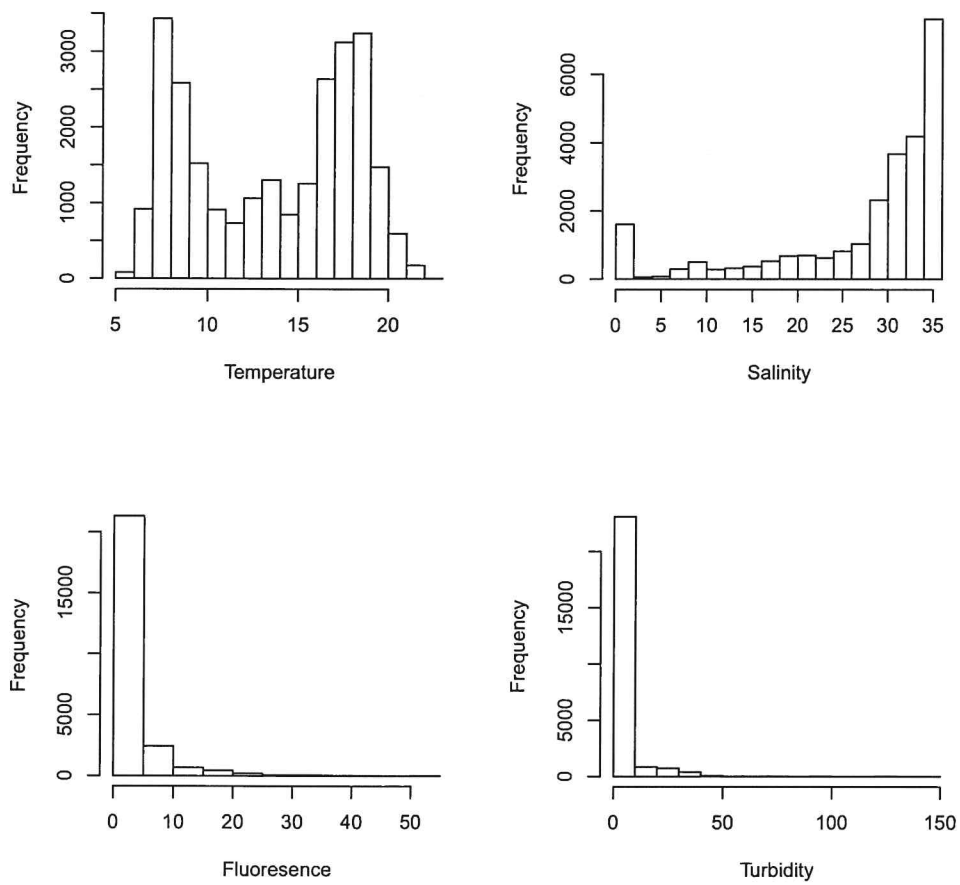


Figure 2: Frequency distributions of the four variables of interest. Temperature in $^{\circ}\text{C}$, salinity in PSU, fluorescence in μg per liter and turbidity in NTU.

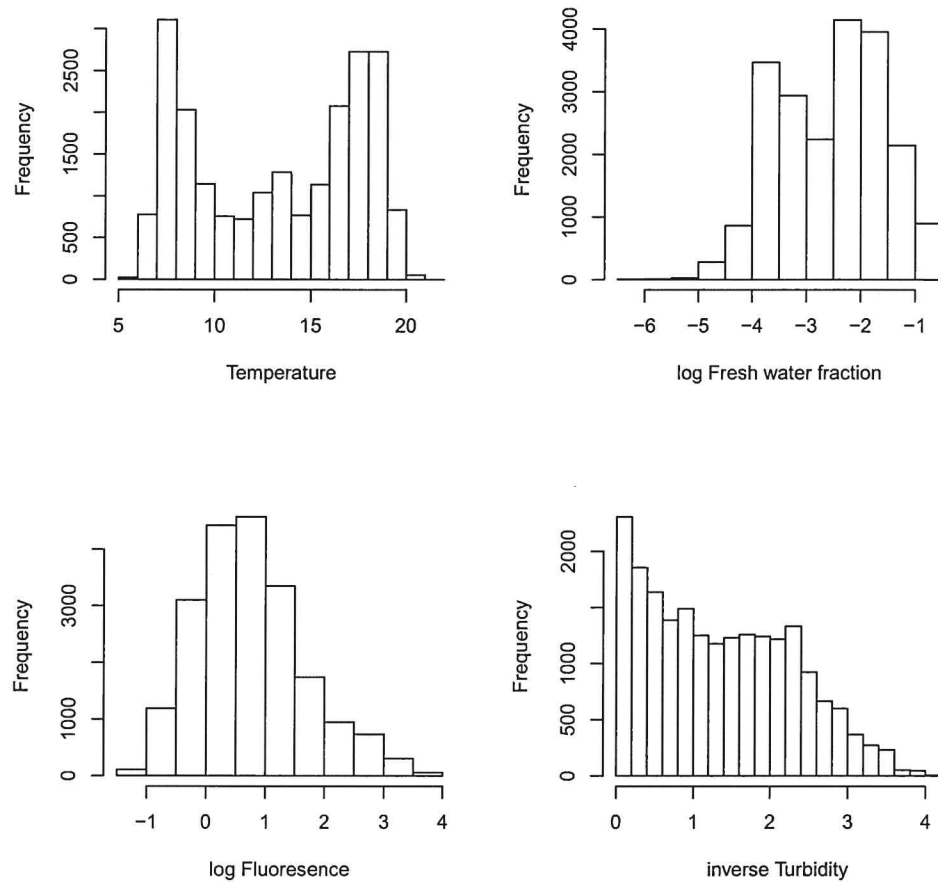


Figure 3: Frequency distributions of the four variables of interest after transformation. Temperature is not transformed, salinity is expressed as the log of the fresh water fraction, fluorescence is log transformed and the inverse of turbidity is taken.

is known. The linear parameters a_i and b_i are estimated at each iteration step in an iterative procedure to estimate the non-linear parameter c . The goodness-of-fit of the model was compared to simpler models, that is to models with further constraints on the parameters a_i and/or b_i .

Second, semi-variances are calculated for a randomly selected sample of paired observations, and all pairs are attributed to a time-distance class, representing a combination of a particular time difference and a particular distance between the observations. I have chosen classes with a width of 10 days and 10 km. A total of one million pairs were sampled with replacement for each variable separately. For each pair of points i and j the semi-variance γ is given by

$$\gamma_{ij} = \frac{1}{2}(z_i - z_j)^2$$

where z_i is the observation of the variable of interest at point i . For each time-distance class the average semi-variance is calculated.

Third, a variogram model was fitted. As the main aim of the analysis is local prediction, interest is in how the semi-variance behaves at relatively close distance (both in time and space) to the origin. The variogram model was therefore fitted for a domain up to a time difference of 60 days and a distance of 60 km. Hence 36 classes were distinguished. Eight different models were fitted, from which the first four were of the form

$$\gamma(g, h) = a_0 + a_1 g^{b_1} + a_2 h^{b_2}$$

where g is the difference in time and h the distance between the two points. These models are power functions and predict an unbounded variation. The power coefficients b_1 and b_2 should fall within the interval from zero to two for the variogram to be conditional negative semidefinite [10]. The first two models are linear models, i.e. it is assumed that the parameters b_1 and b_2 equal one. The second model furthermore assumes that a_0 equals zero. In geostatistical terms, it assumes that there is no nugget effect, which means that no errors of measurement or spatial variation within the shortest sampling interval occur. The other two models within this group only impose the general constraint on the parameters b_1 and b_2 that they lie within the interval ranging from zero to two, and thus allowing for a non-linear increase of the semi-variance with increasing time difference or distance. The fourth model furthermore sets the intercept a_0 equal to zero. These two non-linear models were as before fitted by the Golub-Pereyra method [9]. The other four models were of the form

$$\gamma(g, h) = a_0 + a_1(1 - \exp(-(g/c_1)^{b_1} - (h/c_2)^{b_2}))$$

where the power coefficients b_1 and b_2 are either one or two. Hence these models are extensions of either the so-called exponential model (when the coefficients are set equal to one) or of the Gaussian model (when the coefficients equal two). All these four model are bounded models in which the semi-variance has a maximum, known as the sill in geostatistics.

The fourth step concerns the local predictions and thus the mapping for each variable of interest. I used ordinary kriging to make predictions for all nodes of a fine grid laid out within the region between 2 and 7 degrees longitude and between 51 and 55:30 degrees latitude. Distances between grid nodes were equal to 6 geographical minutes, which is similar to 11.1 km in the North-South direction and about half that distance in the East-West direction. As an example, a map was made for the spring, that is for April 1, 2008.

Within ordinary kriging, each prediction is a weighted linear combination of the observed data within the neighbourhood (in our case the neighbourhood in time and space) of the point to be predicted. Usually, only the nearest neighbours have significant weights and here the 100 nearest neighbours were used, i.e. the 100 points with the lowest semi-variance. The weights are obtained by solving a system of linear equations. Put in matrix terms, the vector of weights λ is the solution of the equation $\mathbf{A}\lambda = \mathbf{b}$, in which the matrix $\mathbf{A}$ contains the semi-variances between all possible pairs of these neighbours and the vector $\mathbf{b}$ the semi-variances between the neighbours and the point to be predicted. The method of Lagrange multipliers is used to guarantee that the weights sum to one, and this leads to an extra row and column for the matrix $\mathbf{A}$, and an extra element for the vectors $\mathbf{b}$ and λ . Hence

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & \gamma_{12} & \dots & \gamma_{1n} & 1 \\ \gamma_{21} & 0 & \dots & \gamma_{2n} & 1 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & 1 \\ \gamma_{n1} & \gamma_{n2} & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$\mathbf{b} = [\gamma_{10} \ \gamma_{20} \ \dots \ \gamma_{n0} \ 1]^T$, and $\lambda = [\lambda_1 \ \lambda_2 \ \dots \ \lambda_n \ \psi_0]^T$, where ψ_0 is the Lagrange multiplier. The kriging variance is given by $\mathbf{b}^T \lambda$.

The reader is referred to Webster and Oliver [10] for an accessible introduction to geostatistics. All calculations were performed in the package *R* 2.10.0 using self-written functions [6].

3 Results

Seasonal trends were strongest for temperature and log fluorescence, and almost absent for log fresh water fraction (Table 1, Fig. 4). In contrast, log fresh water fraction showed the strongest spatial trend (Table 1). In all cases, formal F-tests (ignoring spatial auto-correlation) pointed to the full model as the best-fitting model, and this model was therefore used for detrending. For all four variables, the signs of the parameters a_1 to a_3 coincided with the signs of the parameters b_1 to b_3 , indicating that the spatial trend in the annual average coincided with a spatial trend in the amplitude of the seasonal cycle (Table 2).

Table 1: Goodness-of-fit in terms of the residual sum of squares (RSS) of various models describing the spatial and temporal trend in the variables temperature, log fresh water fraction, log fluorescence, and inverse turbidity. The last model is the full model given in the text, the third model assumes that there is no interaction between time and space, i.e. the parameters b_1 , b_2 , and b_3 are set equal to zero, the second model only takes the temporal trend into consideration, i.e. the parameters a_1 , a_2 , and a_3 are also set equal to zero, and the first model is the null model assuming that there is no trend at all, i.e. the parameter b_0 is also set equal to zero.

Model	Description	Temp	logFresh	logFluo	invTur
1	Null	397961	19559	17195	17977
2	No spatial trend	33504	19433	13882	15925
3	No interaction	27818	11532	11950	13211
4	Full	25891	9391	11883	13163

The Gaussian model including a nugget effect was the best fitting variogram model for log fluorescence (Table 3). The exponential model with nugget effect fitted best for temperature, but the difference with the power function models was small. For the other two variables, the power function with nugget effect was the best-fitting model, but the estimated nugget effect was negative. As this makes no sense, the power function without nugget was selected. For temperature, kriging while using the exponential model resulted in numerical problems, and therefore the power function model without nugget was selected for temperature as well. The goodness-of-fit of the selected models are visualized in Fig. 5 and parameters are given in Table 4.

The variograms for temperature and inverse turbidity showed a gradual increase in semi-variance with both increasing time difference and distance. For log fresh water fraction increasing distance had a stronger effect than

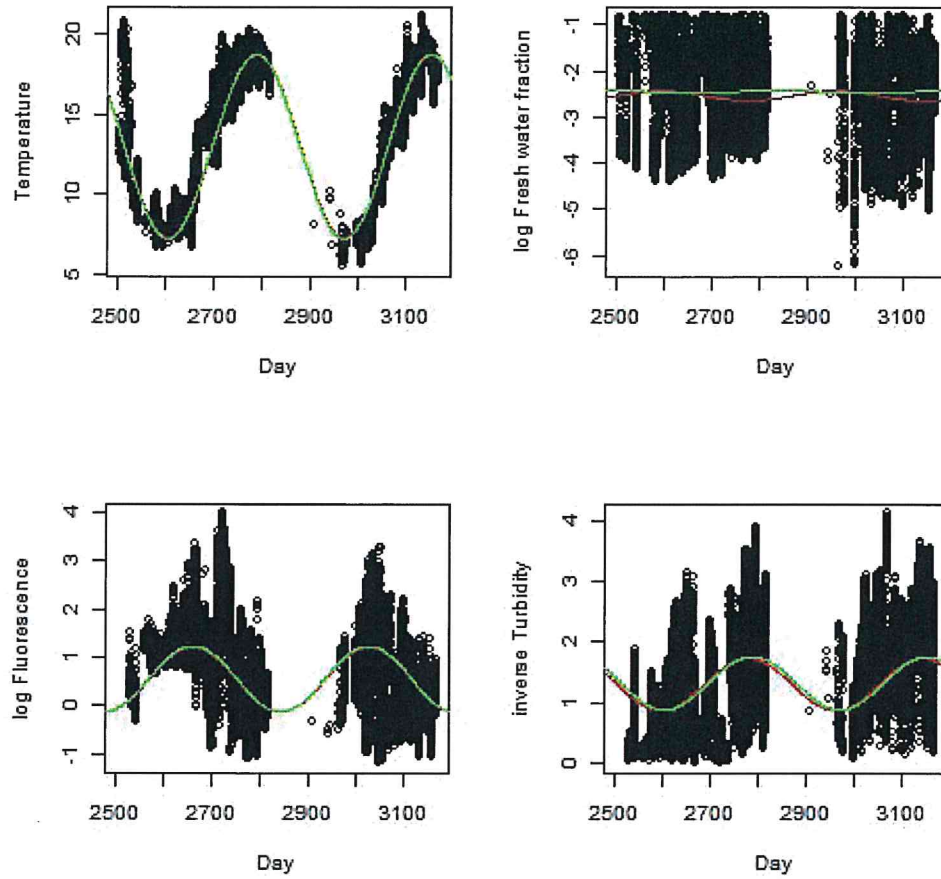


Figure 4: Seasonal trends for temperature, log fresh water fraction, log fluorescence and inverse turbidity. Zirfaea data 2007-2008. Day is Julian day since 1-1-2000. Green lines show model results for the full model for the average longitude-latitude location, red lines for the model that ignored the spatial trend.

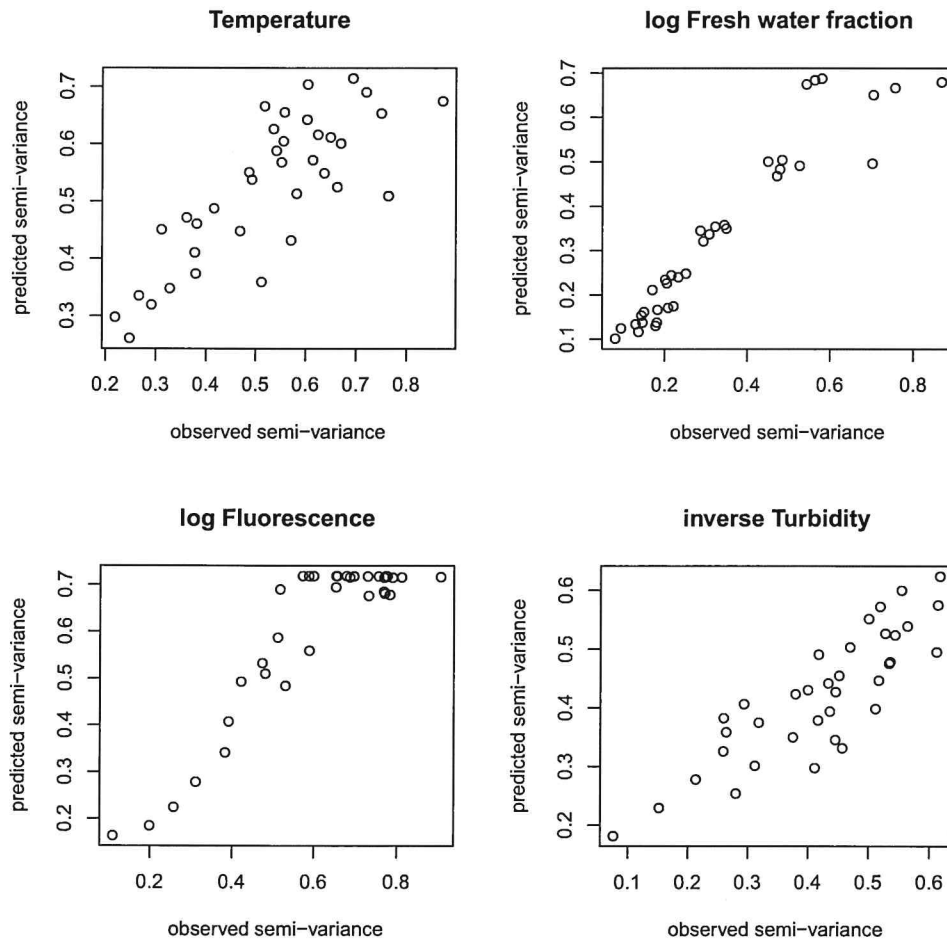


Figure 5: Predicted versus observed semi-variance for temperature, log fresh water fraction, log fluorescence and inverse turbidity. Predictions are based upon variogram model 4 for all variables, except for log fluorescence where model 7 is used. Further explanation of the models in the text and in Table 3. Zirfaea data 2007-2008.

Table 2: Estimated parameter values of the full model describing the spatial and temporal trend. See text for model equation.

Parameter	Temp	logFresh	logFluo	invTur
a_0	13	-2.45	0.55	1.3
a_1	0.31	0.78	0.26	-0.17
a_2	-0.62	-0.81	-0.35	0.38
a_3	-0.17	-0.53	-0.11	0.034
b_0	5.7	0.019	-0.68	0.44
b_1	0.46	0.43	0.12	-0.069
b_2	-0.34	-0.30	-0.055	0.057
b_3	-0.27	-0.54	-0.12	0.057

Table 3: Goodness-of-fit in terms of the residual sum of squares (RSS) of the eight variogram models for the variables temperature, log fresh water fraction, log fluorescence, and inverse turbidity. Models are explained in the text.

Model	Description	Temp	logFresh	logFluo	invTur
1	Linear with nugget	0.35	0.26	0.69	0.21
2	Linear without nugget	0.69	0.26	1.37	0.34
3	Power with nugget	0.31	0.15	0.35	0.10
4	Power without nugget	0.32	0.16	0.49	0.17
5	Exponential with nugget	0.31	0.26	0.26	0.21
6	Exponential without nugget	0.32	0.26	0.30	0.21
7	Gaussian with nugget	0.34	0.18	0.22	0.26
8	Gaussian without nugget	0.43	0.22	0.24	0.26

increasing time difference, compared to the relative effects for the other variables. In contrast, time difference was more important than distance for log fluorescence (Fig. 6).

Predicted semi-variances can be as low as 0.1 for the class close to the origin, but increase to values around 0.7 when sites are 60 days and 60 km apart. Interpretation of these values simplifies when the square root of the semi-variance is taken, and if necessary, subsequently back-transformed. For temperature, the square root of the predicted semi-variance ranges approximately between 0.51 and 0.85 °C. For the fresh water fraction the back-transformed values range between 1.37 and 2.3, which should be interpreted as a factor by which observations differ on average. Similarly, for fluorescence

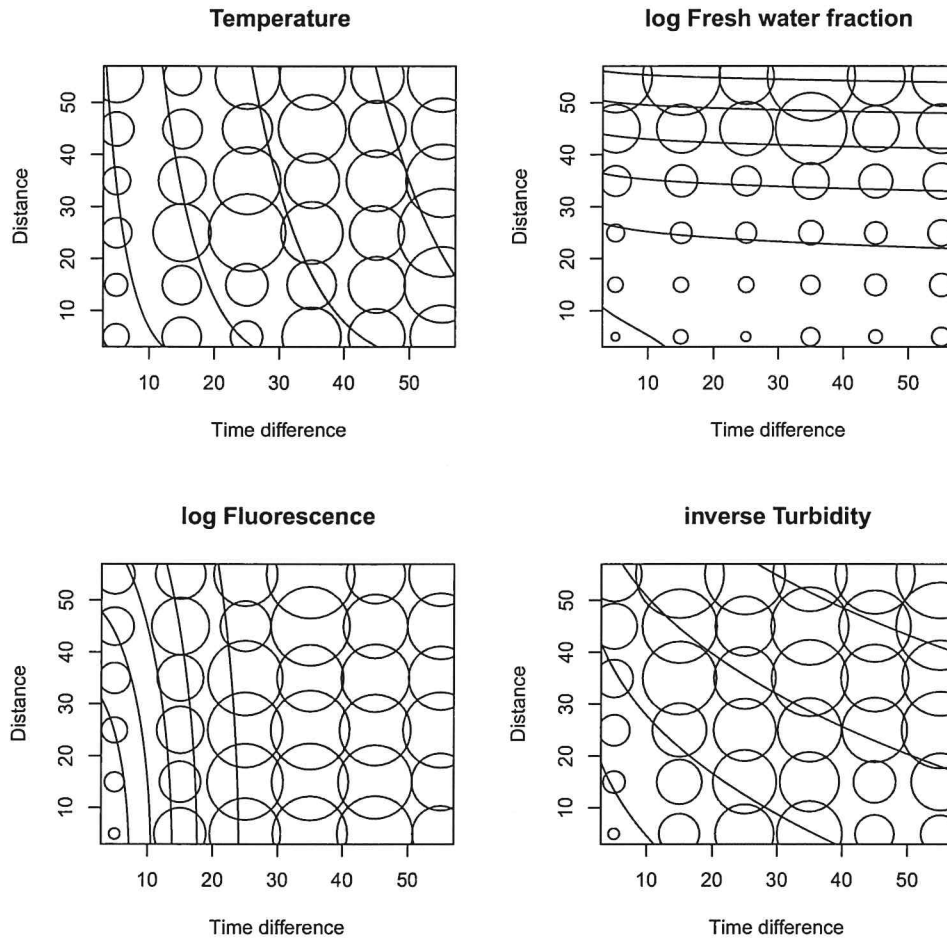


Figure 6: Three-dimensional variograms for temperature, log fresh water fraction, log fluorescence and inverse turbidity. The size of the circles indicates the semi-variance. Solid lines are the semi-variance isolines of the variogram model, with a step size of 0.1. Zirfaea data 2007-2008.

Table 4: Parameters for the selected variogram model for the four variables. For temperature, log fresh water fraction, and inverse turbidity the power model without nugget was selected. The selected model for log fluorescence was the Gaussian model with nugget. Further explanation in the text.

	b_1	b_2	a_1	a_2
Temperature	0.50	0.28	0.070	0.067
log Fresh water fraction	0.13	2.0	0.078	0.00018
inverse Turbidity	0.34	1.0	0.091	0.0046
	a_0	a_1	c_1	c_2
log Fluorescence	0.098	0.62	15	72

this factor ranges from 1.50 to 2.3. For turbidity the interpretation is more difficult due to the type of transformation.

Predictions for April, 1 2008 are presented in the form of maps with additionally a map of the kriging errors, i.e. the square root of the kriging variance. For example, the log fluorescence map shows a region of high fluorescence near the Frisian Islands (Fig. 7). The kriging error is almost everywhere lower than one, which is equivalent to a factor 2.7. Much lower errors, even below 0.4, are found near the port of Rotterdam. Back-transformation reveals a factor 1.6. Maps based on the traditional sampling station data differ from those based on the *FerryBox* data, with generally lower values for the *FerryBox* data (Fig. 8). The kriging errors are rather similar (Fig. 9).

4 Discussion and conclusions

The necessary resolution in time and space of a sampling programme depends upon the requirements on the accuracy of the predictions. As such accuracy is not yet formulated, at the moment no general conclusions can be drawn on the appropriateness of the present coverage, but the variograms can already be helpful in guiding directions. The variograms point to the reliability of the predictions in relation to the difference in time and the spatial distance to real observations. For example, the semi-variance of the log fresh water fraction increases rapidly at distances larger than 30 km. The semi-variance of log fluorescence approaches the sill variance when observations are more than 20 days apart. The variogram for temperature shows that at a distance of 25 km in combination with a time difference of 15 days, the semi-variance is already significantly higher than for the 5 km and 5 days class. A further guidance comes from the presented maps. The kriging error in temperature

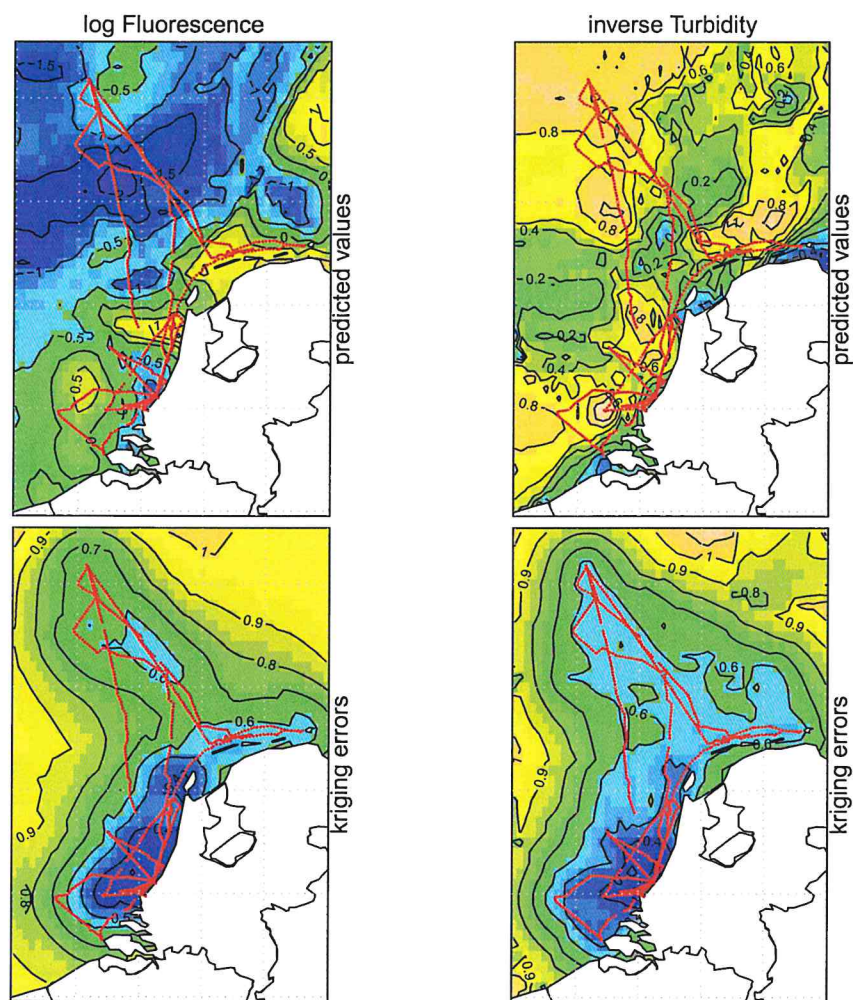


Figure 7: Maps of predicted values and kriging errors for log fluorescence and inverse turbidity for April, 1 2008. Observations from 15 days before and 15 days after April 1, 2008 are plotted.

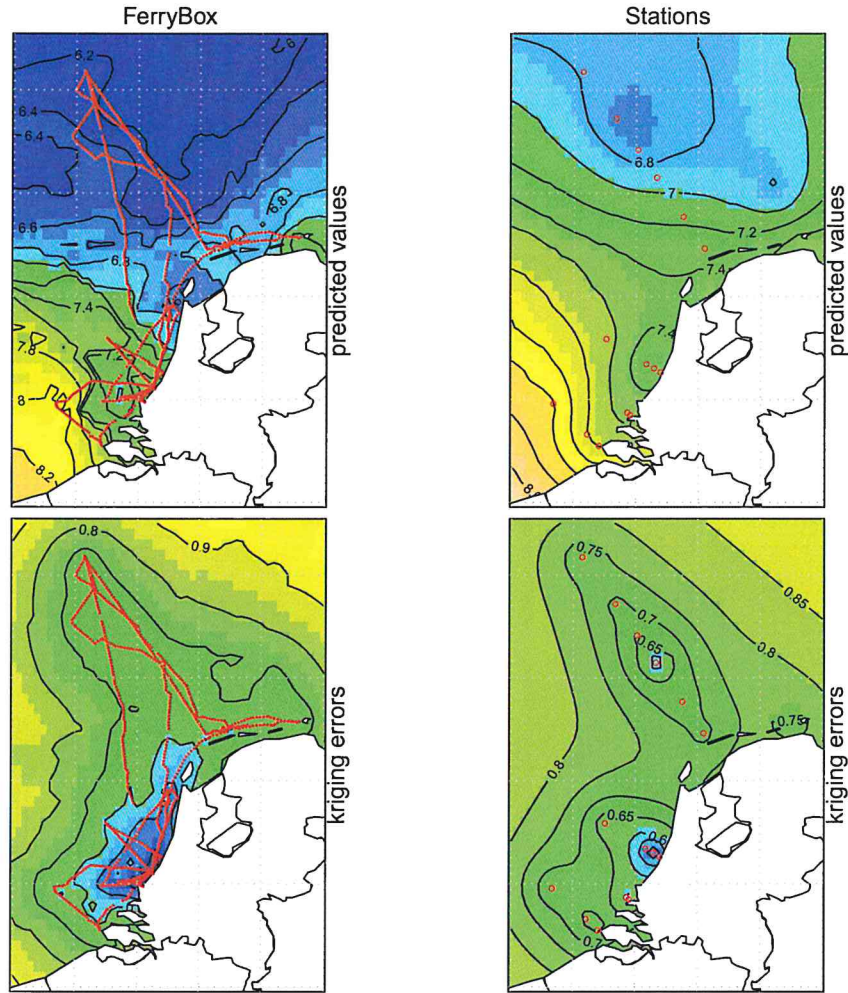


Figure 8: Maps of predicted values and kriging errors for temperature for April, 1 2008, based on either the *FerryBox* on the Zirfaea data (left panels) or on the traditional stations in transects data (right panels). Observation sites from 15 days before and 15 days after April 1, 2008 are plotted.

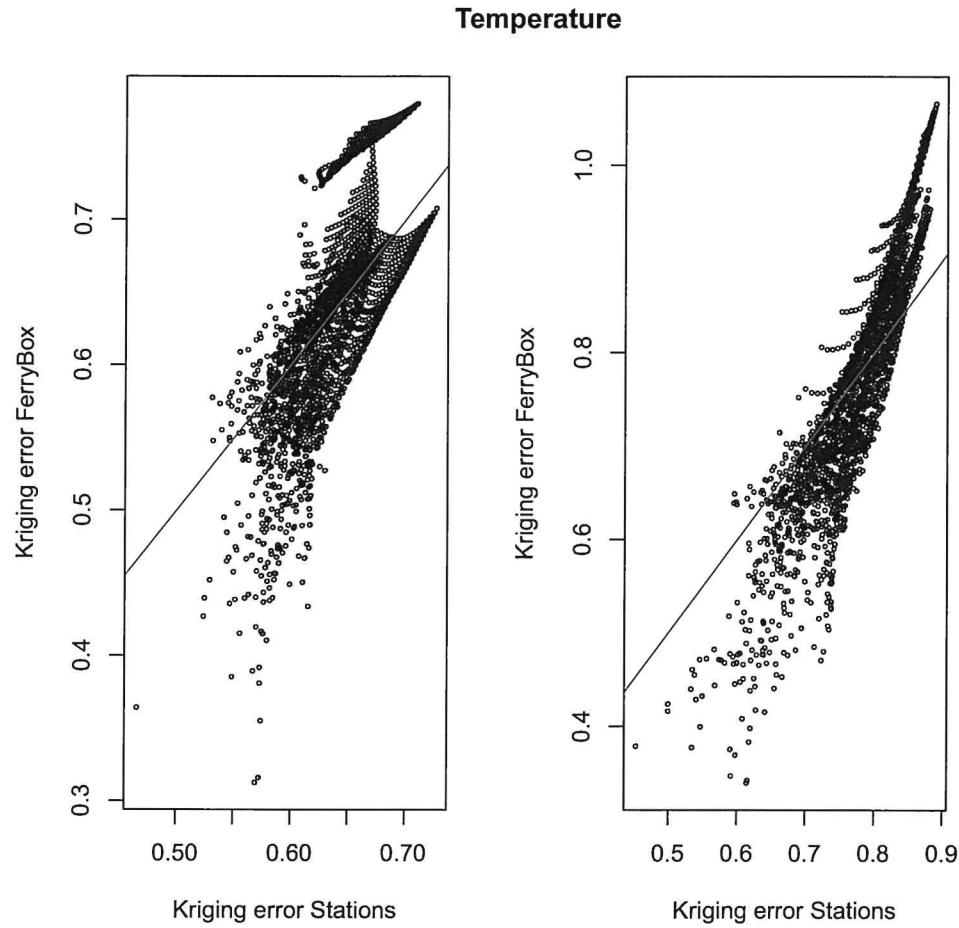


Figure 9: Predicted values and kriging errors for temperature for April, 1 2008. Results based on the Zirfaea data are plotted versus those based on the traditional transect data. The left panel is based on the variogram model 4, i.e. the power function, whereas the right panel is based on the exponential model 6.

based on the Zirfaea data, for example, is below 0.6°C in the coastal region (Fig. 8). The observations that are taken within a period of 30 days around the mapping date show a good geographical coverage near the coast. Further offshore coverage is reduced and consequently the kriging error increases to values between 0.6 and 0.8°C . In areas further away from observations kriging error exceeds 0.8°C . The traditional sampling programme shows kriging errors below 0.6°C only in the close vicinity of a few sampling stations. The area where the kriging error is below 0.8°C is not very different from that on the Zirfaea data based map. Despite the similarities in the kriging error between the two sampling strategies (Fig. 9), the maps of the predicted values are quite distinct. The differences are, however, not larger than the kriging error.

Unconstrained estimation of the parameters of the power variogram model revealed a scaling coefficient b_2 equal to 2.08 for log fresh water fraction, which is slightly larger than two. This result violates the assumption that the variogram is conditional negative semidefinite, and therefore constrained estimation was applied which guarantees that the coefficient falls within the range from zero to two. This large value of 2.08 might, however, indicate that not all trend has been removed. Generally speaking, most of the extensions that I constructed of traditional variogram models which are normally applied in a spatial context only, did not reveal numerical problems and in almost all cases unique kriging solutions were obtained.

A preliminary conclusion is that the *FerryBox* can bring about an improvement compared to the traditional programme, but only if guarantees can be provided that the coverage in time and space is better than what a traditional sampling programme could offer.

References

- [1] Bogaert, P. (1996) Comparison of kriging techniques in a space-time context. *Mathematical Geology* 28: 73-86
- [2] Gneiting, T., Genton, M.G., Guttorp, P. (2006) Geostatistical space-time models, stationarity, separability, and full symmetry. In: Finkenstadt, B., Held, L., Isham, V. *Statistical methods for spatio-temporal systems*. Chapman and Hall, Boca Raton, pp. 151-175
- [3] Luiten, J., Van Buuren, J.T. (1999) Watersystemen en doelvariabelen voor de watersysteemverkenningen. Rapport RIKZ 94.016, Den Haag

- [4] Petersen, W., Colijn, F., et al. (2005) European *FerryBox* project: from online oceanographic measurements to environmental information. Proceedings of the Fourth International Conference on EuroGOOS, pp. 551-560.
- [5] Petersen, W., Wehde, H., Krasemann, H., Colijn, F., Schroeder, F. (2008) *FerryBox* and MERIS — Assessment of coastal and shelf sea ecosystems by combining *in situ* and remotely sensed data. Estuarine, Coastal and Shelf Science 77: 296-307
- [6] R Development Core Team (2009). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0, URL <http://www.R-project.org>.
- [7] Schabenberger, O., Gotway, C.A. (2005) Statistical methods for spatial data analysis. Chapman and Hall, Boca Raton
- [8] Swertz, O., Colijn, F., Hofstraat, H.W., Althuis, B.A. (1999) Temperature, salinity and fluorescence in the Southern North Sea: high resolution data sampled from a ferry. Environmental Management 23: 527-538
- [9] Venables, W.N., Ripley, B.D. (1994) Modern Applied Statistics with S-Plus. Springer, New York
- [10] Webster, R., Oliver, M.A. (2001) Geostatistics for Environmental Scientists. Wiley, Chichester



Het NIOZ Koninklijk Nederlands Instituut
voor Zeeonderzoek maakt deel uit van de
Nederlandse Organisatie voor
Wetenschappelijk Onderzoek (NWO).

Bezoekadres
Landsdiep 4
1797 SZ 't Horntje, Texel

Postadres
Postbus 59, 1790 AB Den Burg, Texel
Telefoon: 0222 - 369300
Fax: 0222 - 319674
<http://www.nioz.nl>

NIOZ Rapport 2010-4

De missie van het NIOZ is het verkrijgen en communiceren van wetenschappelijke kennis
van zeeën en oceanen voor een beter begrip en een duurzaam beheer van onze planeet,
het beheren van de nationale faciliteiten voor zeeonderzoek en het ondersteunen van
onderzoek en onderwijs in Nederland en in Europa.



Koninklijk Nederlands Instituut voor Zeeonderzoek