

Update Ecologische modellen  
KRW-verkenner





**Update Ecologische modellen  
KRW-verkenner**

referentie	projectcode	status
GV1201-1/15-002.578	GV1201-1	definitief
projectleider	projectdirecteur	datum
dr.ir. A.C. de Niet	ir. S.C. van der Biezen	12 februari 2015

autorisatie	naam	paraaf
goedgekeurd	dr.ir. A.C. de Niet	



<b>INHOUDSOPGAVE</b>	<b>blz.</b>
<b>1. INTRODUCTIE</b>	<b>1</b>
1.1. Aanpak	1
1.2. Voorspellingstool	1
1.3. Leeswijzer	1
<b>2. DATASET</b>	<b>3</b>
2.1. Opbouw	3
2.2. Watertypenclusters	3
2.3. Stuurvariabelen	3
2.4. Samenstelling	4
2.5. Opdeling	5
<b>3. GEBRUIK VAN EXPERT-KENNIS</b>	<b>7</b>
3.1. Methode	7
3.2. Resultaten	7
3.3. Gebruik expert-relaties	9
3.4. Aanbevelingen voor verder gebruik van de dataset	9
<b>4. PRODUCT UNIT NEURAAAL NETWERK</b>	<b>11</b>
4.1. Principes achter neurale netwerken	11
4.2. Beperkingen van gewone neurale netwerken	12
4.3. Product Unit Neuraal Netwerk	12
4.3.1. Grote voorspellende kracht	12
4.3.2. Netwerk kan worden vereenvoudigd	12
4.3.3. Inzicht in relatie tussen input en output	12
4.3.4. Transporteerbaar	13
4.4. PUNN-toolbox	13
4.5. Het ontwikkelen van PUNN's voor de EKR-score	13
<b>5. FORMULES VOOR DE ECOLOGISCHE KWALITEITS RATIO</b>	<b>15</b>
5.1. Langzaam stromende beken	15
5.1.1. Waterflora	16
5.1.2. Macrofauna	17
5.1.3. Vissen	17
5.2. Snelstromende beken	18
5.2.1. Waterflora	18
5.2.2. Macrofauna	19
5.2.3. Vissen	19
5.3. Sloten	20
5.3.1. Waterflora	20
5.3.2. Macrofauna	21
5.3.3. Vissen	21
5.4. Kanalen	22
5.4.1. Fytoplankton	22
5.4.2. Waterflora	23
5.4.3. Macrofauna	23
5.4.4. Vissen	24
5.5. Ondiepe meren	25
5.5.1. Fytoplankton	25
5.5.2. Waterflora	26
5.5.3. Macrofauna	26

5.5.4.	Vissen	27
5.6.	Diepen meren	28
5.6.1.	Fytoplankton	28
5.6.2.	Waterflora	29
5.6.3.	Macrofauna	29
5.6.4.	Vissen	30
5.7.	Zwak brakke wateren	31
5.7.1.	Fytoplankton	31
5.7.2.	Waterflora	32
5.7.3.	Macrofauna	32
5.7.4.	Vissen	33
5.8.	Brakke tot zoute wateren	34
5.8.1.	Fytoplankton	34
5.8.2.	Waterflora	35
5.8.3.	Macrofauna	35
5.8.4.	Vissen	36
<b>6.</b>	<b>CONCLUSIES EN AANBEVELINGEN</b>	<b>37</b>
6.1.	Conclusies	37
6.2.	Aanbevelingen	38
<b>7.</b>	<b>LITERATUUR</b>	<b>41</b>
	laatste bladzijde	42
<b>BIJLAGEN</b>		<b>aantal blz.</b>
-		

## 1. INTRODUCTIE

In 2012 heeft Witteveen+Bos in opdracht van Stowa en Deltares in samenwerking met Royal Haskoning en Planbureau voor de Leefomgeving ecologische modellen ontwikkeld voor de KRW-verkenner. De modellen voorspellen de Ecologische Kwaliteits Ratio (EKR) op basis van de karakteristieken van een waterlichaam. De ecologische modellen zijn getrainde Product Unit Neuraal Netwerken (PUNN's) die zijn ontsloten in een zelfstandig draaiende tool. Deze tool is opgenomen in de KRW-verkenner.

In de afgelopen jaren is de dataset met karakteristieken en EKR's van de waterlichamen in Nederland verder uitgebreid. Bovendien zijn de maatlatten waarmee de EKR's worden berekend gewijzigd. Planbureau voor de Leefomgeving heeft daarom Witteveen+Bos verzocht op basis van deze verbeterde en uitgebreide dataset nieuwe rekenregels af te leiden, te beschrijven en te ontsluiten via een tool. Het doel is een geactualiseerde PUNN-tool binnen de KRW-verkenner. Gebruikers van de KRW-verkenner beschikken na de update over ecologische modellen die gebaseerd zijn op de meest actuele data van de ecologische kwaliteit van oppervlaktewater in Nederland.

### 1.1. Aanpak

Voor een eerlijke beoordeling en evaluatie van de kwaliteit van de modellen is de dataset opgesplitst in twee delen. Het trainingsdeel (80 %) wordt gebruikt voor de ontwikkeling van de modellen. Het validatiedeel (20 %) wordt alleen gebruikt om vast te stellen hoe de verschillende modellen presteren op nieuwe data. Het validatiedeel mag op geen enkele wijze worden betrokken in de tot stand koming van de modellen.

In dit rapport zijn aanpak en resultaten beschreven van de modellering van Witteveen+Bos op basis van PUNN's. Een Product Unit Neuraal Netwerk (PUNN) is een speciaal type neuraal netwerk. Een PUNN - ook wel white-box netwerk genoemd - is gebaseerd op producten in plaats van sommen bij een traditioneel neuraal netwerk. Het voordeel van een PUNN is dat het mogelijk is het getrainde netwerk te vereenvoudigen zodat alleen de bepalende relaties overblijven. Een PUNN kan daardoor meer inzicht geven in de onderliggende structuur dan een traditioneel neuraal netwerk.

### 1.2. Voorspellingstool

Het resultaat van de modellering met PUNN's is ontsloten door een tool (executable) op te leveren die kan worden geïntegreerd in de eerstvolgende update van de KRW-verkenner. De tool voorspelt de EKR-scores op basis van stuurvariabelen. Qua in- en output voldoet de nieuwe tool (versie 3.0.0) aan exact dezelfde eisen als de huidige tool (versie 2.1.0). Die eisen zijn bij de oplevering van de voorgaande tool in overleg met Deltares vastgelegd.

### 1.3. Leeswijzer

In hoofdstuk 2 is de dataset beschreven waarop de modellering is gebaseerd. In hoofdstuk 3 wordt ingegaan op de vraag in hoeverre expert-kennis wordt betrokken bij de selectie van het beste model. In het daaropvolgende hoofdstuk wordt uitgelegd wat een PUNN is en hoe deze op basis van de datasets tot stand komt. Hoofdstuk 5 beschrijft de resultaten. De afgeleide EKR-formules zijn in dit hoofdstuk opgenomen en per formule is aangegeven hoe goed deze presteert. Hoofdstuk 6 bevat samenvatting en conclusie.





## 2. DATASET

In dit hoofdstuk is beschreven op basis van welke dataset de modellen zijn gebouwd.

### 2.1. Opbouw

De dataset bestaat uit gegevens van een groot aantal waterlichamen in Nederland. Per waterlichaam is een Ecologische Kwaliteitsratio (EKR) score bepaald voor de volgende kwaliteitselementen:

- fytoplankton;
- overige waterflora;
- macrofauna;
- vissen.

De EKR-scores hebben een waarde tussen 0 en 1 en wordt bepaald met KRW-maatlatten. De maatlat wordt voor natuurlijke watertypen opgedeeld in de klassen Slecht (0-0.2), Ontoereikend (0.2-0.4), Matig (0.4-0.6), Goed (0.6-0.8) en Zeer goed (0.8-1.0).

### 2.2. Watertypenclusters

De data is geaggregeerd per cluster van watertypen. In tabel 2.1 is per watertypencluster aangegeven welke watertypen er toe behoren. Per watertypencluster spelen andere stuurvariabelen een rol bij het verklaren van de ecologische kwaliteitsratio. In de tabel is met een 'x' aangegeven met welke stuurvariabelen de PUNN's zijn getraind.

**Tabel 2.1. stuurvariabelen per watertypencluster**

watertypencluster	watertypen	Oeverinrichting	Peildynamiek	Onderhoud	Connectiviteit	Meandering	Verstuwing	Beschaduwing	Scheepvaart	BZV	Chloride	Fosfaat totaal	Stikstof totaal
Langzaam stromend beken	R4, R5, R6, R12					x	x	x		x		x	x
Snel stromende beken	R13, R14, R15, R17, R18					x	x	x		x		x	x
Sloten	M1, M2, M8	x	x	x								x	x
Kanalen	M3, M4, M6, M7, M10	x	x	x					x			x	x
Ondiepe meren	M14, M23, M27	x	x									x	x
Diepe meren	M20	x	x									x	x
Zwak brakke wateren	M30	x	x	x	x						x	x	x
Brakke tot zoute wateren	M31	x	x	x	x						x	x	x

Bij het trainen van de PUNN's wordt op basis van de data geselecteerd welke stuurvariabelen bijdragen aan het verklaren van de EKR-score. Het is mogelijk dat een stuurvariabele waarmee getraind is, wordt verwijderd bij het vereenvoudigen van het model. Het komt dan niet voor in de uiteindelijke formule voor de EKR-score.

### 2.3. Stuurvariabelen

Er zijn 12 verschillende stuurvariabelen gedefinieerd. Een overzicht daarvan is opgenomen in tabel 2.1. De waarden voor de stuurvariabelen zijn gebonden aan minima en maxima. De geldigheid van de formules buiten de aangegeven range is beperkt. In de tool (executable) voor het toepassen van de PUNN's worden waarden buiten het aangegeven bereik

daarom ook afgerond naar het minimum of maximum voor de desbetreffende stuurvariabele.

In de tabel staat ook aangegeven onder welke verkorte naam de stuurvariabelen in de formules zijn opgenomen. De verkorte codes zijn gebaseerd op de Engelse namen van de stuurvariabelen. Bijvoorbeeld Oeverinrichting - Banks - Ba.

**Tabel 2.2. stuurvariabelen**

stuurvariabele	kort	eenheid	min	max	waarden en omschrijving
Oeverinrichting	Ba	-	1	3	1=beschoeid, 2=steil, 3=flauw/moerassig (NVO*)
Peildynamiek	L	-	1	3	1=tegennatuurlijk, 2=stabiel, 3=natuurlijk
Onderhoud	Ma	-	1	2	1=intensief, 2=extensief
Connectiviteit	Co	-	1	3	1=geïsoleerd, 2=periodiek geïsoleerd, 3=open verbinding
Meandering	Me	-	1	5	1=recht+normprofiel, 2=gestrekt+natuurlijker dwarsprofiel, 3=zwak slingerend, 4=slingerend, 5= vrij meanderend
Verstuwing	W	-	1	3	1=sterk gestuwd zonder vistrappen, 2=gestuwd met vistrappen, 3=ongestuwd
Beschaduwing	Sha	-	1	3	1=onbeschaduwd zonder ruigte op de oevers, 2=gedeeltelijk beschaduwd of ruigte op de oever en 3=grotendeels of geheel beschaduwd (opgaande begroeiing/bos)
Scheepvaart	Shi	-	1	2	1=intensief bevaren, 2 niet of nauwelijks bevaren
BZV	Bo	mg O <sub>2</sub> /l	0,5	20	Zomergemiddelde (april-september), maat voor organische belasting
Chloride	Cl	mg Cl/l	100	15000	Zomergemiddelde (april-september), maat voor verzoeting
Fosfaat totaal	P	mg P/l	0.01	10	Zomergemiddelde (april-september), maat voor eutrofiëring
Stikstof totaal	N	mg N/l	0,67	100	Zomergemiddelde (april-september), maat voor eutrofiëring

De minima en maxima en de omschrijving van de variabelen komen uit het rapport 'Verdere ontwikkeling Expertstelsysteem Ecologische Effecten en evaluatie gebruik in de Ex ante evaluatie KRW' (april 2009) dat Royal Haskoning heeft opgesteld in opdracht van PBL.

De data is bij het ontwikkelen van de modellen niet getoetst op deze minima en maxima. Dat wil zeggen dat er geen aanpassingen zijn gedaan om te zorgen dat de waarden tussen de aangegeven minima en maxima liggen. Bij een aantal waarden in de dataset is gebleken dat deze buiten de grenzen van de stuurvariabelen liggen. Het minimum van de variabelen Stikstof totaal, Fosfaat totaal en Chloride worden onderschreden. Het maximum van de variabelen Chloride en BZV wordt een aantal keren overschreden. In de training van de modellen zijn deze waarden gewoon meegenomen.

## 2.4. Samenstelling

De dataset is in opdracht van Planbureau voor de Leefomgeving samengesteld, gecontroleerd en geleverd door Royal Haskoning DHV. Per watertypencluster is één Excel-file geleverd met waarin per locatie is aangegeven wat de waarde is van de stuurvariabelen en de EKR-scores.

De dataset is deels gebaseerd op metingen, deels op schattingen en deels op een expertoordeel. In een aantal gevallen zijn kunstmatige wateren geïntroduceerd zodat ook extreme situaties in de database zijn opgenomen. Bij de afleiding van de modellen is hierin geen onderscheid gemaakt.

## 2.5. Opdeling

Per watertypencluster en per EKR-score zijn de waterlichamen gesplitst in twee categorieën. Een deel voor training en een deel voor validatie. Het trainingsdeel mag worden gebruikt voor het ontwikkelen en trainen van de voorspellingsmodellen. Het validatie-deel mag daar op geen enkele wijze bij betrokken worden en dient alleen om achteraf de kwaliteit te beoordelen van het model. De indeling is door Royal Haskoning DHV bepaald en meegeleverd met de data. Wij zijn er van uitgegaan dat de selectie van het validatiedeel statistisch zuiver is uitgevoerd.



### 3. GEBRUIK VAN EXPERT-KENNIS

In de dataset zijn veel waarnemingen van verschillende watertypen opgenomen. Hierin zijn een aantal stuurvariabelen opgenomen en de bijbehorende respons op de EKR-score van de verschillende kwaliteitselementen. Naast deze dataset kan er ook gebruik worden gemaakt van andere ecologische kennis om de ecologische relaties te verbeteren.

In de vergelijking tussen de verschillende modelleringstechnieken (Visser, 2013) bleek dat in de vorige versie van de modellen PBL en RH-DHV ecologische kennis (expert-kennis) te hebben gebruikt voor het selecteren van modellen.

Op basis hiervan is de volgende voorwaarde aan de eerdere modellen van PBL en Royal Haskoning DHV opgelegd:

‘Een netwerk wordt na een trainingscyclus verworpen indien een KRW-maatlat stijgt en één of meer van de volgende situaties geldt (PBL, 201

- een toename van de concentratie P, N of BZV;
- een afname van de sinuositeit van meandering;
- een toename van de mate van verstuwung;
- een afname van de mate van beschaduwung;
- het minder natuurlijk worden van de oeverinrichting;
- het minder natuurlijk worden van de peildynamiek;
- een toename van de intensiteit van onderhoud;
- een toename van de scheepvaart.’

Uit Visser, 2013, PBL.

De vraag is nu welke logische ecologische relaties (expert-judgement) meegenomen moeten worden voor de afleiding van de PUNN's. Het doel in dit hoofdstuk is om mogelijke expert-relaties te achterhalen om te gebruiken ter verbetering van de PUNN's.

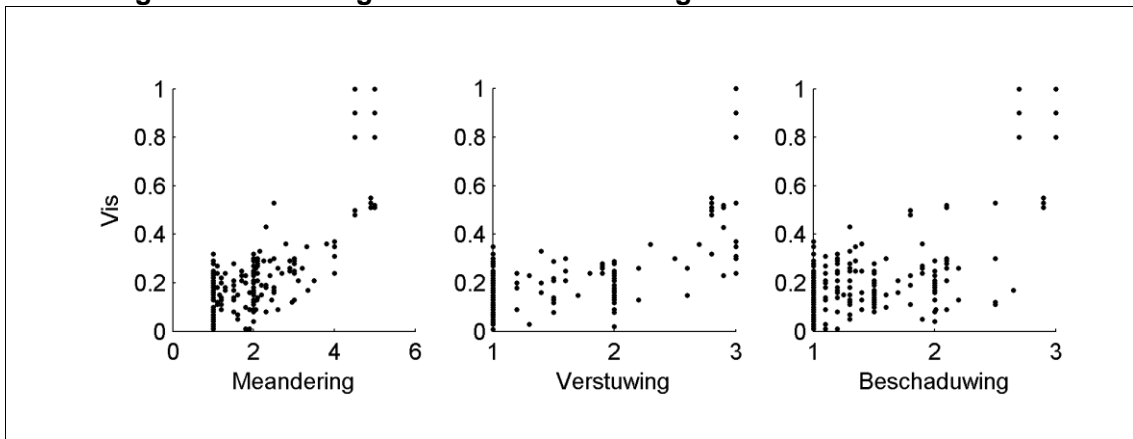
#### 3.1. Methode

Voor het achterhalen van relaties expertkennis is eerst een weergave van de data gemaakt. De stuurvariabelen uit de dataset zijn geplot ten opzichte van de bijbehorende EKR-scores van verschillende kwaliteitselementen. In deze grafieken zijn logische verbanden onderzocht. Verder zijn de eerder genoemde relaties uit het rapport van PBL globaal tegen het licht gehouden.

#### 3.2. Resultaten

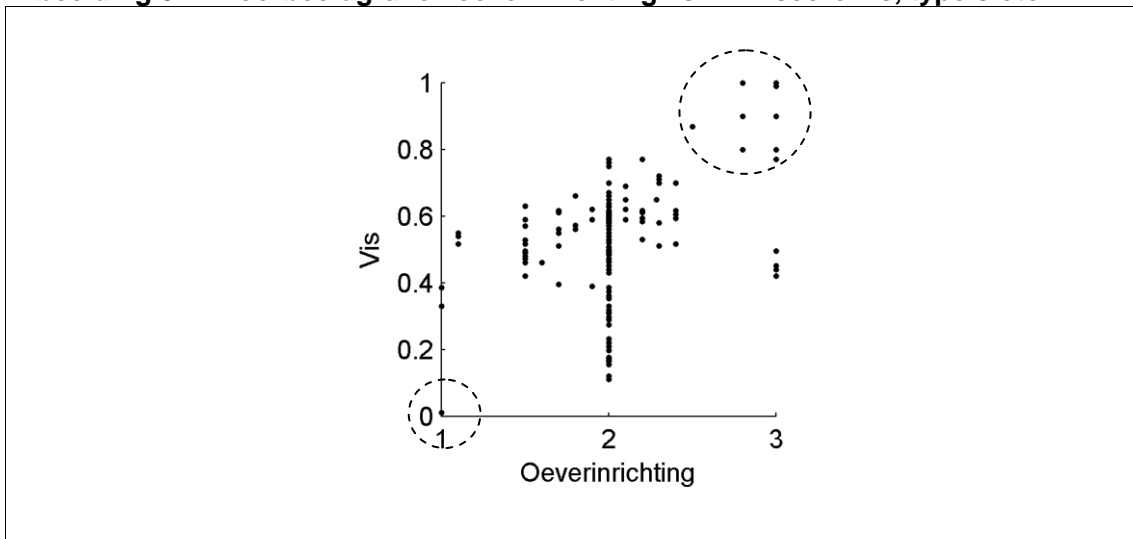
In afbeelding 1 is een voorbeeld gegeven waarbij de stuurvariabelen meandering, verstuwung en beschaduwung zijn uitgezet tegen de EKR-score voor vis. Een hogere score voor de stuurvariabelen betekent een meer natuurlijke situatie (meer meandering, minder verstuwung, meer beschaduwung). De relatie tussen de stuurvariabele en EKR-score is vaak duidelijk. Tegelijkertijd is de spreiding groot. Dit betekent dat het effect van het natuurlijker worden van de inrichting duidelijk is, maar de individuele punten laten zien dat het nemen van de maatregel niet per definitie leidt tot een hogere EKR-score.

**Afbeelding 3.1. Voorbeeldgrafieken EKR vis in langzaamstromende wateren.**



Verder is er bekend dat er expertkennis in de dataset aanwezig is. In de voorbeeldgrafieken lijkt dit ook het geval. In de regio bij hoge EKR en hoge score van de stuurvariabele bijvoorbeeld (zie afbeelding 2, maar ook in afbeelding 1) zijn er waarden aanwezig met (op tienden) afgeronde EKR (bijvoorbeeld de punten in het hoge EKR-bereik). Verder zijn er ook punten aanwezig met een EKR-score van praktisch 0 bij een lage score (van oeverinrichting).

**Afbeelding 3.2. Voorbeeldgrafiek oeverinrichting vs EKR-score vis, type sloten.**



Verder zijn alle van de eerder genoemde relaties (Visser, 2013) van expertkennis in meer of mindere mate al aanwezig in de aangeleverde dataset. Wanneer er regressies worden uitgevoerd zal veel van deze expert-relaties al uit de dataset volgen. Het is dus in veel gevallen niet noodzakelijk om ook nog de expert-relaties aanvullend te vereisen.

### 3.3. Gebruik expert-relaties

De conclusie is dat er geen redenen zijn om expert-relaties toe te voegen aan de dataset voor het afleiden van neurale netwerken, vanwege de volgende redenen:

- veel van de expert-relaties zijn al aanwezig in de dataset;
- we zijn het niet eens met een aantal relaties die eerder gebruikt zijn;
- de effectiviteit van maatregelen moet in samenhang met andere maatregelen worden beschouwd;
- toevoegen van expert-relaties leidt niet tot inzicht in effectiviteit van maatregelen.

Hieronder worden bovengenoemde redenen verder uitgewerkt.

De dataset bevat veel informatie. Veel van de expertrelaties die kunnen worden toegevoegd zijn in feite al aanwezig in de dataset. Aanvullend vereisen dat de netwerken voldoen aan de expert-relaties heeft daarom in onze ogen weinig zin.

We hebben bezwaren voor het opdrukken van een aantal verbanden uit het PBL-rapport. Op basis van modelberekeningen kan er bijvoorbeeld een toename zijn in P- of N-concentratie terwijl de verwachting is dat de EKR dan wel zal toenemen. Een lage P-concentratie garandeert bovendien geen hoge EKR-score. Ook gezien de ruis in de dataset is het niet gezegd dat het verminderen van de concentratie in alle gevallen zal leiden tot een betere EKR-score.

Er is bovendien een hiërarchie in de effectiviteit van type maatregelen. Het aanleggen van een natuurvriendelijke oever heeft bijvoorbeeld pas zin als P-belasting voldoende laag is om effect te hebben op de KRW-score voor waterplanten. Zo zijn er nog meer voorbeelden te bedenken waarbij eerder genoemde expert-relaties niet op zullen gaan.

Als er gebruik gemaakt wordt van de expert kennis zal dit niet leiden tot aanvullend inzicht in de effectiviteit van maatregelen. Door te eisen dat de EKR-score tenminste niet mag dalen na het doen van een ingreep, waarvan we denken dat deze een positief effect heeft, zal er natuurlijk ook uit de regressies volgen dat de maatregelen een neutraal of positief effect hebben. Eenvoudiger gezegd: wat je erin stopt komt er ook weer uit.

Wat ons betreft is het toevoegen van dit soort relaties niet gewenst en zal dit ook geen inzicht geven in de relatie tussen maatregel en daadwerkelijke effect.

### 3.4. Aanbevelingen voor verder gebruik van de dataset

Naast bovengenoemde expert-relaties is er in de dataset zelf ook expert-kennis aanwezig in de vorm van toegevoegde punten waarvan er bijvoorbeeld geen EKR-score gemeten is. De punten op basis van expert inschattingen, bevinden zich waarschijnlijk vooral in de uiteinden van de dataset. Deze punten beïnvloeden (het afleiden van) de relaties behoorlijk. Op deze wijze wordt er al expertkennis in de regressies verwerkt. Om meer inzicht in de relaties tussen maatregel en effect te krijgen is het zinvol om de dataset zonder aanvullingen uit expert-kennis te analyseren.

De spreiding in de dataset groot. Neurale netwerken worden zo gefit dat ze gemiddelden reproduceren. De bijbehorende spreiding in de dataset gaat hierdoor verloren. Wellicht is het belangrijk om juist ook inzicht in de spreiding te geven. Bijvoorbeeld om antwoord te geven op de vraag 'Hoe groot is de kans dat mijn maatregel een positief effect oplevert?'

De dataset lijkt op basis van inspectie van de grafieken in tweedimensionale ruimte consistent en logisch. Veel verbanden die verwacht worden, zijn aanwezig in de dataset. Op basis van deze grafieken is niet te zien hoe de dataset zich in meer dimensies verhoudt. Dit kan met een multivariate analyse verder worden uitgewerkt. Dit voert voor deze studie echter te ver. Wel kan een dergelijke analyse antwoord geven op vragen als: in hoeverre dekt de dataset alle dimensies? Of anders gezegd, zijn alle verschillende combinaties van stuurfactoren even goed vertegenwoordigd?



## 4. PRODUCT UNIT NEURAAAL NETWERK

In dit hoofdstuk wordt kort uitgelegd wat de principes van een neurale netwerk zijn. Vervolgens wordt het product unit neurale netwerk (PUNN) geïntroduceerd en wordt aangegeven wat de belangrijkste verschillen zijn ten opzichte van gewone neurale netwerken.

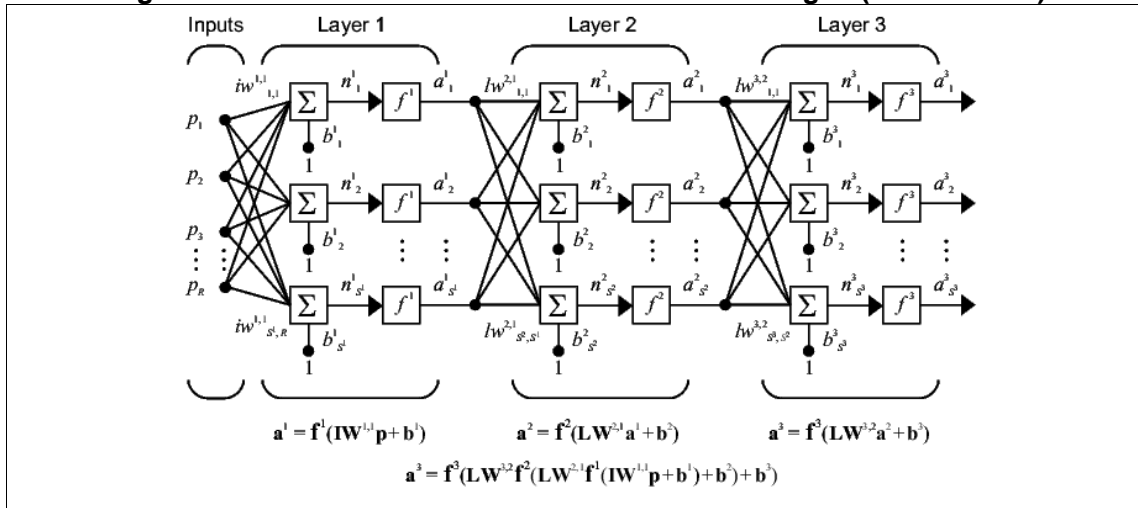
### 4.1. Principes achter neurale netwerken

Neurale netwerken zijn geïnspireerd door het menselijk brein. Het menselijk brein bestaat uit neuronen die aan elkaar gekoppeld zijn en leert door training en herhaling nieuwe begrippen en situaties. Hersens werken met elektrische signalen, wanneer er bij een neuron een signaal binnenkomt, kan het neuron dit signaal doorgeven. Afhankelijk van de signaalsterkte geeft het neuron een sterker of zwakker signaal door. Het neuron manipuleert dus de input en geeft een aangepast signaal door. Dat principe is vertaald naar een wiskundige techniek waarbij een kunstmatig neuron de inputvariabelen weegt en sommeert met de volgende formule:

$$\sum_{u=1}^{n_x} w_u x_u$$

Het resultaat wordt gemanipuleerd via een transferfunctie en dat wordt als output doorgegeven. Door verschillende neuronen naast elkaar te zetten en de output van de ene laag als input voor de volgende te gebruiken ontstaat een neurale netwerk. Een voorbeeld daarvan is weergegeven in Afbeelding 3.1 Er zijn erg veel vrijheden in de keuze van het aantal neuronen, de manier waarop deze zijn gekoppeld en welke transferfuncties worden toegepast.

**Afbeelding 4.1. Voorbeeld van een neurale netwerk met 3 lagen (bron: Matlab)**



Voor een effectief gebruik van neurale netwerken is het van belang de structuur van het netwerk af te stemmen op het onderliggende problemen. Ook moet het netwerk op de juiste manier worden getraind om te voorkomen dat het netwerk uitstekend voorspelt op de trainingset, maar daarbuiten de plank volledig mislaat. Als aan die voorwaarden is voldaan kan het een krachtige tool zijn om modellen te ontwikkelen op basis van grote datasets.

## 4.2. Beperkingen van gewone neurale netwerken

De standaard neurale netwerken hebben beperkingen. Één van de belangrijkste nadelen is het feit dat het model een black-box is. Als het neurale netwerk een goed model oplevert, is het volkomen onduidelijk waarom. Het levert geen inzicht in de aard van de relatie tussen de input en de output van het netwerk. Daarnaast is het lastig een getraind neurale netwerk buiten de omgeving van Matlab toe te passen. Het kan wel, maar vraagt een inspanning die groter wordt naarmate het neurale netwerk complexer wordt.

## 4.3. Product Unit Neuraal Netwerk

Er is een alternatieve formulering voor neurale netwerken die niet gebaseerd is op een som maar op een product: een product unit neuraal netwerk (PUNN). Een PUNN bestaat uit een lineaire combinatie van een constante en termen van de volgende vorm:

$$\prod_{u=1}^{n_x} x_u^{p_u}$$

In plaats van een sommatie van gewogen inputs, wordt gebruik gemaakt van een product waarbij de gewichten de rol van een machtsverheffing hebben gekregen. Bij gewone neurale netwerken worden de gewichten bepaald door training. Bij een PUNN geldt dat voor de machten.

Een PUNN heeft in vergelijking met een gewoon neurale netwerk een paar voordelen. Een PUNN is

- transporteerbaar;
- geeft inzicht in relatie tussen input en output;
- een PUNN kan worden vereenvoudigd;
- een PUNN Grote voorspellende kracht.

Hieronder worden deze voordelen kort beschreven.

### 4.3.1. Grote voorspellende kracht

Het eerste voordeel van PUNN's is dat producten een grotere ruimte beschrijven dan sommen. Een PUNN kan daardoor met minder knopen dan een standaard neurale netwerk hetzelfde resultaat bereiken.

### 4.3.2. Netwerk kan worden vereenvoudigd

Als een PUNN is getraind, valt direct uit het getrainde netwerk af te lezen welke inputs een grote rol spelen en welke er juist minder toe doen. Een input waarvan de machtsverheffing dicht bij 0 ligt, is vrijwel constant en kan mogelijk worden verwijderd. Via een iteratief proces van verwijdering van niet-relevante nodes en hertraining kan een PUNN worden vereenvoudigd. Dit proces heet snoeien (Engels: pruning). Het resultaat van snoeien is een sterk vereenvoudigd netwerk waarin alleen belangrijke structuren overblijven.

### 4.3.3. Inzicht in relatie tussen input en output

Uit wat overblijft van een PUNN na trainen en snoeien valt af te lezen wat de relatie is tussen de in- en output. Uit de machten is direct te zien wat de aard van het verband is. Juist

daarom zijn PUNN's goed bruikbaar voor het ontdekken van verbanden uit grote datasets van nog grotendeels onbegrepen problemen.

#### **4.3.4. Transporteerbaar**

Een PUNN is een formule die zonder veel problemen expliciet kan worden uitgeschreven. Dat maakt het heel eenvoudig een getrainde PUNN in een andere omgeving (Excel, externe code) te gebruiken.

#### **4.4. PUNN-toolbox**

Voor het toepassen van PUNN's heeft Witteveen+Bos een toolbox ontwikkeld. De toolbox is een uitbreiding op de Neural Network toolbox van Matlab. De toolbox maakt het mogelijk PUNN's op te zetten, te trainen, te snoeien en te exporteren in formule-vorm naar een tekstfile. De toolbox is door Witteveen+Bos meerdere keren succesvol toegepast. Bijvoorbeeld bij het ontwikkelen van een metamodel voor PCLake (Witteveen+Bos, 2012, 2013). De PUNN's zijn opgenomen in een website, waardoor een deel van de resultaten van PCLake (de waarden voor kritische belasting) voor een groter publiek is ontsloten (metamodel PCLake. website PBL).

#### **4.5. Het ontwikkelen van PUNN's voor de EKR-score**

Per Watertypencluster en per EKR is één PUNN ontwikkeld. Daarbij zijn de volgende uitgangspunten gehanteerd:

- de PUNN bestaat uit 5 termen plus een constante;
- elke PUNN wordt 5000 keer getraind na random initialisatie;
- de beste 20 PUNN's worden gesnoeid;
- de beste gesnoeide PUNN wordt opgeleverd.

Bij het trainen van de PUNN's is het doel het minimaliseren van de RMSE (root mean squared error). De RMSE is ook gebruikt om te bepalen welke (gesnoeide) PUNN het beste is. De RMSE is de standaard keuze, maar ligt ook voor de hand omdat grote fouten door kwadratering relatief zwaar wegen. De optimalisatie zal er dus voor zorgen dat er minder grote afwijkingen zijn dan wanneer de absolute fout zou zijn geminimaliseerd. Daar komt bij dat de RSME één van de beoordelingcriteria voor de prestatie van de verschillende modellen is.

De PUNN's zijn getraind en gesnoeid op basis van geschaalde data. De schaling wordt achteraf expliciet in de PUNN's worden verwerkt. Dat verandert niets aan de machten zelf. Alleen de factor voor elk deelproduct verandert. In de formules die worden gepresenteerd is de schaling verwerkt. Dit betekent dat de formules direct toepasbaar zijn op de data.



## 5. FORMULES VOOR DE ECOLOGISCHE KWALITEITS RATIO

In dit hoofdstuk wordt het resultaat van de update van de ecologische modellen gepresenteerd. Per watertypencluster is aangegeven wat de formules voor de verschillende EKR-deelmaatlscores zijn zoals afgeleid op basis van PUNN's.

In de opdracht aan Witteveen+Bos heeft PBL drie beoordelingscriteria opgegeven waarop de kwaliteit van de modellen wordt beoordeeld. Het gaat om

- percentage fout kleiner dan 0.10;
- de RMSE;
- 'coefficient of determination' (gecorrigeerde R-kwadraat).

Deze criteria zijn gelijk aan de criteria die eerder zijn gebruikt bij het vergelijken en beoordelen van de kwaliteit van verschillende modellen. De kengetallen worden berekend over de validatieset, die op geen enkele wijze is betrokken bij de training van de netwerken. In de tabellen is aangegeven hoe de netwerken van de verschillende EKR's presteren op de bovengenoemde beoordelingscriteria. De kengetallen zijn ook voor de trainingset weergegeven.

De formules die per watertypencluster voor elke EKR zijn bepaald worden eveneens in dit hoofdstuk weergegeven. In de formules zijn alle coëfficiënten afgerond op maximaal 4 significante cijfers. Eventuele 'trailing zeros' zijn daarbij niet weergegeven. '0.001400' wordt dus afgebeeld als '0.0014'. In de tool wordt gewerkt met coëfficiënten die niet zijn afgerond. De berekeningen in de tool zijn daardoor preciezer dan op basis van de weergegeven formules.

### 5.1. Langzaam stromende beken

**Tabel 5.1. Kwaliteit EKR-PUNN's voor Langzaam stromende wateren**

EKR	Training			Validatie		
	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ
Waterflora	91 %	0.060	0.80	83 %	0.073	0.73
Macrofauna	97 %	0.047	0.93	86 %	0.073	0.55
Vissen	94 %	0.053	0.90	86 %	0.074	0.30

### 5.1.1. Waterflora

$$\begin{aligned} EKR_{\text{wat}} = & + 1.161 \\ & - 0.3802 \frac{Me^{0.03588} W^{0.1904} Sha^{0.4312} Bo^{0.3715}}{p^{0.09535} N^{0.1534}} \\ & - 0.2669 \frac{Sha^{0.6296} p^{0.2266} N^{0.7605}}{Me^{0.1568} W^{0.6241} Bo^{0.5076}} \\ & + 0.1991 \frac{Me^{0.251} W^{0.3989} Sha^{0.954} Bo^{0.1054}}{p^{0.355} N^{0.4779}} \\ & + 0.3744 \frac{Sha^{1.411} N^{0.4265}}{Me^{0.1342} W^{0.4096} Bo^{0.5967}} \\ & - 0.5828 \frac{Me^{0.06394} Sha^{0.9849}}{Bo^{0.3928} p^{0.1978} N^{0.1355}} \end{aligned}$$

### 5.1.2. Macrofauna

$$\begin{aligned}
 EKR_{mac} = & + 0.3023 \\
 & - 0.02713 \frac{Me^{1.286}Bo^{0.09394}p^{0.1039}N^{0.7029}}{W^{0.9165}Sha^{0.4404}} \\
 & + 0.0004906 \frac{Me^{4.988}W^{1.664}N^{0.985}}{Sha^{0.5075}Bo^{0.4713}p^{0.02008}} \\
 & + 0.0297 \frac{Me^{0.9018}N^{0.4201}}{W^{2.565}p^{0.1767}} \\
 & - 0.0009343 \frac{Me^{4.319}W^{2.198}N^{0.9331}}{Sha^{0.2271}Bo^{0.4613}p^{0.03485}} \\
 & + 0.001796 \frac{Me^{2.804}W^{2.451}Sha^{0.3701}N^{0.7495}}{Bo^{0.3993}p^{0.06212}}
 \end{aligned}$$

### 5.1.3. Vissen

$$\begin{aligned}
 EKR_{vis} = & - 2.343 \\
 & + 1.708e - 06 \frac{Me^{0.3903}W^{9.855}Sha^{1.103}}{Bo^{0.06281}p^{0.1148}N^{0.1656}} \\
 & - 3.482e + 04 \frac{Me^{3.155}p^{3.135}}{W^{2.051}Sha^{0.5729}Bo^{0.5776}N^{5.353}} \\
 & + 2.707 \frac{N^{0.05422}}{W^{0.01214}Sha^{0.05657}Bo^{0.05668}p^{0.008254}} \\
 & - 0.35 \frac{p^{0.1612}N^{0.5204}}{Me^{0.09388}W^{0.1007}Sha^{0.7714}Bo^{0.6792}} \\
 & + 3.478e + 04 \frac{Me^{3.159}p^{3.135}}{W^{2.046}Sha^{0.583}Bo^{0.5789}N^{5.348}}
 \end{aligned}$$

## 5.2. Snelstromende beken

Tabel 5.2. Kwaliteit EKR-PUNN's voor Snel stromende wateren

EKR	Training			Validatie		
	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ
Waterflora	93 %	0.056	0.92	79 %	0.085	0.83
Macrofauna	71 %	0.096	0.79	49 %	0.13	0.50
Vissen	85 %	0.074	0.86	56%	0.11	0.65

### 5.2.1. Waterflora

$$EKR_{wat} = + 1.04$$

$$\begin{aligned}
 & - 0.006575 \frac{Me^{2.845}Bo^{0.8263}}{W^{0.9134}Sha^{0.45}p^{0.4899}N^{0.1681}} \\
 & - 0.004734 \frac{Me^{1.234}W^{3.061}Sha^{0.1024}p^{0.2299}N^{0.4883}}{Bo^{0.3875}} \\
 & - 0.8173 \frac{W^{0.5541}p^{0.1327}N^{0.2182}}{Me^{0.1205}Sha^{0.1557}Bo^{0.1768}} \\
 & + 0.09733 \frac{Me^{0.4355}W^{1.855}p^{0.2095}N^{0.4627}}{Sha^{0.1546}Bo^{0.4088}} \\
 & + 0.007813 \frac{Me^{2.441}Bo^{0.379}}{Sha^{0.02208}p^{0.3546}N^{0.1028}}
 \end{aligned}$$



### 5.2.2. Macrofauna

$$\begin{aligned}
 EKR_{mac} = & + 1.201 \\
 & - 0.8709 \frac{Sha^{0.1783} Bo^{0.185} p^{0.01652} N^{0.0631}}{Me^{0.03625} W^{0.6519}} \\
 & - 1.782 \frac{W^{0.482} p^{0.3233}}{Me^{1.58} Bo^{0.6253} N^{1.3}} \\
 & - 0.269 \frac{p^{1.023} N^{0.4555}}{W^{2.917} Bo^{1.875}} \\
 & + 0.009766 \frac{Me^{1.762} Sha^{2.743} p^{0.161}}{W^{2.331} Bo^{0.271}} \\
 & + 2.682 \frac{Bo^{0.3823} p^{0.1547}}{Me^{1.242} W^{2.423} Sha^{0.1768} N^{0.7289}}
 \end{aligned}$$

### 5.2.3. Vissen

$$\begin{aligned}
 EKR_{vis} = & + 0.1723 \\
 & - 12.74 \frac{Me^{0.7149} W^{0.4764} Bo^{0.1401} p^{1.457}}{Sha^{2.772} N^{2.358}} \\
 & + 9.132e - 06 \frac{Me^{2.752} W^{1.286} Sha^{2.784} Bo^{0.6975} N^{0.4009}}{p^{0.7415}} \\
 & + 0.02528 \frac{Me^{1.609} W^{1.562} Sha^{0.4866} p^{0.2667}}{Bo^{0.2167} N^{0.01705}} \\
 & - 0.0002856 \frac{Me^{0.5157} W^{0.3211} p^{0.3544} N^{2.203}}{Bo^{0.5299}} \\
 & - 0.0002362 Me^{2.617} W^{2.651} Sha^{1.861} Bo^{0.07423} p^{0.1513} N^{0.2499}
 \end{aligned}$$

### 5.3. Sloten

Tabel 5.3. Kwaliteit EKR-PUNN's voor Sloten

EKR	Training			Validatie		
	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ
Waterflora	83 %	0.071	0.85	62 %	0.11	0.45
Macrofauna	76 %	0.081	0.80	62 %	0.12	0.64
Vissen	88 %	0.062	0.88	82 %	0.085	0.60

#### 5.3.1. Waterflora

$$EKR_{wat} = + 0.7037$$

$$\begin{aligned}
 & - 2.486 \frac{p^{0.5752}}{Ba^{1.325}L^{1.653}N^{1.865}} \\
 & - 0.459 \frac{L^{0.8755}Ma^{0.4859}p^{0.1957}N^{0.0456}}{Ba^{0.5108}} \\
 & + 0.0899 \frac{L^{0.9383}Ma^{1.119}N^{0.2676}}{p^{0.1464}} \\
 & - 0.0106 \frac{Ba^{1.383}N^{1.447}}{L^{0.4674}Ma^{0.361}p^{0.6493}} \\
 & + 0.0004816 \frac{Ba^{1.61}N^{2.354}}{L^{0.3523}Ma^{0.3942}p^{1.105}}
 \end{aligned}$$

### 5.3.2. Macrofauna

$$\begin{aligned}
 EKR_{mac} = & + 0.1179 \\
 & + 0.332 \frac{Ba^{2.3} p^{0.05466} N^{0.6332}}{L^{1.896} Ma^{0.9973}} \\
 & - 0.07318 \frac{Ma^{1.999} N^{0.4631}}{L^{0.6417} p^{0.393}} \\
 & - 0.4008 \frac{Ba^{2.193} p^{0.1008} N^{0.5008}}{L^{1.476} Ma^{0.7052}} \\
 & + 0.472 \frac{Ba^{0.3267} Ma^{0.5804} N^{0.1033}}{p^{0.121}} \\
 & - 0.03882 \frac{Ba^{2.04} N^{0.9963}}{L^{2.296} Ma^{3.053} p^{0.1807}}
 \end{aligned}$$

### 5.3.3. Vissen

$$\begin{aligned}
 EKR_{vis} = & + 2.077 \\
 & + 0.1267 \frac{L^{1.628}}{Ma^{0.1376} p^{0.5208} N^{1.916}} \\
 & + 0.1579 \frac{Ba^{0.516} L^{0.8428} Ma^{1.378}}{p^{0.09409} N^{0.5472}} \\
 & - 1.165 \frac{L^{0.2079} Ma^{0.5314} p^{0.06798}}{N^{0.05838}} \\
 & - 0.2143 \frac{L^{1.128} Ma^{0.5007}}{p^{0.514} N^{1.444}} \\
 & - 0.6003 \frac{p^{0.05727} N^{0.1587}}{L^{0.3568} Ma^{1.005}}
 \end{aligned}$$

## 5.4. Kanalen

Tabel 5.4. Kwaliteit EKR-PUNN's voor Kanalen

EKR	Training			Validatie		
	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ
Fytoplankton	80 %	0.075	0.83	67 %	0.12	0.61
Waterflora	73 %	0.083	0.73	55 %	0.12	-0.25
Macrofauna	75 %	0.082	0.80	57 %	0.11	0.58
Vissen	85 %	0.074	0.84	64 %	0.16	0.23

### 5.4.1. Fytoplankton

$$EKR_{fyt} = - 4.338$$

$$+ 5.366 \frac{Ba^{0.1361} p^{0.2965} N^{0.5679}}{L^{0.1727} Ma^{4.778} Shi^{1.368}}$$

$$+ 0.03225 \frac{Ba^{0.8327} L^{0.553} N^{1.992}}{Ma^{0.9579} Shi^{1.808} p^{0.1384}}$$

$$- 1.159 \frac{L^{0.6867} Shi^{0.4214} p^{0.3205}}{Ba^{0.1321} Ma^{2.254} N^{2.7}}$$

$$- 3.929 \frac{Ba^{0.2183} p^{0.3011} N^{0.7448}}{L^{0.08607} Ma^{4.694} Shi^{1.441}}$$

$$+ 4.774 \frac{L^{0.01088} Ma^{0.0723} Shi^{0.09319}}{Ba^{0.015} p^{0.01008} N^{0.1195}}$$

#### 5.4.2. Waterflora

$$\begin{aligned}
 EKR_{\text{wat}} = & - 0.1816 \\
 & - 0.09009 \frac{L^{0.03809} Ma^{0.552} Shi^{1.584} N^{0.3736}}{Ba^{0.173} p^{0.8546}} \\
 & + 0.0115 \frac{Ma^{0.7021} Shi^{3.826} N^{0.3243}}{Ba^{0.2283} L^{0.06152} p^{0.9265}} \\
 & - 0.4845 \frac{Ba^{0.5994} L^{1.514} Shi^{2.54}}{Ma^{4.384} p^{0.3581} N^{0.3266}} \\
 & + 0.5273 \frac{Ba^{0.5809} L^{1.434} Shi^{2.513}}{Ma^{4.353} p^{0.3567} N^{0.3064}} \\
 & + 0.2881 \frac{Ba^{0.1096} L^{0.2304} Ma^{0.6365} N^{0.1896}}{p^{0.4401}}
 \end{aligned}$$

#### 5.4.3. Macrofauna

$$\begin{aligned}
 EKR_{\text{mac}} = & + 0.5841 \\
 & + 0.7062 \frac{L^{0.3393} Ma^{0.1273} Shi^{0.8704} p^{0.1316} N^{0.7548}}{Ba^{1.546}} \\
 & - 0.5543 \frac{L^{0.1811} Shi^{1.045} N^{0.6433}}{Ba^{2.793} Ma^{0.233}} \\
 & + 0.04944 \frac{Ba^{1.617} L^{1.464} p^{0.3261} N^{1.309}}{Ma^{1.169} Shi^{0.2929}} \\
 & - 0.4024 Ba^{0.8763} L^{0.7016} Ma^{0.09325} Shi^{0.2942} p^{0.3451} N^{0.9141} \\
 & + 0.07218 Ba^{2.257} L^{0.4738} Ma^{0.9401} Shi^{0.6442} p^{0.4805} N^{0.6069}
 \end{aligned}$$

#### 5.4.4. Vissen

$$\begin{aligned}
 EKR_{vis} = & + 0.2129 \\
 & + 23.96 \frac{1}{Ba^{0.7488}L^{1.138}Ma^{3.491}Shi^{0.0778}p^{0.5051}N^{1.132}} \\
 & - 8.797 \frac{Shi^{0.2153}}{Ba^{0.3444}L^{1.119}Ma^{2.304}p^{0.4797}N^{1.362}} \\
 & + 0.0005088 \frac{Ba^{2.426}L^{4.095}N^{0.6008}}{Shi^{2.705}p^{0.2284}} \\
 & + 0.7051 \frac{Ba^{0.3499}Shi^{0.95}}{L^{0.5122}Ma^{0.6306}p^{0.244}N^{0.8308}} \\
 & - 14.88 \frac{1}{Ba^{0.9036}L^{1.108}Ma^{4.363}Shi^{0.1465}p^{0.4986}N^{0.9547}}
 \end{aligned}$$

## 5.5. Ondiepe meren

Tabel 5.5. Kwaliteit EKR-PUNN's voor Ondiepe meren

EKR	Training			Validatie		
	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ
Fytoplankton	72 %	0.098	0.86	71 %	0.13	0.67
Waterflora	81 %	0.077	0.86	73 %	0.10	0.73
Macrofauna	81 %	0.077	0.78	66 %	0.11	0.45
Vissen	82 %	0.075	0.86	61 %	0.13	0.39

### 5.5.1. Fytoplankton

$$\begin{aligned}
 EKR_{fyt} = & - 1.916 \\
 & - 0.2929 \frac{1}{L^{1.445} P^{0.5813} N^{0.5861}} \\
 & + 7.34 \frac{Ba^{1.011} P^{0.9054}}{L^{0.9239} N^{0.6413}} \\
 & - 7.264 \frac{Ba^{1.462} P^{0.9013}}{L^{1.363} N^{0.8006}} \\
 & + 0.07404 \frac{L^{1.301} N^{0.5998}}{Ba^{1.05} P^{0.6038}} \\
 & + 2.901 \frac{Ba^{0.4465}}{L^{0.7139} P^{0.04095} N^{0.3577}}
 \end{aligned}$$

### 5.5.2. Waterflora

$$\begin{aligned}EKR_{\text{wat}} = & + 3.983 \\ & - 0.0007194 \frac{Ba^{2.08}}{L^{1.855}p^{1.861}N^{0.3484}} \\ & - 3.379 N^{0.05849} \\ & - 253.9 \frac{p^{0.8062}}{Ba^{1.666}L^{2.301}N^{1.714}} \\ & + 261.1 \frac{p^{0.8216}}{Ba^{1.711}L^{2.392}N^{1.728}} \\ & + 0.0009796 \frac{Ba^{2.257}}{L^{0.9774}p^{1.571}}\end{aligned}$$

### 5.5.3. Macrofauna

$$\begin{aligned}EKR_{\text{mac}} = & + 0.623 \\ & + 18.71 \frac{L^{0.3531}p^{0.3522}}{Ba^{1.894}N^{0.1975}} \\ & + 7.48e - 23 \frac{L^{16.28}N^{12.63}}{p^{6.6}} \\ & + 0.0003872 \frac{Ba^{3.552}L^{2.456}}{N^{1.215}} \\ & - 7.115e - 07 \frac{N^{5.248}}{Ba^{2.452}p^{2.658}} \\ & - 18.94 \frac{L^{0.348}p^{0.3516}}{Ba^{1.821}N^{0.1879}}\end{aligned}$$



#### 5.5.4. Vissen

$$\begin{aligned}
 EKR_{fyt} = & - 4.696 \\
 & + 1.203e - 06 \frac{Ba^{2.566}N^{5.648}}{L^{3.189}p^{3.181}} \\
 & - 1.447e - 06 \frac{Ba^{2.576}N^{5.647}}{L^{3.461}p^{3.182}} \\
 & + 4.891 \frac{1}{Ba^{0.04881}L^{0.004355}p^{0.0109}N^{0.09368}} \\
 & + 0.2184 \frac{Ba^{0.4292}N^{0.6222}}{p^{0.1775}} \\
 & + 0.05797 \frac{L^{5.449}p^{2.565}}{N^{3.996}} \\
 EKR_{vis} = & + 4.262 \\
 & - 0.9133 \frac{L^{1.082}N^{0.2214}}{Ba^{0.7791}p^{0.3544}} \\
 & - 0.001381 \frac{L^{7.71}}{Ba^{3.489}N^{0.7154}} \\
 & - 7.209 \frac{Ba^{0.8553}p^{0.403}}{L^{0.9537}N^{0.03375}} \\
 & + 0.05943 \frac{L^{2.636}N^{0.4392}}{Ba^{1.408}p^{0.667}} \\
 & + 3.883 \frac{Ba^{1.358}p^{0.614}}{L^{1.437}}
 \end{aligned}$$

## 5.6. Diepen meren

Tabel 5.6. Kwaliteit EKR-PUNN's voor Diepe meren

EKR	Training			Validatie		
	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ
Fytoplankton	67 %	0.10	0.86	35 %	0.16	0.43
Waterflora	96 %	0.049	0.91	65 %	0.12	0.50
Macrofauna	91 %	0.053	0.90	77 %	0.098	0.49
Vissen	88 %	0.068	0.88	69 %	0.12	-0.52

### 5.6.1. Fytoplankton

$$\begin{aligned}
 EKR_{fyt} = & - 4.696 \\
 & + 1.203e - 06 \frac{Ba^{2.566}N^{5.648}}{L^{3.189}p^{3.181}} \\
 & - 1.447e - 06 \frac{Ba^{2.576}N^{5.647}}{L^{3.461}p^{3.182}} \\
 & + 4.891 \frac{1}{Ba^{0.04881}L^{0.004355}p^{0.0109}N^{0.09368}} \\
 & + 0.2184 \frac{Ba^{0.4292}N^{0.6222}}{p^{0.1775}} \\
 & + 0.05797 \frac{L^{5.449}p^{2.565}}{N^{3.996}} \\
 EKR_{wat} = & - 0.2125 \\
 & - 0.2268 \frac{Ba^{0.7976}N^{0.9141}}{L^{1.794}p^{0.4869}} \\
 & + 0.0001172 \frac{Ba^{2.703}L^{5.46}N^{1.296}}{p^{0.4554}} \\
 & - 2.338e - 05 \frac{Ba^{2.808}L^{6.572}N^{1.633}}{p^{0.5144}} \\
 & + 0.5787 \frac{1}{N^{0.1182}} \\
 & + 0.1868 \frac{Ba^{0.8596}N^{0.961}}{L^{1.884}p^{0.5424}}
 \end{aligned}$$

### 5.6.2. Waterflora

$$\begin{aligned} EKR_{\text{wat}} = & - 0.2125 \\ & - 0.2268 \frac{Ba^{0.7976} N^{0.9141}}{L^{1.794} p^{0.4869}} \\ & + 0.0001172 \frac{Ba^{2.703} L^{5.46} N^{1.296}}{p^{0.4554}} \\ & - 2.338e - 05 \frac{Ba^{2.808} L^{6.572} N^{1.633}}{p^{0.5144}} \\ & + 0.5787 \frac{1}{N^{0.1182}} \\ & + 0.1868 \frac{Ba^{0.8596} N^{0.961}}{L^{1.884} p^{0.5424}} \end{aligned}$$

### 5.6.3. Macrofauna

$$\begin{aligned} EKR_{\text{mac}} = & + 0.4803 \\ & - 0.01882 \frac{Ba^{1.354} p^{0.1775} N^{1.463}}{L^{1.202}} \\ & - 0.435 \frac{Ba^{0.1796} L^{2.609} p^{0.9511}}{N^{0.3058}} \\ & + 0.3439 \frac{L^{3.272} p^{1.205}}{Ba^{0.09047} N^{0.6491}} \\ & + 0.01046 Ba^{1.932} L^{0.9247} p^{0.7004} N^{1.342} \\ & + 0.0144 Ba^{1.87} L^{1.529} p^{0.03375} \end{aligned}$$

#### 5.6.4. Vissen

$$\begin{aligned}
 EKR_{fyt} = & - 1.534 \\
 & + 112.2 \frac{Ba^{0.3899} L^{0.9984} Ma^{0.8892} Co^{0.5936} p^{0.8569}}{Cl^{0.6677} N^{1.281}} \\
 & + 37.27 \frac{Ba^{0.7275} L^{1.994} Co^{1.862} p^{1.088}}{Ma^{1.332} Cl^{1.124}} \\
 & - 367.1 \frac{Ba^{0.2929} L^{1.71} Ma^{0.7946} Co^{1.63} p^{1.028}}{Cl^{0.9589} N^{1.512}} \\
 & + 2.785 \frac{L^{0.22} Co^{0.7224} p^{0.01066}}{Ma^{0.1258} Cl^{0.1557} N^{0.2826}} \\
 EKR_{vis} = & + 0.03832 \frac{Cl^{0.4257} N^{0.2257}}{Ba^{0.03384} L^{0.5058} Ma^{0.1322} Co^{0.6732} p^{0.305}} \\
 & + 0.6018 \\
 & - 0.1835 L^{0.6057} p^{0.761} \\
 & - 1.258 \frac{1}{Ba^{0.6646} L^{1.119} p^{0.317} N^{0.4259}} \\
 & + 0.002372 \frac{Ba^{1.775} L^{1.93}}{p^{0.191} N^{1.644}} \\
 & - 0.312 \frac{1}{Ba^{0.2228} L^{1.868} p^{0.7507} N^{1.127}} \\
 & + 1.048 \frac{1}{Ba^{0.4916} L^{1.603} p^{0.5949} N^{0.7788}}
 \end{aligned}$$

## 5.7. Zwak brakke wateren

Tabel 5.7. Kwaliteit EKR-PUNN's voor Zwak brakke wateren

EKR	Training			Validatie		
	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ
Fytoplankton	69 %	0.11	0.76	55 %	0.15	0.31
Waterflora	81 %	0.077	0.84	60 %	0.12	0.32
Macrofauna	78 %	0.081	0.69	57 %	0.16	0.08
Vissen	88 %	0.069	0.82	71 %	0.11	0.18

### 5.7.1. Fytoplankton

$$\begin{aligned}
 EKR_{fyt} = & - 1.534 \\
 & + 112.2 \frac{Ba^{0.3899}L^{0.9984}Ma^{0.8892}Co^{0.5936}P^{0.8569}}{Cl^{0.6677}N^{1.281}} \\
 & + 37.27 \frac{Ba^{0.7275}L^{1.994}Co^{1.862}P^{1.088}}{Ma^{1.332}Cl^{1.124}} \\
 & - 367.1 \frac{Ba^{0.2929}L^{1.71}Ma^{0.7946}Co^{1.63}P^{1.028}}{Cl^{0.9589}N^{1.512}} \\
 & + 2.785 \frac{L^{0.22}Co^{0.7224}P^{0.01066}}{Ma^{0.1258}Cl^{0.1557}N^{0.2826}} \\
 & + 0.03832 \frac{Cl^{0.4257}N^{0.2257}}{Ba^{0.03384}L^{0.5058}Ma^{0.1322}Co^{0.6732}P^{0.305}}
 \end{aligned}$$

### 5.7.2. Waterflora

$$\begin{aligned}
 EKR_{\text{wat}} = & - 0.7148 \\
 & - 0.0001089 \frac{Ma^{2.963} Co^{0.8083} Cl^{1.024} N^{0.003273}}{Ba^{1.374} L^{1.15} P^{0.9049}} \\
 & + 0.1995 \frac{Ba^{0.3897} Co^{0.3947} Cl^{0.05328} P^{0.1313}}{L^{0.05921} Ma^{1.999} N^{0.02467}} \\
 & + 0.01596 \frac{Ma^{1.616} Co^{0.3797} Cl^{0.4877} N^{0.004975}}{Ba^{0.3987} L^{0.5395} P^{0.4892}} \\
 & + 3.412e - 06 \frac{L^{0.4883} Co^{0.467} Cl^{1.091}}{Ba^{0.7316} P^{1.202} N^{0.807}} \\
 & + 3.884 \frac{L^{0.7516} Ma^{0.8667} P^{0.3131}}{Ba^{0.2409} Co^{0.2576} Cl^{0.3934} N^{0.3749}}
 \end{aligned}$$

### 5.7.3. Macrofauna

$$\begin{aligned}
 EKR_{\text{mac}} = & + 0.2876 \\
 & + 0.0001142 \frac{Co^{0.2696} Cl^{1.265} P^{1.309}}{Ba^{1.74} Ma^{1.021} N^{1.125}} \\
 & - 8.12e - 05 \frac{Ma^{0.1667} Co^{0.449} Cl^{1.232} P^{0.9827}}{Ba^{1.162} L^{0.8105} N^{0.3934}} \\
 & - 5.173e - 06 \frac{Ba^{1.723} Ma^{0.7397} Co^{0.2013} Cl^{0.9837} N^{0.7883}}{L^{1.075} P^{0.9749}} \\
 & + 0.0005651 \frac{Ma^{0.5048} Co^{0.03209} Cl^{0.8089} P^{0.1691} N^{0.3502}}{Ba^{0.1458} L^{1.291}} \\
 & + 0.0005138 \frac{Ba^{0.7888} L^{0.3635} Ma^{0.4711} Co^{0.273} Cl^{0.5982} N^{0.1452}}{P^{0.4862}}
 \end{aligned}$$

5.7.4. Vissen

$$\begin{aligned}
 EKR_{fyt} = & - 0.5267 \\
 & + 85.48 \frac{Ba^{0.9021}Co^{3.524}p^{2.252}N^{0.101}}{L^{0.5929}Ma^{3.089}Cl^{1.302}} \\
 & - 0.03369 \frac{Ba^{4.732}L^{1.624}p^{0.2749}}{Ma^{3.319}Co^{0.2961}Cl^{0.2392}N^{0.316}} \\
 & - 15.17 \frac{Ba^{1.757}p^{0.7635}}{L^{0.9482}Ma^{2.36}Co^{0.5989}Cl^{0.5336}} \\
 & + 4.123 \frac{Ba^{0.8535}}{L^{0.1999}Ma^{0.8738}Co^{0.02948}Cl^{0.09829}p^{0.03341}N^{0.1684}} \\
 & - 4.212 \frac{Ba^{1.639}}{L^{0.8311}Ma^{1.852}Cl^{0.2395}p^{0.129}N^{0.2666}} \\
 EKR_{vis} = & + 3.074 \\
 & - 3.58 \frac{Ba^{0.1428}L^{0.06882}Ma^{0.3757}Co^{0.1533}}{Cl^{0.04169}N^{0.02098}} \\
 & - 0.08771 \frac{N^{0.6527}}{Ba^{2.755}L^{2.568}Ma^{3.973}} \\
 & - 0.00203 \frac{L^{2.842}Ma^{3.667}Co^{1.631}Cl^{0.2787}p^{0.17}}{Ba^{1.739}N^{0.4888}} \\
 & - 0.00317 \frac{Cl^{0.7291}}{Ba^{0.4984}Ma^{0.8996}Co^{1.304}N^{0.4026}} \\
 & + 0.4067 \frac{Ba^{0.439}L^{0.3637}Ma^{1.437}Co^{0.6093}}{N^{0.2137}}
 \end{aligned}$$

## 5.8. Brakke tot zoute wateren

Tabel 5.8. Kwaliteit EKR-PUNN's voor Brak tot zoute wateren

EKR	Training			Validatie		
	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ	perc. bin- nen 0.10	RMSE	coef of determ
Fytoplankton	72 %	0.098	0.70	54 %	0.16	0.38
Waterflora	90 %	0.059	0.87	70 %	0.11	0.46
Macrofauna	64 %	0.11	0.76	46 %	0.15	0.51
Vissen	85 %	0.066	0.81	76 %	0.10	0.30

### 5.8.1. Fytoplankton

$$\begin{aligned}
 EKR_{fyt} = & - 0.5267 \\
 & + 85.48 \frac{Ba^{0.9021}Co^{3.524}P^{2.252}N^{0.101}}{L^{0.5929}Ma^{3.089}Cl^{1.302}} \\
 & - 0.03369 \frac{Ba^{4.732}L^{1.624}P^{0.2749}}{Ma^{3.319}Co^{0.2961}Cl^{0.2392}N^{0.316}} \\
 & - 15.17 \frac{Ba^{1.757}P^{0.7635}}{L^{0.9482}Ma^{2.36}Co^{0.5989}Cl^{0.5336}} \\
 & + 4.123 \frac{Ba^{0.8535}}{L^{0.1999}Ma^{0.8738}Co^{0.02948}Cl^{0.09829}P^{0.03341}N^{0.1684}} \\
 & - 4.212 \frac{Ba^{1.639}}{L^{0.8311}Ma^{1.852}Cl^{0.2395}P^{0.129}N^{0.2666}}
 \end{aligned}$$



### 5.8.2. Waterflora

$$\begin{aligned}
 EKR_{\text{wat}} = & - 0.4477 \\
 & - 30.33 \frac{Ba^{0.4484} N^{0.198}}{L^{2.375} Ma^{5.482} Cl^{0.4911} p^{0.3084}} \\
 & + 6.794 \frac{Ba^{0.08209} Co^{0.6464} N^{0.09296}}{L^{0.9703} Ma^{2.561} Cl^{0.2667} p^{0.1805}} \\
 & + 0.08478 \frac{L^{0.345} Cl^{0.1869} p^{0.0291}}{Ba^{0.4047} Ma^{0.2957} Co^{1.069} N^{0.0172}} \\
 & + 0.0281 \frac{Ba^{1.366} L^{0.1195} Ma^{3.637} Co^{0.108} Cl^{0.1181} p^{0.3231}}{N^{0.4278}} \\
 & - 0.006369 \frac{Ba^{1.697} L^{0.1423} Ma^{4.694} Co^{0.0001195} Cl^{0.1391} p^{0.4753}}{N^{0.495}}
 \end{aligned}$$

### 5.8.3. Macrofauna

$$\begin{aligned}
 EKR_{\text{mac}} = & - 0.2169 \\
 & + 54.15 \frac{Ma^{0.3919} Co^{0.3721} p^{0.2111}}{Ba^{0.146} L^{0.3602} Cl^{0.3542} N^{0.9721}} \\
 & - 8360 \frac{Ma^{0.1793} Co^{1.521} p^{0.7147}}{Ba^{0.09677} L^{0.9427} Cl^{1.03} N^{2.185}} \\
 & + 7.72e + 08 \frac{p^{0.7405}}{Cl^{2.954}} \\
 & - 201.1 \frac{L^{0.1023} Ma^{0.121}}{Co^{1.194} Cl^{0.5949} p^{0.1605} N^{0.4255}} \\
 & + 0.06613 \frac{Ba^{0.606} L^{0.3982} Cl^{0.1971} N^{0.1554}}{Ma^{0.305} Co^{0.9317} p^{0.174}}
 \end{aligned}$$

#### 5.8.4. Vissen

$$\begin{aligned}
 EKR_{vis} = & + 1.005 \\
 & + 3.172e - 08 \frac{Ba^{0.6344}Ma^{2.353}Co^{2.94}Cl^{1.983}N^{0.006998}}{L^{2.314}P^{0.1933}} \\
 & - 9.16e - 09 \frac{Ba^{0.874}Ma^{2.614}Co^{3.115}Cl^{2.169}}{L^{2.556}P^{0.2045}N^{0.07429}} \\
 & - 0.7333 \frac{Cl^{0.02557}N^{0.1161}}{L^{0.3267}Ma^{0.4643}Co^{0.2133}P^{0.04342}} \\
 & - 4.942e - 07 \frac{Ma^{2.39}Co^{3.121}Cl^{1.239}P^{0.009539}N^{0.4978}}{Ba^{1.05}L^{0.3956}} \\
 & + 9.051e - 10 \frac{Ba^{1.08}Ma^{2.84}Co^{3.29}Cl^{2.324}}{L^{2.732}P^{0.209}N^{0.1453}}
 \end{aligned}$$

## 6. CONCLUSIES EN AANBEVELINGEN

In dit rapport is verslag gedaan van het opnieuw afleiden van ecologische modellen op basis van een uitgebreide en geactualiseerde ecologische dataset. Voor het afleiden van de modellen zijn wederom product unit neurale netwerken gebruikt. De modellen die daarvan het resultaat zijn, zijn in het vorige hoofdstuk gepresenteerd.

We hebben geen redenen om aanvullend gebruik te maken van ecologische kennis (expert-judgement) voor het afleiden van de PUNN's. Er zijn daarom geen aanvullende eisen gesteld aan de resultaten van de PUNN's.

### 6.1. Conclusies

Als de formules en de prestaties van de modellen worden vergeleken met die van de modellen die in de huidige KRW-verkenner worden gebruikt, kunnen de volgende conclusies worden getrokken:

#### **Prestaties vergelijkbaar met 2012, iets slechtere score op CoD**

De prestaties van de nieuw getrainde ecologische modellen zijn vergeleken met de prestaties van de modellen uit 2012. Bij die vergelijking valt het volgende op:

- de prestaties op de trainingset zijn iets beter voor alle prestatie-indicatoren;
- de prestaties op de validatieset wat betreft (pct<0,1) en RMSE zijn afwisselend iets beter of iets slechter, maar over de hele linie vergelijkbaar;
- de prestaties op de validatieset wat betreft CoD zijn over het algemeen wat minder goed.

De prestaties op de trainingset zijn vanzelfsprekend beter dan op de validatieset, maar de verhouding tussen de prestaties op beide sets komt in de meeste gevallen goed overeen met de prestaties van de voorgaande modellen met uitzondering van de CoD.

Daarbij moet worden opgemerkt dat de onderliggende datasets en ook de verdeling training/validatie niet gelijk zijn aan de dataset en verdeling uit 2012. In sommige gevallen presteert het nieuwe model op basis van de nieuwe dataset beter, in andere gevallen presteert het oorspronkelijke model op basis van de oorspronkelijke dataset beter. Doordat de dataset en de opdeling niet volledig identiek zijn, is de vergelijking niet helemaal zuiver.

#### **Twee opvallende afwijkingen**

Er zijn twee EKR-formules die er in negatieve zin uitspringen. Dat betreft de EKR Waterflora voor Kanalen en de EKR Vissen voor Diepe meren. In beide gevallen is "de coefficient of determination" voor de validatieset negatief. Dat betekent dat het model op de validatieset slechter presteert dan het gemiddelde van de validatieset. De CoD's van de vorige modellen waren ook laag, maar nog wel positief. Met de andere twee prestatie-indicatoren (pct<0,1 en RMSE) lijkt niet veel aan de hand.

De oorzaak ligt waarschijnlijk in de representativiteit van de validatieset voor de dataset als geheel. Bij de EKR Vissen voor Diepe Meren, zijn vrijwel alle extreme waarden onderdeel van de trainingset, terwijl de variatie van de EKR in de validatieset zich beperkt tot de range 0,15-0,52. Voor de EKR Waterflora bij Kanalen geldt iets soortgelijks. De range in de validatieset is daar beperkt tot 0,12-0,58. Het model is dus wel op de volledige range getraind, terwijl de evaluatie plaatsvindt op een heel beperkte range. Een controle laat zien dat bij de andere EKR's voor Kanalen en Diepe Meren de validatieset een veel groter deel van range (0-1) van de EKR-score bevat. Er lijkt dus sprake van een wat ongelukkige opdeling van de validatieset voor beide modellen, waardoor de CoD voor deze twee modellen niet representatief is voor de kwaliteit van het model. Een meer representatieve keuze voor de validatieset leidt waarschijnlijk tot een hogere CoD.

Op basis van deze constatering is het advies om beide modellen wel te gebruiken omdat ze over de hele range van verklarende variabelen en EKR-scores waarschijnlijk wel een acceptabele voorspelling geven die beter is dan het populatiegemiddelde.

### **Modellen minder goed te vereenvoudigen**

De modellen zijn over het algemeen groter geworden. De eerst verklaring is dat er gestart met een term meer (5 in plaats van 4 producten) ten opzichte van de modellen uit 2012. Maar bij het snoeiproces blijkt vereenvoudigen zonder kwaliteit te verliezen beperkt mogelijk. Dat heeft als nadeel dat de formules complexer en onoverzichtelijker zijn dan de formules van 2012. Een (fysische) interpretatie is daardoor moeilijker.

### **Andere keuzes in de opzet van de PUNN's**

De verschillen hebben voor een deel te maken met andere keuzes in de opzet, training en vereenvoudigen van de PUNN's. Er is een extra term toegevoegd waardoor de voorspellende kracht toeneemt, maar ook de kans op overfitting, zeker bij kleine datasets. Bij het trainen van de PUNN's is een methode ingebouwd die overfitting moet voorkomen, maar dat biedt geen volledige garantie. Het kan verklaren waarom de modellen iets minder goed presteren als het gaat om de CoD op de validatieset. Ook het snoeiproces is iets anders ingericht met als gevolg complexere modellen.

## **6.2. Aanbevelingen**

Op basis van bovenstaande conclusies hebben we de volgende aanbevelingen voor een eventuele volgende update van de ecologische modellen.

### **Controleer de opdeling van de datasets**

De datasets zijn klein. Een statisch zuivere, maar wel representatieve opdeling van de dataset in trainingset en validatieset is daarom van groot belang. Bij kleine datasets is de kans op een ongelukkige random selectie relatief groot. De verdeling moet derhalve getoetst worden. We bevelen aan om:

- de opdeling vooraf via random selectie uit te voeren;
- te controleren of de validatieset voldoende representatief is voor de dataset als geheel;
- zonodig een nieuwe random selectie uit te voeren.

### **Starten met een kleiner netwerk**

Bij de update van de ecologische modellen is gestart met een PUNN van vijf knopen (producten). De modellen in 2012 zijn afgeleid op basis van vier knopen. Achteraf gezien was het waarschijnlijk verstandiger geweest met hetzelfde aantal knopen te starten. Dat zorgt ervoor dat de kans op overfitting verder wordt gereduceerd en meer generieke structuren worden gevangen in het model. Vanwege de tijd als beperkende factor was het nu niet mogelijk om modellen af te leiden op basis van 4 knopen. Het is overigens niet op voorhand zeker dat minder knopen ook tot betere prestaties op de validatieset leiden.





## 7. LITERATUUR

H. Visser, 2013. De ecologische kwaliteit van Nederlands oppervlaktewater: een vergelijking van drie modelleringstechnieken. PBL-Notitie 500208002.

Witteveen+Bos, 2012. Voorspellen ecologische kwaliteits ratio op basis van product unit neural networks. Rapport, ref STO179-1/smid3/001.

Witteveen+Bos, 2013. Beschrijving formules voor het voorspellen van de ecologische kwaliteits ratio. Notitie, ref STO179-2/zutd/002.

Metamodel PCLake: <http://themasites.pbl.nl/modellen/pclake/>

