

## Interpoleren kun je leren

Een beslissingsondersteunend systeem voor interpolatie, aggregatie en desaggregatie in ruimte en tijd



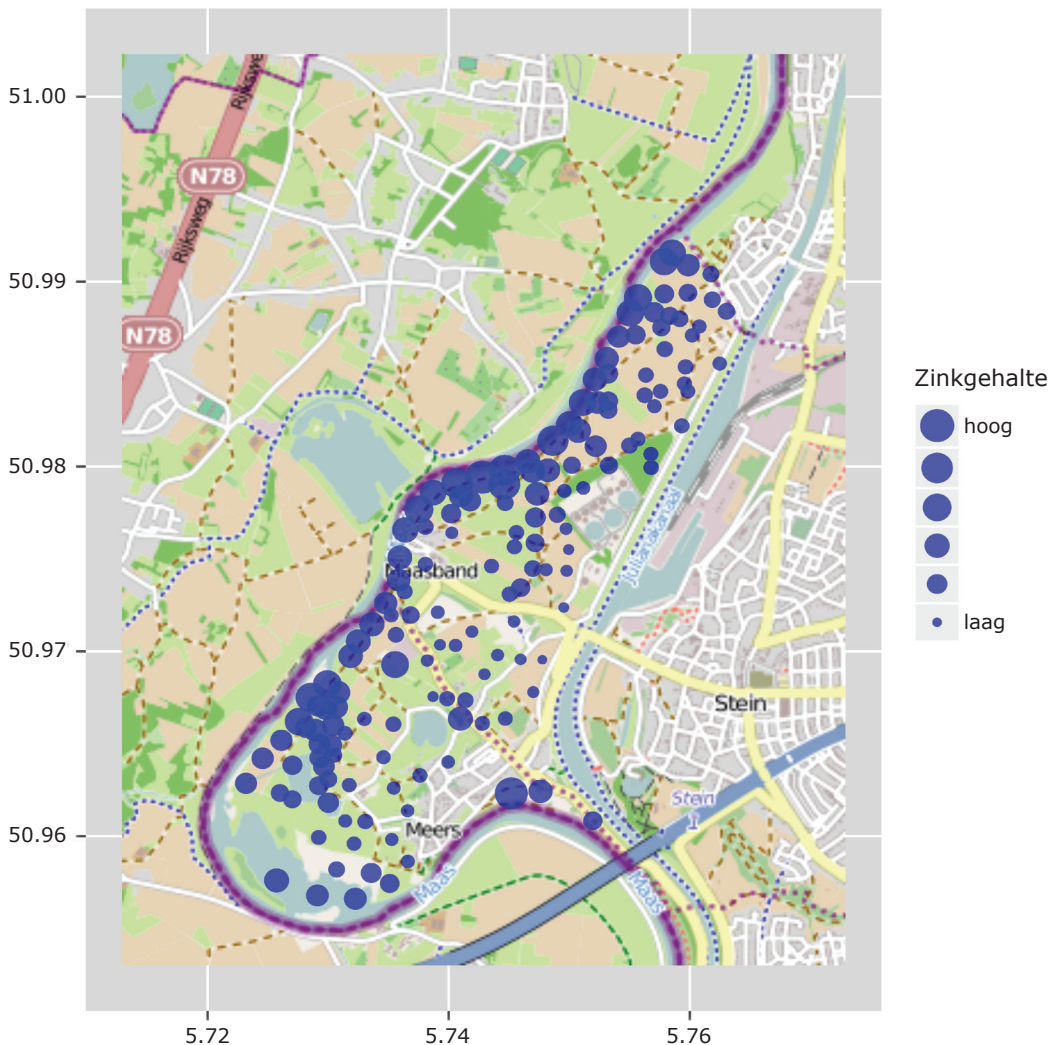
© Bas van Gennip

Tijd en geld ontbreken meestal om overal en altijd waarnemingen te verrichten. Daarom moeten in vrijwel elk onderzoek gegevens worden geïnterpoleerd naar niet-bezochte locaties of tijdstippen. Ook moeten gegevens vaak worden geaggregeerd tot bijvoorbeeld ruimtelijke of temporele totalen of gemiddelden, of worden gedesaggregeerd van grote naar kleine ruimtelijke of temporele eenheden. Dat kan op vele manieren, maar welke manier is het meest geschikt? Om onderzoekers te helpen bij het maken van een gefundeerde keuze hebben we een website met een beslissingsondersteunend systeem ontworpen, die we in deze paper onder de aandacht brengen ([www.mapmakersguide.org](http://www.mapmakersguide.org)). Voorbeelden maken duidelijk dat de keuze van de juiste interpolatie-, aggregatie- of desaggregatiemethode er wel degelijk toe doet.

### Waarom interpolatie?

Om onderzoek te onderbouwen zijn vaak ruimtelijke en temporele gegevens nodig, die meestal slechts op een beperkt aantal locaties en momenten zijn verzameld. Figuur 1 (zie pagina 2) geeft een voorbeeld van ruimtelijke gegevens. Deze figuur toont locaties langs de Maas waar bodemmonsters zijn genomen die vervolgens zijn geanalyseerd op zware metalen, waaronder zink (Pebesma & Bivand, 2005). Hoe groter de cirkels in figuur 1, hoe hoger het zinkgehalte. Het zinkgehalte is het hoogst langs de Maas en neemt landinwaarts af. Het zink komt waarschijnlijk uit het Geuldal, dat in vorige eeuwen door mijnbouw is verontreinigd (Berendsen, 2004). Via de Geul kwam het zink in de Maas terecht, en bij overstromingen bleef het achter op het land. De figuur laat echter niet zien hoe hoog het zinkgehalte is op locaties waar geen bodemmonsters zijn genomen.

Als we het mechanisme dat de ruimtelijke variatie in zinkgehalte bepaalt exact in wiskundige formules konden vatten, dan zouden we daarmee relatief eenvoudig zinkgehalten op onbemonsterde locaties kunnen voorspellen. Dit kan echter alleen bij relatief eenvoudige processen zoals de sedimentatie van zandkorrels in stilstaand water (wet van Stokes), of de vrije val van een rotsblok langs een klif (kinematica). Bovendien is de beschrijving alleen exact onder 'ideale' omstandigheden, bijvoorbeeld bij een systeem zonder wrijving. Meestal zijn de mechanismen achter de ruimtelijke en temporele variatie niet of onvoldoende bekend, en zijn de omstandigheden verre van ideaal. Daarnaast zijn de waarden die we waarnemen vaak de resultante van een groot aantal interacterende mechanismen, en behept met meetfouten. In die gevallen moeten we interpolatietechnieken gebruiken.



Figuur 1. Locaties op de oostoever van de Maas ten westen van Stein waar het zinkgehalte is bepaald. De oppervlaktes van de cirkels zijn evenredig met de hoogte van de zinkgehalten. Bron achtergrondkaart: [www.openstreetmap.org](http://www.openstreetmap.org).

## Wat zijn interpolatie, aggregatie en desaggregatie?

Interpolatie kan worden gedefinieerd als het bepalen van een waarde op een punt dat tussen andere punten in ligt, zonder gebruik te maken van het exacte mechanisme dat aan de waarde ten grondslag ligt (zie ook Everitt, 2006). In het bovenstaande voorbeeld met zink ging het om ruimtelijke interpolatie, maar ook interpolatie in de tijd en interpolatie in ruimte én tijd zijn mogelijk.

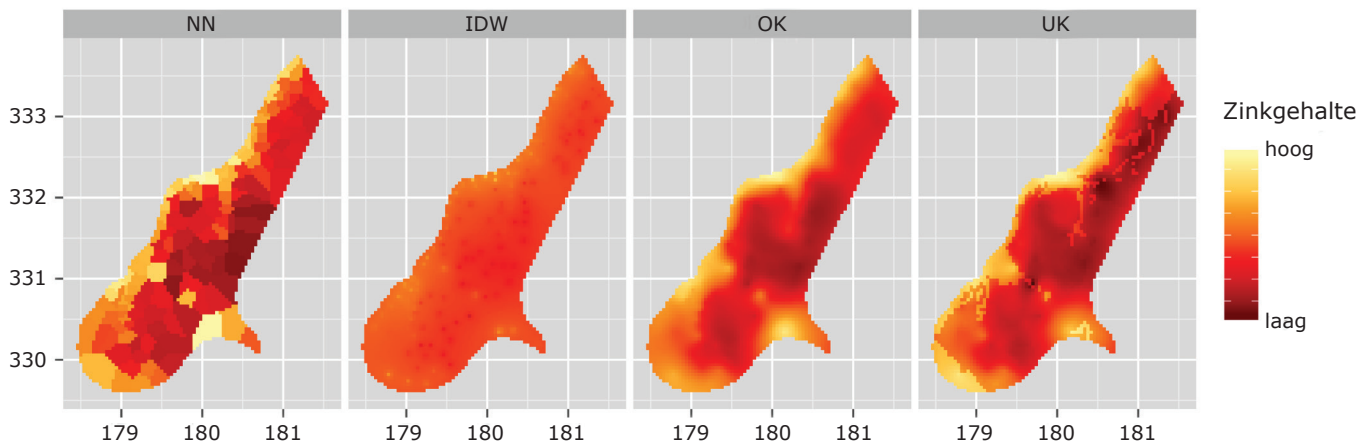
Aggregatie en desaggregatie zijn nauw verwant aan interpolatie. Bij aggregatie worden de waarden van kleine eenheden, zoals boorlocaties, samengevoegd tot een enkele waarde voor een grotere eenheid, zoals een stroomgebied. Desaggregatie is het omgekeerde daarvan, namelijk het opdelen van de waarde voor een grotere eenheid in de waarden van de afzonderlijke componenten waaruit de grotere eenheid bestaat. Aggregatie wordt soms ook wel 'opschalen' genoemd en desaggregeren 'neerschalen'. Vaak is interpolatie een tussenstap van aggregatie, bijvoorbeeld om een gebiedsgemiddelde te berekenen op basis van puntgegevens die niet volgens een bekend steekproefontwerp zijn verzameld.

## Waarom een beslissingsondersteunend systeem?

Interpoleren, aggregeren en desaggregeren kan op verschillende manieren, zie Knotters *et al.* (2010) voor een uitgebreid overzicht. Niet elke methode is echter even geschikt in elke situatie. Vaak laten onderzoekers zich bij hun keuze voor een bepaalde methode echter leiden door de beschikbaarheid van software in plaats van door de geschiktheid van de methode om het probleem op te lossen: *software driven* in plaats van *problem driven*. De gekozen methode mag dan eenvoudig toepasbaar zijn omdat deze is geïmplementeerd in een vertrouwd softwarepakket, onbekend is of de methode resultaten oplevert die nauwkeurig genoeg zijn. Ook worden de resultaten vaak alleen visueel beoordeeld. Een geïnterpoleerde kaart krijgt dan al snel het predicaat 'plausibel' opgelegd terwijl de kwaliteit van de kaart in termen van interpolatiefouten onbekend is.

## 'Map Maker's Guide'

Om de gebruiker te helpen bij het maken van een weloverwogen keuze uit de vele interpolatie-, aggregatie- en



Figuur 2. Voorspelling van het zinkgehalte op basis van nearest neighbor interpolatie (NN), inverse distance weighting interpolatie (IDW), ordinary kriging (OK) en universal kriging (UK).

desaggregatiemethoden is een beslissingsondersteunend systeem (BOS) ontwikkeld. Het BOS is geïmplementeerd als een interactieve website: [www.mapmakersguide.org](http://www.mapmakersguide.org). Het BOS is hierdoor algemeen toegankelijk en kan eenvoudig worden geactualiseerd. Aan de hand van een aantal vragen analyseert het BOS het interpolatie-, aggregatie-, of desaggregatieprobleem, en kent geschiktheidsscores toe aan alle interpolatie-, aggregatie-, en desaggregatiemethoden in zijn kennisbank. Deze methoden zijn grotendeels ontleend aan Knotters *et al.* (2010). Omdat dit een afspiegeling is van de beschikbare literatuur zijn desaggregatiemethoden relatief ondervertegenwoordigd. De geschikteste methoden worden gepresenteerd in een tabel. De gebruiker kan vervolgens de aanbevolen methoden met elkaar vergelijken. Ook kan hij achteraf zijn antwoorden nog aanpassen en het effect daarvan bekijken op het gegeven advies.

### Hoe sterk hangt het resultaat van de methode af?

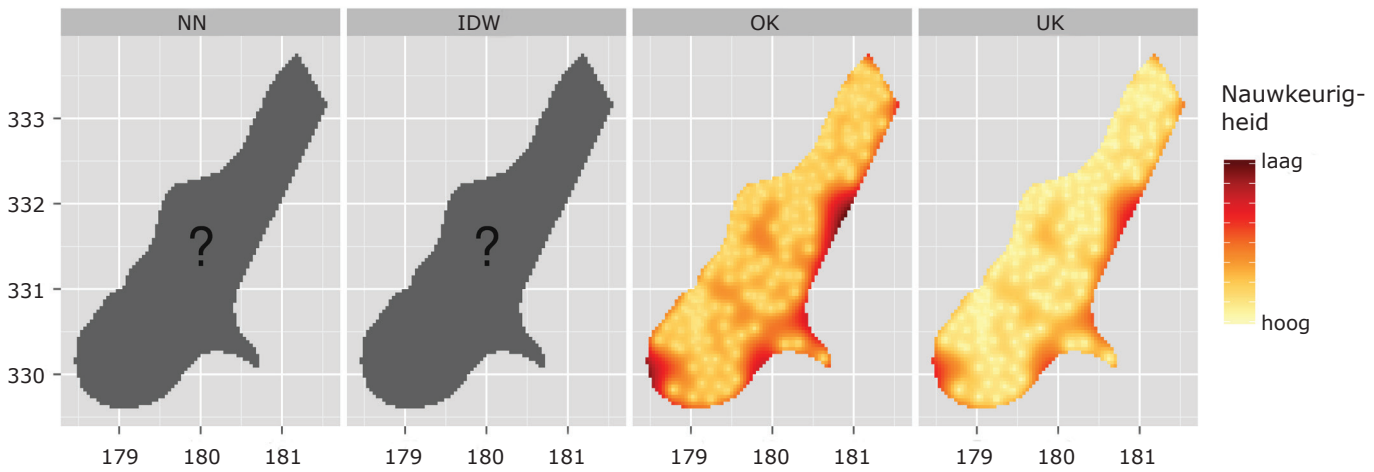
Uit het overzicht van Knotters *et al.* (2010) kozen we vier populaire methoden, waarmee we kaarten maakten door de puntgegevens in figuur 1 naar een dicht grid van voorspelpunten te interpoleren. De vier methoden zijn nearest neighbour interpolatie (NN), inverse distance weighting interpolatie (IDW), ordinary kriging (OK), en universal kriging (UK). Bij alle vier methoden is een voorspelling een gewogen gemiddelde van de waarnemingen, maar de methoden kennen op verschillende manieren gewichten toe aan de waarnemingen. Bij NN krijgt de meest nabijgelegen waarneming het volledige gewicht. Bij IDW zijn de gewichten omgekeerd evenredig met de afstand tussen de waarnemingspunten en het voorspelpunt: nabijgelegen waarnemingen krijgen meer gewicht dan waarnemingen verder weg. IDW maakt dus van meer gegevens gebruik dan NN. OK gaat nog een stapje verder door de gewichten te laten hangen van de ruimtelijke structuur in het gebied. De gewichten zijn dan niet alleen een functie van de afstand, maar ook van de configuratie van de waarnemingspunten (denk bijvoor-

beeld aan clustering), en de mate waarin waarnemingen op elkaar lijken. UK is een generalisatie van OK, waarbij aanvullende informatie (zoals de overstromingsfrequentie) kan worden benut om de voorspellingen te verbeteren.

Figuur 2 laat zien dat de kaarten die de vier methoden opleveren sterk verschillen. Dit komt doordat de gewichten op vier verschillende manieren zijn berekend. NN levert een patroon op dat bestaat uit polygonen, waarbinnen het zinkgehalte overal gelijk is. Dit is niet erg waarschijnlijk, gezien het sedimentatieproces dat de ruimtelijke variatie van zink voornamelijk bepaalt. IDW geeft een patroon waarbij de ruimtelijke variatie sterk is gereduceerd. Alleen bij de meetlocaties komen extreme waarden voor (deze benaderen de meetwaarden). Omdat we bij het karteren van zinkgehalten juist in extremen geïnteresseerd zijn, is ook IDW minder geschikt. Het patroon dat OK oplevert lijkt plausibel, gegeven het sedimentatieproces dat een groot deel van de ruimtelijke variatie van zink bepaalt: het zinkgehalte neemt af naarmate de afstand tot de Maas groter wordt. De kaart die met UK is berekend lijkt op die van OK. De patronen bij UK worden tevens bepaald door informatie die samenhangt met het afzettingsmechanisme van zink, namelijk een kaart van overstromingsfrequentieclassen.

### Welke methode is het nauwkeurigst?

Een kaart is, net als ieder ander model, een vereenvoudiging van een deel van de werkelijkheid en bevat daarom fouten. Deze zijn de resultante van meet- en interpolatiefouten. Welke methode geeft nu de kaart met de kleinste fouten? Om deze vraag te beantwoorden, moeten we informatie hebben over de verschillen tussen de werkelijke waarden en de geïnterpoleerde waarden. We kennen niet alle werkelijke waarden, want dan zou interpolatie niet nodig zijn, maar met statistische methoden kunnen we wel iets zeggen over deze verschillen. Geostatistische interpolatiemethoden zoals OK en UK minimaliseren de spreiding van de fout en dwingen de gemiddelde fout naar nul. Figuur 3 geeft een kaart van de nauwkeurigheid van



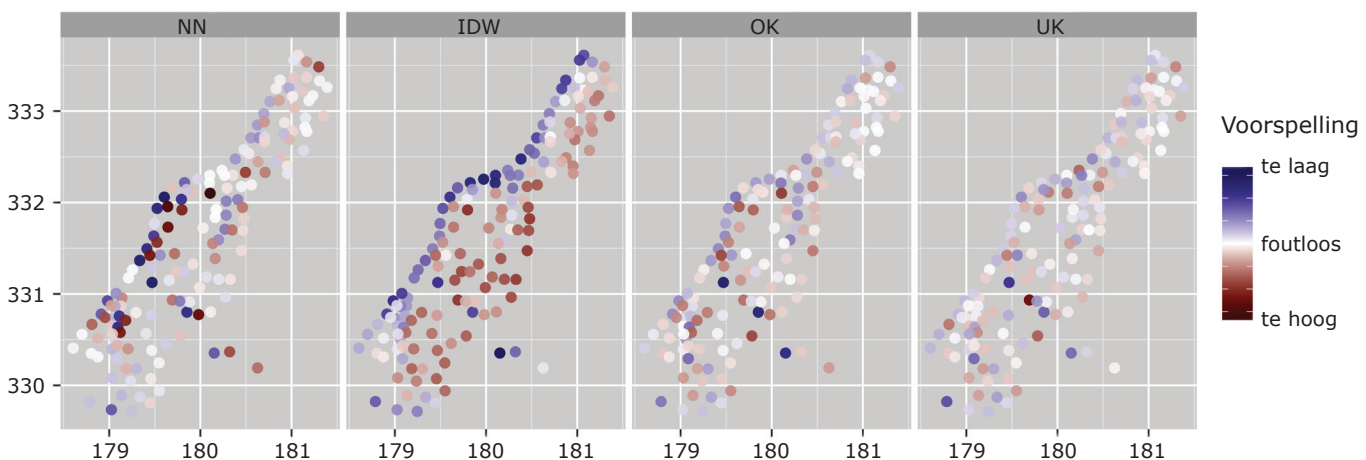
Figuur 3. Nauwkeurigheid van de voorspelling van het zinkgehalte op basis van *nearest neighbor* interpolatie (NN), *inverse distance* interpolatie (IDW), *ordinary kriging* (OK), en *universal kriging* (UK). Merk op dat alleen OK en UK de nauwkeurigheid kwantificeren.

de kaarten in figuur 2. De nauwkeurigheid kan alleen voor geostatistische methoden worden berekend omdat die gebruik maken van een expliciet model van de ruimtelijke structuur. Doordat UK ook gebruik maakt van de overstroomingsfrequentie is de nauwkeurigheid van deze methode groter dan die van OK.

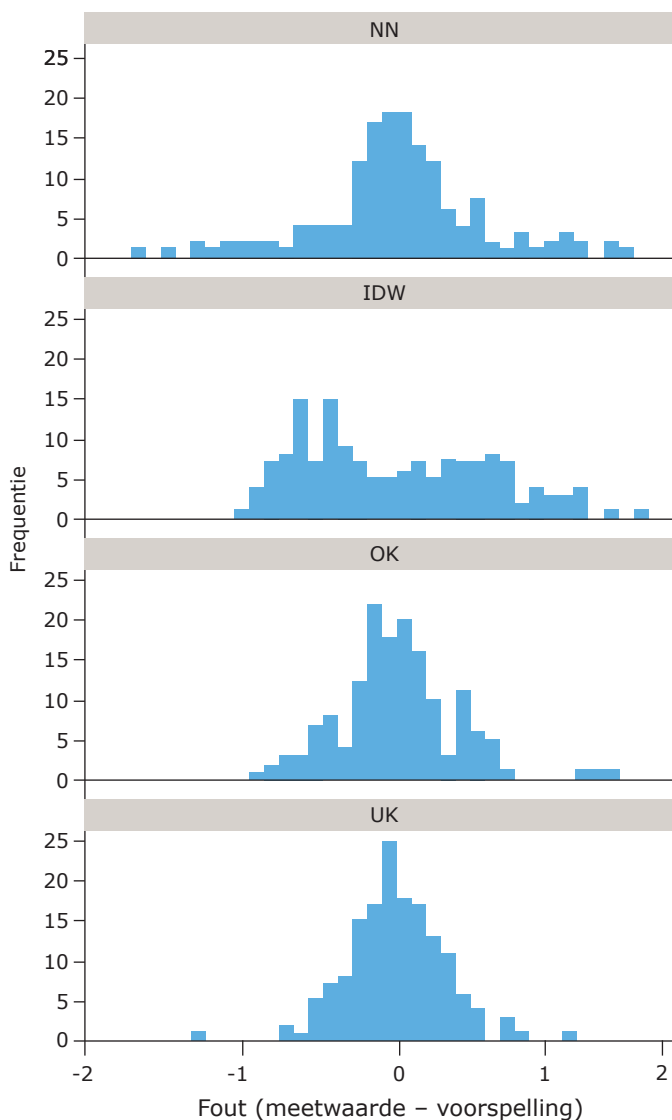
De nauwkeurigheid van een kaart kan worden bepaald met validatie. Als er geen geostatistisch model is gebruikt bij het maken van de kaart, dan is validatie zelfs de enige mogelijkheid om de kwaliteit te bepalen. Bij validatie wordt een deel van de meetgegevens *niet* gebruikt om de kaart te maken, maar achteraf gebruikt om de interpolatiefout te berekenen. Met een aanvullende kanssteekproef kan de gemiddelde fout van de kaart objectief worden berekend (De Gruijter *et al.*, 2006), dat wil zeggen dat de uitkomst niet afhangt van veronderstellingen die moeilijk zijn te verifiëren. Is een aanvullende steekproef niet mogelijk, dan is bijvoorbeeld 'kruisvalidatie' een optie (Efron & Gong, 1983): telkens wordt een waarde apart gezet om te valideren, net zolang totdat alle waarden zijn gebruikt voor kalibratie én voor validatie. Figuur 4 geeft

de interpolatiefouten op de waarnemingslocaties zoals berekend met kruisvalidatie. Uit de figuur blijkt dat IDW het zinkgehalte langs de Maas sterk onderschat en verder van de Maas juist overschat. NN geeft de grootste extremen te zien. OK en UK geven de kleinste fouten.

Figuur 5 geeft de histogrammen van de met kruisvalidatie berekende fouten, en tabel 1 de bijbehorende statistieken. De gebruikte interpolatiemethoden hebben allemaal een gemiddelde fout van ongeveer nul, dus ze over- of onderschatten het zinkgehalte niet systematisch. De spreiding van de fouten is het kleinst voor UK. Hoewel NN de grootste fouten oplevert, hebben die van IDW de grootste spreiding. De vierde kolom in tabel 1 geeft de correlatie tussen de metingen en de voorspellingen op basis van kruisvalidatie. De correlatie geeft aan in hoeverre de ruimtelijke patronen worden gereproduceerd. UK doet dat het beste doordat van relevante additionele informatie gebruik wordt gemaakt.



Figuur 4. De interpolatiefout berekend als het verschil tussen het waargenomen en het voorspelde zinkgehalte voor *nearest neighbor* interpolatie (NN), *inverse distance* interpolatie (IDW), *ordinary kriging* (OK), en *universal kriging* (UK). De fouten zijn berekend met kruisvalidatie.



Figuur 5. Histogram van de interpolatiefout (meting minus voorspelling) voor *nearest neighbor* interpolatie (NN), *inverse distance* interpolatie (IDW), *ordinary kriging* (OK), en *universal kriging* (UK).

Tabel 1. Gemiddelde fout (optimum: 0), variantie van de fout (optimum: 0) en de correlatie tussen de meetwaarden en de voorspellingen (optimum: 1) voor *nearest neighbor* interpolatie (NN), *inverse distance* interpolatie (IDW), *ordinary kriging* (OK), en *universal kriging* (UK) op basis van kruisvalidatie.

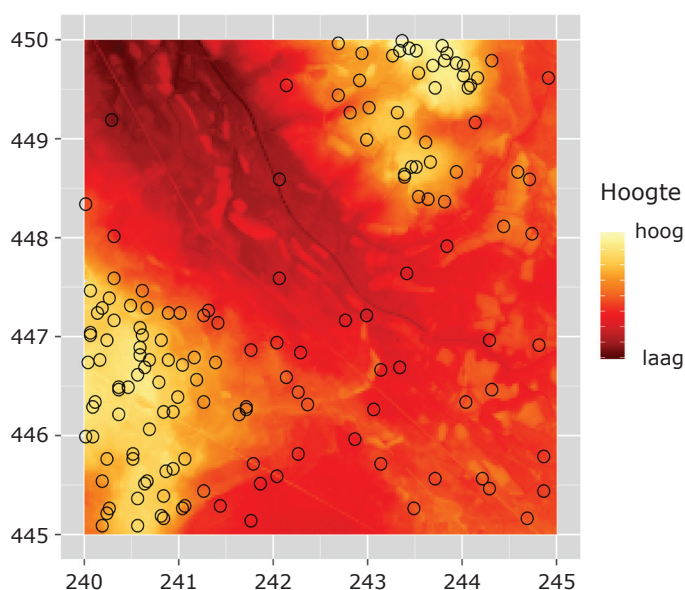
Methode	Gemiddelde	Variantie	Correlatie
NN	0,01	0,32	0,69
IDW	0,00	0,41	0,72
OK	0,00	0,15	0,84
UK	0,00	0,11	0,89

## Van punten naar vlakken

Bij onderzoek op het gebied van de leefomgeving moeten ruimtelijke gegevens vaak worden geaggregeerd. Gegevens van puntlocaties worden bijvoorbeeld geaggregeerd tot gemiddelden voor stroomgebieden, provincies, postcodegebieden, fysiografische eenheden, en COROP-gebieden. Er zijn verschillende aggregatiemethoden, en evenals bij interpolatie is het kiezen van de juiste methode belangrijk. Dit illustreert het volgende voorbeeld.

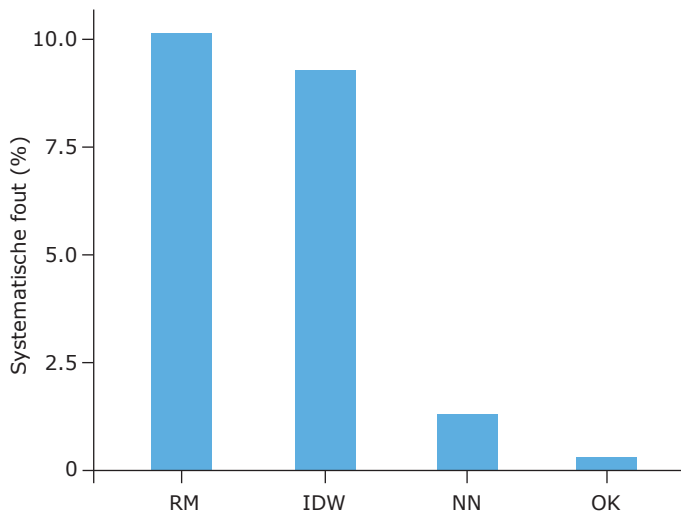
Figuur 6 is een hoogtekartaart van een deel van het stroomgebied van de Groenlose Slinge. Stel dat de hoogte alleen bekend is van een beperkt aantal locaties, weergegeven met stippen. Wat opvalt is dat de waarnemingslocaties preferent voorkomen in gebieden met hoge waarden. Een dergelijk patroon komt bijvoorbeeld voor bij milieukundig onderzoek waar verontreinigingen moeten worden uitgekarteerd.

Stel dat het doel is om op basis van de waarnemingen het gebiedsgemiddelde te berekenen. Het mag duidelijk zijn dat rekenkundig middelen van alle waarnemingen zal leiden tot een overschatting van het werkelijke gebiedsgemiddelde. Er is dan sprake van een systematische fout. We hebben in dit geval dus een aggregatiemethode nodig die de bijdrage van ruimtelijk geclusterde waarnemingen reduceert.



Figuur 6. Waarnemingslocaties geprojecteerd op een kaart van het gebied waarvoor het gemiddelde moet worden voorspeld.

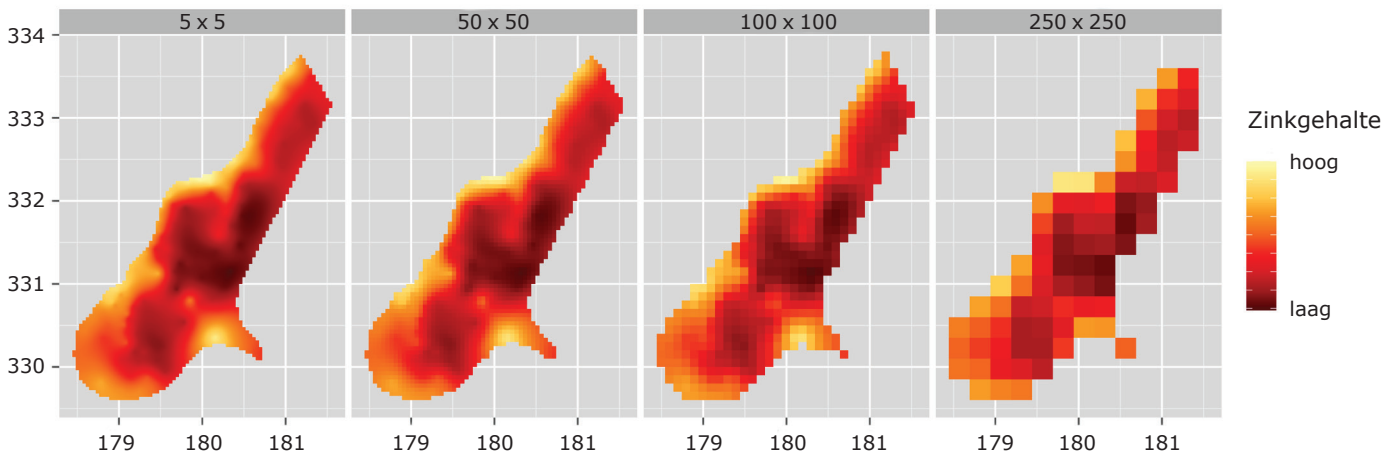
We zullen het gebiedsgemiddelde berekenen op basis van vier aggregatiemethoden: rekenkundig middelen (RM), en aggregatiemethoden gebaseerd op NN, IDW, en OK. In dit voorbeeld kunnen we de hoogtekartaart in figuur 6 gebruiken om het werkelijke gemiddelde te berekenen zodat we ook de mate van overschatting door elke methode kunnen berekenen. Figuur 7 geeft voor elke methode de systematische fout. Door de preferente wijze van monsterneming zal iedere methode het werkelijke gemiddelde overschatten. De beste resultaten worden verkregen met NN en OK. Beide methoden verminderen de redundantie van de gegevens door clusters van punten minder gewicht te geven. Hoewel NN over het algemeen niet zo'n goede interpolator is kunnen haar ontclusterende eigenschappen worden gebruikt om gebiedsgemiddelden te schatten. Ook OK geeft minder gewicht aan clusters van punten. In tegenstelling tot NN wordt daarbij een expliciet model van de ruimtelijke structuur gebruikt.



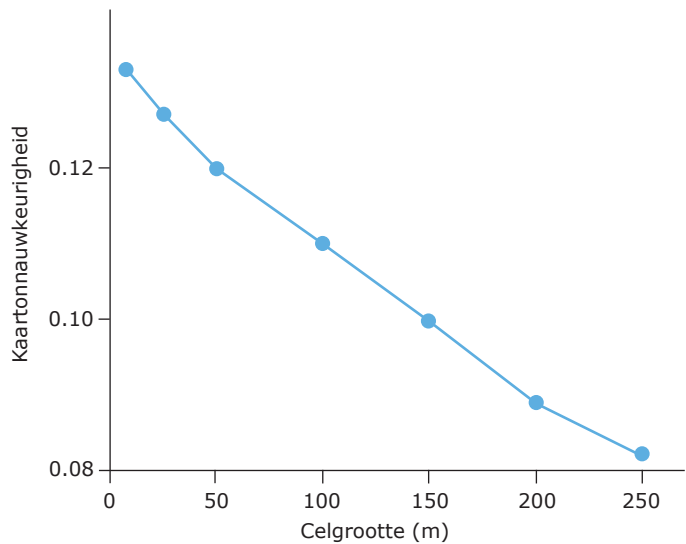
Figuur 7. Systematische fout (%) van vijf aggregatiemethoden om het gebiedsgemiddelde te voorspellen op basis van de locaties in figuur 6. De aggregatiemethoden zijn: rekenkundig middelen (RM), *inverse distance* interpolatie (IDW), *nearest neighbor* (NN), en *ordinary kriging* (OK).

### Resolutie versus nauwkeurigheid

De begrippen resolutie en nauwkeurigheid worden vaak met elkaar verward. Dat een hoge resolutie niet hoeft te leiden tot een hogere nauwkeurigheid blijkt uit figuur 8 en figuur 9. Hier is OK toegepast om de waarden op de punten in figuur 1 te aggregeren naar gemiddelde zinkgehalten voor cellen van  $5 \times 5 \text{ m}^2$ ,  $50 \times 50 \text{ m}^2$ ,  $100 \times 100 \text{ m}^2$  en  $250 \times 250 \text{ m}^2$ . Doordat de resolutie van de linker figuur het grootst is geeft deze figuur de meeste details te zien. Dat wil overigens niet zeggen dat de nauwkeurigheid van deze kaart ook het grootst is. In tegendeel. In figuur 9 is de gemiddelde kaartonauwkeurigheid gegeven als functie van de celgrootte. De nauwkeurigheid is berekend met OK. Het blijkt dat het gemiddelde voor grotere cellen nauwkeuriger kan worden berekend dan voor kleinere cellen. Dit is ook begrijpelijk. Op basis van de punten in figuur 1 is het immers eenvoudiger om een gemiddelde te berekenen voor het hele studiegebied, dan voor een specifiek plekje in een bepaald weiland.



Figuur 8. Zinkgehalte voor kaarten met verschillende ruimtelijke resoluties:  $5 \times 5 \text{ m}^2$ ,  $50 \times 50 \text{ m}^2$ ,  $100 \times 100 \text{ m}^2$  en  $250 \times 250 \text{ m}^2$ .



Figuur 9. Kaartonauwkeurigheid als functie van de celgrootte voor aggregatie van het zinkgehalte op basis van de gegevens in figuur 1.

### Tot slot

In deze WOt-paper hebben we aan de hand van een aantal voorbeelden laten zien dat de keuze voor een interpolatie-, aggregatie, of desaggregatiemethode weloverwogen moet gebeuren. Om die keuze te vergemakkelijken hebben we het beslissingsondersteunende systeem 'Map Maker's Guide' ontwikkeld. Dit interactieve systeem moet zowel de beginnende als de meer ervaren gebruiker op weg helpen bij het kiezen van een geschikte interpolatie-, aggregatie-, of desaggregatiemethode. Zoals de titel al zegt: 'Interpoleren kun je leren'. Dit leerproces is overigens in twee richtingen: ook het beslissingsondersteunende systeem kan leren op basis van gebruikerservaringen. Feedback stellen wij daarom zeer op prijs.

### Dankbetuiging

Wij willen Harm Houweling (WOT Natuur & Milieu, Wageningen UR), Peter Janssen (Planbureau voor de Leefomgeving) en George van Voorn (PRI/Biometris-Wageningen UR) bedanken voor het kritisch doornemen

van een eerdere versie van deze paper. Het beslissingsondersteunend systeem is ontwikkeld in het kader van de Wettelijke Onderzoekstaken Natuur & Milieu (WOT N&M) die Wageningen UR in opdracht van het Ministerie van Economische Zaken uitvoert voor het Planbureau voor de Leefomgeving (PBL).

## Literatuur

- Berendsen, H.J.A. (2004). *De vorming van het land: inleiding in de geologie en de geomorfologie*. Uitgeverij Van Gorcum.
- Efron, B., & G. Gong (1983). A Leisurely Look at the Bootstrap, the Jackknife, and Cross- Validation. *The American Statistician*, 37(1), 36–48.
- Everitt, B.S. (2006). *The Cambridge Dictionary of Statistics*. 3 edn. Cambridge, UK: Cambridge University Press.
- Gruijter, J. de, D. Brus, M. Bierkens & M. Knotters (2006). *Sampling for Natural Resource Monitoring*. Berlin: Springer.
- Knotters, M., G.B.M. Heuvelink, T. Hoogland & D.J.J. Walvoort (2010). *A disposition of interpolation techniques*. WOT-werkdocument 190. WOT Natuur & Milieu - Wageningen UR, Wageningen.
- Pebesma, E.J., & R.S. Bivand (2005). Classes and methods for spatial data in R. *R News*, 5 (2).

## Colofon

Achtergronden van deze paper zijn te vinden in WOT-werkdocument 190: Knotters, M., G.B.M. Heuvelink, T. Hoogland & D.J.J. Walvoort (2010). *A disposition of interpolation techniques*. WOT Natuur & Milieu - Wageningen UR, Wageningen.

Auteurs: D.J.J. Walvoort en M. Knotters

© 2013

Alterra Wageningen UR  
Postbus 47  
6700 AA Wageningen  
T (0317) 48 07 00  
E info.alterra@wur.nl

ISSN 1879-4688

De reeks 'WOT-papers' is een uitgave van de Wettelijke Onderzoekstaken (WOT) Natuur & Milieu, onderdeel van Wageningen UR. Een WOT-paper bevat resultaten van afgerond onderzoek op een voor de doelgroep zo toegankelijk mogelijke wijze. De maatschappelijke discussie waarbinnen en waarom het onderzoek is uitgevoerd, komt daarbij nadrukkelijk aan de orde, evenals de beleidsrelevantie en mogelijk de wetenschappelijke relevantie van de resultaten.

Onderzoeksopdrachten van de WOT Natuur & Milieu worden gefinancierd door het Ministerie van Economische Zaken.

Deze paper is gemaakt conform het Kwaliteitshandboek van de unit WOT Natuur & Milieu.

Project WOT-04-011-036.16

Wettelijke Onderzoekstaken Natuur & Milieu

Postbus 47  
6700 AA Wageningen  
T (0317) 48 54 71  
F (0317) 41 90 00  
E info.wnm@wur.nl  
I www.wageningenUR.nl/wotnatuurenmilieu

Alle rechten voorbehouden. Niets uit deze uitgave mag worden veeleevoudigd en/of openbaar gemaakt door middel van druk, fotokopie, microfilm of op welke wijze dan ook, zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van de uitgever.



