

Update ecologische kennisregels KRW-Verkenner



Update ecologische kennisregels KRW-Verkenner

Auteur(s)

A. van der Linden (Deltares)
J.C. van den Roovaart (Deltares)
N. Evers (Royal HaskoningDHV)
J. Rost (Royal HaskoningDHV)
H. Visser (PBL)
P. Vethman (PBL)
A.C. de Niet (Witteveen+Bos)
S. Nieuwhof (Witteveen+Bos)
R. Knobben (Royal HaskoningDHV)
A. Bontsma (Royal HaskoningDHV)
F. van Gaalen (PBL)

Deltares



Planbureau voor de Leefomgeving

Witteveen + Bos



Update ecologische kennisregels KRW-Verkenner




| | |
|-----------------------|--|
| Oprichtgever | Ministerie van Infrastructuur en Waterstaat |
| Contactpersoon | Annelotte van der Linden |
| Referenties | Linden, A, van der, J.C. van den Roovaart, N. Evers, J. Rost, H. Visser, P. Vethman, A.C. de Niet, S. Nieuwhof, R. Knobben, A. Bontsma en F. van Gaalen, (2021), Update ecologische kennisregels KRW-Verkenner. Deltares-rapport 11203728-008-BGS-0009 |
| Trefwoorden | Ecologische kennisregels, Kaderrichtlijn Water, random forest, neurale netwerken, regressiebomen, KRW-Verkenner, stuurvariabelen |

Documentgegevens

| | |
|----------------------|-----------------------|
| Versie | Definitief |
| Datum | 30-03-2021 |
| Projectnummer | 11203728-008 |
| Document ID | 11203728-008-BGS-0009 |
| Pagina's | 189 |
| Status | definitief |

Auteurs(s)

| | | |
|--|--|--|
| | | |
| | | |

| Doc. Versie | Auteur | Controle | Akkoord | Publicatie |
|-------------|--|--|---|------------|
| Definitief | Annelotte van der Linden  | Valesca Harezlac  | Rob Nieuwenhuis  | |
| | | | | |

Samenvatting

Deze rapportage geeft een overzicht van de update van de ecologische kennisregels in de Kaderrichtlijn Water-Verkenner (KRW-Verkenner) voor regionale wateren. De regionale ecologische kennisregels voorspellen de Ecologische KwaliteitsRatio (EKR score, tussen 0 = slecht en 1 = zeer goed) van vier biologische kwaliteitselementen (fytoplankton, overige waterflora, macrofauna en vis) op basis van abiotische karakteristieken van een waterlichaam.

Voor het afleiden van de nieuwe kennisregels is gebruik gemaakt van een verbeterde en aangevulde dataset ten opzichte van de voorgaande dataset uit 2015. De datasets bevatten relaties tussen EKR scores en verschillende chemische en hydromorfologische stuurvariabelen van een groot aantal waterlichamen. In de nieuwe dataset is actuele data toegevoegd en gebruik gemaakt van gedetailleerde data van waterbeheerders die gegevens beschikbaar hebben over delen van waterlichamen (trajecten). De EKR's zijn berekend met recent beschikbaar gekomen nieuwe KRW-maatlatten.

Er zijn drie nieuwe stuurvariabelen toegevoegd aan de dataset: ammonium, doorzicht en toxiciteit (uitgedrukt als msPAF). Daarnaast zijn twee nieuwe watertypen toegevoegd: de moerasbeken en de doorstroommoerassen.

Op basis van de verbeterde en uitgebreide dataset zijn door Royal HaskoningDHV, Witteveen+Bos en het Planbureau voor de Leefomgeving (PBL) nieuwe ecologische kennisregels afgeleid met behulp van drie methodes.

Op basis van de verbeterde en uitgebreide dataset zijn er drie methodes gebruikt om ecologische kennisregels af te leiden: random forest (door Royal HaskoningDHV), neuraal netwerk met PUNN-methode (door Witteveen+Bos, eerder toegepast in 2015) en regressiebomen (door het Planbureau voor de Leefomgeving, eerder toegepast in 2015). De methodes zijn onderling vergeleken wat betreft eigenschappen en voorspel-performance. Random forest laat op basis van deze vergelijking de beste performance zien, gevolgd door de PUNNs en daarna de regressiebomen.

De drie methodes verschillen in de mate van biologische interpretatie. De regressiebomen tonen de helderste interpretatiemogelijkheden. Uit de opbouw van regressiebomen is direct af te lezen welke stuurvariabelen een rol spelen in de bepaling van de EKR scores en hoe groot de bijdrage van deze stuurvariabelen is. Ook voor de PUNNs is zichtbaar welke stuurvariabelen een rol spelen maar de bijdrage is niet direct af te lezen. Het is wel mogelijk om deze informatie te bepalen. Bij de random forest methode is een extra bewerking nodig om inzichtelijk te krijgen welke stuurvariabelen van belang zijn en welke van meeste invloed zijn op de juistheid van de voorspelling van de EKR scores.

De nieuwe random forest methode is al toegepast in de Nationale Analyse Waterkwaliteit (Galen et al., 2020), met uitzondering van de doorstroommoerassen en de moerasbeken. Alle drie de ecologische modellen zijn ingebouwd in de nieuwe KRW-verkenner versie 2.4.1, die in maart 2021 beschikbaar wordt gesteld via de website van de KRW-Verkenner: www.krwwerkenner.nl.

Inhoud

| | | |
|----------|--|-----------|
| | Samenvatting | 4 |
| 1 | Inleiding | 8 |
| 1.1 | Aanleiding | 8 |
| 1.2 | Aanpak | 9 |
| 1.3 | Leeswijzer | 9 |
| 2 | Dataset | 10 |
| 2.1 | Opbouw dataset | 10 |
| 2.2 | Watertypeclusters | 10 |
| 2.2.1 | Nieuw: doorstroommoerassen en moerasbeken | 10 |
| 2.2.2 | Overzicht van watertypeclusters | 11 |
| 2.3 | Stuurvariabelen | 11 |
| 2.3.1 | Ammonium | 12 |
| 2.3.2 | Doorzicht | 13 |
| 2.3.3 | Toxiciteit | 13 |
| 2.4 | Samenstelling dataset | 14 |
| 2.4.1 | Datatypes en -bronnen van de dataset | 14 |
| 2.4.2 | Toetsing nieuwe KRW-maatlatten | 17 |
| 2.4.3 | Selectie van records in dataset | 19 |
| 2.4.4 | Dataset doorstroommoerassen en moerasbeken | 20 |
| 2.4.5 | Overzicht van de resulterende dataset | 20 |
| 2.4.6 | Opdeling dataset voor training en validatie | 23 |
| 3 | Beschrijving toegepaste rekenmethodes | 25 |
| 3.1 | Product Unit Neuraal Netwerk | 25 |
| 3.1.1 | Theorie | 25 |
| 3.1.2 | Opzetten PUNNs | 26 |
| 3.2 | Random forest | 28 |
| 3.2.1 | Theorie | 28 |
| 3.2.2 | Toepassing | 28 |
| 3.3 | Regressiebomen | 28 |
| 3.3.1 | Theorie | 28 |
| 3.3.2 | Toepassing | 29 |
| 4 | Resultaten toegepaste rekenmethodes | 30 |
| 4.1 | Product Unit Neuraal Netwerk | 31 |
| 4.2 | Random forest | 35 |
| 4.3 | Regressiebomen | 41 |
| 5 | Vergelijking toegepaste rekenmethodes | 43 |
| 5.1 | Voorspel-performance | 43 |
| 5.2 | Biologische interpretatie | 45 |
| 6 | Implementatie in KRW-Verkenner | 48 |
| 7 | Conclusies en aanbevelingen | 49 |
| 7.1 | Conclusies | 49 |
| 7.2 | Aanbevelingen | 49 |

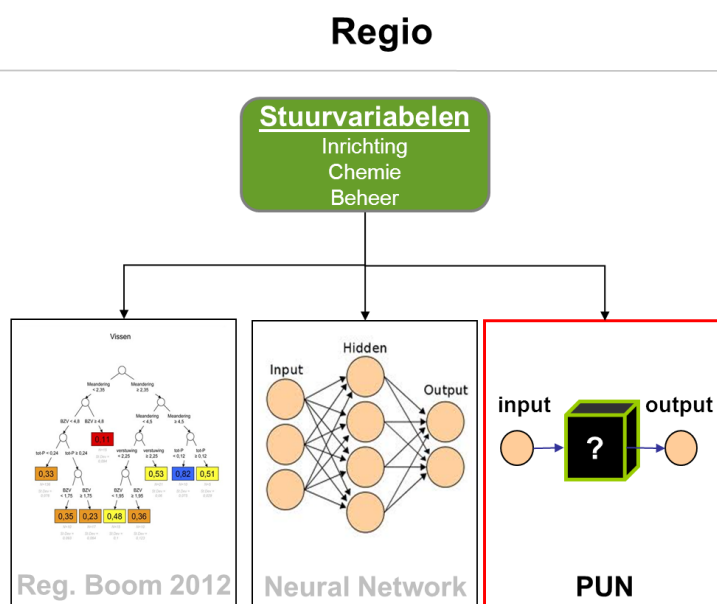
| | | |
|----------|--|------------|
| 8 | Lijst met afkortingen | 51 |
| 9 | Literatuur | 52 |
| | Bijlagen | 54 |
| A | Aanlevering dataset voor de Nationale Analyse Waterkwaliteit | 55 |
| A.1 | Data aanlevering | 55 |
| A.2 | Volledigheid van de dataset | 56 |
| B | Uitgebreide omschrijving van toetsing van nieuwe KRW-maatlatten | 57 |
| C | Formules van de PUNNS | 59 |
| C.1 | Langzaam stromende beken | 59 |
| C.2 | Snel stromende wateren | 59 |
| C.3 | Sloten | 60 |
| C.4 | Kanalen | 61 |
| C.5 | Ondiepe meren | 62 |
| C.6 | Diepe meren | 63 |
| C.7 | Zwak brakke wateren | 64 |
| C.8 | Brakke tot zoute wateren | 65 |
| C.9 | Moerasbeken | 66 |
| D | Prestatieplots PUNNS | 68 |
| D.1 | Langzaam stromende beken | 68 |
| D.2 | Snel stromende wateren | 70 |
| D.3 | Sloten | 71 |
| D.4 | Kanalen | 73 |
| D.5 | Ondiepe meren | 75 |
| D.6 | Diepe meren | 77 |
| D.7 | Zwak brakke wateren | 79 |
| D.8 | Brakke tot zoute wateren | 81 |
| D.9 | Moerasbeken | 83 |
| E | Variable Importance PUNNS | 85 |
| E.1 | Langzaam stromende wateren | 85 |
| E.2 | Snel stromende wateren | 87 |
| E.3 | Sloten | 89 |
| E.4 | Kanalen | 90 |
| E.5 | Ondiepe meren | 92 |
| E.6 | Diepe meren | 94 |
| E.7 | Zwak brakke wateren | 96 |
| E.8 | Brakke tot zoute wateren | 98 |
| E.9 | Moerasbeken | 100 |
| F | Aanvullende resultaten random forest | 102 |
| G | Aanvullende resultaten regressiebomen | 120 |
| G.1 | Langzaam stromende wateren | 120 |
| G.2 | Snel stromende wateren | 126 |
| G.3 | Sloten | 132 |
| G.4 | Kanalen | 138 |
| G.5 | Ondiepe meren | 146 |
| G.6 | Diepe meren | 154 |

| | | |
|----------|--|------------|
| G.7 | Zwak brakke wateren | 163 |
| G.8 | Brak tot zoute wateren | 171 |
| G.9 | Moerasbeken | 179 |
| H | Voorspellingen voor de validatieperiode in detail | 188 |

1 Inleiding

1.1 Aanleiding

In 2012 hebben Royal HaskoningDHV, Witteveen+Bos en het Planbureau voor de Leefomgeving (PBL) in opdracht van de Stichting Toegepast Onderzoek Waterbeheer (STOWA) en Deltares ecologische rekenmethodes voor de regionale wateren ontwikkeld om op te nemen in de KRW-Verkenner. Deze rekenmethodes voorspellen de Ecologische KwaliteitsRatio (EKR) op basis van abiotische karakteristieken van een waterlichaam, hier stuurvariabelen genoemd. In de ecologische module van KRW-Verkenner versie 2.3 zijn deze drie rekenmethodes beschikbaar om toe te passen voor de regionale oppervlaktewateren (Figuur 1.1): regressiebomen (Visser en Wortelboer, 2013), neurale netwerken (Schomaker en Schipper, 2015) en Product Unit Neurale Netwerken, ook wel PUNNs genoemd (De Niet, 2015).



Figuur 1.1 Ecologische rekenmethodes voor regionale toepassingen, beschikbaar in de KRW-Verkenner versie 2.3. De PUNN methode is daarbij ingesteld als default methode.

De laatste jaren is via monitoring, met name ten behoeve van de uitvoering van de Kaderrichtlijn Water (KRW), veel nieuwe data beschikbaar gekomen. Naast de hoeveelheid data is ook de betrouwbaarheid van de data toegenomen, wat naar verwachting rekenmethodes op zou kunnen leveren met een hoger voorspellend vermogen. Daarnaast is er de wens om meer aan te sluiten bij de Ecologische Sleutelfactoren (ESF) methodiek die de laatste jaren door STOWA met verschillende partners is ontwikkeld. Door een aantal van de milieuvariabelen van de verschillende ESF's toe te voegen als extra stuurvariabelen in de ecologische kennisregels, kunnen we een stap maken in de richting van de vertaling van de ESF's naar EKR-scores. Deltares heeft daarom PBL, Royal HaskoningDHV en Witteveen+Bos verzocht om op basis van de verbeterde en uitgebreide dataset de ecologische rekenmethodes voor de KRW-Verkenner verder te ontwikkelen, te beschrijven en toe te passen.

In dit rapport worden de rekenmethodes die gebruikt zijn om nieuwe ecologische kennisregels te ontwikkelen beschreven. De nieuwe rekenmethodes worden ingebouwd in een nieuwe versie van de KRW-Verkenner (versie 2.4.1), die begin 2021 openbaar beschikbaar wordt gesteld via de website www.krwwerken.nl. De nieuwe rekenmethodes zijn, met uitzondering van de moerasbeken en de doorstroommoerassen, al gebruikt bij de uitvoering van de Nationale Analyse Waterkwaliteit (NAW) door PBL (Cleij et al., 2020; Gaalen et al., 2020; Gaalen en Osté, 2020; Loos et al., 2020). Gebruikers van de KRW-Verkenner kunnen, wanneer gewenst, de nieuwe rekenmethodes ook benutten voor regionale analyses.

1.2 Aanpak

De uitgebreide en verbeterde dataset met stuurvariabelen en EKR's van de waterlichamen is opgesplitst in twee sets om de kwaliteit van de modellen te beoordelen. Een trainingset (met 80% van de data), die gebruikt wordt voor de ontwikkeling van de rekenmethodes en een validatieset (met 20% van de data), waarmee wordt vastgesteld hoe de verschillende rekenmethodes presteren op nieuwe data. Om de rekenmethodes op een eerlijke wijze te beoordelen is de validatieset op geen enkele wijze betrokken geweest bij de totstandkoming van de rekenmethodes.

In dit rapport zijn de ontwikkeling en resultaten beschreven van de drie rekenmethodes:

- 1 Random forest (Royal HaskoningDHV);
- 2 Neuraal netwerk met PUNN-methode (Witteveen+Bos);
- 3 Regressiebomen (PBL).

1.3 Leeswijzer

Hoofdstuk 2: Beschrijving van de dataset die gebruikt is voor de ontwikkeling van de rekenmethodes.
Hoofdstuk 3: Uitleg over de drie rekenmethodes en hoe de rekenmethodes op basis van de dataset tot stand zijn gekomen.
Hoofdstuk 4: Beschrijving van de resultaten van de rekenmethodes.
Hoofdstuk 5: Evaluatie van de rekenmethodes aan de hand van de voorspel-performance en de biologische interpretatie.
Hoofdstuk 6: Implementatie van de drie rekenmethodes in de KRW-Verkenner.
Hoofdstuk 7: Conclusies en aanbevelingen naar aanleiding van de resultaten.

2 Dataset

Dit hoofdstuk beschrijft welke dataset gebruikt is voor de afleiding van de verbeterde en nieuwe rekenmethodes. De dataset van de laatste versie van de KRW-Verkenner (Schomaker en Schipper, 2015) is aangevuld met verschillende bronnen, zoals de KRW-toestandsbepaling 2018 en watersysteemanalyses van diverse waterschappen. Daarnaast zijn drie nieuwe stuurvariabelen toegevoegd en zijn, daar waar nodig, de nieuwste maatlatten doorgerekend (Van der Molen et al, 2019).

2.1 Opbouw dataset

Voor de afleiding van vernieuwde rekenmethodes is een uitgebalanceerde dataset met waarden van stuurvariabelen en Ecologische KwaliteitsRatio (EKR) scores gebruikt. De stuurvariabelen en EKR scores hebben betrekking op de individuele waterlichamen en betreffen de volgende ecologische kwaliteitselementen:

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

De EKR-scores hebben een waarde tussen 0 en 1 en worden bepaald met behulp van de KRW-maatlatten. De maatlatten voor sterk veranderde en kunstmatige wateren zijn opgedeeld in de volgende klassen: Slecht, Ontoereikend, Matig en Goed.

De stuurvariabelen bestaan uit hydromorfologische (bijvoorbeeld oeverinrichting en beschaduwing) en chemische (bijvoorbeeld totaal stikstof en chloride) parameters. Per watertype is bepaald welke stuurvariabelen mogelijk een invloed hebben op de toestand in het waterlichaam en daardoor de EKR beïnvloeden. De waardes voor deze stuurvariabelen zijn op verschillende wijze verzameld. Voor een deel van de stuurvariabelen zijn waardes uit de dataset in 2015 overgenomen, die gebruikt is als trainingset voor de rekenmethodes in de versie 2.3 van de KRW-Verkenner. Daarnaast zijn stuurvariabelen bepaald door de waterschappen op waterlichaamsniveau of op trajectniveau (delen van een waterlichaam). Als laatste zijn de waardes voor de nieuwe stuurvariabelen verzameld uit verschillende bronnen. De samenstelling en bronnen van de dataset worden nader toegelicht in Paragraaf 2.4.

2.2 Watertypeclusters

2.2.1 Nieuw: doorstroommoerassen en moerasbeken

De KRW-Verkenner maakt gebruik van watertypeclusters waarin waterlichamen op basis van het watertype bij elkaar worden geclusterd. Deze watertypen zijn vergelijkbaar in de bepaling van kwaliteitselementen en in de verklarende stuurvariabelen voor de EKR-score. De indeling in watertypeclusters is voor de nieuwe versie van de KRW-Verkenner (versie 2.4.1) aangevuld met twee nieuwe clusters: doorstroommoerassen (R19) en moerasbeken (R20). Voor deze twee watertypen zijn in 2018 maatlatten opgesteld en begin 2020 is één van deze twee watertypen toegekend aan ca. 40 waterlichamen.

Deze twee clusters omvatten veelal stromende wateren met zeer weinig beekdalverhang (voorheen watertype uit het cluster langzaam stromende wateren) of sloten met enige mate van stroming (watertype uit het cluster sloten). Omdat de maatlatten voor R19 en R20 dusdanig anders zijn dan de bestaande clusters ontstond hierdoor de noodzaak om de KRW-Verkenner uit te breiden wanneer men ook voor deze 40 waterlichamen correct wil kunnen rekenen.

De maatlatten van beide moerasbeektypen zijn gebaseerd op de bestaande langzaam stromende wateren (met name R4a en R5), met aanvulling van soorten uit de moeraszone. Daar is bij de opzet van de dataset voor de rekenmethodes gebruik van gemaakt (zie verderop in dit hoofdstuk). Omdat de maatlatten voor overige waterflora en vis voor R19 en R20 exact gelijk zijn, is er geen onderscheid gemaakt in de rekenmethodes voor deze twee kwaliteitselementen.

2.2.2 Overzicht van watertypeclusters

Voor de nieuwe versie van de KRW-Verkenner (versie 2.4.1) zijn de waterlichamen na de toevoeging van de twee nieuwe clusters onderverdeeld in tien watertypeclusters:

- 1 langzaam stromende beken (R4a/b, R5, R6 en R12);
- 2 snel stromende beken (R13, R14, R15, R17 en R18);
- 3 sloten (M1a/b, M2 en M8);
- 4 kanalen (M3, M4, M6a/b, M7a/b en M10) ;
- 5 ondiepe meren (M11, M12, M14, M22, M23, M25 en M27)
- 6 diepe meren (M16 en M20);
- 7 zwak brakke wateren (M30);
- 8 brakke tot zoute wateren (M31);
- 9 doorstroommoerassen (R19);
- 10 moerasbeken (R20).

2.3 Stuurvariabelen

Alle drie de rekenmethodes maken gebruik van dezelfde set stuurvariabelen (Tabel 2.1). Per watertypecluster is een deelselectie van de totale set aan stuurvariabelen van toepassing. Per watertypecluster worden (minimaal) 7 tot (maximaal) 10 stuurvariabelen gebruikt. De waarden voor stuurvariabelen zijn gebonden aan minima en maxima. Als stuurvariabelen buiten de aangegeven range vallen, zullen de rekenmethodes geen resultaat opleveren. Voor de hydromorfologische stuurvariabelen zijn de waarden opgedeeld in klassen. Voor deze stuurvariabelen geldt dat het mogelijk is om een waarde tussen de klassen op te geven, zolang de waarde binnen de minimale en maximale klasse valt. Zo is het dus mogelijk om voor een waterlichaam een waarde voor meandering van bijvoorbeeld 3,5 op te geven. Dit maakt het mogelijk om gedetailleerde informatie over de betreffende stuurvariabele op eenvoudige wijze aan te passen, evenredig met het aandeel oeverlengte, lengte of oppervlak waarop de maatregel wordt toegepast ten opzichte van de totale oeverlengte, lengte of oppervlak van het betreffende waterlichaam. De gebruikte ranges en klassen van stuurvariabelen worden omschreven in Tabel 2.2.

Ten opzichte van de eerdere versie van de KRW-Verkenner (versie 2.3) is een drietal stuurvariabelen toegevoegd aan de set van 12 stuurvariabelen:

- ammonium;
- doorzicht;
- toxiciteit (msPAF).

De aanvullende stuurvariabelen worden kort beschreven in Paragraaf 2.3.1 t/m 2.3.3.

Tabel 2.1 Selectie stuurvariabelen per watertypecluster. Doorzicht is alleen toegevoegd voor de watertypeclusters met KRW-normen voor deze stuurvariabele.

| Watertypecluster | Oeverinrichting | Peilbeheer | Onderhoud | Connectiviteit | Beschaduwning | Meandering | Scheepvaart | Verstuwing | Doorzicht | Chloride | Fosfor totaal | Stikstof totaal | Ammonium | Toxiciteit | BZV |
|--------------------------|-----------------|------------|-----------|----------------|---------------|------------|-------------|------------|-----------|----------|---------------|-----------------|----------|------------|-----|
| Langzaam stromende beken | | | | | x | x | | x | | | x | x | x | x | x |
| Snel stromende beken | | | | | x | x | | x | | | x | x | x | x | x |
| Sloten | x | x | x | | | | | | | | x | x | x | x | |
| Kanalen | x | x | x | | | | x | | x | | x | x | x | x | |
| Ondiepe meren | x | x | | | | | | | x | | x | x | x | x | |
| Diepe meren | x | x | | | | | | | x | | x | x | x | x | |
| Zwak brakke wateren | x | x | x | x | | | | | x | x | x | x | x | x | |
| Brakke tot zoute wateren | x | x | x | x | | | | | x | x | x | x | x | x | |
| Doorstroomoerassen | | | | | x | x | | x | | | x | x | x | x | x |
| Moerasbeken | | | | | x | x | | x | | | x | x | x | x | x |

Tabel 2.2 Definitie en classificering van de stuurvariabelen.

| Stuurvariabele | Klassen/Eenheid | Range (Min. – Max.) | Waarden en omschrijving |
|-----------------------------|-----------------------|---------------------|--|
| Oeverinrichting | 3 | 1 – 3 | 1 = beschoeid of steil en onbegroeid, 2 = riet/helofyten, 3 = moeras + riet/helofyten |
| Peilbeheer | 3 | 1 – 3 | 1 = tegennatuurlijk, 2 = stabiel, 3 = natuurlijk |
| Onderhoud | 2 | 1 – 2 | 1 = intensief, 2 = extensief |
| Connectiviteit | 3 | 1 – 3 | 1 = geïsoleerd, 2 = periodiek geïsoleerd, 3 = open verbinding |
| Meandering | 5 | 1 – 5 | 1= recht + normprofiel, 2= gestrekt + natuurlijk dwarsprofiel, 3 = zwak slingerend, 4 = slingerend, 5 = vrij meanderend |
| Beschaduwning (schaduw) | 3 | 1 – 3 | 1 = onbeschaduwd zonder ruigte op de oevers, 2 = gedeeltelijk beschaduwd of ruigte op de oever, 3 = grotendeels of geheel beschaduwd |
| Scheepvaart | 2 | 1 – 2 | 1 = intensief bevaren, 2 = niet of nauwelijks bevaren |
| Verstuwing (stuw) | 3 | 1 – 3 | 1 = sterk gestuwd zonder vistrappen, 2 = gestuwd met vistrappen, 3 = ongestuwd |
| Doorzicht | m | 0,05 – 5,00 | Zomergemiddelde |
| Chloride (Cl) | mg Cl/l | 100 – 15000 | Zomergemiddelde (april-september), maat voor verzoeting |
| Fosfor totaal (Ptot) | mg P/l | 0,01 – 10 | Zomergemiddelde (april-september), maat voor eutrofiëring |
| Stikstof totaal (Ntot) | mg N/l | 0,67 – 100 | Zomergemiddelde (april-september), maat voor eutrofiëring |
| Toxiciteit (msPAF) | - | 0,00 – 1,00 | Fractie |
| Ammonium (NH ₄) | mg NH ₄ /l | 0,02 – 48,80 | Maximale concentratie |
| BZV (BOD) | mg O ₂ /l | 0,5 – 20 | Zomergemiddelde (april-september), maat voor organische belasting |

2.3.1

Ammonium

Regionale analyses met de laatste versie van de KRW-Verkenner (versie 2.3) hebben laten zien dat het model voor veel waterlichamen goed toepasbaar is. Er waren echter ook uitzonderingen. Voor een deel van de waterlichamen werd bijvoorbeeld een consequente overschatting van de ecologische kwaliteit berekend (een te hoge EKR), waarvan de oorzaak niet achterhaald kon worden met de bestaande stuurvariabelen. In stromende wateren bleek dat ammonium een belangrijke ontbrekende stuurvariabele was.

Benedenstroomse rioolwaterzuiveringsinstallaties (RWZI's), grote stedelijke kernen met veel overstorten of industriële lozings hadden vaak een lagere gemeten EKR dan berekend werd met de beschikbare rekenmethodes. Ammonium bleek daar vaak, in de vorm van piekbelastingen, de probleemstof te zijn. Omdat ammonium in alle watertypen bekend staat als een veel voorkomende normoverschrijdende stof, is de maximale ammoniumconcentratie voor alle type clusters toegevoegd als stuurvariabele.

Doordat de maximale ammoniumconcentratie wordt gebruikt, is er maar beperkte overlap met de zomergemiddelde concentratie stikstof die al als stuurvariabele in de KRW-Verkenner zit. Dit is relevant voor de statistische modules waar collineariteit (lineair verband tussen twee verklarende variabelen) onwenselijk is. Daarnaast is niet gekozen om gebruik te maken van de gecorrigeerde normfractie (met pH en temperatuur) omdat deze minder gemakkelijk uit ruwe data is af te leiden en er nog veel discussie is over de norm die wordt gebruikt voor het bepalen van de normfractie.

2.3.2 Doorzicht

Doorzicht kan een knelpunt zijn voor de ecologische kwaliteit van een waterlichaam. Doorzicht is daarbij afwijkend ten opzichte van de andere stuurvariabelen. Aan de ene kant is doorzicht een *respons* variabele die met name gestuurd wordt door fytoplankton, zwevend stof en andere in het water opgeloste stoffen. Aan de andere kant is doorzicht wel een stuurvariabele omdat doorzicht het voorkomen van overige waterflora stuurt en daarmee indirect ook het voorkomen van macrofauna en vis, maar ook direct invloed kan hebben op het gedrag en voorkomen van vis.

In de laatste versie van de KRW-Verkenner (versie 2.3) ontbrak met name de relatie tussen doorzicht en fytoplankton en andere in water zwevende stoffen. Met het toevoegen van het zomergemiddelde doorzicht als stuurvariabele is deze omissie verholpen. Doorzicht is alleen toegevoegd voor die watertypen waarvoor er KRW-normen voor doorzicht zijn en niet voor de stromende wateren, doorstroommoerassen, moerasbeken en de sloten.

2.3.3 Toxiciteit

Een toenemende toxische druk kan gepaard gaan met toenemende negatieve ecologische effecten in watersystemen (zie onder meer Posthuma, 2016). Toxiciteit is een verzamelparameter. Metingen aan de concentraties van toxische stoffen kunnen met behulp van de 'msPAF calculator' worden omgerekend naar een score die de toxische druk van de gemeten stoffen uitdrukt in een lethale fractie van waterorganismen: de msPAF (meer-soorten Potentieel Aangetaste Fractie). Deze methodiek is ontwikkeld in het kader van de ecologische sleutelfactoren (ESF's) en biedt de kans om toxiciteit mee te nemen als stuurvariabele in de rekenmethodes. Het toevoegen van toxiciteit is wenselijke vanwege het verwachte belang als verklarende variabele. Binnen de update ecologische kennisregels KRW-Verkenner is de dataset met stuurvariabelen daarom aangevuld met data voor toxiciteit.

De waarde van de msPAF is uitgedrukt als fractie (percentage aangetaste waterorganismen) en kan variëren van 0 (geen aangetaste waterorganismen) tot 1 (100% van de waterorganismen is aangetast). De hoogste msPAF waarde in de dataset is 0.613 en betrof een watermonster dat was verontreinigd met dioxines.

In de notitie "Afleidingswaarden voor stuurvariabele Toxiciteit" staat in detail beschreven hoe de dataset van de stuurvariabele toxiciteit tot stand is gekomen en hoe de msPAF waarden zijn berekend (Fennema, 2018). Hieronder worden de gevolgde stappen in het kort beschreven.

Voor de stuurvariabele toxiciteit zijn gegevens verzameld op twee niveaus:

- Data van de waterlichamen (2012-2017): Dit zijn de toxiciteitsgegevens van alle verschillende waterlichamen in Nederland (InformatieHuis Water, IHW);

- Historische data (1980-2010) van individuele meetpunten van waterschappen: Deze gegevens zijn verzameld om de extremen (hele goede of hele slechte ecologische waterkwaliteit) in de dataset voor de afleiding van de rekenmethodes af te dekken. Recente meetdata heeft relatief veel punten in het 'middengebied' (ontoereikend tot goed) en relatief weinig gegevens in 'slecht' en 'zeer goed'.

De verzamelde de toxiciteitsgegevens zijn opgeschoond waarbij inconsistenties, zoals bijvoorbeeld: gewijzigde meetpunten, verschuivingen in meetpakketten, verschillende eenheden, zijn verwijderd. De uiteindelijke dataset bevat in totaal 5681 datarecords (meetpunt-jaar combinaties) voor de periode 1980-2017.

Daarnaast zijn er nog een aantal wijzigingen doorgevoerd ten opzichte van de standaard manier voor het berekenen van de msPAF-waarden:

- Ammonium is uit de datasets verwijderd, onder andere omdat deze in een andere, aparte stuurvariabele voor de rekenmethodes al is meegenomen;
- Sulfaat is voor de zoute en brakke wateren uit de datasets verwijderd. De toxiciteitscurve is voor sulfaat bepaald op basis van enkele zoetwatersoorten, dit is niet toepasbaar op zoute en brakke wateren;
- IJzer, mangaan en aluminium zijn uit de datasets verwijderd omdat met de beschikbare analysetechnieken geen betrouwbaar beeld van de opgeloste concentraties van deze stoffen wordt verkregen.

De dataset is vervolgens benut om de toxische druk per waterlichaam per jaar te kunnen berekenen. Er is gerekend met maximale concentraties op jaarbasis. Dat betekent dat er pieken die op verschillende momenten in het jaar optreden in één score zijn samengevat. De maximale concentraties per jaar zijn in de 'msPAF calculator' ingevoerd. In de uitvoer van de 'msPAF calculator' is een koppeling gemaakt tussen meetpunt en waterlichaam. Voor de hogere scores is een handmatige controle uitgevoerd op de oorzaken van de hoge score, zoals een check op eenheden en het juist hanteren van de rapportagegrenstekens.

Voor het gebruik van de rekenmethodes in de KRW-Verkenner is van belang dat de msPAF's op dezelfde wijze zijn afgeleid als beschreven in de notitie "Afleiden waarden voor stuurvariabele Toxiciteit" (Fennema, 2018).

2.4 Samenstelling dataset

2.4.1 Datatypen en -bronnen van de dataset

De dataset die gebruikt is voor de afleiding van de nieuwe rekenmethodes bevat relaties tussen EKR-scores en verschillende waterkwaliteit- en inrichtingsvariabelen, hierna genoemd stuurvariabelen, voor een groot aantal waterlichamen in Nederland. De dataset is onder te verdelen in subdatasets per combinatie van watertypecluster en kwaliteitselement. De dataset is een verzameling van verschillende type data uit een groot aantal bronnen. Voor transparantie is voor iedere datarecord de informatie over het type (de herkomst) en de bijbehorende bron opgeslagen.

Herkomst stuurvariabelen en EKR's

Er zijn vier verschillende type records:

- meetpunten;
- trajecten uit watersysteemanalyses;
- waterlichamen;
- defaults.

De default records zijn toegevoegd om niet (frequent) voorkomende waarden toe te voegen aan de dataset, zoals een EKR van 0.9. Deze default records zijn gebaseerd op de omschrijving van het referentietoestand en de bijpassende omgeving (Van der Molen et al, 2019).

Bronnen stuurvariabelen en EKR's

De nieuwe dataset, gebaseerd op de dataset die gebruikt is voor training in 2015 (trainingset 2015) , is uitgebreid met stuurvariabelen en EKR's uit meerdere (nieuwe) bronnen. Tabel 2.3 toont een overzicht van de benutte bronnen.

Voor de data uit trainingset 2015 zijn de bijbehorende bronnen overgenomen. De oorspronkelijke bronnen in trainingset 2015 maakte gebruik van de gegevens van het waterkwaliteitsportaal (WKP) voor:

- stroomgebiedsbeheerperiode 2 (SGBP2);
- KRW conforme toetsing meetpuntgegevens (KRW);
- expertoordelen (EO);
- defaults (DF).

Er komen combinaties van de eerste drie genoemde bronnen voor: een expertoordeel van een kwaliteitselement is bijvoorbeeld toegevoegd op basis van de beschikbare gegevens van andere kwaliteitselementen. In tegenstelling tot trainingset 2015, zijn in de nieuwe dataset in aanvulling op de bronnen van de EKR's nu ook de bronnen voor de stuurvariabelen opgenomen. De bron van de oude records is aangegeven met één code (T15) omdat de bronnen van deze stuurvariabelen niet meer te achterhalen zijn.

Naast de oorspronkelijke bronnen zijn er 5 nieuwe bronnen benut. Voor de nutriënten en EKR's op waterlichaamsniveau is data uit het waterkwaliteitsportaal (WKP) van juni 2018 en de update van oktober 2018 gebruikt (WKP18 en WKP18U, www.waterkwaliteitsportaal.nl). Vervolgens zijn de EKR's en stuurvariabelen toegevoegd uit de uitvraag van PBL aan de waterschappen ten behoeve van de NAW (zie Bijlage A). Hierbij zijn zowel EKR's op basis van de oude als de nieuwe maatlaten aangeleverd. Wanneer er geen data beschikbaar was voor scheepvaart, is een default waarde hiervoor bepaald op basis van het watertype (DS). Als laatste zijn records uit watersysteemanalyses van enkele waterschappen aangeleverd, deze records zijn meestal op trajectniveau (zie Tabel 2.3; WSA).

Tabel 2.3 Overzicht van de bronnen die gebruikt zijn om de herkomst van de stuurvariabelen en de EKR's aan te geven. Voor de data uit trainingset 2015 zijn de bijbehorende bronnen overgenomen.

| Code | Beschrijving | Aanwezig in trainingsset 2015 |
|--------|---|-------------------------------|
| DF | Default o.b.v. maatlatomschrijving | ja |
| DS | Default scheepvaart | nee |
| EO | Expertoordeel | ja |
| KRW | KRW conforme toetsing meetpuntgegevens | ja |
| PBL | Aangeleverde data n.a.v. PBL uitvraag | nee |
| SGBP2 | EKR uit WKP SGBP2 | ja |
| T15 | Stuurvariabelen uit trainingset 2015 | ja |
| WKP18 | Waterkwaliteitsportaal (WKP) 2018 (juni 2018) | nee |
| WKP18U | Update WKP 2018 in oktober 2018 | nee |
| WSA | Watersysteemanalyse 2018-2019 | nee |

Veel waterbeheerders hebben in 2018-2019 een watersysteemanalyse uitgevoerd in hun beheergebied waarbij de toestand in (een deel van) hun waterlichamen is bepaald. Hierbij is vaak gekozen voor het opdelen van de soms heterogene waterlichamen in homogene trajecten op basis van inrichting, de ligging van RWZI's en stuwen, en de samenvoeging met andere waterlopen. Deze trajectinformatie is benut bij het opstellen van de nieuwe trainingset, omdat het vaak gedetailleerdere informatie oplevert dan op waterlichaamsniveau. Tabel 2.4 toont een overzicht van het aantal trajecten per waterschap met het aantal waterlichamen waarvoor trajecten zijn bepaald.

De trajecten hadden vaak geen volledige dekking voor de stuurvariabelen en/of voor de kwaliteitselementen. Enkel trajecten die een volledige dekking hadden voor de stuurvariabelen en één of meer kwaliteitselementen bevatten zijn meegenomen in de trainingset. Om dubbelingen te voorkomen zijn in de selectie van de uiteindelijke trainingset de waterlichamen waarvoor trajecten beschikbaar zijn niet meegenomen.

Tabel 2.4 Waterschappen waarvan de watersysteemanalyse is meegenomen in de trainingset 2018. Inclusief het aantal aangeleverde trajecten en de hoeveelheid waterlichamen waarvan trajecten zijn aangeleverd.

| Waterschap | Aantal trajecten | Aantal waterlichamen |
|---|------------------|----------------------|
| Hoogheemraadschap De Stichtse Rijnlanden | 12 | 5 |
| Hoogheemraadschap Schieland en Krimpenerwaard | 44 | 21 |
| Waterschap Aa en Maas | 121 | 45 |
| Waterschap De Dommel | 233 | 24 |
| Waterschap Limburg | 97 | 39 |
| Waterschap Rijn en IJssel | 118 | 36 |
| Waterschap Rivierenland | 128 | 23 |
| Waterschap Vallei en Veluwe | 34 | 32 |
| Wetterskip Fryslân | 6 | 4 |
| WS De Dommel en WS Aa en Maas | 12 | 2 |
| WS Limburg en WS Aa en Maas | 4 | 2 |
| WS Limburg en WS De Dommel | 17 | 1 |

Extra broninformatie nieuwe stuurvariabelen

Voor de nieuwe trainingset zijn drie nieuwe stuurvariabelen toegevoegd, namelijk maximum ammoniumgehalte, zomergemiddelde doorzicht en toxiciteit (zie Paragraaf 2.3). De broninformatie voor deze variabelen is uitgebreider dan voor de andere stuurvariabelen omdat er veel historische meetpunt data verzameld is. Voor de toxiciteit zijn slechts twee bronnen genoteerd, namelijk watersysteemanalyses (WSA) en de toxiciteit dataset van Witteveen+Bos (TOX). De bronnen van de toxiciteit dataset van Witteveen+Bos zijn in Paragraaf 2.3.3 beschreven.

Voor ammonium en doorzicht is voornamelijk geput uit de data op het waterkwaliteitsportaal (WKP) en vanuit de regionale watersysteemanalyses (WSA). Daarnaast zijn er voor historische data van de meetpunten verschillende bronnen gebruikt. Daarvoor is eerst gebruik gemaakt van de dataset Limnodata Neerlandica (LD), waaruit de oorspronkelijk meetpunten uit de dataset uit 2015 komen. Als de data niet aanwezig was in LD zijn de historische waterkwaliteitsmetingen van het WKP bekeken (WKM). Als laatste mogelijkheid zijn datasets gebruikt waarmee de toxiciteitdata werd aangeleverd aan Witteveen+Bos vanuit verschillende waterschappen of provincies (TOX + bron). Voor zowel de historische waterkwaliteitsmetingen als de toxiciteitdata is het jaartal genoteerd waarvan de data is gebruikt, omdat dit soms niet overeenkomt met het meetjaar van de andere stuurvariabelen. Echter om de trainingset zo volledig mogelijk te krijgen is toch gekozen om data mee te nemen tot 3 jaar voor of na het oorspronkelijke meetjaar.

Tabel 2.5 Bronnen voor de aanvullende stuurvariabelen maximale ammoniumgehalte, zomergemiddelde doorzicht en toxiciteit.

| Code | Beschrijving |
|----------|--|
| LD | Limnodata Neerlandica |
| TOX | Toxiciteit dataset van Witteveen+Bos |
| TOX LB | Toxiciteit dataset aangeleverd aan Witteveen+Bos door Waterschap Limburg, inclusief jaartal |
| TOX PNH | Toxiciteit dataset aangeleverd aan Witteveen+Bos door Provincie Noord-Holland, inclusief jaartal |
| TOX ZZL | Toxiciteit dataset aangeleverd aan Witteveen+Bos door Waterschap Zuiderzeeland, inclusief jaartal |
| TOX HHSK | Toxiciteit dataset aangeleverd aan Witteveen+Bos door Hoogheemraadschap Schieland en Krimpenerwaard, inclusief jaartal |
| WKM | Waterkwaliteitsmetingen op WKP, inclusief jaartal |
| WKP18 | Waterkwaliteitsportaal (WKP) 2018 (juni 2018) |
| WKP18U | Update WKP 2018 in oktober 2018 |
| WSA | Watersysteemanalyse |

2.4.2 Toetsing nieuwe KRW-maatlatten

Vanwege het beschikbaar komen van de nieuwe maatlatten tijdens dit project, is besloten om de EKR's opnieuw door te rekenen voor de kwaliteitselementen en types waarvoor de EKR verandert (Van der Molen et al, 2019, Evers et al., 2018). Een overzicht van de watertypes en de kwaliteitselementen waarvoor nieuwe maatlatten beschikbaar zijn, is weergegeven in Tabel 2.6.

Tabel 2.6 Overzicht van de kwaliteitselementen en watertypes waarvoor een nieuwe KRW-maatlat beschikbaar is, deze combinaties zijn aangegeven met "X".

| Cluster | Watertype | Fytoplankton | Overige waterflora | Macrofauna | Vis |
|----------------------------|-----------------------------------|--------------|--------------------|----------------------------|-----|
| Langzaam stromende wateren | R4 | - | - | X; gesplitst in R4a en R4b | X |
| | R5, R6, R12 | - | - | - | X |
| Snel stromende wateren | R13, R17 | - | - | - | X |
| | R14, R15, R18 | - | - | X | X |
| Sloten | M1a, M1b, M2, M8 | - | X | - | - |
| Kanalen | M3, M4, M6a, M6b, M7a, M7b, M10 | - | X | - | - |
| Zwak brakke wateren | M30 | - | - | X; incl. chloride | - |
| Ondiepe meren | M11, M12, M14, M22, M23, M25, M27 | - | - | - | X |
| Diepe meren | M16, M20 | - | - | - | X |
| Brakke tot zoute wateren | M31 | - | - | - | - |

Een deel van de waterschappen heeft, na uitraag door PBL, zelf de nieuwe maatlatten doorgerekend. Deze EKR's zijn aangeleverd aan PBL en vervolgens aan de dataset toegevoegd. Echter, voor een klein deel van de waterschappen hebben we binnen dit project de nieuwe maatlatten doorgerekend. Tabel 2.7 geeft een overzicht van de waterschappen waarvoor er binnen dit project nieuwe maatlatten zijn doorgerekend.

Tabel 2.7 Overzicht van de doorgerekende kwaliteitselementen per watertype en per waterschap.

| Waterschap | Type | Kwaliteitselement |
|---|------------------------|--------------------|
| Waterschap Amstel, Gooi en Vecht | M6a, M6b, M7b, M10 | Overige waterflora |
| | M14, M20, M27 | Vis |
| Waterschap Brabantse Delta | M6b | Overige waterflora |
| | M30, R4 | Macrofauna |
| | M14 | Vis |
| Hoogheemraadschap Delfland | M3, M7b, M10 | Overige waterflora |
| | M23 | Vis |
| Wetterskip Fryslân | M1b, M3, M6b, M7b, M10 | Overige waterflora |
| | M30, R4 | Macrofauna |
| | M14, M27, R4, R5, R6 | Vis |
| Hoogheemraadschap Schieland en Krimpenerwaard | M3, M6b, M7b, M8, M10 | Overige waterflora |
| | M30 | Macrofauna |
| | M14, M20, M27 | Vis |
| Hoogheemraadschap Rijnland | M3, M6a, M7b, M8, M10 | Overige waterflora |
| | M14, M20, M23 | Vis |
| Waterschap Vechtstromen | M1a, M3 | Overige waterflora |
| | R4a, R5, R6, R13 | Vis |

Voor de waterlichamen waar het waterschap niet zelf de nieuwe EKR heeft berekend, is het doorrekenen van de nieuwe maatlatten uitgevoerd met QBWat 6.02 (Pot, 2018). Met QBWat kan de biologische waterkwaliteit worden beoordeeld op basis van monsters voor fytoplankton, overige waterflora, macrofauna of vis. De input van QBWat is een lijst met monsters (zie QBWat handleiding Pot, 2018) of een UM-Aquo format en waar nodig een lijst met meetpunten. In de lijst met meetpunten staat de koppeling tussen het meetpunt en de waterlichamen. Als er meerdere meetpunten per waterlichaam zijn is er vaak een wegingsfactor toegevoegd. In de uitkomsten van QBWat staan onder andere de maatlat score (EKR) per monster en na aggregatie de EKR per meetpunt en per waterlichaam. Met deze uitkomsten is vervolgens de gemiddelde EKR per waterlichaam berekend op basis van de drie meest recente meetjaren (in periode 2009 t/m 2017, oudere monsters zijn niet meegenomen). Een uitgebreide omschrijving van de toetsing per waterschap is beschikbaar in Bijlage B.

In de QBWat versie 6.02 zijn na de toetsing nog enkele bugs gevonden die een effect kunnen hebben op de berekende EKR's. Deze bugs zijn opgelost in QBWat versie 6.03 en beschreven in de update-notitie van QBWat versie 6.03 (Pot, 2019). Hieronder is een overzicht gegeven van de relevante bugs in de toegepaste QBWat versie 6.02:

- Overige waterflora (M1a, M1b, M2, M3, M4, M6a, M6b, M7a, M7b, M8 en M10)
 - De codes voor groeivormen zijn mogelijk niet altijd correct ingelezen.
 - Er is geen meetpuntweging gedaan.
- Macrofauna (R4, R14, R15, R18 en M30)
 - Het aantal negatief dominante soorten kan overschat zijn omdat taxa die tot dezelfde indicator behoren niet eerst worden samengevoegd voordat het aantal negatief dominante soorten wordt bepaald. Hierdoor kan de berekende EKR lager uitvallen.
- Vissen (R4, R5, R6, R12, R13, R14, R15, R17, R18, M11, M12, M14, M16, M20, M22, M23, M25 en M27)
 - Bittervoorn en riviergrondel zijn niet altijd herkend.
 - Mogelijk zijn visvangstfactoren van 0 meegenomen in de toetsing, hiervoor zou een waarschuwing getoond moeten worden welke niet is getoond.
 - De berekeningen van de visstand in M-typen zijn niet correct uitgevoerd.

Voor de toetsing van de nieuwe maatlatten zijn codes gebruikt om de toetsingsmethode aan te geven (Tabel 2.8). Voor de meetpunten is de beschikbare data uit LD gehaald voor het toetsen van de macrofauna-monsters. De andere kwaliteitselementen konden niet opnieuw getoetst worden door het niet beschikbaar zijn van data (vis), het ontbreken van data vanwege een nieuwe opnamemethode (overige waterflora) of omdat er geen nieuwe maatlat was (fytoplankton). De monsters uit Limnodata Neerlandica zijn vervolgens getoetst met QBWat versie 6.02 door RHDHV (KRW_602). Daarnaast hebben de waterschappen zelf een toetsing gedaan voor waterlichamen (en in sommige gevallen trajecten) met QWBat versie 6 (TWS) of monsters aangeleverd. Wanneer er monsters zijn aangeleverd dan zijn de monsters getoetst door RHDHV volgens de methodiek beschreven in de volgende paragraaf (TRHDHV). Voor de doorstroommoerassen en de moerasbeken is nog een additionele toetsing uitgevoerd waarvoor recente data is aangeleverd door de waterschappen of waarvoor trajecten van de watersysteemanalyses opnieuw zijn getoetst. Dit is gedaan met de Aquo-kit versie 3.6.4.30.

Tabel 2.8 Bronnen voor de toetsing van de nieuwe maatlatten (2018) voor kwaliteitselementen waar een nieuwe maatlat (beschreven in Paragraaf 2.4.2) geldt.

| Code | Beschrijving |
|---------|--|
| KRW_602 | Toetsing van meetpuntgegevens met QBWat versie 6.02 door RHDHV |
| TRHDHV | Toetsing met QBWat versie 6.02 door RHDHV |
| TWS | Toetsing met QBWat versie 6 door waterschap |
| AKRHDHV | Toetsing met Aquo-kit versie Aquo-kit 3.6.4.30 door RHDHV |

2.4.3 Selectie van records in dataset

De data uit alle bovengenoemde bronnen is samengevoegd in één bestand. Doordat de meeste watertypeclusters een hogere dichtheid van records hebben in specifieke klassen dan in andere klassen, is een selectie toegepast op de records om zo een gelijkmatigere dataset te creëren. Deze aanpassing is ook uitgevoerd bij de dataset die gebruikt werd voor de training in 2015. Daarbij werd als criterium genomen dat records alleen geselecteerd konden worden wanneer de EKR voor alle kwaliteitselementen beschikbaar was. Dit leidde echter tot uitsluiting van records met uitzonderlijke (hoge en lage) EKR's, omdat de andere kwaliteitselementen niet beschikbaar waren, of tot het invullen van expert oordelen om de record te behouden. Bij deze versie is besloten om niet langer vast te houden aan het criterium dat de EKR voor alle kwaliteitselementen beschikbaar moest zijn.

De opschoning van de nieuwe dataset is uitgegaan van de overlap tussen trajecten uit de watersysteemanalyses en KRW-waterlichamen op het niveau van kwaliteitselementen (EKR's). Hier is het uitgangspunt gehanteerd dat een combinatie van waterlichaam en EKR maar één keer in de trainingset mag voorkomen. Wanneer er een keuze was, is voor het traject uit de KRW-watersysteemanalyses gekozen omdat die data met de hoogste mate van nauwkeurigheid is afgeleid (fijnste detailniveau, afgeleid samen met het waterschap en relatief recent).

Het resultaat van deze opschoning is vervolgens met een random forest getraind. Afhankelijk van het cluster was daarna verdere opschoning nodig. De opschoning bleek nodig voor de grotere clusters en dan met name kanalen en langzaam stromende wateren. De benodigde opschoning bestaat uit 2 categorieën:

- Bij de grotere clusters waren er zeer veel gemeten EKR's binnen een beperkt bereik, met name tussen 0.30 en 0.50 (een uitzondering hierbij is vis in kanalen, waarvoor de gemeten EKR's juist vooral tussen 0.50 en 0.70 lagen). Hierdoor is het model niet goed te trainen over het hele bereik van 0.0 tot 1.0. De opschoning is gedaan door de betreffende data te selecteren en vervolgens bij de dominante waterschappen eerst random records te verwijderen van de waterlichamen en eventueel aanvullend van trajecten uit de watersysteemanalyses en meetpunten. Records met expert inschattingen hadden daarbij de hoogste voorkeur om te verwijderen.
- Bij enkele kleinere clusters waren er soms records die sterk afwijkende resultaten lieten zien in de training. Deze zijn nagelopen en alleen verwijderd wanneer er duidelijke indicaties waren dat de betreffende EKR niet overeenkomt met de daadwerkelijk toestand. Een grote afwijking tussen de waterlichaamscore en eventuele onderliggende trajectcores was hier een belangrijk argument voor. Ook gebiedskennis is gebruikt om met name enkele EKR's van trajecten uit watersysteemanalyses of bijbehorende waterlichamen alsnog niet mee te nemen. Bijvoorbeeld omdat bekend was dat de locatie van de gemeten ammoniumconcentratie (vlak benedenstrooms een RWZI) niet overeenkwam met het bemonsterde traject voor overige waterflora (bovenstrooms de RWZI in een vrij natuurlijk traject met hoge EKR). Dit was het geval bij de Hertogswetering van Waterschap Aa en Maas.

2.4.4 Dataset doorstroommoerassen en moerasbeken

Voor de doorstroommoerassen (R19) en moerasbeken (R20) is een iets andere aanpak gekozen om de dataset op te stellen dan bij de andere watertypeclusters. De belangrijkste reden hiervoor is dat de watertypen pas recent beschikbaar zijn en worden toegekend. Hierdoor is het niet mogelijk om op dit moment een volledige dataset met alleen officieel toegekende wateren van R19 en R20 op te stellen.

Omdat de maatlatten van R19 en R20 deels gebaseerd zijn op de langzaam stromende wateren en uit een pilot bij Waterschap De Dommel, geven de EKR's redelijk hetzelfde beeld. Daarom is de trainingset van de langzaam stromende wateren als basis gebruikt. De waarden voor de stuurvariabelen zijn daarbij overgenomen en de EKR's zijn vervangen door toetsingen aan de maatlatten van R19 en R20 met Aquo-kit versie 3.6. Omdat R19 en R20 alleen voor macrofauna een onderliggende verschillende maatlat hebben, heeft dit tot 4 datasets geleid:

- Overige waterflora R19/R20;
- Macrofauna R19;
- Macrofauna R20;
- Vis R19/R20.

Deze datasets zijn vervolgens gebruikt voor het opstellen van de rekenmethodes in hoofdstuk 3.

2.4.5 Overzicht van de resulterende dataset

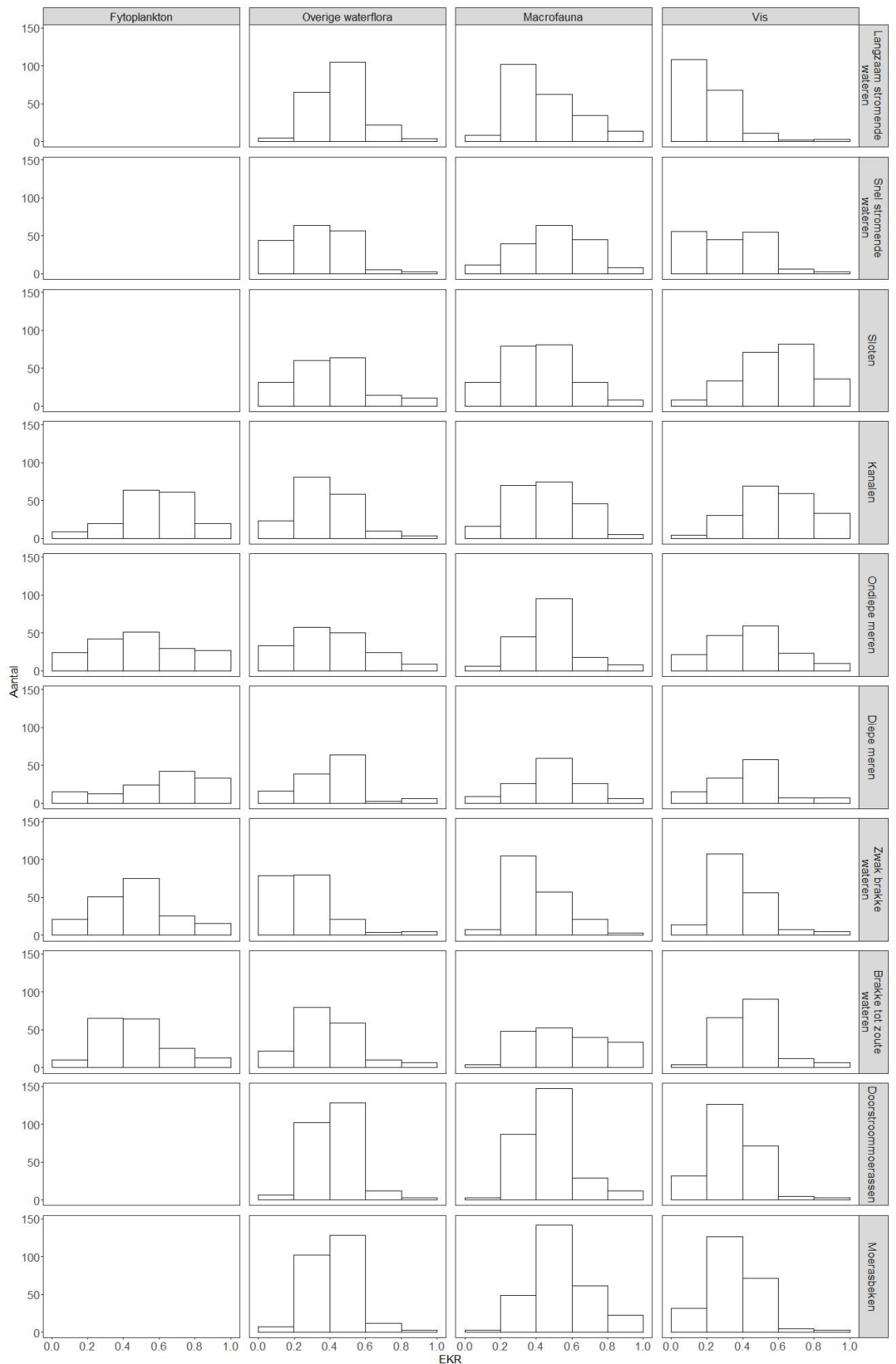
Het zwaartepunt van de dataset qua verdeling van EKR-scores ligt meestal tussen 0.2 en 0.6. Dit komt door het ontbreken van waterlichamen waarin de toestand tot een lage of hoge EKR score leidt (Figuur 2.1). Uitzonderingen hierop zijn onder andere vis in kanalen en sloten (zwaartepunt boven 0.6), overige waterflora in zwak brakke wateren (zwaartepunt onder 0.4) en vis in langzaam stromende (zwaartepunt onder 0.4).

Bij de samenstelling van de dataset is gepoogd om records te hebben in alle kwaliteitsklassen van 0.2 EKR (0 - 0.2, 0.2 - 0.4, etc.) voor ieder kwaliteitselement en watertypecluster (zie Figuur 2.1). Echter, voor bijna alle clusters, behalve sloten, zijn er voor één of meerdere EKR-klassen en kwaliteitselementen geen monsters beschikbaar die getoetst zijn. Voor deze clusters zijn defaults of expert oordelen toegevoegd aan de dataset om minstens 2 monsters per EKR-klasse en kwaliteitselement voor ieder watertypecluster te behalen. Voor brakke tot zoute wateren was er maar beperkte data beschikbaar voor overige waterflora en vis monsters in de hoge en lage EKR klassen. Voor overige waterflora waren defaults en expert oordelen nodig voor EKR-klassen 0.6-0.8 en 0.8-1 en voor vis waren deze nodig in EKR-klassen 0-0.2 en 0.8-1.

De uiteindelijke dataset per watertypecluster is samengesteld uit verschillende bronnen. Een deel van deze bronnen zijn biologische monsters die aan de KRW-maatlatten zijn getoetst, maar een deel is echter gebaseerd op defaults of expert oordelen. Het totale aantal records per watertypecluster en de verdeling tussen de getoetste records en de expert oordelen is weergegeven in Tabel 2.9.

Tabel 2.9 Aantal records in de dataset en het aandeel monsters dat getoetst is aan de KRW-maatlatten.

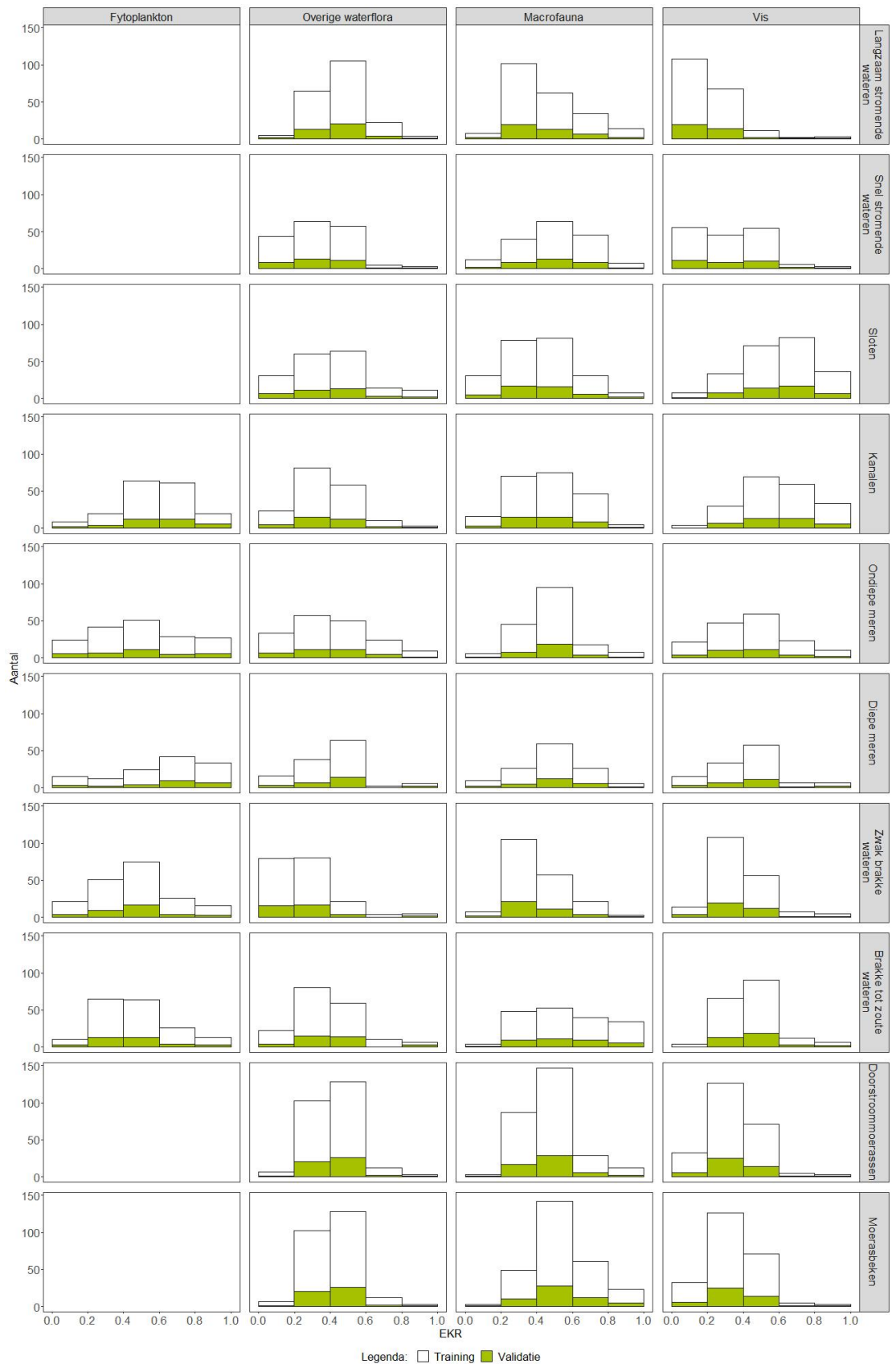
| Watertypecluster | Totaal aantal records | Aantal records per kwaliteitselement (percentage records gebaseerd op echte biologische monsters die aan KRW-maatlatten getoetst zijn) | | | |
|--------------------------|-----------------------|--|--------------------|------------|-----------|
| | | Fytoplankton | Overige waterflora | Macrofauna | Vis |
| Langzaam stromende beken | 428 | - | 201 (98%) | 220 (99%) | 192 (98%) |
| Snel stromende beken | 181 | - | 173 (15%) | 169 (95%) | 165 (8%) |
| Sloten | 274 | - | 180 (43%) | 230 (97%) | 230 (53%) |
| Kanalen | 277 | 174 (94%) | 175 (97%) | 212 (98%) | 195 (95%) |
| Ondiepe meren | 173 | 173 (76%) | 173 (50%) | 172 (85%) | 160 (34%) |
| Diepe meren | 126 | 126 (63%) | 126 (26%) | 126 (60%) | 119 (18%) |
| Zwak brakke wateren | 199 | 189 (89%) | 189 (39%) | 194 (95%) | 191 (21%) |
| Brakke tot zoute wateren | 179 | 178 (85%) | 178 (19%) | 179 (93%) | 179 (16%) |
| Doorstroommoerassen | 315 | | 257 (98%) | 278 (98%) | 238 (97%) |
| Moerasbeken | | | 257 (98%) | 281 (98%) | 238 (97%) |



Figuur 2.1 Het aantal records (links) in de dataset voor iedere EKR-klasse (onderste x-as) per kwaliteitselement (bovenste x-as) en per watertypecluster (rechts).

2.4.6 Opdeling dataset voor training en validatie

Royal HaskoningDHV heeft de nieuwe dataset op gesplitst in twee sets op basis van waterlichamen per watertypecluster en per kwaliteitselement (Figuur 2.2). Een set (80%) wordt gebruikt voor training en ontwikkeling en de andere set (20%) voor validatie van de drie rekenmethodes. Om te garanderen dat zowel de training- als validatiesets EKR scores uit iedere kwaliteitsklasse (0 - 0.2, 0.2 - 0.4, etc.) bevatten en bovendien in vergelijkbare verdeling, is een random opsplitsing van 80/20 per kwaliteitsklasse gedaan.



Figuur 2.2 Aantal records (links) per EKR-klasse (onderste x-as) in de dataset gebruikt voor training (wit) en validatie (groen) per watertypecluster (rechts) en per kwaliteitselement (bovenste x-as).

3 Beschrijving toegepaste rekenmethodes

Vanuit de dataset, zoals in het vorige hoofdstuk beschreven, zijn per combinatie van watertypecluster en kwaliteitselement subdatasets samengesteld. Voor een vijftal watertypeclusters is het kwaliteitselement fytoplankton niet van toepassing, zodat het totaal aantal subdatasets op 35 komt (5 watertypeclusters met 4 kwaliteitselementen en 5 watertypeclusters met 3 kwaliteitselementen). Van deze 35 subdatasets zijn er twee identiek aan een ander: de waterflora en de vis van doorstroommoerassen en moerasbeken. Dit levert dan 33 subdatasets waarvoor per dataset via drie machine learning methodes relaties zijn gelegd tussen de stuurvariabelen en de EKR's, te weten:

- 1 Random forest (door Royal HaskoningDHV);
- 2 Neuraal netwerk met PUNN-methode (door Witteveen+Bos);
- 3 Regressiebomen (door PBL).

Deze drie rekenmethodes zijn opgenomen in de ecologische module van de KRW-Verkenner versie 2.4.1. In dit hoofdstuk worden de drie rekenmethodes kort toegelicht.

3.1 Product Unit Neuraal Netwerk

3.1.1 Theorie

Voor de Product Unit Neurale Netwerken, oftewel PUNNs, wordt uitgegaan van kunstmatige neurale netwerken. Deze kunstmatige netwerken worden toegepast om voorspellingen te maken op basis van complexe data-input. In dit project worden ze toegepast om EKR's te voorspellen op basis van de stuurvariabelen. Een kunstmatig neuraal netwerk bestaat uit een set verbonden neuronen. Deze neuronen kunnen een signaal ontvangen, bewerken en doorgeven aan verbonden neuronen. De bewerking bestaat normaal gesproken uit het wegeven en sommeren van de inputsignalen:

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

Het resultaat van deze som wordt bewerkt door een zogenaamde transferfunctie voordat het wordt doorgegeven aan andere verbonden neuronen. Vaak zijn de neuronen geordend in lagen, waar de eerste laag de inputvariabelen verwerkt, de tweede laag de output van de eerste laag, enzovoorts. Met betrekking tot het ontwerp (aantal lagen, aantal neuronen per laag, type transferfuncties, e.d.) zijn er veel configuraties mogelijk. Wanneer een kunstmatig neuraal netwerk ontworpen is, zal het nog niet goed werken. Voordat het goede voorspellingen kan maken dient het netwerk eerst getraind te worden. Veelal wordt de weging voor de neuronen eerst willekeurig gekozen. Tijdens de training wordt, in een iteratief proces, het netwerk 'geleerd' om de fout, uitgedrukt als Root Mean Square Error (RMSE), te minimaliseren door voortdurend kleine aanpassingen te maken aan de weging van de inputs van een neuron.

Voor het voorspellen van de EKR-scores voor de verschillende watertypen en kwaliteitselementen op basis van de inputdata heeft Witteveen+Bos gekozen voor een algoritme verwant aan het eerder beschreven kunstmatige netwerk, namelijk een Product Unit Neuraal Netwerk. Het verschil tussen een PUNN en een regulier Neuraal Netwerk (NN) is dat in de bepaling van het outputsignaal van een neuron geen gebruik wordt gemaakt van een sommatie maar van een product:

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

Het principe van een PUNN is vergelijkbaar met dat van een regulier neuraal netwerk, alleen nu worden de machten in plaats van de gewichten geoptimaliseerd tijdens de training. Een PUNN heeft een aantal voordelen ten opzichte van een regulier neuraal netwerk:

- een PUNN is te exporteren als een (relatief) eenvoudige formule. Dit zorgt er voor dat een geproduceerde PUNN makkelijk te gebruiken is in andere applicatie;
- het geeft het inzicht in de verbanden tussen in- en output;
- een PUNN kan goed veréenvoudigd worden door de formule te 'snoeien';
- een PUNN heeft een grotere voorspellende kracht in vergelijking met reguliere neurale netwerken.

Zoals bij alle machine learning technieken is het overfitten van de data een risico. Overfitting is het fenomeen dat een model zeer goede voorspellingen maakt op de data waarop het getraind is, maar kan slechter presteren wanneer nieuwe data wordt aangeboden. Om overfitting te voorkomen wordt hierop gemonitord door tijdens het trainen steeds een deel van de trainingsdata apart te houden voor het valideren en wordt de training afgebroken op het moment dat overfitting dreigt.

3.1.2 Opzetten PUNNs

Voor het ontwikkelen van de PUNNs is de eerder door Witteveen+Bos ontwikkelde PUNN-toolbox gebruikt (De Niet, 2015). De PUNN-toolbox is een uitbreiding op de Neural Network toolbox van Matlab. De ontwikkelde toolbox maakt het mogelijk om de PUNNs op te zetten, te trainen, te snoeien en te exporteren naar verschillende formats zodat ze ook buiten Matlab gebruikt kunnen worden. Daarnaast bevat de toolbox ook de middelen om te testen hoe goed de voorspellingen van de PUNNs zijn. De toolbox is voorheen onder andere gebruikt om PUNNs te trainen voor eerdere versies van de KRW-Verkenner en voor een metamodel voor PCLake (De Niet, 2015; Witteveen+Bos, 2012, 2013).

Voor elk watertypecluster is per kwaliteitselement één PUNN gemaakt. Overeenkomstig met eerdere versies van de PUNNs zijn de volgende uitgangspunten gehanteerd:

- voor elk watertypecluster en kwaliteitselement worden 5000 PUNNs willekeurig geïnitieerd en vervolgens getraind;
- de beste 20 PUNNs worden gesnoeid;
- de best gesnoeide PUNN wordt opgeleverd.

In navolging van het advies uit 2015 (de Niet, 2015) zijn ook nu weer 4 lagen opgenomen in de PUNNs in plaats van 5. Het idee is dat met 4 lagen de PUNNs relaties opleveren die generieker zijn en dat de PUNNs minder snel overfitten op de trainingsdata.

De validatiedata wordt op geen enkele wijze gebruikt tijdens de training en selectie. De PUNNs worden getraind op de trainingsdata, waarbij wordt getracht om de voorspelling op de testdata te verbeteren (getoetst met de RMSE). Ook tijdens het snoeien wordt na elke snoeistap gecontroleerd of de voorspellende prestaties op de testdata nog acceptabel zijn.

Om te zorgen dat de train- en testdata goed verspreid liggen over alle stuurvariabelen, is met behulp van een cluster algoritme (k-means) de data verdeeld in 6 groepen die de data zo goed mogelijk dekken. Naderhand is met behulp van gestratificeerde sampling gezorgd dat zowel train- als testdata goed vertegenwoordigd zijn in alle clusters. Voor enkele clusters waren er te weinig samples, waardoor de testdata in dat cluster niet voorkwam.

Nadat de beste 20 PUNNs gesnoeid zijn, zijn deze gesorteerd aan de hand van de adjusted R^2 . De adjusted R^2 is een aangepaste versie van de R^2 die rekening houdt met het aantal gebruikte parameters per PUNN. Zodoende kan een selectie gemaakt worden op basis van prestatie én, op een eenvoudig leesbaar (simpel) PUNN met weinig parameters. Na inspectie bleek dat alleen voor de vis-dataset in watertypecluster brakke tot zoute wateren bij de beste PUNN duidelijk sprake was van overfitting. Er is daarom voor gekozen om het tweede beste PUNN te gebruiken in de KRW-Verkenner. Resultaten voor beide PUNNs zijn wel opgenomen in dit rapport (zie Paragraaf 4.1). Per watertypecluster zijn er op basis van PUNNs formules afgeleid voor de verschillende EKR-scores per kwaliteitselement. De afgeleide formules worden per watertypecluster en kwaliteitselement weergegeven in Bijlage C.

De PUNNs zijn getraind op basis van geschaalde data. Schaling is gunstig voor het initialiseren van de machten van de PUNNs voor het trainen. Voor elke variabele is de mediaan bepaald (voor alle watertypen). De parameterwaarden zijn vervolgens gedeeld door de gevonden mediaan (Tabel 3.1). Omdat voor de stuurvariabele toxiciteit een waarde 0 kan voorkomen, en dit leidt tot fouten in een PUNN, is bij alle waarden 0.5 opgeteld.

Tabel 3.1 Schalingsfactoren toegepast op de variabelen voor het bepalen van de PUNNs.

| Stuurvariabele | Schalingsfactor |
|--------------------|----------------------------|
| Oeverinrichting | 2 |
| Peilbeheer | 2 |
| Onderhoud | 1.3 |
| Connectiviteit | 2 |
| Meandering | 2.35 |
| Schaduw | 1.5 |
| Scheepvaart | 2 |
| Chloride | 6350 |
| Ptot | 0.16 |
| Ntot | 2.8 |
| Doorzicht | 0.57 |
| Toxiciteit (msPAF) | 0.503 (na translatie +0.5) |
| NH ₄ | 0.8165 |
| BZV | 2 |
| Stuw | 1.9 |

De schaling heeft geen gevolgen voor de machten in de PUNNs, maar alleen voor de factor van elk deelproduct. In de gerapporteerde formules is de schaling al verwerkt in de deelfactoren, zodat de formules rechtstreeks op ongeschaalde data toegepast kunnen worden. Toxiciteit (msPAF) vormt hierop een uitzondering. De translatie en schaling van toxiciteit is voor de extra watertypeclusters moerasbeken en doorstroommoerassen niet toegepast. Deze parameter komt in een beperkt aantal formules voor. In de formule is aangegeven of er wel of geen translatie van toxiciteit moet worden toegepast voorafgaand aan de formule.

3.2 Random forest

3.2.1 Theorie

Een random forest is machine learning algoritme die uit een verzameling (ensemble) van regressiebomen (beslisbomen) bestaat. Deze bomen zijn één voor één getraind op een random sample van de gehele trainingset. De uitkomst van een random forest is de gemiddelde uitkomst van alle individuele regressiebomen. Bij een random forest wordt, net zoals bij de PUNNs, per boom een subset van alle variabelen aangeboden. Hierdoor ontstaat er veel variatie tussen de bomen, waardoor het model minder snel overfit.

De rekenmethode is geïmplementeerd in Python met behulp van de scikit-learn library. Er is gekozen voor zogenaamde extra trees (extremely randomized trees). Hierbij wordt binnen iedere regressieboom de splitsing threshold op een willekeurig punt gekozen (Geurts et al., 2006).

3.2.2 Toepassing

Er zijn een aantal parameters die gekozen kunnen worden als instellingen bij een random forest-analyse. De belangrijkste zijn:

- aantal bomen;
- minimum aantal samples per eindpunt;
- aantal (stuur)variabelen per boom.

In dit project is gekozen voor 2000 bomen. Het minimum aantal samples per eindpunt geeft aan hoever iedere regressieboom moet gaan met het opsplitsen. Er is gekozen voor de waarde 1. Waarden hoger dan 1 zorgen voor afvlakking aan de uiteinden van het EKR-score spectrum. Dit is een ongewenste eigenschap voor de KRW-Verkenner. .

Het aantal variabelen per boom wordt per combinatie watertypecluster en kwaliteitselement geoptimaliseerd met behulp van 10-fold cross-validatie. Bij cross-validatie wordt de trainingsdata random opgesplitst in k (in ons geval 10) sets. Vervolgens wordt 10 keer een algoritme getraind, waarbij telkens één van de 10 subsets (folds) wordt weggelaten, om deze algoritmes te valideren op de weggelaten set. Dit is een robuuste methode om de nauwkeurigheid van het algoritme te kunnen schatten, zonder de validatieset te gebruiken. De gemiddelde RMSE over alle folds kan gebruikt worden om de optimale parameters te vinden. Na deze procedure wordt het algoritme (met de gevonden parameters) opnieuw getraind op de gehele trainingset.

3.3 Regressiebomen

3.3.1 Theorie

Regressieboom-analyse is een statistische techniek waarmee de relatie tussen een variabele y_i en verklarende variabelen $x_{1,i}, x_{2,i}, x_{3,i}, \dots, x_{m,i}$ bepaald kan worden. Een belangrijke eigenschap van de methode is dat die relaties niet lineair hoeven te zijn. Ook niet-lineaire drempel-effecten kunnen bij deze methode meegenomen worden. In dit project wordt voor 'y' steeds een EKR deelmaatlat gekozen en voor de x-en een aantal stuurvariabelen, zoals N_{tot} , P_{tot} , toxiciteit, peilbeheer.

3.3.2 Toepassing

Bij een regressieboom-analyse wordt er steeds gezocht naar succesvolle drempelwaarden in de x-variabelen, de stuurvariabelen, om de variabiliteit van de y-variabele, de EKR, sterk te verminderen. De variabiliteit van de y-variabele wordt uitgedrukt met de term deviantie, ofwel de som van de kwadratische afwijkingen van het gemiddelde. Bij een succesvolle drempelwaarde wordt de dataset gesplitst in twee deelsets. Vervolgens wordt er steeds naar andere succesvolle drempelwaarden gezocht en de data verder opgesplitst, zodanig dat de totale deviantie zoveel mogelijk daalt. Zo ontstaat een boomstructuur met 'knopen' die verbonden zijn door 'takken' waarbij de stuurvariabele aan wordt gegeven met de bijbehorende drempelwaarde. Als het er geen 'winst' meer behaald kan worden in deviantie, dan stopt de boom. De boom eindigt met een set eindknopen (zie Paragraaf 5.2 voor een voorbeeld). Als de relevante stuurvariabelen van een watertype bekend zijn dan kan aan de hand van de boom direct de voorspelling van de EKR score worden afgelezen door de takken te volgen tot aan de eindknoop. De regressiebomen zijn geschat in R met de Rpart routine uit de gelijknamige package en worden getoond in Bijlage G. Voor details over de methode van regressiebomen wordt verwezen naar Visser en Wortelboer (2013) en Visser et al. (2008).

4 Resultaten toegepaste rekenmethodes

In dit hoofdstuk wordt ingegaan op de prestaties van de drie methodes voor het voorspellen van EKR scores. Er is gekeken naar de bijdrage van de stuurvariabelen aan de voorspelde EKR, de prestaties van de methodes (voorspel-performance) en de kwaliteit van de getrainde methodes. Om de kwaliteit van de getrainde methodes te bepalen zijn vier beoordelingscriteria gebruikt. Voor ieder watertypecluster en kwaliteitselement zijn de methodes geëvalueerd met behulp van de kwaliteitsscores:

- Het kwadraat van de correlatiecoëfficiënt (R^2);
- Fractie binnen ± 0.10 ;
- Root Mean Square Error (RMSE);
- Coefficient of Determination (CoD).

De R^2 geeft aan hoe goed het lineaire verband is tussen X (hier de EKR-metingen) en Y (hier de EKR-voorspellingen). Een waarde van 1.0 geeft aan dat het verband perfect lineair is, een waarde van nul dat er helemaal geen lineair verband is. De kwaliteitsscore Fractie binnen ± 0.10 is de fractie voorspelde EKR's die ligt binnen een range van ± 0.10 van de werkelijke EKR-maatlat-waarde, RMSE is de gemiddelde voorspelfout, en CoD kan worden bepaald vanuit de RMSE (zie Bijlage H voor een verdere toelichting over de kwaliteitsscores). Voor de PUNNs is geen R^2 kwadraat bepaald maar is in aanvulling op de kwaliteitsscores wel de complexiteit van het model (N, het aantal termen) opgenomen.

Voor elke van de drie methodes wordt weergegeven hoe de afgeleide kennisregels voor de verschillende EKR's scoren op de bovengenoemde beoordelingscriteria. De kwaliteitsscores zijn berekend over de trainingset en de validatieset, de laatste set is op geen enkele wijze betrokken geweest bij het trainingsproces. Voor beide datasets zijn ook prestatieplots gemaakt waarin de gemeten EKR's zijn uitgezet tegen de voorspelde EKR's voor zowel de trainingset als de validatieset. Deze figuren geven meer inzicht in de prestaties van de rekenmethodes.

Om een gevoel te krijgen hoe zwaar een stuurvariabele weegt in een PUNN is voor elke stuurvariabele in een PUNN de Variable Importance (VI) berekend. De VI is berekend door voor elke stuurvariabele de waarden tussen de records te permuteren (d.w.z. een record krijgt de stuurvariabele waarde van een willekeurig ander record in de dataset). De permutatie is voor elke variabele 200 keer herhaald. Voor elke permutatie is de mediaan van de VI bepaald en de 0.1 en 0.9 percentielen geven aan hoe groot de variatie is in de bepaalde VI. Voor zowel de originele dataset als de gepermuteerde dataset is naderhand de RMSE berekend. De VI is daarna berekend door middel van $RMSE_{perm}/RMSE_{orig}$. Een VI rond de 1 betekent dat de betreffende variabele weinig betekenis heeft in het algoritme. Een waarde van bijvoorbeeld 2 geeft aan dat de fout (RMSE) twee maal groter wordt wanneer de informatie in betreffende variabele verloren gaat. De variabele heeft dan dus veel meer betekenis bij de bepaling van de EKR score.

Ook voor de random forest methode is gebruik gemaakt van de mogelijkheid om aan te geven welke stuurvariabele het meest bijdraagt aan het model. Dit is gedaan aan de hand van partial dependence en feature importance plots. Om de feature importance te bepalen wordt de EKR score voor een EKR deelmaatlat nogmaals berekend terwijl er telkens één stuurvariabele niet wordt meegenomen. De resulterende EKR-score wordt vervolgens vergeleken met de originele EKR-score om de afname in juistheid te bepalen. De afname in juistheid geeft aan in welke mate de stuurvariabele bijdraagt aan de bepaling van de EKR-score, waarbij een grotere afname in juistheid betekent dat de stuurvariabele een grotere bijdrage levert aan het model.

Voor de partial dependence figuren zijn de EKR deelmaatlat algoritmes geëvalueerd door het algoritme toe te passen op een range van de stuurvariabelen. Voor iedere stuurvariabele zijn 20 punten bepaald die gelijkmatig verdeeld zijn tussen de minimale en maximale waarde in de trainingset voor die variabele. De andere stuurvariabelen zijn op een referentiewaarde gezet. Vervolgens is het modelalgoritme toegepast op de range van de stuurvariabelen en zijn er figuren gemaakt van de berekende EKR per stuurvariabele.

4.1 Product Unit Neuraal Netwerk

Tabel 4.1 toont een overzicht van de kwaliteitsscores van de PUNNs. In Figuur 4.1 zijn bovendien de plots van de VI voor elk van de PUNNs weergegeven. Detail figuren van de berekende VI's voor elke EKR deelmaatlat zijn weergegeven in Bijlage E. In Bijlage C zijn de prestatieplots opgenomen voor de PUNNs. Voor elke EKR deelmaatlat is daarin de EKR waarde die door de PUNN wordt voorspeld afgezet tegen de werkelijke EKR waarde. Op basis van de trainings- en validatieresultaten van de PUNNS valt het volgende op te merken:

- De toegevoegde stuurvariabele toxiciteit blijkt maar beperkte meerwaarde te hebben. Deze komt slechts voor in twee van de PUNNs van de oorspronkelijke set watertypeclusters (de set zonder de moerasbeken en de doorstroommoerassen). Dit betreft de PUNNs voor de EKR deelmaatlat Vis in Sloten en de EKR deelmaatlat Macrofauna in Zwak brakke wateren. De bijdrage in die PUNNs is bovendien vrij beperkt. Opvallend is dat toxiciteit (msPAF) een grotere rol speelt bij de PUNNs van het nieuwe watertypecluster moerasbeken. In de PUNNs van EKR deelmaatlat Overige waterflora R20 en EKR deelmaatlat Macrofauna R20 is toxiciteit (msPAF) de belangrijkste verklarende variabele en voor de EKR deelmaatlat Vis R20 levert de stuurvariabele een relatief groot aandeel.
- De EKR scores voor snel en langzaam stromende wateren worden bepaald door belasting (Ntot, Ptot en/of BZV) en meandering. Verstuwung speelt alleen in de EKR scores voor Vis een rol, al komt deze bij snel stromende wateren pas op de vierde plaats en speelt in deze wateren dus een kleinere rol dan in langzaam stromende wateren .
- De EKR scores voor watertypeclusters sloten en kanalen worden voornamelijk bepaald door belasting (Ntot en Ptot). Voor sloten speelt daarnaast onderhoud een grote rol. Voor kanalen is dat oeverinrichting en doorzicht. De variabelen NH₄, toxiciteit, oeverinrichting en scheepvaart (alleen kanalen) hebben helemaal geen of slechts beperkt invloed.
- In EKR scores voor diepe en ondiepe meren speelt de belasting met Ptot een grote rol. Daarnaast leveren doorzicht, Ntot en oeverinrichting in verschillende PUNNs een belangrijke bijdrage. Peilbeheer is alleen van invloed op de EKR deelmaatlat Vis in ondiepe meren en de EKR deelmaatlat Overige waterflora in diepe meren.
- Het beeld voor zwak brakke en brakke tot zoute wateren is divers. De belasting van Ntot en Ptot speelt in het algemeen een grote rol, maar welke stuurvariabelen daarnaast een bepalende factor zijn, verschilt sterk per deelmaatlat.
- Ook het beeld voor het nieuwe watertypecluster moerasbeken is divers. In de verschillende PUNNs zijn andere variabelen van belang. Het is opvallend dat beschaduwing en toxiciteit een aanmerkelijk grotere rol spelen dan in de aanverwante watertypen langzaam en snel stromende wateren.

Tabel 4.1 Overzicht kwaliteitsscores PUNNs berekend op zowel de trainingsdata en validatiedata.

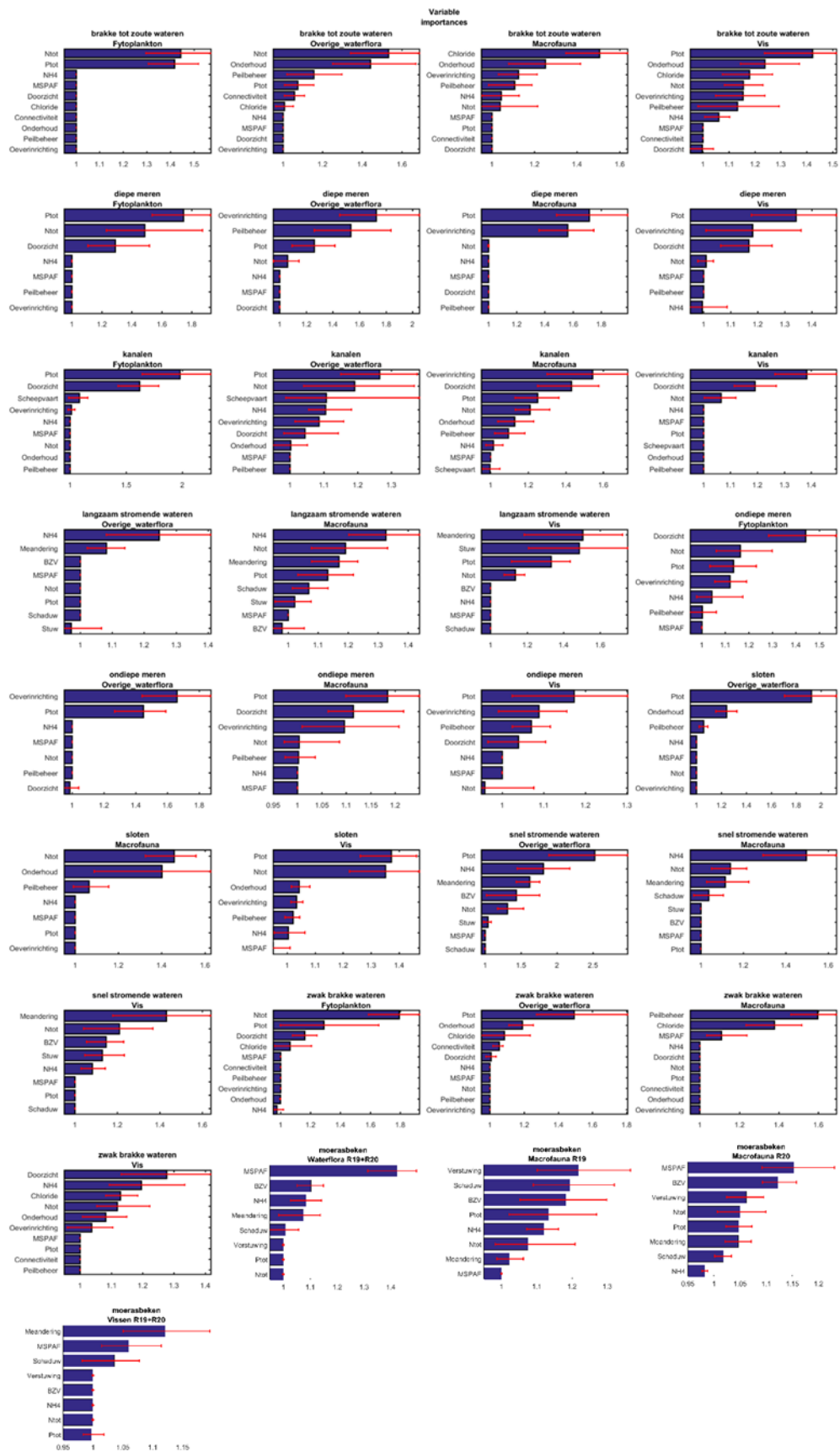
| Watertype | Kwaliteits-element | Trainingsdata | | | | Validatiedata | | | |
|-------------------------------------|----------------------|---------------|---------------------------|------|------|---------------------------|------|-------|--|
| | | N | Fractie binnen ± 0.10 | RMSE | CoD | Fractie binnen ± 0.10 | RMSE | CoD | |
| 1 Langzaam stromende wateren | Overige waterflora | 4 | 0.68 | 0.11 | 0.28 | 0.66 | 0.13 | 0.25 | |
| | Macrofauna | 13 | 0.59 | 0.11 | 0.61 | 0.57 | 0.13 | 0.48 | |
| | Vis | 4 | 0.74 | 0.1 | 0.57 | 0.63 | 0.11 | 0.67 | |
| 2 Snel stromende wateren | Overige waterflora | 13 | 0.86 | 0.08 | 0.81 | 0.71 | 0.09 | 0.8 | |
| | Macrofauna | 7 | 0.64 | 0.13 | 0.54 | 0.59 | 0.15 | 0.39 | |
| | Vis | 8 | 0.74 | 0.09 | 0.76 | 0.76 | 0.11 | 0.69 | |
| 3 Sloten | Overige waterflora | 4 | 0.54 | 0.13 | 0.58 | 0.56 | 0.13 | 0.64 | |
| | Macrofauna | 6 | 0.6 | 0.12 | 0.58 | 0.52 | 0.14 | 0.44 | |
| | Vis | 16 | 0.58 | 0.13 | 0.55 | 0.66 | 0.16 | 0.39 | |
| 4 Kanalen | Fytoplankton | 7 | 0.67 | 0.11 | 0.67 | 0.58 | 0.13 | 0.65 | |
| | Overige waterflora | 14 | 0.66 | 0.1 | 0.6 | 0.51 | 0.13 | 0.5 | |
| | Macrofauna | 15 | 0.7 | 0.1 | 0.64 | 0.65 | 0.11 | 0.72 | |
| | Vis | 3 | 0.47 | 0.15 | 0.46 | 0.56 | 0.14 | 0.47 | |
| 5 Ondiepe meren | Fytoplankton | 9 | 0.49 | 0.14 | 0.68 | 0.4 | 0.15 | 0.67 | |
| | Overige waterflora | 4 | 0.51 | 0.14 | 0.56 | 0.57 | 0.13 | 0.62 | |
| | Macrofauna | 9 | 0.75 | 0.09 | 0.64 | 0.79 | 0.11 | 0.37 | |
| | Vis | 7 | 0.61 | 0.13 | 0.61 | 0.68 | 0.14 | 0.57 | |
| 6 Diepe meren | Fytoplankton | 5 | 0.58 | 0.12 | 0.79 | 0.56 | 0.13 | 0.77 | |
| | Overige waterflora | 4 | 0.86 | 0.07 | 0.81 | 0.85 | 0.08 | 0.78 | |
| | Macrofauna | 4 | 0.85 | 0.08 | 0.8 | 0.62 | 0.09 | 0.67 | |
| | Vis | 11 | 0.86 | 0.07 | 0.84 | 0.79 | 0.11 | 0.65 | |
| 7 Zwak brakke wateren | Fytoplankton | 6 | 0.63 | 0.13 | 0.64 | 0.62 | 0.12 | 0.66 | |
| | Overige waterflora | 7 | 0.69 | 0.1 | 0.66 | 0.56 | 0.14 | 0.37 | |
| | Macrofauna | 4 | 0.72 | 0.09 | 0.52 | 0.64 | 0.11 | 0.54 | |
| | Vis | 8 | 0.67 | 0.12 | 0.44 | 0.68 | 0.11 | 0.59 | |
| 8 Brakke tot zoute wateren | Fytoplankton | 2 | 0.56 | 0.13 | 0.53 | 0.75 | 0.12 | 0.64 | |
| | Overige waterflora | 9 | 0.75 | 0.09 | 0.67 | 0.64 | 0.12 | 0.6 | |
| | Macrofauna | 8 | 0.59 | 0.12 | 0.7 | 0.53 | 0.16 | 0.45 | |
| | Vis-1* | 15 | 0.76 | 0.09 | 0.64 | 0.65 | 0.16 | -0.05 | |
| | Vis-2 | 9 | 0.77 | 0.09 | 0.61 | 0.68 | 0.11 | 0.52 | |
| 9 Doorstroommoerassen | Overige waterflora** | 6 | 0.66 | 0.10 | 0.27 | 0.69 | 0.10 | 0.45 | |
| | Macrofauna | 9 | 0.78 | 0.09 | 0.63 | 0.67 | 0.11 | 0.57 | |
| | Vis** | 15 | 0.67 | 0.11 | 0.25 | 0.70 | 0.11 | 0.14 | |
| 10 Moerasbeken | Overige waterflora** | 6 | 0.66 | 0.10 | 0.27 | 0.69 | 0.10 | 0.45 | |
| | Macrofauna | 19 | 0.65 | 0.40 | 0.12 | 0.60 | 0.15 | 0.31 | |
| | Vis** | 15 | 0.67 | 0.11 | 0.25 | 0.70 | 0.11 | 0.14 | |

* In de KRW-Verkenner is PUNN vis-2 opgenomen omdat de validatiedata laat zien dat PUNN vis-1 overtraint is.

** Maatlat voor overige waterflora en vis is gelijk voor doorstroommoerassen en moerasbeken, daarom hiervoor één PUNN afgeleid.

De prestaties van de PUNNs zijn vergeleken met de prestaties in 2015 door te kijken naar de indicatoren RMSE, fractie binnen ± 0.10 en CoD van de validatieset. Bij deze vergelijking verschillen wel de onderliggende datasets: er is nieuwe data toegevoegd en oude data verwijderd. Bovendien zijn deels nieuwe maatlatten toegepast bij het afleiden van de EKR scores. De vergelijking tussen de prestaties in 2015 en de prestaties van de nieuwe PUNNs geeft het volgende beeld:

- De kwaliteit van de nieuwe PUNNs is over het algemeen vergelijkbaar met de kwaliteit van de PUNNs in 2015.
- Voor langzaam stromende wateren en sloten zijn de nieuwe PUNNs wat slechter.
- Voor diepe meren en zwak brakke wateren zijn de nieuwe PUNNs wat beter.
- De nieuwe PUNNs zijn een stuk eenvoudiger. Anders dan in 2015 was het nu goed mogelijk om het aantal variabelen in de PUNNs fors te reduceren. Een goed voorbeeld is de EKR deelmaatlat Overige waterflora in sloten: de formule uit 2015 had 25 coëfficiënten, de nieuwe formule 7. Dat geldt voor veel PUNNs, wat ten goede komt aan de interpretatiemogelijkheden van de formules.



Figuur 4.1 Bijdrage van iedere stuurvariabele aan de bepaling van de EKR score (variable importance) voor iedere EKR deelmaatlat. De lengte van de balk geeft aan hoeveel een variabele bijdraagt waarbij een langere balk meer bijdrage betekent. Zie Bijlage E voor meer detail.

4.2 Random forest

De kwaliteitsscores worden per watertypecluster en kwaliteitselement weergegeven in Tabel 4.2. De voorspelde EKR waarden zijn uitgezet tegen de werkelijke EKR waarden voor de trainingset (Figuur 4.2) en de validatieset (Figuur 4.3). De voorspelde EKR's komen voor alle EKR-deelmatlatten vrij goed overeen met de gemeten EKR's wanneer deze worden uitgezet voor de werkelijke EKR waarden in de trainingset. Dit is het resultaat van de training met deze data.

Wanneer echter gebruik wordt gemaakt van nieuwe data (validatieset) dan is er een afwijking zichtbaar tussen de voorspelde EKR's en de werkelijke EKR's (Figuur 4.3). Hierbij geldt in het algemeen dat de EKR wordt overschat bij een lage werkelijke EKR en onderschat bij een hoge werkelijke EKR. De mate van deze afwijking is afhankelijk van het watertype en het kwaliteitselement. Het is zeer waarschijnlijk dat hier het effect van de lage data beschikbaarheid in de hoge en lage ranges zichtbaar is. Door die beperkte beschikbaarheid wordt het model in deze regio's sterk gestuurd door een laag aantal records en vervolgens wordt het model ook gevalideerd op een nog lager aantal records. In de validatieset zit daardoor nog maar een enkel record in de buitenste klassen (en deels niet aan de buitenkant) waardoor de regressielijn vlakker gaat lopen. Daarnaast heeft het model ook meer moeite met de voorspelnauwkeurigheid in deze regio's ten opzichte van de kwaliteitsklassen waar veel meer data voor beschikbaar is. Dit verschijnsel is ook te zien bij zowel de PUNNs als de regressiebomen.

In het algemeen presteert random forest voor het kwaliteitselement fytoplankton slechter dan de andere biologische kwaliteitselementen (gemiddelde RMSE van 0.115). De andere drie kwaliteitselementen presteren allen gemiddeld hetzelfde (gemiddelde RMSE tussen 0.103 en 0.105). De algoritmes voor langzaam stromende wateren presteren allen slechter dan de gemiddelde voorspelfout voor alle algoritmes (gemiddelde RMSE van 0.106). Daarnaast presteren de sloten (voor twee van de drie kwaliteitselementen slechter dan gemiddeld) en de kanalen (voor drie van de vier kwaliteitselementen slechter dan gemiddeld) ook slecht ten opzichte van de watertypeclusters. De twee slechtst presenterende random forests zijn ook onderdeel van deze watertypeclusters. In beide gevallen wordt het minst gescoord voor het kwaliteitselement vis. De diepe meren en zwak brakke wateren presteren daarentegen beter dan gemiddeld voor waterflora, macrofauna en vis. Voor EKR-deelmaatlat macrofauna voor diepe meren toont random forest de beste prestatie.

De voorspelde EKR waarden zijn uitgezet tegen de werkelijke EKR waarden voor de trainingset (Figuur 4.2) en de validatieset (Figuur 4.3). De voorspelde EKR's komen voor alle EKR-deelmatlatten vrij goed overeen met de gemeten EKR's wanneer deze worden uitgezet voor de werkelijke EKR waarden in de trainingset. Dit is het resultaat van de training met deze data.

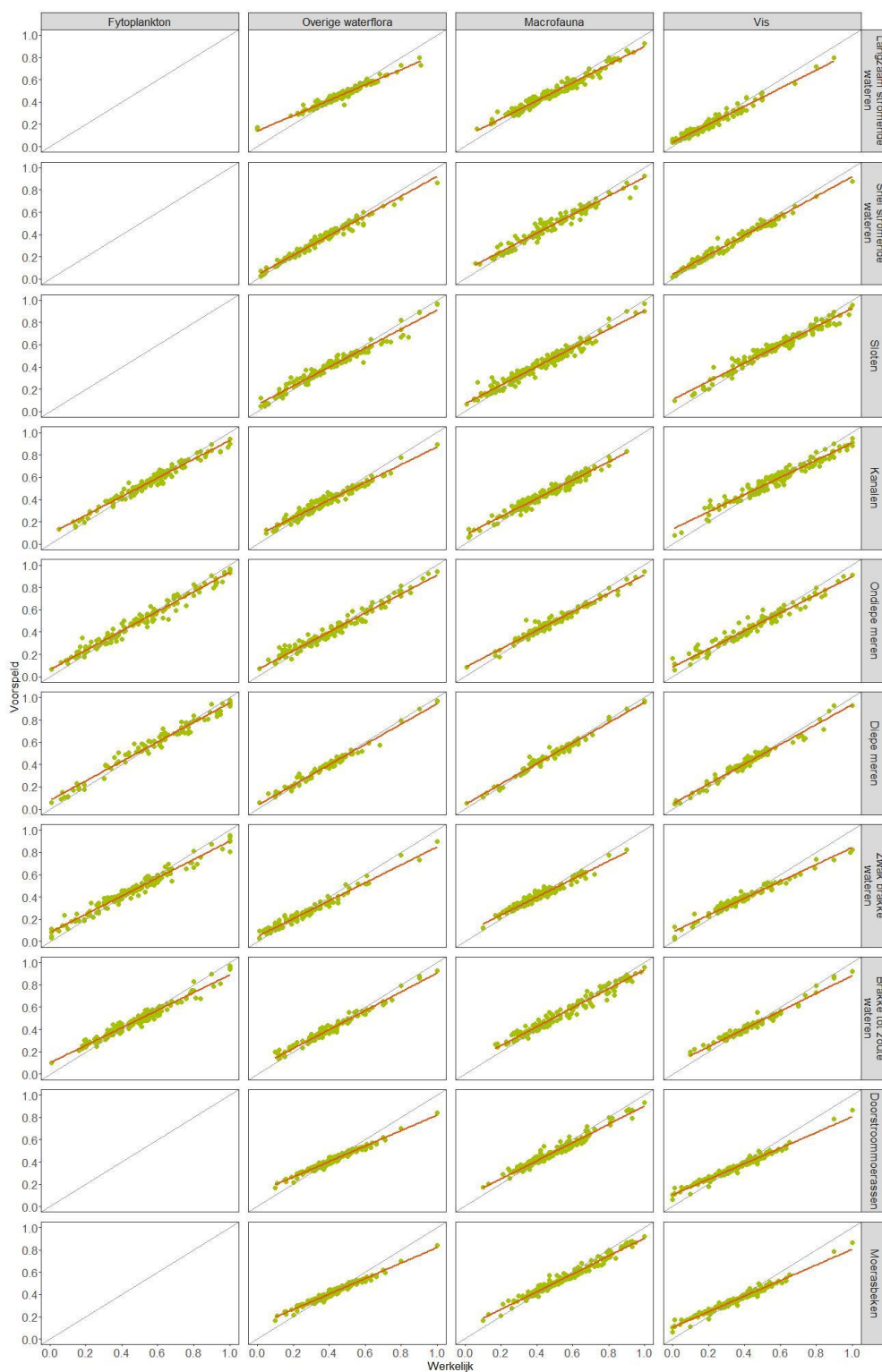
Wanneer echter gebruik wordt gemaakt van nieuwe data (validatieset) dan is er een afwijking zichtbaar tussen de voorspelde EKR's en de werkelijke EKR's (Figuur 4.3). Hierbij geldt in het algemeen dat de EKR wordt overschat bij een lage werkelijke EKR en onderschat bij een hoge werkelijke EKR. De mate van deze afwijking is afhankelijk van het watertype en het kwaliteitselement. Het is zeer waarschijnlijk dat hier het effect van de lage data beschikbaarheid in de hoge en lage ranges zichtbaar is. Door die beperkte beschikbaarheid wordt het model in deze regio's sterk gestuurd door een laag aantal records en vervolgens wordt het model ook gevalideerd op een nog lager aantal records. In de validatieset zit daardoor nog maar een enkel record in de buitenste klassen (en deels niet aan de buitenkant) waardoor de regressielijn vlakker gaat lopen. Daarnaast heeft het model ook meer moeite met de voorspelnauwkeurigheid in deze regio's ten opzichte van de kwaliteitsklassen waar veel meer data voor beschikbaar is. Dit verschijnsel is ook te zien bij zowel de PUNNs als de regressiebomen.

Tabel 4.2 Overzicht kwaliteitsscores van random forest berekend op zowel de trainingsdata en validatiedata.

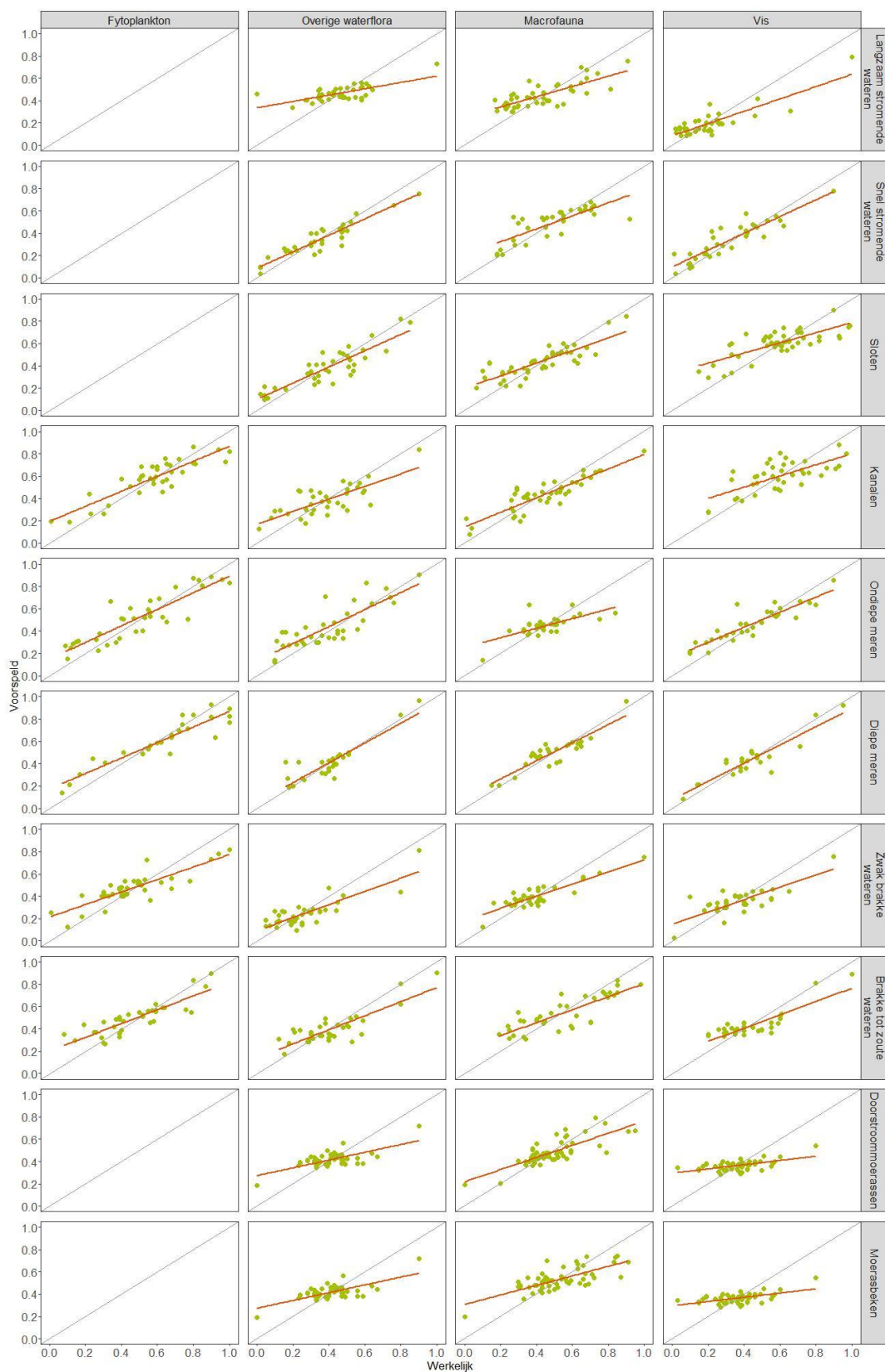
| Watertype | Kwaliteits- element | Trainingsdata | | | | Validatiedata | | | |
|---|------------------------|----------------|----------------------------|-------|-------|----------------|----------------------------|-------|-------|
| | | R ² | Fractie binnen ±0.10 | RMSE | CoD | R ² | Fractie binnen ±0.10 | RMSE | CoD |
| 1 Langzaam stromende wateren | Overige waterflora | 0.957 | 0.956 | 0.046 | 0.882 | 0.465 | 0.634 | 0.120 | 0.392 |
| | Macrofauna | 0.968 | 0.983 | 0.044 | 0.943 | 0.589 | 0.591 | 0.122 | 0.548 |
| | Vis | 0.961 | 0.994 | 0.037 | 0.937 | 0.716 | 0.737 | 0.107 | 0.673 |
| 2 Snel stromende wateren | Overige waterflora | 0.977 | 0.986 | 0.033 | 0.967 | 0.869 | 0.771 | 0.078 | 0.847 |
| | Macrofauna | 0.956 | 0.948 | 0.047 | 0.940 | 0.635 | 0.765 | 0.113 | 0.631 |
| | Vis | 0.977 | 0.985 | 0.033 | 0.967 | 0.807 | 0.727 | 0.091 | 0.793 |
| 3 Sloten | Overige waterflora | 0.963 | 0.951 | 0.047 | 0.949 | 0.774 | 0.667 | 0.100 | 0.770 |
| | Macrofauna | 0.959 | 0.967 | 0.045 | 0.944 | 0.680 | 0.674 | 0.112 | 0.654 |
| | Vis | 0.964 | 0.956 | 0.048 | 0.942 | 0.561 | 0.511 | 0.135 | 0.538 |
| 4 Kanalen | Fytoplankton | 0.965 | 0.964 | 0.043 | 0.948 | 0.761 | 0.694 | 0.110 | 0.749 |
| | Overige waterflora | 0.959 | 0.979 | 0.043 | 0.930 | 0.564 | 0.571 | 0.120 | 0.564 |
| | Macrofauna | 0.959 | 0.988 | 0.042 | 0.939 | 0.783 | 0.651 | 0.100 | 0.757 |
| | Vis | 0.951 | 0.929 | 0.059 | 0.916 | 0.491 | 0.513 | 0.136 | 0.490 |
| 5 Ondiepe meren | Fytoplankton | 0.971 | 0.942 | 0.050 | 0.961 | 0.773 | 0.514 | 0.123 | 0.763 |
| | Overige waterflora | 0.965 | 0.978 | 0.047 | 0.951 | 0.687 | 0.657 | 0.122 | 0.641 |
| | Macrofauna | 0.963 | 0.978 | 0.036 | 0.944 | 0.457 | 0.848 | 0.100 | 0.453 |
| | Vis | 0.958 | 0.891 | 0.052 | 0.935 | 0.812 | 0.677 | 0.098 | 0.773 |
| 6 Diepe meren | Fytoplankton | 0.973 | 0.970 | 0.052 | 0.962 | 0.860 | 0.680 | 0.115 | 0.822 |
| | Overige waterflora | 0.980 | 0.990 | 0.027 | 0.975 | 0.792 | 0.885 | 0.079 | 0.776 |
| | Macrofauna | 0.974 | 0.990 | 0.029 | 0.971 | 0.801 | 0.846 | 0.072 | 0.797 |
| | Vis | 0.972 | 0.968 | 0.035 | 0.965 | 0.825 | 0.833 | 0.080 | 0.824 |
| 7 Zwak brakke wateren | Fytoplankton | 0.966 | 0.934 | 0.053 | 0.942 | 0.716 | 0.595 | 0.119 | 0.677 |
| | Overige waterflora | 0.966 | 0.980 | 0.041 | 0.938 | 0.700 | 0.718 | 0.101 | 0.674 |
| | Macrofauna | 0.956 | 0.987 | 0.035 | 0.933 | 0.761 | 0.795 | 0.088 | 0.697 |
| | Vis | 0.969 | 0.948 | 0.046 | 0.922 | 0.617 | 0.684 | 0.103 | 0.609 |
| 8 Brakke tot zoute wateren | Fytoplankton | 0.957 | 0.958 | 0.051 | 0.926 | 0.727 | 0.667 | 0.108 | 0.698 |
| | Overige waterflora | 0.972 | 1.000 | 0.035 | 0.955 | 0.706 | 0.722 | 0.103 | 0.695 |
| | Macrofauna | 0.968 | 0.972 | 0.048 | 0.953 | 0.678 | 0.528 | 0.126 | 0.662 |
| | Vis | 0.967 | 1.000 | 0.036 | 0.937 | 0.696 | 0.676 | 0.089 | 0.676 |
| 9 Doorstroom- moerassen | Overige waterflora* | 0.971 | 0.980 | 0.039 | 0.892 | 0.462 | 0.680 | 0.099 | 0.434 |
| | Macrofauna | 0.961 | 0.991 | 0.035 | 0.939 | 0.607 | 0.745 | 0.102 | 0.601 |
| | Vis** | 0.969 | 0.947 | 0.047 | 0.894 | 0.319 | 0.681 | 0.115 | 0.267 |
| 10 Moerasbeken | Overige waterflora* | 0.971 | 0.980 | 0.039 | 0.892 | 0.462 | 0.680 | 0.099 | 0.434 |
| | Macrofauna | 0.970 | 0.977 | 0.040 | 0.939 | 0.525 | 0.625 | 0.118 | 0.504 |
| | Vis** | 0.969 | 0.947 | 0.047 | 0.894 | 0.319 | 0.681 | 0.115 | 0.267 |

* De maatlat voor overige waterflora is identiek voor doorstroommoerassen en moerasbeken en daarom is hiervoor één RF afgeleid.

** De maatlat voor vis is identiek voor doorstroommoerassen en moerasbeken en daarom is hiervoor één RF afgeleid.



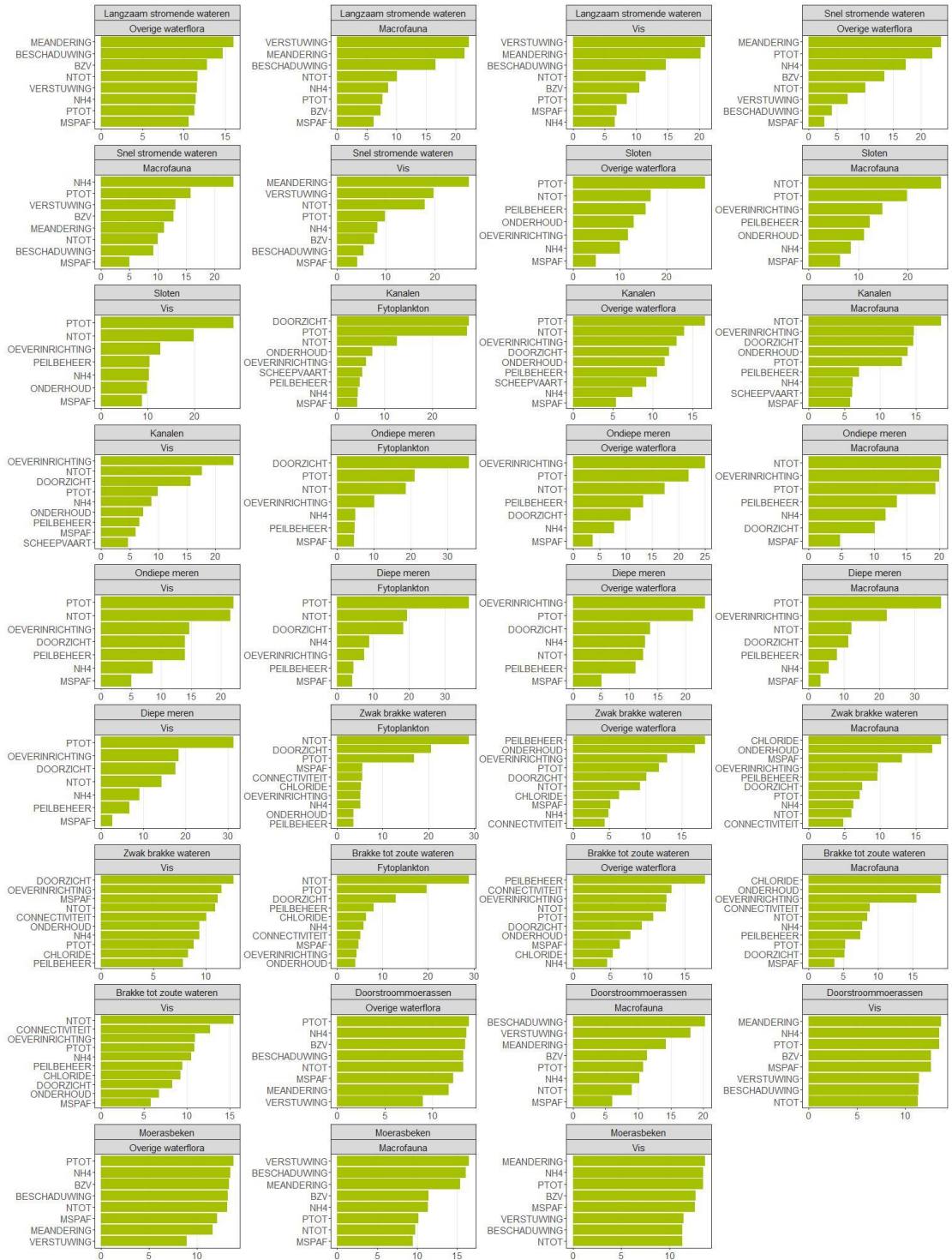
Figuur 4.2 Werkelijk EKR's (x-as) en voorspelde EKR's (y-as) voor de trainingsset voor ieder kwaliteitselement (van links naar rechts: fytoplankton, overige waterflora, macrofauna en vis) en watertypecluster (van boven naar beneden: langzaam stromende wateren, snel stromende wateren, sloten, kanalen, ondiepe meren, diepe meren, zwak brakke wateren, brak tot zoute wateren, doorstroommoerassen en moerasbeken). De zwarte lijn geeft de 1-op-1 lijn aan en de rode lijn geeft de lineaire relatie tussen de werkelijk EKR's en voorspelde EKR's aan.



Figuur 4.3 Werkelijk EKR's (x-as) en voorspelde EKR's (y-as) voor de validatieset voor ieder kwaliteitselement (van links naar rechts: fytoplankton, overige waterflora, macrofauna en vis) en watertypecluster (langzaam stromende wateren, snel stromende wateren, sloten, kanalen, ondiepe meren, diepe meren, zwak brakke wateren, brakke tot zoute wateren, doorstroommoerassen en moerasbeken). De zwarte lijn geeft de 1-op-1 lijn aan en de rode lijn geeft de lineaire relatie tussen de werkelijk EKR's en voorspelde EKR's aan.

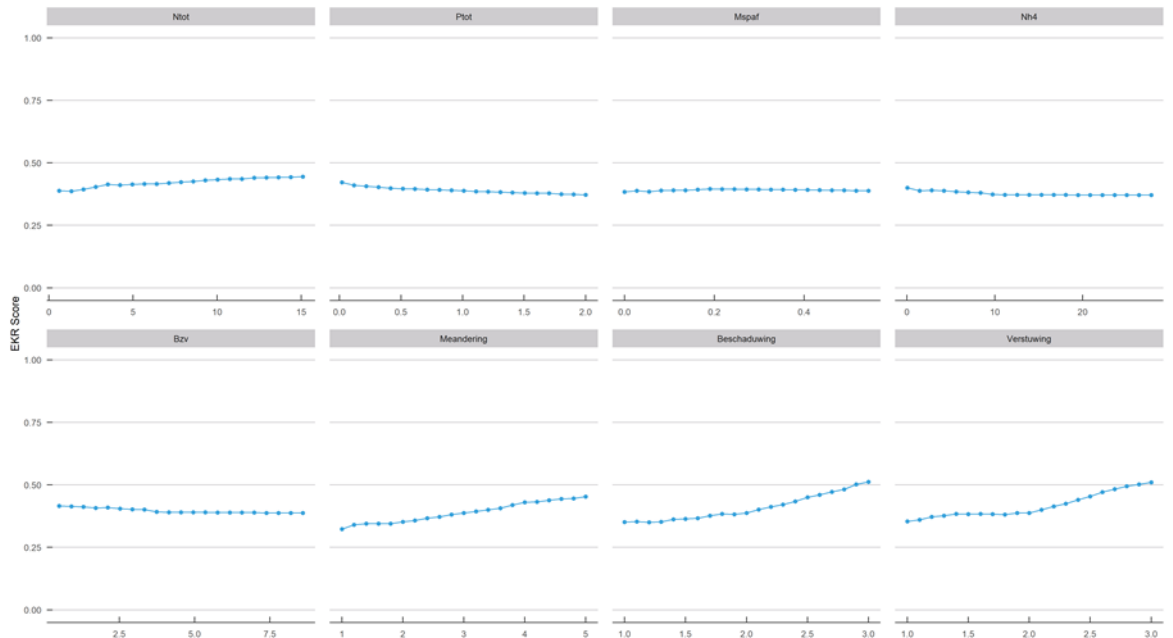
In Figuur 4.4 zijn de stuurvariabelen gerangschikt van meeste invloed op de juistheid van het model (boven; langere balk) naar minste invloed op de model juistheid (beneden; kortere balk) voor ieder watertypecluster en kwaliteitselement. Er zijn enkele algemene conclusies te trekken op basis van deze figuur:

- Meandering is alleen bij stromende wateren een stuurvariabele. In zowel langzaam als snelstromende wateren is het de belangrijkste stuurvariabele voor bijna alle kwaliteitselementen. Alleen voor macrofauna in snelstromende wateren is meandering niet de belangrijkste variabele. Bij de doorstroommoerassen en de moerasbeken is meandering alleen de belangrijkste variabele voor vis.
- In de langzaam stromende en snelstromende wateren is verstuwung een belangrijke variabele voor macrofauna en vissen, maar niet voor overige waterflora. Bij de doorstroommoerassen en de moerasbeken is verstuwung alleen een belangrijke variabele voor macrofauna.
- In bijna alle modellen zijn de nutriënten (Ntot en Ptot) sturend voor de model nauwkeurigheid (minstens één van de twee variabelen is het meest sturend voor de helft van de variabelen). De enige uitzonderingen hierop zijn overige waterflora in de langzaam stromende wateren en macrofauna in de zwak brakke wateren, doorstroommoerassen en moerasbeken.
- Maximum ammonium (NH₄) concentraties zijn slechts voor één EKR deelmaatlat de belangrijkste variabele, namelijk bij snelstromende wateren voor macrofauna.
- Toxiciteit (msPAF) is in 23 van de 33 modellen de variabele die het minst toevoegt aan de model nauwkeurigheid. Verder staat toxiciteit in acht gevallen op de tweede of derde plek van minst toevoegende variabelen aan de model nauwkeurigheid. Alleen voor macrofauna in de zwak brakke wateren is de toxiciteit van belang voor de model nauwkeurigheid.
- Doorzicht is voor fytoplankton een variabele die veel effect heeft op de model nauwkeurigheid. Dit komt overeen met de aanname dat doorzicht voor fytoplankton een responsievariabele is en niet een sturende variabele. Hoewel doorzicht een effect heeft op overige waterflora is het niet één van de meest sturende variabelen. Voor vis daarentegen is doorzicht vaak een meer sturende variabele, behalve in de brakke tot zoute wateren.
- Oeverinrichting is een belangrijke sturende variabele voor de diepe en ondiepe meren voor macrofauna, overige waterflora en vis. Voor deze twee watertypeclusters en deze kwaliteitselementen is oeverinrichting één van de drie meest sturende variabelen, samen met de Ntot en Ptot.
- Chloride is sterk sturend in de zwak brakke wateren en in de brakke tot zoute wateren voor de biologische toestand van macrofauna.



Figuur 4.4 Bijdrage van iedere stuurvariabele aan de EKR score (feature importance) voor iedere EKR deelmaatlat en watertypecluster. De lengte van de balk geeft aan hoeveel een variabele bijdraagt, waarbij een langere balk meer bijdrage betekent.

Voor model evaluatie zijn ook partial dependence figuren gemaakt. Figuur 4.5 toont een voorbeeld van een partial dependence figuur (alle figuren per kwaliteitselement en watertypecluster zijn opgenomen in Bijlage F). Deze figuur geeft het verloop aan voor de EKR bij wisselende waarden van de stuurvariabele terwijl de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden. De figuur laat zien dat bij een afname in P_{tot}, BZV en toxiciteit een hogere EKR wordt voorspeld en dat een toename in de andere stuurvariabelen leidt tot een hogere, voorspelde EKR bij toenemende waarden. Opvallend is dat bij een kleine toename in N_{tot} de voorspelde EKR ook toeneemt. Dit komt waarschijnlijk omdat er beken aanwezig zijn met een hoge concentratie totaal stikstof en daarnaast een vrij hoog verhang waardoor de EKR hoger is dan verwacht op basis van de totaal stikstof concentratie alleen.



Figuur 4.5 Partial dependence plot voor macrofauna in langzaam stromende wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.

4.3 Regressiebomen

De kwaliteitsscores (CoD, RMSE etc.) voor de regressiebomen (berekend met de Rpart routine in Rrandom forest) worden per watertypecluster en kwaliteitselement getoond in Tabel 4.3. De rest van de resultaten van de regressiebomen worden per watertype en kwaliteitselement weergegeven in Bijlage G. In deze bijlage worden voor elk watertypecluster en kwaliteitselement vier figuren getoond:

- De regressieboom
- De scatterplot van alle gemeten EKR-waarden op de x-as en de voorspelde EKR-waarden op de y-as, dus alle beschikbare data (training- en validatie data).
- Idem alleen de trainingsdata, gecodeerd als 'T'.
- Idem alleen de validatie-data, gecodeerd als 'V'.

Tabel 4.3 Overzicht kwaliteitsscores van de regressiebomen voor de trainingsdata en validatiedata.

| Watertype | Kwaliteits- element | Trainingsdata | | | | Validatiedata | | | |
|---|------------------------|----------------|----------------------------|------|------|----------------|----------------------------|------|------|
| | | R ² | Fractie binnen ±0.10 | RMSE | CoD | R ² | Fractie binnen ±0.10 | RMSE | CoD |
| 1 Langzaam stromende wateren | Overige waterflora | 0.35 | 0.69 | 0.12 | 0.35 | 0.21 | 0.61 | 0.14 | 0.20 |
| | Macrofauna | 0.61 | 0.55 | 0.11 | 0.61 | 0.48 | 0.52 | 0.13 | 0.45 |
| | Vis | 0.53 | 0.68 | 0.10 | 0.53 | 0.44 | 0.58 | 0.14 | 0.41 |
| 2 Snel stromende wateren | Overige waterflora | 0.76 | 0.82 | 0.09 | 0.76 | 0.66 | 0.57 | 0.12 | 0.66 |
| | Macrofauna | 0.62 | 0.61 | 0.12 | 0.63 | 0.38 | 0.59 | 0.15 | 0.33 |
| | Vis | 0.62 | 0.69 | 0.11 | 0.63 | 0.64 | 0.67 | 0.12 | 0.64 |
| 3 Sloten | Overige waterflora | 0.67 | 0.65 | 0.12 | 0.67 | 0.62 | 0.72 | 0.13 | 0.62 |
| | Macrofauna | 0.55 | 0.61 | 0.14 | 0.54 | 0.32 | 0.43 | 0.16 | 0.27 |
| | Vis | 0.59 | 0.60 | 0.13 | 0.60 | 0.31 | 0.55 | 0.17 | 0.29 |
| 4 Kanalen | Fytoplankton | 0.69 | 0.67 | 0.11 | 0.69 | 0.61 | 0.53 | 0.14 | 0.60 |
| | Overige waterflora | 0.56 | 0.67 | 0.11 | 0.57 | 0.38 | 0.43 | 0.15 | 0.33 |
| | Macrofauna | 0.59 | 0.62 | 0.11 | 0.59 | 0.55 | 0.49 | 0.14 | 0.55 |
| | Vis | 0.46 | 0.53 | 0.15 | 0.46 | 0.25 | 0.44 | 0.17 | 0.18 |
| 5 Ondiepe meren | Fytoplankton | 0.66 | 0.49 | 0.15 | 0.66 | 0.79 | 0.63 | 0.12 | 0.78 |
| | Overige waterflora | 0.59 | 0.54 | 0.14 | 0.59 | 0.52 | 0.43 | 0.15 | 0.44 |
| | Macrofauna | 0.61 | 0.75 | 0.10 | 0.61 | 0.21 | 0.58 | 0.13 | 0.14 |
| | Vis | 0.59 | 0.67 | 0.13 | 0.60 | 0.59 | 0.68 | 0.13 | 0.59 |
| 6 Diepe meren | Fytoplankton | 0.72 | 0.46 | 0.14 | 0.73 | 0.72 | 0.40 | 0.15 | 0.71 |
| | Overige waterflora | 0.61 | 0.73 | 0.10 | 0.62 | 0.48 | 0.54 | 0.13 | 0.44 |
| | Macrofauna | 0.72 | 0.77 | 0.09 | 0.72 | 0.52 | 0.58 | 0.12 | 0.46 |
| | Vis | 0.62 | 0.67 | 0.12 | 0.62 | 0.59 | 0.67 | 0.13 | 0.56 |
| 7 Zwak brakke wateren | Fytoplankton | 0.58 | 0.57 | 0.14 | 0.58 | 0.59 | 0.57 | 0.13 | 0.60 |
| | Overige waterflora | 0.62 | 0.71 | 0.10 | 0.62 | 0.45 | 0.56 | 0.13 | 0.43 |
| | Macrofauna | 0.61 | 0.79 | 0.08 | 0.62 | 0.48 | 0.69 | 0.12 | 0.47 |
| | Vis | 0.44 | 0.61 | 0.12 | 0.44 | 0.22 | 0.47 | 0.15 | 0.13 |
| 8 Brakke tot zoute wateren | Fytoplankton | 0.61 | 0.62 | 0.12 | 0.62 | 0.40 | 0.47 | 0.17 | 0.22 |
| | Overige waterflora | 0.64 | 0.67 | 0.10 | 0.63 | 0.62 | 0.64 | 0.12 | 0.59 |
| | Macrofauna | 0.69 | 0.59 | 0.12 | 0.69 | 0.49 | 0.50 | 0.16 | 0.44 |
| | Vis | 0.46 | 0.72 | 0.11 | 0.46 | 0.49 | 0.59 | 0.11 | 0.47 |
| 9 Doorstroom- moerassen | Overige waterflora* | 0.23 | 0.73 | 0.11 | 0.23 | 0.27 | 0.69 | 0.12 | 0.26 |
| | Macrofauna | 0.53 | 0.77 | 0.10 | 0.54 | 0.32 | 0.65 | 0.14 | 0.32 |
| | Vis** | 0.20 | 0.64 | 0.12 | 0.20 | 0.05 | 0.65 | 0.12 | 0.02 |
| 10 Moerasbeken | Overige waterflora* | 0.23 | 0.73 | 0.11 | 0.23 | 0.27 | 0.69 | 0.12 | 0.26 |
| | Macrofauna | 0.50 | 0.65 | 0.11 | 0.51 | 0.14 | 0.61 | 0.17 | 0.08 |
| | Vis** | 0.20 | 0.64 | 0.12 | 0.20 | 0.05 | 0.65 | 0.12 | 0.02 |

* De maatlat voor overige waterflora is identiek voor doorstroommoerassen en moerasbeken en daarom is hiervoor één regressieboom afgeleid

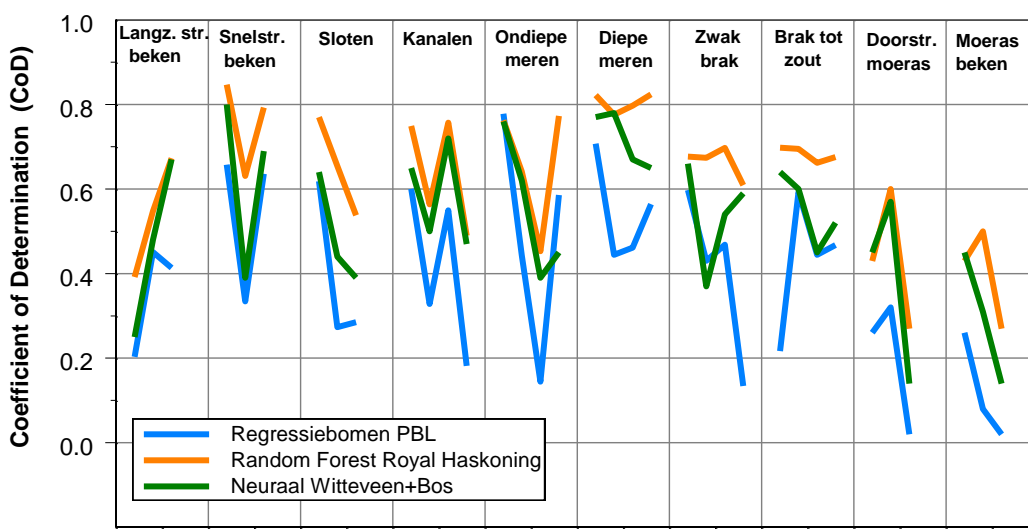
** Ook voor vis is de maatlat voor doorstroommoerassen en moerasbeken gelijk.

5 Vergelijking toegepaste rekenmethodes

5.1 Voorspel-performance

In dit hoofdstuk worden de drie rekenmethodes vergeleken wat betreft eigenschappen, zoals interpretatiemogelijkheden, en voorspel-performance. Alle 33 datasets (van de 35 dataset zijn er twee identiek aan een ander: de waterflora en de vis van doorstroommoerassen en moerasbeken) uit dit onderzoek zijn door Royal HaskoningDHV verdeeld in een training dataset (soms aangeduid als kalibratie-set) en een validatie dataset (of test dataset), volgens de verhouding 80% - 20%. Deze verdeling is steeds random tot stand gekomen. Elk instituut heeft exact dezelfde data en opdeling van 80% - 20% gebruikt.

Elk instituut heeft op basis van geschatte algoritmes op de trainingset voorspellingen gemaakt voor de validatieset. Hierbij worden de waarden van de stuurvariabelen gebruikt om een voorspelling te maken voor een nieuwe situatie. De resultaten van de voorspel-exercitie op de validatieset zijn samengevat in de tabellen in Hoofdstuk 4. De voorspel-performance is geanalyseerd door te kijken naar drie grootheden: (1) de Coefficient of Determination (CoD), (2) de fractie van de voorspellingen die ligt binnen een range van ± 0.10 van de werkelijke EKR-deelmaatlat-waarde en (3) de Root Mean Square Error (RMSE).



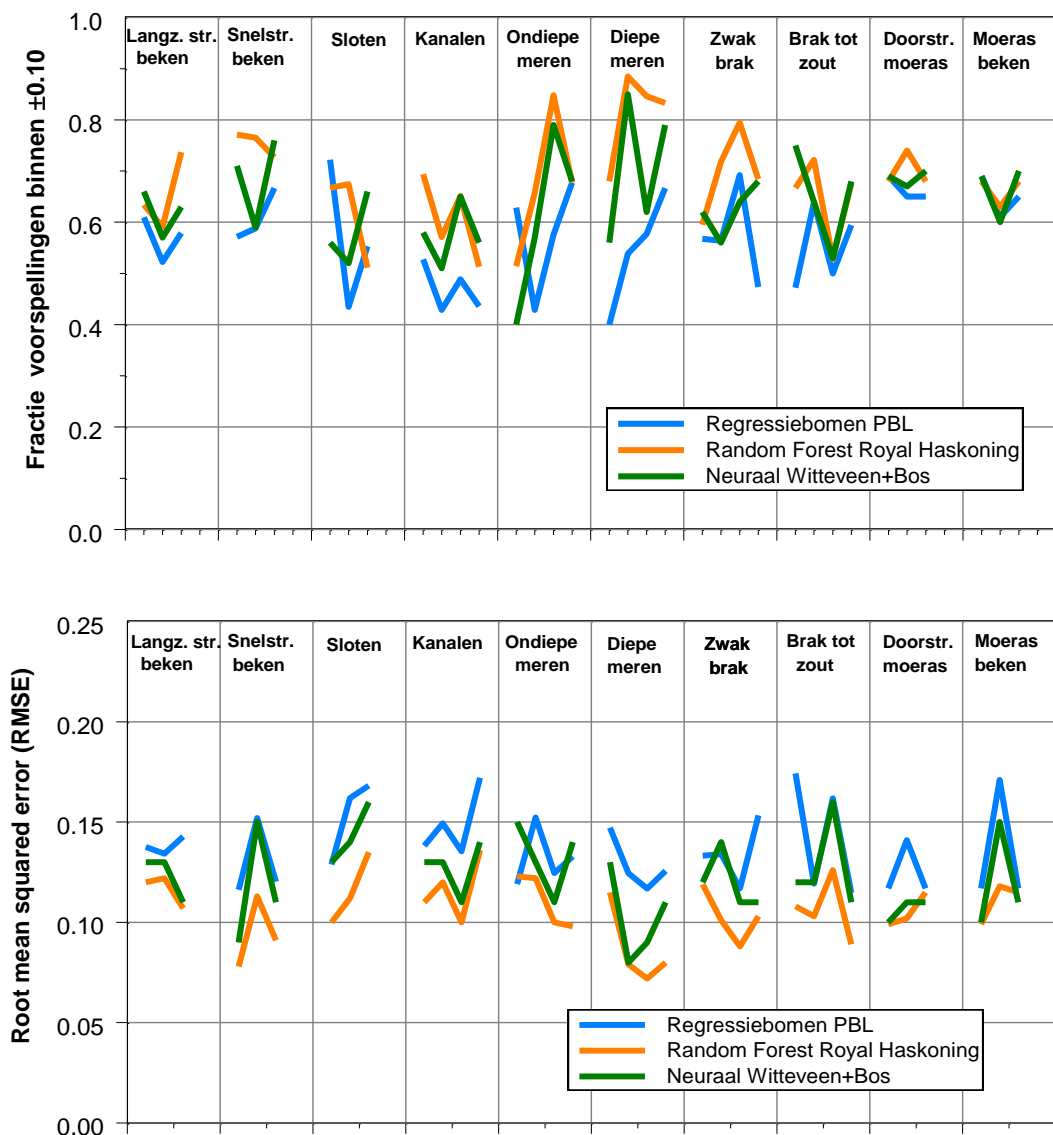
Figuur 5.1 CoD-waarden voor drie methodes en 33 EKR deelmaatlaten. De volgorde van de 33 EKR deelmaatlaten op de x-as is die zoals weergegeven in de evaluatie tabellen van de drie methodes weergegeven in Hoofdstuk 4 (Tabel 4.1, Tabel 4.2 en Tabel 4.3). Per watertypecluster is dat respectievelijk v.l.n.r. fytoplankton (indien van toepassing), overige waterflora, macrofauna en vis.

Figuur 5.1 toont de resultaten van de CoD. Enkele opvallende verschillen en overeenkomsten van de CoD scores voor de drie methodes:

- Random forest voorspellingen op de validatieset komen er het beste uit. Dat geldt voor 31 van de 33 EKR deelmaatlaten. PUNNs komen als tweede beste voorspelmethode naar voren, en regressiebomen als derde.
- De data voor snelstromende beken en diepe meren blijken met random forest het best te voorspellen van alle watertypen (random forest CoD's variërend tussen 0.63 en 0.84).

- Er zijn drie EKR deelmaatlaten die alle drie methoden slecht voorspellen, namelijk waterflora in langzaam stromende beken (CoD-waarden tussen 0.20 en 0.40) en vis in doorstroommoerassen en moerasbeken (CoD-waarden tussen 0.0 en 0.30).

De tweede grootheid die gebruikt wordt voor het samenvatten en vergelijken van de performance van de drie methodes is 'fractie binnen 0.10'. Met "binnen 0.10" bedoelen we dat als de echte EKR-waarde van een bepaald water de waarde 0.62 heeft er wordt gekeken of de voorspelling wel of niet in de range [0.52, 0.72] ligt. De fractie is het percentage voorspellingen dat binnen deze range van hun EKR-waarde liggen. Hoe dichterbij 1, hoe beter de voorspellingen. Deze grootheid is anders van karakter dan de CoD, in die zin dat het ongevoeliger is voor incidentele uitschieters zoals zeer slechte voorspellingen. Immers, zit een voorspelling buiten de 0.10-range, dan maakt het niet uit hoeveel de afwijking is. De resultaten voor deze grootheid liggen dichterbij elkaar dan voor CoD (zie het bovenste paneel in Figuur 5.2). Ook hier scoort de random forest methode het beste. Elk van de drie methodes scoort relatief slecht voor kanalen en sloten.



Figuur 5.2 Voorspel-performance voor 33 EKR deelmaatlaten volgens het 'fractie van de wateren binnen 0.10' (boven) en de RMSE (onder). De volgorde van 33 EKR deelmaatlaten op de x-as is gelijk aan die in de tabellen in Hoofdstuk 4. Per watertypecluster is dat respectievelijk v.l.n.r. fytoplankton (indien van toepassing), overige waterflora, macrofauna en vis.

Het onderste paneel in Figuur 5.2 geeft de voorspel-resultaten voor de gemiddelde voorspelfout (RMSE). Hier is de interpretatie andersom; hoe dichter deze waarde bij 0 ligt, hoe beter de voorspellingen. Deze figuur hangt nauw samen met die voor de CoD, maar invers (zie definitie van CoD en RMSE in Bijlage H). De resultaten zijn daarom vergelijkbaar met die getoond in Figuur 5.1 en het blijkt dat ook hier de random forest methode het best presteert.

De resultaten uit Figuur 5.1 en Figuur 5.2 zijn gecondenseerd samengevat in Tabel 5.1. In de tabel is per methode het gemiddelde van alle 33 CoD's berekend, idem voor RMSE en idem voor 'fractie binnen 0.10'. De tabel laat zien dat het beeld dat Figuur 5.1 en Figuur 5.2 geven, ook getalsmatig klopt. De met random forest berekende voorspellingen komen er voor elk van drie grootheden er als beste uit, daarna PUNNs gevolgd door de regressiebomen.

Tabel 5.1 Voorspel-performance gemiddeld over alle 33 EKR-deelmaatlaten.

| | Fractie binnen ± 0.10 | RMSE | CoD |
|-----------------------------|---------------------------|------|------|
| Random forest | 0.68 | 0.11 | 0.63 |
| Neurale netwerken met PUNNs | 0.63 | 0.12 | 0.53 |
| Regressiebomen | 0.57 | 0.14 | 0.40 |

5.2 Biologische interpretatie

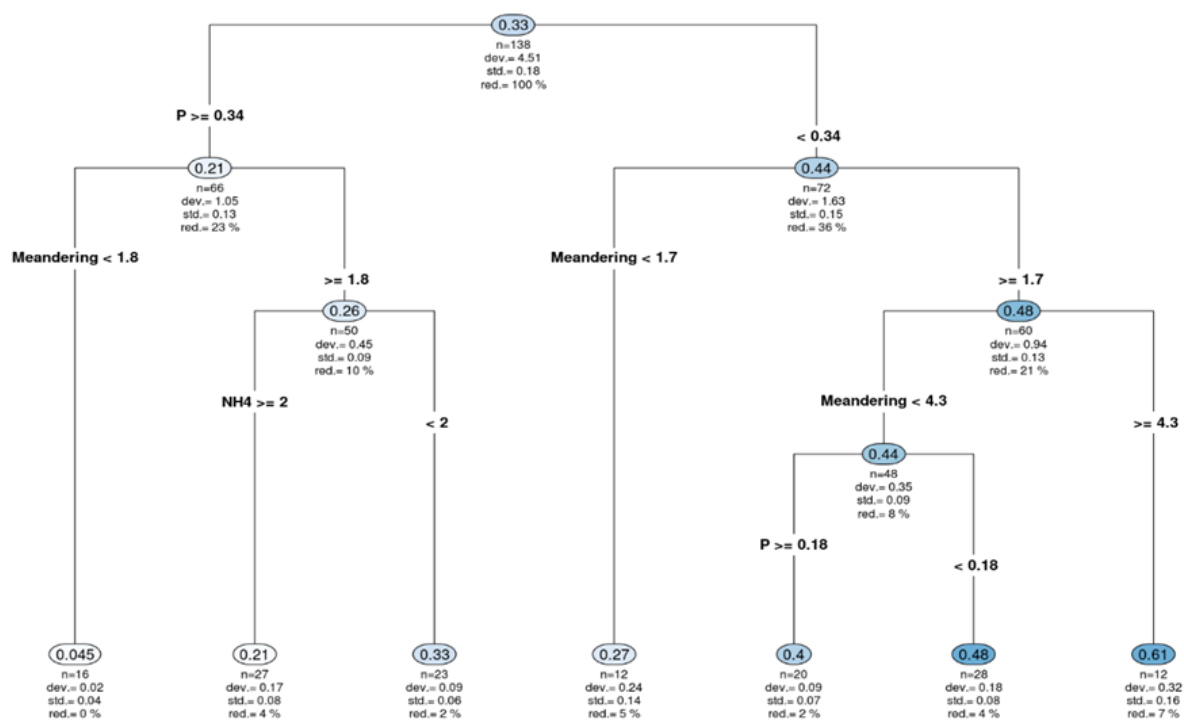
De drie gebruikte methodes verschillen in de mate van mogelijkheden voor biologische interpretatie. De helderste interpretatiemogelijkheden bieden de regressiebomen. Figuur 5.3 geeft een voorbeeld voor overige waterflora in snelstromende beken. Dit figuur kan als volgt worden gelezen: de statistieken van de data van alle wateren staan onder ellipsen (gemiddelde EKR-waarde van 0.33 met een standaarddeviatie van 0.18, 138 beken en deviantie van 4.51 voor de bovenste ellips). Het algoritme splitst of "knipt" de dataset vervolgens in twee groepen: een groep waarvan de records boven een optimale drempelwaarde van de stuurvariabele met de grootste voorspelkracht en de andere groep onder die waarde. De voorspelkracht (d.w.z. de variantie in data) van de twee groepen samen is daarmee maximaal verbeterd ten opzichte van de voorspelkracht van de oorspronkelijke groep.

Na de eerste splitsing wordt elke nieuwe groep wateren steeds opnieuw gesplitst, tot het moment waarop de voorspelkracht niet meer significant verbetert. De voorspelkracht van een splitsing kan afgeleid worden van de afname in deviantie (afgekort als 'dev' onder de ellips). De belangrijkste splitsing en stuurvariabele ligt boven in de "boom": de set van 138 beken wordt in twee groepen verdeeld: die met fosfaatconcentraties ≥ 0.34 (n 66 beken) en fosfaatconcentraties < 0.34 (72 beken). Na de splitsing wordt de bijbehorende EKR-waarde respectievelijk 0.21 en 0.44. Ptot is dus een belangrijke stuurvariabele voor deze 138 beken. De deviantie neemt af van 4.51 zonder splitsing naar een deviantie van $1.05 + 1.63 = 2.68$ na de splitsing.

De regressieboom wordt vervolgens driemaal gesplitst door drie stuurvariabelen: meandering, NH_4 en Ptot. De hele boom telt 7 eindknopen (onderste rij van de boom). De verklarende kracht van alle splitsingen volgt uit de afname van de deviantie: van 4.51 naar de som van de devianties van alle eindknopen: 1.11.

De regressieboom van deze dataset voorspelt dat de waterkwaliteit het beste is bij $P < 0.34$ en meandering ≥ 4.3 . Hier is de gemiddelde EKR het hoogst: 0.61 (rechter eindknoop). Aan de hand van de regressieboom kan de EKR van een nieuwe situatie worden afgeleid door simpelweg de regressieboom te doorlopen met nieuwe waarden voor Ptot, meandering en NH_4 . De regressiebomen voor alle 35 EKR deelmaatlaten zijn weergegeven in Bijlage G.

WaterSnel_Overigeflora



Figuur 5.3 Voorbeeld van een regressieboom voor waterflora in snelstromende beken.

Ook PUNNs laten een interpretatie toe, zij het lastiger dan regressiebomen. Hierna geven we twee voorbeelden voor fytoplankton (Figuur 5.4: voor alle formules, zie Bijlage C). De formules laten simpele relaties niet direct zien. Wel is duidelijk welke stuurvariabelen een rol spelen. Maar of in de bovenste formule de EKR stijgt bij toenemende Ntot concentraties is niet eenvoudig te zien (Ntot, weergegeven als TotN , komt tweemaal voor in de formule).

Daarnaast is het bij de PUNNs mogelijk om de bijdrage van iedere stuurvariabele aan de bepaling van de EKR score voor iedere EKR deelmaatlat in beeld te brengen via de variable importance.

$$\begin{aligned}
\text{Fytoplankton} = & + 0.3972 \\
& - 0.4123 \text{ TotP}^{0.5171} \\
& + 0.2854 \frac{1}{\text{TotN}^{0.7866}} \\
& - 0.01734 \text{ Zich}^{2.055} \\
& + 0.09588 \text{ TotN}^{0.2335} \text{ Zich}^{1.246}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Fytoplankton} = & + 0.4123 \\
& + 0.6367 \frac{1}{\text{TotN}^{1.047}} \\
& + 3.244e - 28 \frac{\text{Onde}^{14.45} \text{Chl}^{4.876} \text{NH4}^{1.965}}{\text{TotP}^{7.878}} \\
& - 0.07014 \frac{1}{\text{Zich}^{0.6445}}
\end{aligned}$$

Figuur 5.4 Wiskundige vergelijkingen voor twee PUNNs: boven voor 'fytoplankton in diepe meren', onder voor 'fytoplankton in zwak-brakke wateren'. Codering : TotN= totaal N, TotP= totaal P, Onde= onderhoud, Zich= doorzicht, Chl= Chloride, NH4= Ammonium.

De random forest-analyses zijn gebaseerd op een groot aantal regressiebomen zoals getoond in Figuur 5.3. Deze set van bomen kunnen niet 'gemiddeld' worden maar wel kan de invloed (importance) van elke stuurvariabele bepaald worden door een vorm van middeling over alle geschatte bomen (Figuur 4.4). Door een extra bewerking op de methode kan dus inzichtelijk gemaakt worden welke stuurvariabelen een grote rol spelen voor een EKR-score. Random forest kan dus wel inzicht geven in welke stuurvariabelen belangrijk zijn, maar geeft geen inzicht in de volgorde van stuurvariabelen, wat wel kan bij individuele regressiebomen. Echter, een voordeel van een random forest is dat, doordat het voor één EKR deelmaatlat meerdere regressiebomen worden opgesteld, het inzicht geeft in de onzekerheid van de berekening van de EKR-score. Daarnaast kunnen bij de random forest methode ook de partial dependence figuren relevante extra informatie geven (zie Paragraaf 4.2) Deze figuren geven het verloop aan voor de EKR bij wisselende waarden van de stuurvariabele terwijl de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.

Een ander punt dat ook gelinkt is aan interpretatiemogelijkheden, is de vraag of bij een voorspelling ook onzekerheden worden gegeven door de methode. Zoals we beschreven hebben is dat voor regressiebomen inderdaad het geval. Ook bij toepassing van random forest kunnen onzekerheden worden berekend. Onzekerheden met PUNNs zijn lastig te construeren.

6 Implementatie in KRW-Verkenner

In de nieuwe versie van de KRW-Verkenner (versie 2.4.1) zijn alle drie de rekenmethodes geïmplementeerd om de invloed van stuurvariabelen op de biologische waterkwaliteit (EKR) te bepalen. De random forest-benadering is als default-methode geselecteerd in de ecologische module van de KRW-verkenner. Een gebruiker kan er ook voor kiezen om een van de andere twee methodes, PUNNs of regressiebomen, te gebruiken om EKR scores te bepalen. De software is te vinden op de website van de KRW-Verkenner: www.krwwerkenner.nl en vrij te downloaden en te gebruiken.

In de update van de Gebruikershandleiding (Deltares, 2021), die ook op de website te vinden is, staat een overzicht van de verschillende versies van de kennisregels.

Door de introductie van nieuwe stuurvariabelen voor de regionale ecologische kennisregels zijn de oude rekenregels (EEE3, EEE4, PUNN1, PUNN3 en de regressiebomen) verwijderd uit de KRW-Verkenner versie 2.4.1. Mocht een gebruiker deze nog willen gebruiken, dan kan gebruik gemaakt worden van KRW-Verkenner versie 2.3, die ook nog beschikbaar is op de website.

7 Conclusies en aanbevelingen

7.1 Conclusies

De belangrijkste conclusies uit het rapport worden hieronder vermeld.

- Voor het afleiden van de nieuwe kennisregels is gebruik gemaakt van een verbeterde en aangevulde dataset ten opzichte van de voorgaande uit 2015. Hierbij is actuele data toegevoegd en gebruik gemaakt van gedetailleerde data van waterbeheerders die gegevens beschikbaar hebben over delen van waterlichamen (trajecten). De EKR's zijn berekend met recent beschikbaar gekomen nieuwe KRW-maatlatten.
- De set met stuurvariabelen is uitgebreid met drie nieuwe stuurvariabelen ten opzichte van de eerdere versie van de KRW-Verkenner (versie 2.3): maximum ammoniumconcentraties, doorzicht en toxiciteit (msPAF). Ammonium, vooral afkomstig uit RWZI's en overstorten kan op veel plekken voor een lagere EKR-score zorgen. De watertypeclusters die in de KRW-Verkenner worden gebruikt zijn aangevuld met de nieuwe types doorstroommoerassen (R19) en moerasbeken (R20). Omdat de maatlatten voor overige waterflora en vis voor R19 en R20 exact gelijk zijn, is er geen onderscheid gemaakt in de rekenmethodes voor die kwaliteitselementen. Voor macrofauna is wel een onderscheid gemaakt.
- Op basis van de verbeterde en uitgebreide dataset zijn er drie methodes gebruikt om ecologische kennisregels af te leiden: random forest (door Royal HaskoningDHV), neuraal netwerk met PUNN-methode (door Witteveen+Bos) en regressiebomen (door het PBL). Met deze kennisregels kan de invloed van abiotische karakteristieken van een waterlichaam (stuurvariabelen) op de biologische waterkwaliteit bepaald worden.
- De methodes zijn onderling vergeleken wat betreft eigenschappen en voorspel-performance. Random forest laat op basis van deze vergelijking de beste performance zien, gevolgd door de PUNNs en daarna de regressiebomen.
- Voor alle drie de methodes geldt dat sommige EKR deelmaatlatten vlakke regressie lijnen tonen wanneer de methodes worden toegepast op nieuwe data (de validatieset). De afvlakking is gerelateerd aan de lage data beschikbaarheid in de hoge en lage ranges (EKR > 0.6, EKR < 0.2) in de trainingset.
- De drie methodes verschillen in de mate van biologische interpretatie. De regressiebomen tonen de helderste interpretatiemogelijkheden. Uit de opbouw van regressiebomen is direct af te lezen welke stuurvariabelen een rol spelen in de bepaling van de EKR scores en hoe groot de bijdrage van deze stuurvariabelen is. Ook voor de PUNNs is zichtbaar welke stuurvariabelen een rol spelen maar de bijdrage is niet direct af te lezen. Door voor elke stuurvariabele de Variable Importance (VI) te berekenen is wel mogelijk om een gevoel te krijgen hoe zwaar een stuurvariabele weegt. Voor de random forest methode is een vergelijkbare feature importance berekend, die inzicht geeft welke stuurvariabelen van meeste invloed zijn op de juistheid van de voorspelling van de EKR scores.
- De nieuwe random forest methode is al toegepast in de Nationale Analyse Waterkwaliteit (Galen et al., 2020), met uitzondering van de doorstroommoerassen en de moerasbeken. In maart 2021 worden de drie methodes beschikbaar gesteld in de nieuwe versie van de KRW-Verkenner (versie 2.4.1) via de website van de KRW-Verkenner: www.krwwerken.nl.

7.2 Aanbevelingen

De aanbevelingen die uit het onderzoek naar voren komen, worden hieronder benoemd.

- Verbeteringen in dataverzameling. Met name de toerekening van waterkwaliteitsparameters aan andere waterlichamen, wat door waterbeheerders in bepaalde gevallen wordt toegepast, leidt tot extra veel ruis in de dataset.

- Het zoveel mogelijk verwijderen van default of expert oordelen van waterbeheerders uit de dataset. Een probleem hierbij kan zijn dat er onvoldoende waarnemingen overblijven voor een kwalitatief acceptabele statistische relatie.
- Uitbreiding van de dataset met vooral meer waarden aan de uiteinden van het spectrum (zeer lage en zeer hoge EKR's) om de dichtheid aan data hier te vergroten. Het beschikbaar komen van meer traject data in de laatste jaren kan hieraan bijdragen. Juist kleine trajecten kunnen door specifieke abiotiek een heel hoge of heel lage EKR scoren voor een kwaliteitselement.
- Naast verbetering van de data van de huidige stuurvariabelen, zou ook kunnen worden overwogen om per watertypecluster een meer specifieke set stuurvariabelen te gebruiken. Deze set zou per watertypecluster misschien zelfs kleiner kunnen zijn dan de huidige sets. Met een kleinere set variabelen, die wel een hoog verklarend vermogen hebben, zijn in principe betere relaties af te leiden. Op deze manier zou mogelijk ook meer gebruik kunnen worden gemaakt van de data, die binnen het ESF-spoor door de waterbeheerders wordt verzameld.
- Binnen de randvoorwaarden van dit project is het niet mogelijk gebleken om een methode te ontwikkelen, waarmee een uitspraak kan worden gedaan over de betrouwbaarheid van de voorspellingen van een nieuwe dataset. Het lijkt nuttig om een melding te kunnen krijgen bij een KRW-Verkenner berekening, wanneer de ingevoerde waarden van de stuurvariabelen buiten de range vallen, waarbinnen de output als kwalitatief acceptabel kan worden beschouwd. Wanneer zo'n methode zou kunnen worden ontwikkeld, kan deze worden toegevoegd aan de KRW-Verkenner software.

8 Lijst met afkortingen

| | |
|-------|--|
| CoD | Coefficient of Determination |
| EKR | Ecologische KwaliteitsRatio |
| ESF | Ecologische Sleutelfactoren |
| KRW | Kaderrichtlijn Water |
| LD | Limnodata Neerlandica |
| msPAF | meer-soorten Potentieel Aangetaste Fractie |
| NAW | Nationale Analyse Waterkwaliteit |
| PBL | Planbureau voor de Leefomgeving |
| PUNN | Product Unit Neuraal Netwerk |
| RMSE | Root Mean Square Error |
| RWZI | Rioolwaterzuiveringsinstallatie |
| SGBP | Stroomgebiedbeheerplan |
| STOWA | Stichting Toegepast Onderzoek Waterbeheer |
| VI | Variable Importance |
| WKP | Waterkwaliteitsportaal |
| WSA | Watersysteemanalyse |

9 Literatuur

- Cleij, P., S. Loos, A. van der Linden, J. van den Roovaart, (2020). Achtergrondrapportage Nationale Analyse Waterkwaliteit 2019. Deltares-rapport 11203700-003-BGS-0002.
- Deltares (2021). Installatie handleiding KRW-Verkenner (WFD-Explorer 2.4.1).
https://publicwiki.deltares.nl/download/attachments/90428880/KRW_Verkenner_UserManual_2_4_1_NL.pdf?version=1&modificationDate=1612283759973&api=v2
- De Niet, A. C. (2015). Update Ecologische modellen KRW-verkenner, Witteveen+Bos, referentie GV1201-1/15-002.578.
- Evers, C.H.M., A.J.M. van den Broek, R. Buskens, A. Van Leerdam, R.A.E. Knoben, F.C.J. Van Herpen, en R. Pot. (2018). 'Omschrijving mep en maatlatten voor Sloten en kanalen voor de kaderrichtlijn water 2021-2027'. STOWA 2018-50. Amersfoort: STOWA.
- Fennema, M., (2018). Afleiden waarden voor stuurvariabele Toxiciteit, Witteveen+Bos, referentie 109708/18-019.053
- Gaalen, F. van, L. Osté, (2020). Addendum bij het eindrapport van de Nationale Analyse Waterkwaliteit; Onderdeel van de Delta-aanpak Waterkwaliteit. PBL, Den Haag: Planbureau voor de Leefomgeving.
- Gaalen, F. van, L. Osté en E. van Boekel, (2020). Nationale analyse waterkwaliteit; Onderdeel van de Delta-aanpak Waterkwaliteit; Den Haag: Planbureau voor de Leefomgeving. PBL-publicatienummer 4002.
- Geurts P., D. Ernst, and L. Wehenkel, (2006) "Extremely randomized trees", Machine Learning, 63(1), 3-42.
- Loos, S., L. Renaud, P. Groenendijk, P. Cleij, A. van der Linden, F. van der Bolt en T. Kroon, (2020), Rapportage Basisprognoses waterkwaliteit 2019. Deltares-rapport 11203700-000-BGS-0002.
- Posthuma, L., D. de Zwart, R. Keijzers en J. Postma (2016). Ecologische Sleutefactor Toxiciteit, Deel 2 Kalibratie: toxische druk en ecologische effecten op macrofauna. STOWA rapport 2016-15 B.
- Pot, R. (2018). QBwat, programma voor beoordeling van de biologische waterkwaliteit volgens de Nederlandse maatlatten voor de Kaderrichtlijn Water (Versie 6.02). Geraadpleegd van <http://www.roelfpot.nl/qbwat>.
- Pot, R. (2019, maart 18). Update-notitie QBWat 6.03.
- Schomaker, A.H.H.M. & M. Schipper, (2015). Verbetering kennisregels ecologische effecten ten behoeve van de KRW-verkenner. Rapport Royal Haskoning DHV R00003.
- Van der Molen, D. T., R. Pot, C. H. M. Evers, F. C. J. Van Herpen, L. L. J. Van Nieuwerburgh, (2019). Referenties en maatlatten voor natuurlijke watertypen voor de kaderrichtlijn water 2021-2027 (Nr. rapportnummer 2018-49). Amersfoort: STOWA.
- Visser, H., P.J.T.M. van Puijenbroek, P.H.M. Janssen, (2008). Stuurfactoren voor de ecologische kwaliteit van regionaal oppervlaktewater. Een statistische analyse met regressiebomen voor de Ex-ante evaluatie KRW. PBL-rapport 500140002/2008.

- Visser, H. & R. Wortelboer, (2013c). De ecologische kwaliteit van Nederlands oppervlaktewater: een analyse met regressiebomen. PBL-notitie 1075, 25 februari 2013.
- 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.

Bijlagen

A Aanlevering dataset voor de Nationale Analyse Waterkwaliteit

In 2020 heeft het Planbureau voor de Leefomgeving (PBL) een nationale analyse uitgevoerd naar de actuele toestand van watersystemen en een voorspelling van de toekomstige toestand (2027). Voor deze analyse heeft het PBL gevraagd om een complete dataset van de actuele toestand in alle waterlichamen (n = 724).

A.1 Data aanlevering

Na uitvraag door PBL hebben de waterschappen stuurvariabelen en EKR's aangeleverd van de waterlichamen binnen hun beheergebied. Deze data is aangeleverd in een standaard format waarna deze bij elkaar in een overkoepelend bestand zijn geplaatst. De nutriënten (totaal stikstof en totaal fosfor) en BZV zijn daarna toegevoegd. De nutriënten zijn toegevoegd op basis van de data die de waterschappen hebben aangeleverd in 2018 aan het waterkwaliteitsportaal. BZV is toegevoegd op basis van een extra uitvraag aan de relevante waterschappen of, waar mogelijk, vanuit de uitkomsten van watersysteemanalyses bij de waterschappen.

Vanwege het beschikbaar komen van de nieuwe maatlatten voor het berekenen van de EKR is besloten om de huidige toestand te bepalen met de oude en de nieuwe maatlatten (Van der Molen e.a., 2019). De EKR's op basis van de oude maatlatten zijn uit het waterkwaliteitsportaal (versie 2018, inclusief update oktober 2018) gehaald. Daarnaast is er een uitvraag gedaan aan de waterschappen voor het opleveren van EKR's op basis van de nieuwe maatlatten of monsters voor het berekenen van de EKR's. Een groot deel van de waterschappen heeft vervolgens nieuwe EKR's aangeleverd terwijl een aantal waterlichamen monsters hebben aangeleverd. Uiteindelijk hebben alle waterschappen hiervoor data geleverd. De onderstaande tabel geeft een overzicht van de waterschappen die monsters hebben aangeleverd en waarvoor er binnen dit project nieuwe maatlatten zijn doorgerekend.

Overzicht van de doorgerekende kwaliteitselementen per watertype en per waterschap.

| Waterschap | Type | Kwaliteitselement |
|---|------------------------|--------------------|
| Waterschap Amstel, Gooi en Vecht | M6a, M6b, M7b, M10 | Overige waterflora |
| | M14, M20, M27 | Vis |
| Waterschap Brabantse Delta | M6b | Overige waterflora |
| | M30, R4 | Macrofauna |
| | M14 | Vis |
| Hoogheemraadschap Delfland | M3, M7b, M10 | Overige waterflora |
| | M23 | Vis |
| Wetterskip Fryslân | M1b, M3, M6b, M7b, M10 | Overige waterflora |
| | M30, R4 | Macrofauna |
| | M14, M27, R4, R5, R6 | Vis |
| Hoogheemraadschap Schieland en Krimpenerwaard | M3, M6b, M7b, M8, M10 | Overige waterflora |
| | M30 | Macrofauna |
| | M14, M20, M27 | Vis |
| Hoogheemraadschap Rijnland | M3, M6a, M7b, M8, M10 | Overige waterflora |
| | M14, M20, M23 | Vis |
| Waterschap Vechtstromen | M1a, M3 | Overige waterflora |
| | R4a, R5, R6, R13 | Vis |

Het doorrekenen van de nieuwe maatlatten is gedaan met QBWat 6.02 (Pot, 2018). Met QBWat kan de biologische waterkwaliteit worden beoordeeld op basis van monsters met fytoplankton, macrofyten, macrofauna of vis. De input van QBWat is een lijst met monsters (zie QBWat handleiding) of een IM-Aquo format en waar nodig een lijst met meetpunten. In de lijst met meetpunten staat de koppeling tussen het meetpunt en de waterlichamen. Als er meerdere meetpunten per waterlichaam zijn is er vaak een wegingsfactor toegevoegd. In de uitkomsten van QBWat staan onder andere de maatlat score (EKR) per monster en na aggregatie de EKR per meetpunt en per waterlichaam. Met deze uitkomsten is vervolgens de gemiddelde EKR per waterlichaam berekend op basis van de drie meest recente meetjaren (in periode 2009 t/m 2017, oudere monster zijn niet meegenomen). Een uitgebreide omschrijving van de methodiek voor het doorrekenen van de EKR per waterschap is beschreven in Bijlage A.2.

A.2 Volledigheid van de dataset

Na aanlevering van de data door de waterschappen zijn de data samengevoegd in een overkoepelend bestand. De uiteindelijke dataset omvat 669 waterlichamen (van in totaal 724 waterlichamen) waarvoor data beschikbaar is. De grote wateren en kustwateren zijn niet meegenomen in de dataset.

De volledigheid van de dataset is hieronder beschreven:

- Zes waterlichamen zijn toegevoegd ten opzichte van SGBP2. Voor waterschap Hollandse Delta zijn de Gaatkensplas en Koedoodseplas (NL19_30_3) en De Dalle (NL19_31_3) toegevoegd. Terwijl bij waterschap Aa en Maas twee waterlichamen opgesplitst zijn in twee losse waterlichamen (namelijk de Oploosche Molenbeek, Oeffeltsche Raam e.a. (NL38_8P) opgesplitst in de Oploosche Molenbeek (NL38_8P(A)) en de Oeffeltsche Raam e.a. (NL38_8P(B)) en de Ledeaekerse Beek en St Anthonisloop (NL38_8S) opgesplitst in de Ledeaekerse Beek (NL38_8S(A)) en de St Anthonisloop (NL38_8S(B)).
- Vier waterlichamen zijn vervallen ten opzichte van SGBP2, namelijk de eerdergenoemde Oploosche Molenbeek, Oeffeltsche Raam e.a. (NL38_8P) en de Ledeaekerse Beek en St Anthonisloop (NL38_8S) van waterschap Aa en Maas. En daarnaast de Zuid-Willemsvaart in Den Bosch (NL38_5D) van waterschap Aa en Maas en Afwatering Spijkenisse (NL19_20_2) van Waterschap Hollandse Delta.
- Er zijn drie waterlichamen waarvoor de stuurvariabelen niet volledig zijn aangeleverd, inclusief de twee nieuwe waterlichamen in waterschap Hollandse Delta.
- Er zijn 51 waterlichamen waarvoor één of meerdere EKR's missen voor de nieuwe maatlatten en 49 waterlichamen waarvoor de EKR niet is bepaald voor één of meer kwaliteitselementen met de oude maatlatten.

B Uitgebreide omschrijving van toetsing van nieuwe KRW-maatlatten

Onderstaand is per waterschap beschreven hoe de toetsing van de nieuwe KRW-maatlatten in QBWat 6.02 is verlopen.

Waterschap Amstel, Gooi en Vecht

Het waterschap heeft data aangeleverd voor overige waterflora en vis voor de periode 2006 t/m 2017 in IM-Aquo format. Van de meetwaarden is een subset gemaakt van de monsters waarvoor het watertype een nieuwe maatlat heeft. Daarnaast is voor vis het bemonsteringsoppervlakte van m² naar hectare (ha) omgerekend. Het meetpuntenbestand voor vis is aangepast vanwege te hoge wegingsfactoren, deze zijn allen gedeeld door 1000. Omdat het meetpuntenbestand niet de waterlichaamcodes aangaf maar een code op basis van de waterlichaam naam (bijvoorbeeld NL11_Amstellandboezem voor waterlichaamcode NL_11_1_1), zijn de berekende EKR's waterlichamen vervolgens gekoppeld met de waterlichaamcodes op basis van de code met de waterlichaamnaam.

Waterschap Brabantse Delta

Waterschap Brabantse Delta heeft zelf vis voor stromende wateren doorgerekend en daarnaast data aangeleverd voor de andere waterlichamen. Voor de M14 waterlichamen zijn per waterlichaam QBwat bestanden aangeleverd, de EKR's voor deze waterlichamen zijn zonder aanpassingen aan de bestanden bepaald. Voor overige waterflora en macrofauna is door het waterschap een koppeltabel aangeleverd met de meetpunten per waterlichaam (inclusief weging) en de meetjaren per meetpunt. Op basis van deze data zijn een meetpuntenbestand en een meetwaardenbestand gemaakt voor overige waterflora en voor macrofauna. Binnen het waterschap zijn er drie M30 waterlichamen waarvoor bij de toetsing van macrofauna de chloride concentratie nodig is. Het waterschap heeft per waterlichaam een chloride concentratie aangeleverd die voor alle meetpunten binnen het waterlichaam gebruikt zijn. Voor de waterlichamen NL25_47 (Molenkreek complex) en NL25_18 (Roode Vaart) zijn, in tegenstelling tot de informatie in de koppeltabel, de monsters uit 2017 niet meegenomen omdat deze data niet is aangeleverd.

Hoogheemraadschap Delfland

Het hoogheemraadschap heeft meetpunten en meetwaarden aangeleverd voor overige waterflora in UM-Aquo format. De meetwaarden zijn gefilterd op de meetpunten van de waterlichamen waarvoor overige waterflora berekend is. Daarnaast zijn er twee M23 waterlichamen waarvoor de maatlat van vis is veranderd. Voor NL15_07 (Duinwater Solleveld) zijn er geen recente visbemonsteringen gedaan, waardoor er geen data beschikbaar is. Voor NL15_08 (Duinwater Meijendel) geldt dat de ecologische toestand bepaald wordt door Hoogheemraadschap Rijnland, daarom is de EKR gebruikt zoals bepaald door Hoogheemraadschap Rijnland.

Wetterskip Fryslân

Het wetterskip heeft data aangeleverd voor overige waterflora en macrofauna in de periode 2015 t/m 2017. In deze periode zijn alle waterlichamen minst eenmaal bemonsterd. Voor alle waterlichamen is vervolgens voor de aangepaste maatlatten een EKR berekend, waarbij de R4 monsters voor macrofauna als een R4a type zijn beoordeeld. De nieuwe maatlatten voor vis zijn niet doorgerekend omdat de data nog niet beschikbaar was tijdens dit project.

Hoogheemraadschap Rijnland

Het hoogheemraadschap heeft data aangeleverd voor overige waterflora en macrofauna voor de bemonsterde jaren en voor vis in de periode van 2006 t/m 2016. Alle databestanden zijn in het IMAquo format aangeleverd. Omdat de databestanden per jaar of per waterlichaam zijn aangeleverd, is alle data eerst bij elkaar gevoegd, waarbij is gefilterd op de waterlichamen die opnieuw getoetst moesten worden voor het kwaliteitselement. Vervolgens zijn de monsters van vis eerst met de Aquo-kit getoetst om de visbestandschatting te berekenen, dit is nodig om de aantallen om te zetten naar aantal per oppervlakte. Vervolgens is de EKR berekend voor overige waterflora, macrofauna en vis voor de geselecteerde waterlichamen.

Waterschap Scheldestromen

Het waterschap heeft EKR's aangeleverd per waterlichaam voor de kwaliteitselementen die gemeten zijn. Vervolgens is gemiddeld over de metingen van de drie meest recente jaren om de EKR te bepalen.

Hoogheemraadschap Schieland en Krimpenerwaard

De aangeleverde data voor overige waterflora, macrofauna en vis zijn zonder aanpassingen als invoer gebruikt voor QBWat. Vervolgens zijn de meetobjecten gekoppeld aan de waterlichaamcode (bijvoorbeeld NL39_KOP0109 aan waterlichaam NL39_19a).

Waterschap Vechtstromen

Het waterschap heeft data aangeleverd die gebruikt zijn voor de toetsingen in 2016 en 2017 voor overige waterflora en vis. Voor overige waterflora en vis zijn de projectieregels uit 2017 gebruikt om de meetpunten aan waterlichamen te koppelen. In de projectieregels staat aan welke meetlocatie de waterlichamen zijn gekoppeld. Deze meetlocaties zijn vervolgens in het meetpuntenbestand gekoppeld aan een meetpunt waarvoor monsters beschikbaar zijn. Voor overige waterflora waren er enkele waterlichamen waarvoor de bijbehorende meetlocatie niet in het meetpuntenbestand stonden waardoor deze niet zijn doorgerekend (namelijk voor NL36_OWM_013, NL36_OWM_016 en NL36_OWM_017).

C Formules van de PUNNS

C.1 Langzaam stromende beken

$$\begin{aligned} \text{Macrofauna} = & + 0.2098 \\ & + 0.03114 \frac{\text{Mean}^{0.154} \text{Scha}^{0.9069} \text{TotN}^{0.7634} \text{BOD}^{0.4026}}{\text{TotP}^{0.3898} \text{NH4}^{0.4273}} \\ & - 0.04765 \text{Scha}^{1.709} \\ & - 4.935e - 05 \frac{\text{Scha}^{1.531} \text{TotN}^{1.937} \text{BOD}^{1.827}}{\text{TotP}^{1.228} \text{NH4}^{1.391} \text{Weir}^{0.7375}} \\ \\ \text{Overigewaterflora} = & + 0.08301 \\ & - 0.002716 \frac{1}{\text{NH4}^{1.684}} \\ & + 0.0005118 \frac{\text{Weir}^{1.457}}{\text{NH4}^{2.336}} \\ & + 0.3183 \text{Mean}^{0.2139} \\ \\ \text{Vis} = & + 0.2708 \\ & - 0.1777 \frac{1}{\text{TotN}^{0.3946}} \\ & + 0.0003803 \frac{\text{Mean}^{1.862} \text{Weir}^{2.54}}{\text{TotP}^{0.6204}} \end{aligned}$$

C.2 Snel stromende wateren

$$\begin{aligned} \text{Macrofauna} = & + 2.133 \\ & + 1.167 \text{Scha}^{0.7514} \\ & - 1.86 \frac{\text{Scha}^{0.7082} \text{NH4}^{0.05085}}{\text{Mean}^{0.1576} \text{TotN}^{0.1411}} \\ & - 0.8707 \text{Mean}^{0.1787} \text{TotN}^{0.2237} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Overigewaterflora} = & - 0.3147 \\
& + 0.1094 \frac{BOD^{0.858}}{Mean^{0.4383} TotP^{0.5031} TotN^{0.4428} NH4^{0.1589}} \\
& + 0.005945 \frac{NH4^{0.9713} Weir^{1.074}}{TotP^{0.8456}} \\
& - 0.1254 \frac{1}{Mean^{1.278} TotP^{0.3409}} \\
& + 0.5269 \frac{Mean^{0.163}}{NH4^{0.08025} BOD^{0.1811}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Vis} = & - 0.4239 \\
& + 0.8273 \frac{Mean^{0.1172} Weir^{0.2359}}{TotN^{0.168} BOD^{0.07912}} \\
& - 2.485 \frac{1}{Mean^{1.11} TotN^{2.234}} \\
& + 0.03213 \frac{1}{TotN^{0.6438} NH4^{0.9609}}
\end{aligned}$$

C.3 Sloten

$$\begin{aligned}
\text{Macrofauna} = & - 0.1198 \\
& - 0.02212 \frac{Peil^{4.143}}{Onde^{5.359} TotN^{2.195}} \\
& + 0.0003434 Peil^{5.994} \\
& + 0.739 \frac{Peil^{0.1133}}{TotN^{0.3824}} \\
\text{Overigewaterflora} = & + 0.1849 \\
& + 0.1155 \frac{Peil^{0.2013} Onde^{0.7338}}{TotP^{0.3076}} \\
& - 0.1088 TotP^{0.7114}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Vis = & + 0.5003 \\
& + 0.02587 \frac{Oeve^{0.9006} Oude^{0.4833} TotN^{0.3946}}{TotP^{0.2754} NH4^{0.1743}} \\
& - 0.1526 \frac{TotP^{0.9838}}{NH4^{0.2419}} \\
& - 0.06051 \frac{Oude^{0.7653} TotP^{0.4076} NH4^{0.5837}}{Peil^{0.2959} (PAF + 0.5)^{1.86}} \\
& + 0.3916 \frac{Oude^{0.645} TotP^{0.5478} NH4^{0.5771}}{TotN^{0.461}}
\end{aligned}$$

C.4 Kanalen

$$\begin{aligned}
Fytoplankton = & + 0.3202 \\
& + 0.4796 \frac{1}{Oeve^{0.4467} Sche^{0.631}} \\
& + 0.05523 \frac{1}{TotP^{0.4431} Zich^{1.215}} \\
& - 0.3736 \frac{1}{Zich^{0.6228}} \\
& + 0.2397 Oeve^{0.5857} Zich^{0.413} \\
Macrofauna = & + 0.08695 \\
& + 0.2046 \frac{Peil^{0.7142} Zich^{0.3187}}{Oude^{0.8595} Sche^{0.5638} TotP^{0.2468}} \\
& - 0.007211 \frac{Peil^{2.085} NH4^{0.3319}}{Oeve^{3.936} TotP^{0.7998} Zich^{0.8675}} \\
& + 0.1262 \frac{Oude^{1.334} Sche^{1.182} NH4^{0.1089}}{Peil^{0.6267} TotN^{0.5569}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Overigewaterflora} = & + 1.133 \\
& - 0.1691 \frac{Sche^{1.184} TotN^{0.6328} Zich^{0.1826}}{Onde^{0.6702} NH4^{0.06985}} \\
& + 0.04823 \frac{1}{NH4^{0.8286}} \\
& - 1.058 \frac{Onde^{0.5642}}{Oeve^{0.4387} Sche^{1.612} TotN^{0.6781}} \\
& - 0.1875 \frac{Onde^{1.077} TotP^{0.4599}}{TotN^{0.6108} Zich^{0.6661}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Vis} = & + 2.174 \\
& - 0.3921 \frac{1}{Oeve^{1.235}} \\
& - 1.273 \frac{TotN^{0.05843}}{Zich^{0.09346}}
\end{aligned}$$

C.5 Ondiepe meren

$$\begin{aligned}
\text{Fytoplankton} = & + 0.2493 \\
& - 0.03507 \frac{Peil^{0.5397} TotN^{0.4691} NH4^{0.6552}}{TotP^{0.6303}} \\
& + 0.1719 \frac{NH4^{0.4919}}{TotP^{0.4368}} \\
& - 0.316 TotP^{0.5584} \\
& + 0.1655 Oeve^{0.8074} Zich^{0.5803}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Macrofauna} = & - 0.02774 \\
& + 2.424e - 05 \frac{Oeve^{9.5} TotP^{0.4083}}{TotN^{2.757}} \\
& + 4.637e - 05 \frac{1}{Zich^{2.592}} \\
& + 0.5 \frac{1}{TotP^{0.0863} Zich^{0.1655}} \\
& - 0.1903 \frac{1}{Oeve^{0.4342} Peil^{0.2093} Zich^{0.639}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Overigewaterflora} = & - 0.0436 \\
& + 0.1652 \frac{\text{Oeve}^{0.5345}}{\text{TotP}^{0.4453}} \\
& - 0.06068 \frac{1}{\text{TotP}^{0.7076}} \\
& + 0.09872 \text{Zich}^{0.6404}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Vis} = & - 0.02447 \\
& + 0.4095 \frac{\text{Oeve}^{0.1397}}{\text{TotP}^{0.2834} \text{TotN}^{0.1689}} \\
& - 0.1972 \frac{1}{\text{Peil}^{0.8327} \text{TotN}^{0.5439} \text{Zich}^{0.5482}} \\
& - 0.0374 \frac{1}{\text{TotP}^{0.6804}}
\end{aligned}$$

C.6 Diepe meren

$$\begin{aligned}
\text{Fytoplankton} = & + 0.3972 \\
& - 0.4123 \text{TotP}^{0.5171} \\
& + 0.2854 \frac{1}{\text{TotN}^{0.7866}} \\
& - 0.01734 \text{Zich}^{2.055} \\
& + 0.09588 \text{TotN}^{0.2335} \text{Zich}^{1.246}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Macrofauna} = & + 0.4398 \\
& - 0.2346 \text{TotP}^{0.6126} \\
& - 0.0008344 \frac{1}{\text{TotN}^{2.675}} \\
& + 0.0061 \frac{\text{Oeve}^{2.529}}{\text{TotP}^{0.3912}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Overigewaterflora} = & - 2.571 \\
& + 2.756 \frac{1}{\text{TotN}^{0.02097}} \\
& + 0.08966 \frac{1}{\text{TotP}^{0.2758}} \\
& + 1.34e - 05 \text{Oeve}^{6.112} \text{Peil}^{3.428}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Vis} = & - 0.4743 \\
& - 0.000586 \frac{1}{\text{TotP}^{1.275}} \\
& + 0.09479 \frac{\text{Oeve}^{1.137} \text{TotP}^{0.1955} \text{Zich}^{0.4357}}{\text{NH4}^{0.1752}} \\
& + 0.4797 \frac{1}{\text{TotP}^{0.1616} \text{Zich}^{0.09425}} \\
& + 0.00281 \frac{\text{Zich}^{1.251} \text{NH4}^{0.8357}}{\text{TotP}^{0.8061} \text{TotN}^{0.9841}}
\end{aligned}$$

C.7 Zwak brakke wateren

$$\begin{aligned}
\text{Fytoplankton} = & + 0.4123 \\
& + 0.6367 \frac{1}{\text{TotN}^{1.047}} \\
& + 3.244e - 28 \frac{\text{Onde}^{14.45} \text{Chl}^{4.876} \text{NH4}^{1.965}}{\text{TotP}^{7.878}} \\
& - 0.07014 \frac{1}{\text{Zich}^{0.6445}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Macrofauna} = & + 0.186 \\
& + 0.01455 \text{Peil}^{3.402} \\
& + 5.885e - 05 \frac{\text{Chl}^{0.4733}}{\text{Peil}^{1.445} (\text{PAF} + 0.5)^{7.127}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Overigewaterflora} = & - 0.1444 \\
& + 0.3333 \text{ TotP}^{0.1913} \text{ Zich}^{0.2356} \\
& - 4.3e - 10 \text{ Conn}^{17.92} \\
& + 0.000214 \frac{\text{Chl}^{0.7645}}{\text{TotP}^{0.9514}} \\
& + 0.09544 \frac{\text{Onde}^{3.082}}{\text{Chl}^{0.2325} \text{ TotP}^{0.2488}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Vis} = & - 2.055 \\
& - 2.584 \frac{1}{\text{NH4}^{0.5075}} \\
& - 0.01745 \frac{1}{\text{Oeve}^{1.413} \text{ Zich}^{1.269}} \\
& + 2.671 \frac{1}{\text{NH4}^{0.03522}} \\
& + 2.24 \frac{\text{Onde}^{0.0392} \text{ Chl}^{0.0115}}{\text{TotN}^{0.01906} \text{ NH4}^{0.518}}
\end{aligned}$$

C.8 Brakke tot zoute wateren¹

$$\begin{aligned}
\text{Fytoplankton} = & - 0.1478 \\
& + 0.6182 \frac{1}{\text{TotN}^{0.3847}} \\
& + 0.2658 \frac{1}{\text{TotP}^{0.2062}} \\
\text{Macrofauna} = & - 11.01 \\
& - 0.000241 \text{ Zich}^{15.16} \\
& + 11.27 \frac{1}{\text{NH4}^{0.004442}} \\
& + 4.736e - 05 \text{ Oeve}^{0.9699} \text{ Chl}^{0.8637} \\
& + 0.1538 \frac{\text{Onde}^{4.069} \text{ NH4}^{0.4402}}{\text{Peil}^{1.363} \text{ TotN}^{1.844}}
\end{aligned}$$

¹ PUNN vis-2 is weergegeven

$$\begin{aligned}
\text{Overigewaterflora} = & + 0.07138 \\
& - 0.01324 \frac{\text{Onde}^{3.164} \text{Conn}^{1.234}}{\text{Peil}^{2.085}} \\
& + 0.1471 \frac{\text{Onde}^{0.8467} \text{Conn}^{0.2316} \text{Chl}^{0.1078}}{\text{TotP}^{0.1317} \text{TotN}^{0.2637}} \\
& - 0.02627 \frac{1}{\text{TotP}^{0.8657}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Vis} = & + 1.113 \\
& + 0.01337 \frac{1}{\text{TotP}^{1.096}} \\
& - 0.5589 \frac{\text{Onde}^{0.4801} \text{TotN}^{0.1138} \text{NH4}^{0.04036}}{\text{Oeve}^{0.3056}} \\
& - 640.3 \frac{\text{Peil}^{0.9527} \text{Zich}^{0.444}}{\text{Onde}^{2.64} \text{Chl}^{0.9363}}
\end{aligned}$$

C.9 Moerasbeken

$$\begin{aligned}
\text{Macrofauna}_{R19} = & + 0.4985 \\
& - 0.1783 \text{NH4}^{0.07111} \text{BOD}^{0.4591} \\
& + 0.003603 \frac{\text{Mean}^{2.452}}{\text{BOD}^{1.445}} \\
& + 0.002358 \frac{\text{TotN}^{0.4627} \text{BOD}^{1.13} \text{Scha}^{1.44} \text{Weir}^{0.9363}}{\text{TotP}^{0.5857}} \\
& + 0.1389 \frac{1}{\text{Scha}^{1.247}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Macrofauna}_{R20} = & + 0.2897 \\
& + 0.2088 \text{TotN}^{0.1057} \text{Weir}^{0.1197} \\
& - 1.084 \frac{\text{TotP}^{0.6924} \text{PAF}^{0.1066} \text{BOD}^{0.3167}}{\text{TotN}^{0.8157} \text{Scha}^{0.2362} \text{Weir}^{0.4501}} \\
& + 0.2021 \frac{\text{PAF}^{0.499} \text{Mean}^{0.431} \text{Scha}^{0.7456} \text{Weir}^{0.2168}}{\text{TotP}^{0.2121}} \\
& - 0.08794 \frac{\text{PAF}^{0.7634} \text{BOD}^{0.6799} \text{Scha}^{0.9759}}{\text{TotN}^{0.08626} \text{TotP}^{0.7038} \text{NH4}^{0.1086}}
\end{aligned}$$

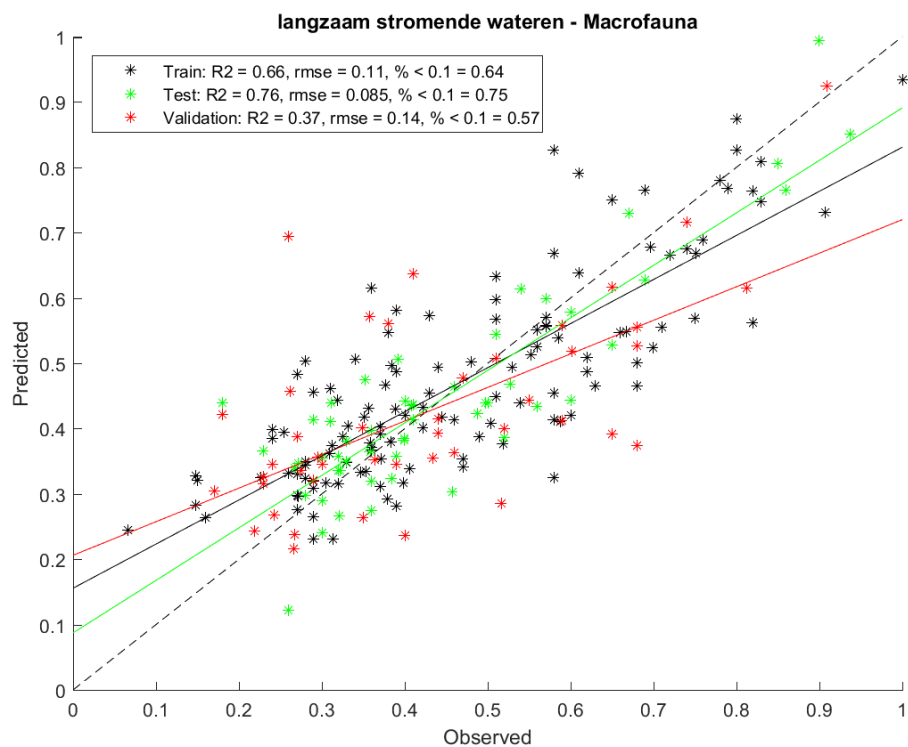
$$\begin{aligned}
\text{Overigewaterflora} = & + 0.2414 \\
& + 0.1749 \frac{1}{BOD^{0.5205}} \\
& + 0.2011 PAF^{0.8522} BOD^{0.6212} \\
& + 0.007708 \frac{Mean^{0.9299} Scha^{0.8531}}{NH4^{0.5726}}
\end{aligned}$$

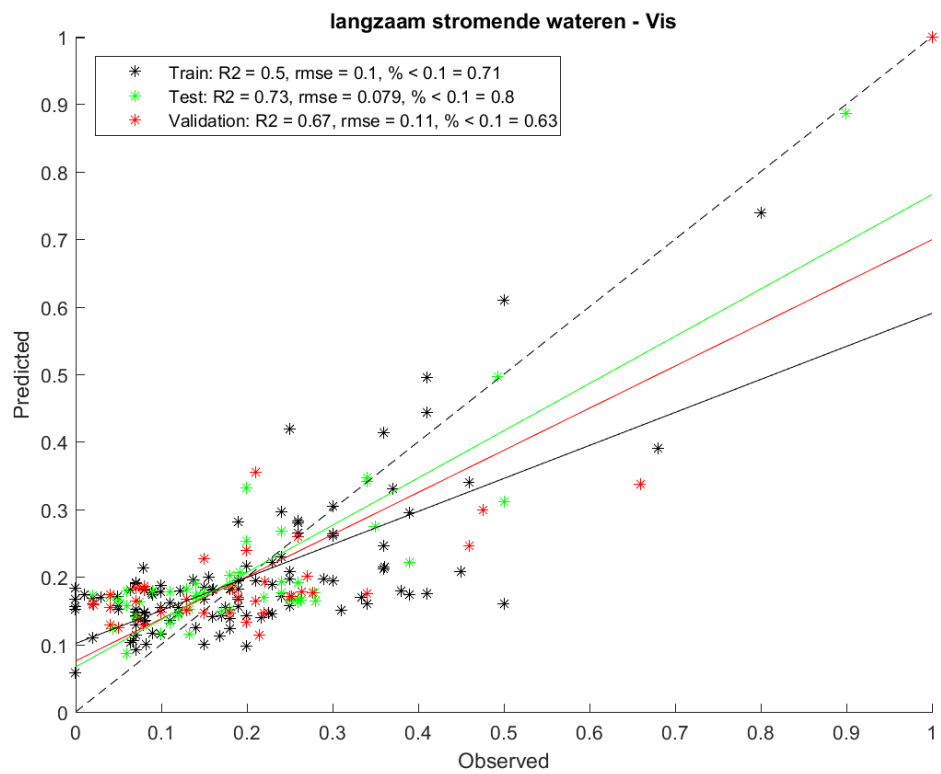
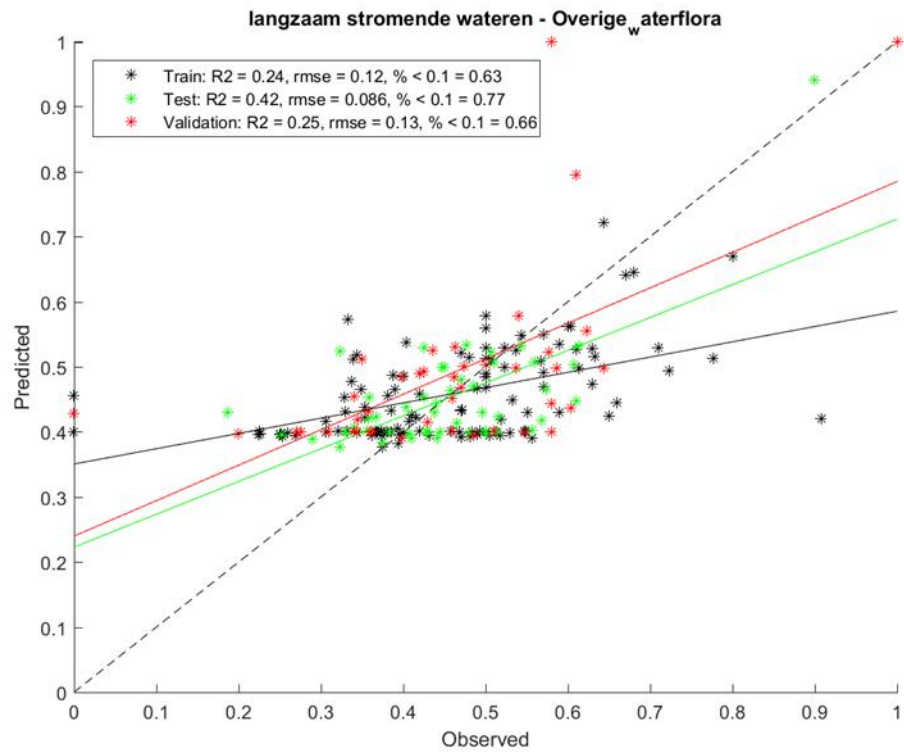
$$\begin{aligned}
\text{Vis} = & + 0.3523 \\
& - 0.8265 \frac{TotP^{0.4801} PAF^{0.4796}}{Mean^{0.6991}} \\
& - 0.03321 \frac{1}{TotP^{0.2779}} \\
& + 0.2048 \frac{PAF^{0.1739} Mean^{0.4433}}{Scha^{0.9679}}
\end{aligned}$$

D Prestatieplots PUNNs

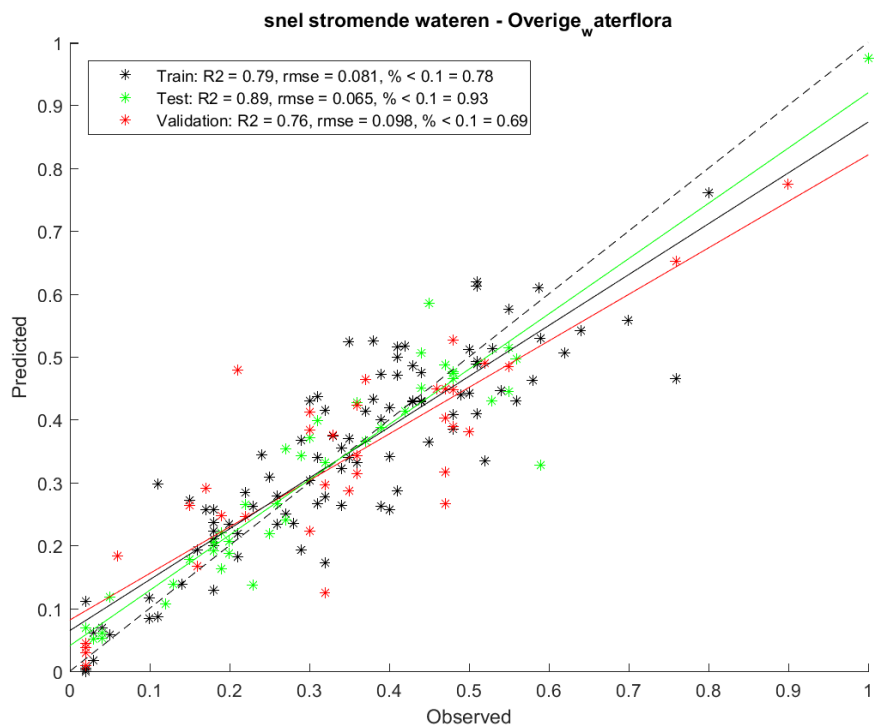
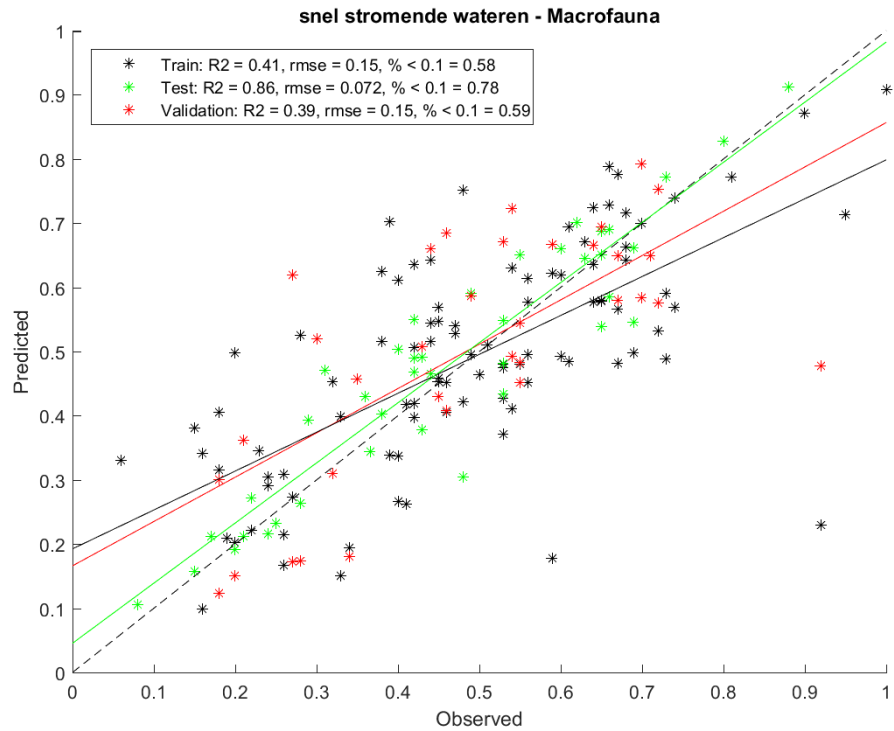
In de figuren in deze bijlage is weergegeven hoe de PUNNs presteren. De voorspellingen van de PUNNs is afgezet tegen de daadwerkelijk geobserveerde EKR-waarden. De verschillende delen van de dataset (training, test, validatie) zijn daarbij afzonderlijk weergegeven.

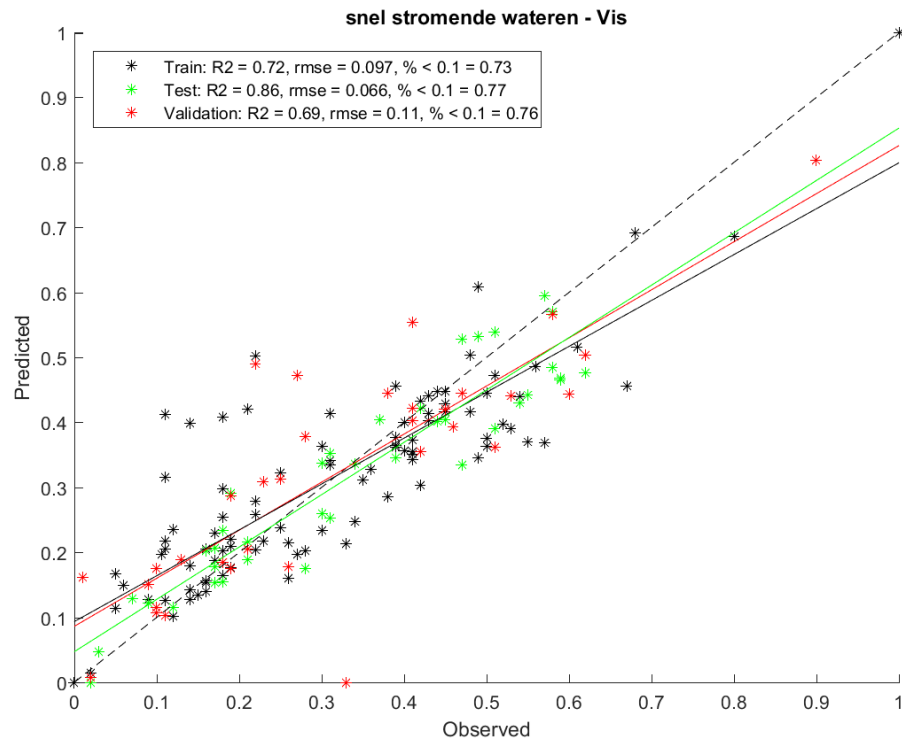
D.1 Langzaam stromende beken



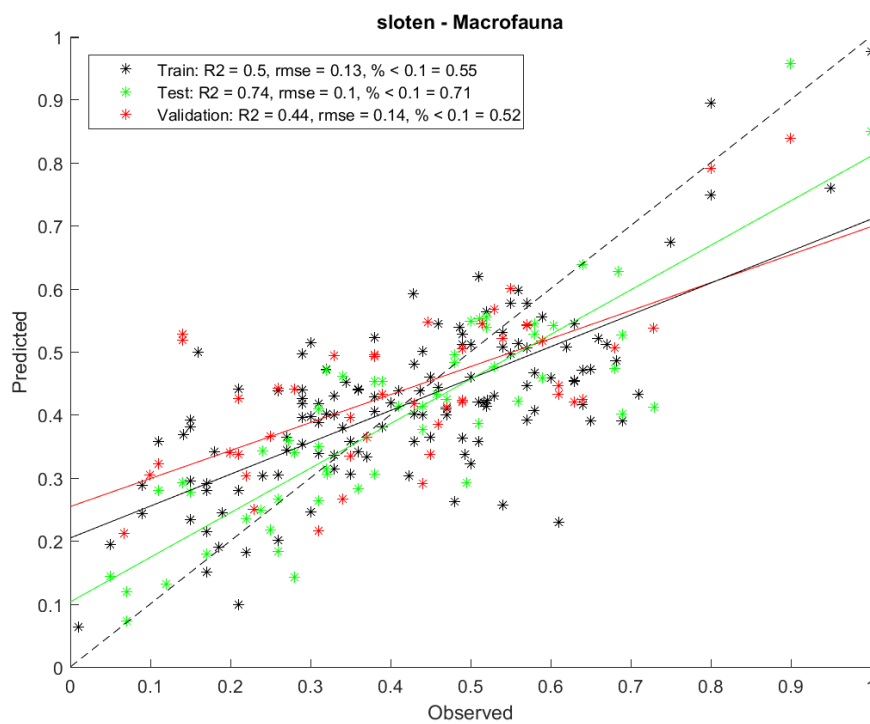


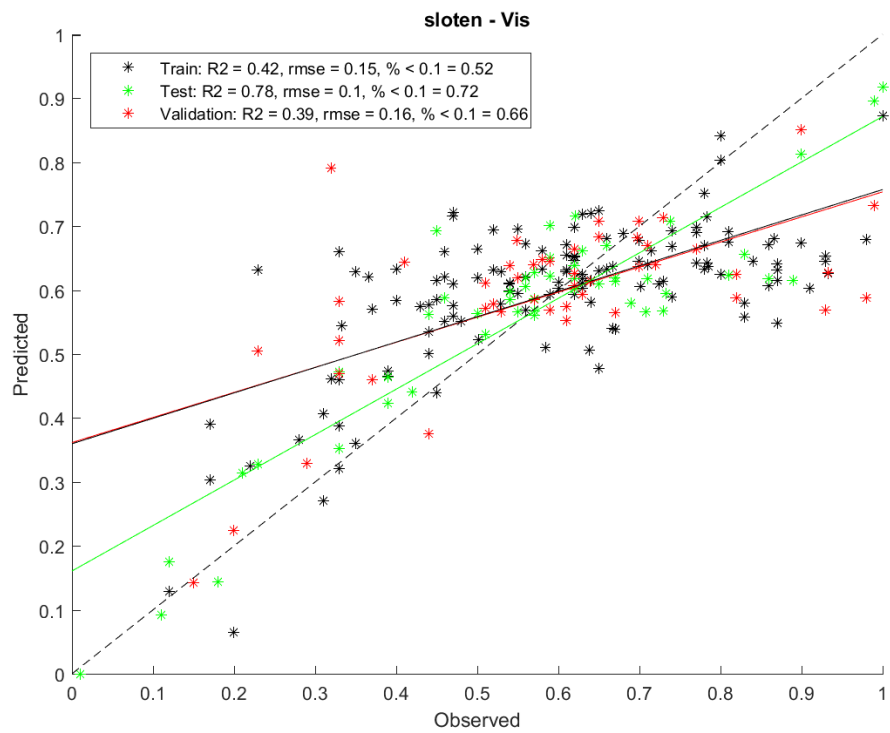
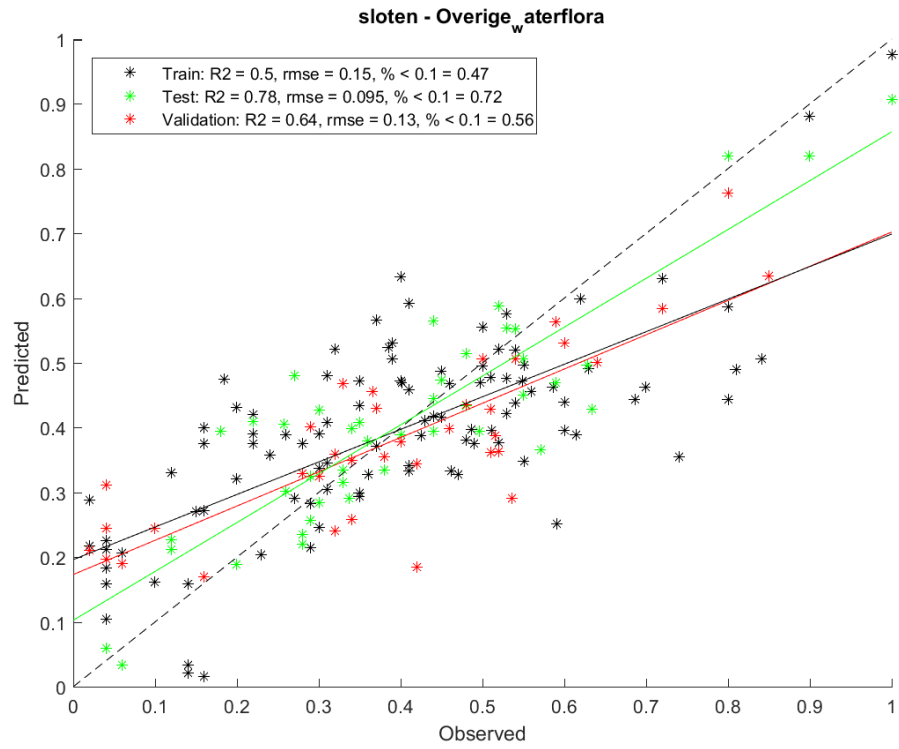
D.2 Snel stromende wateren



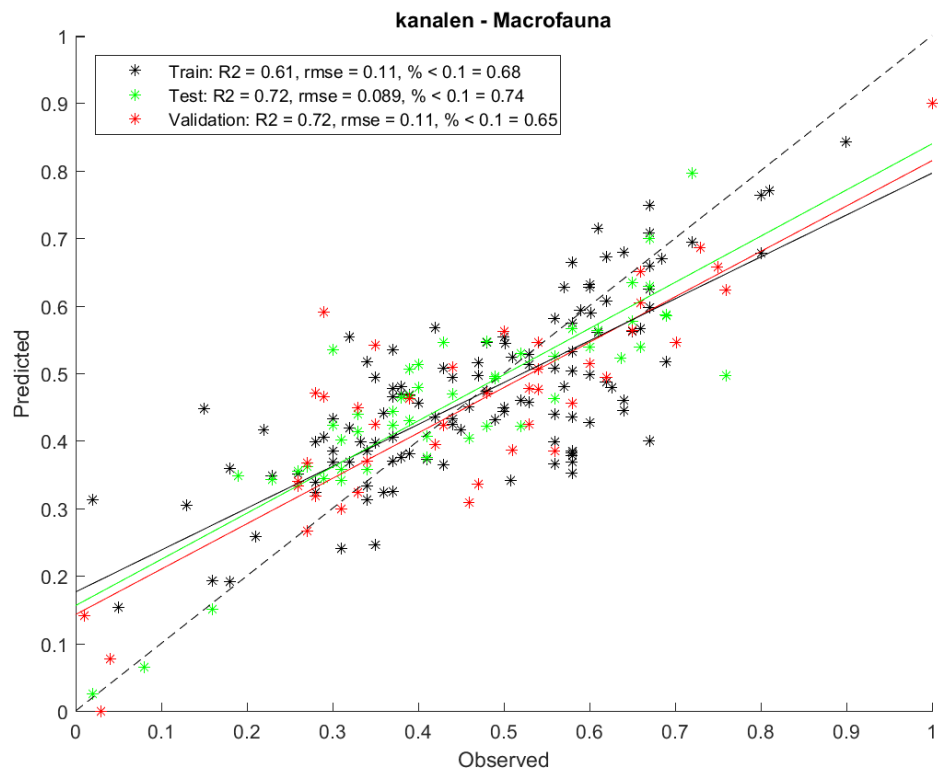
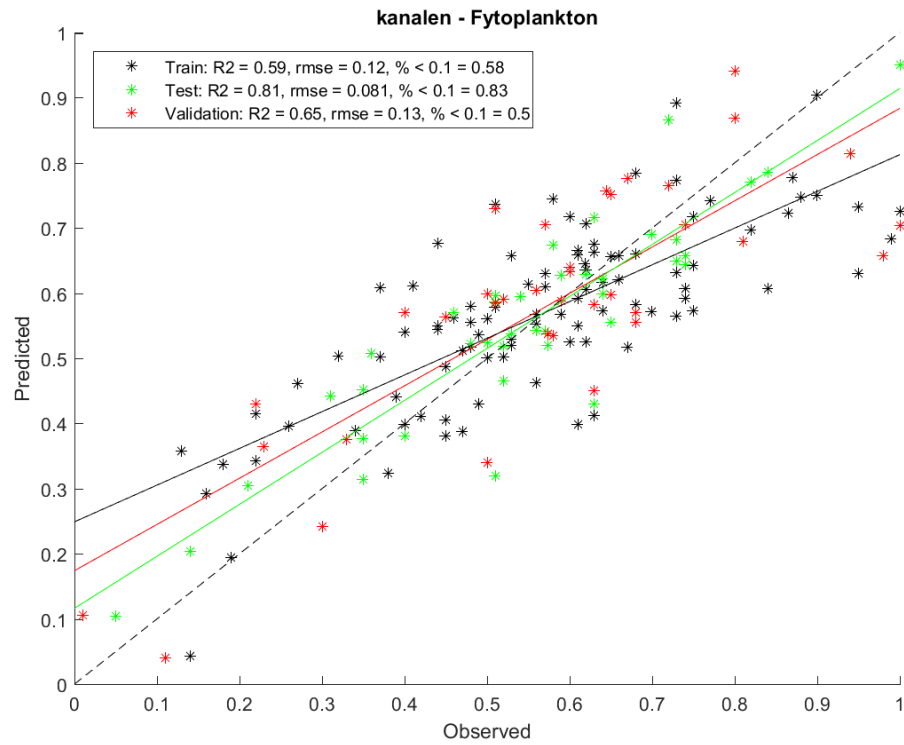


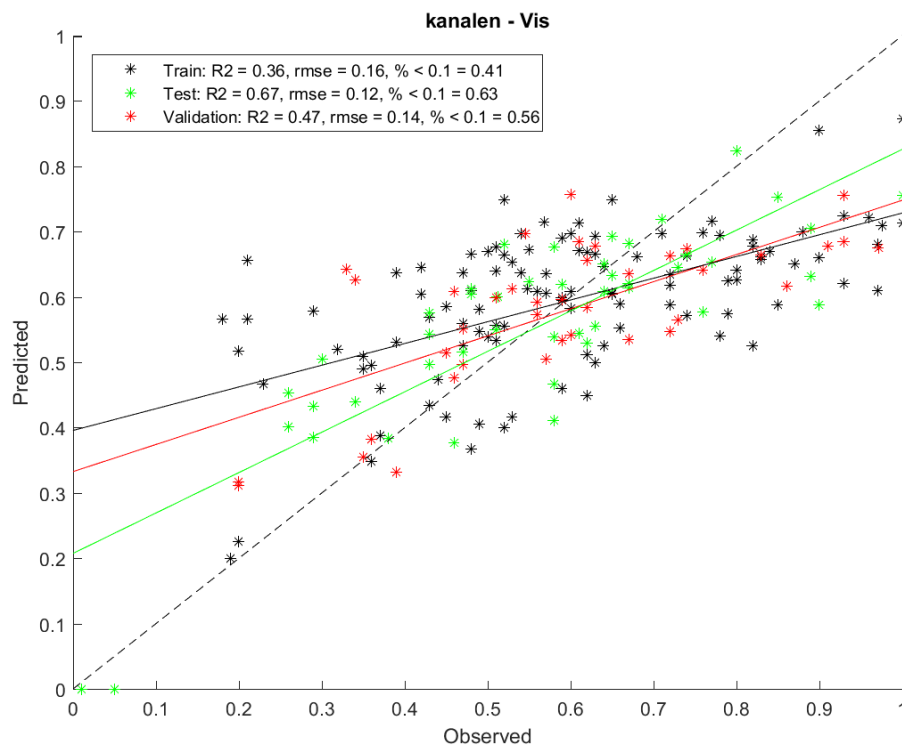
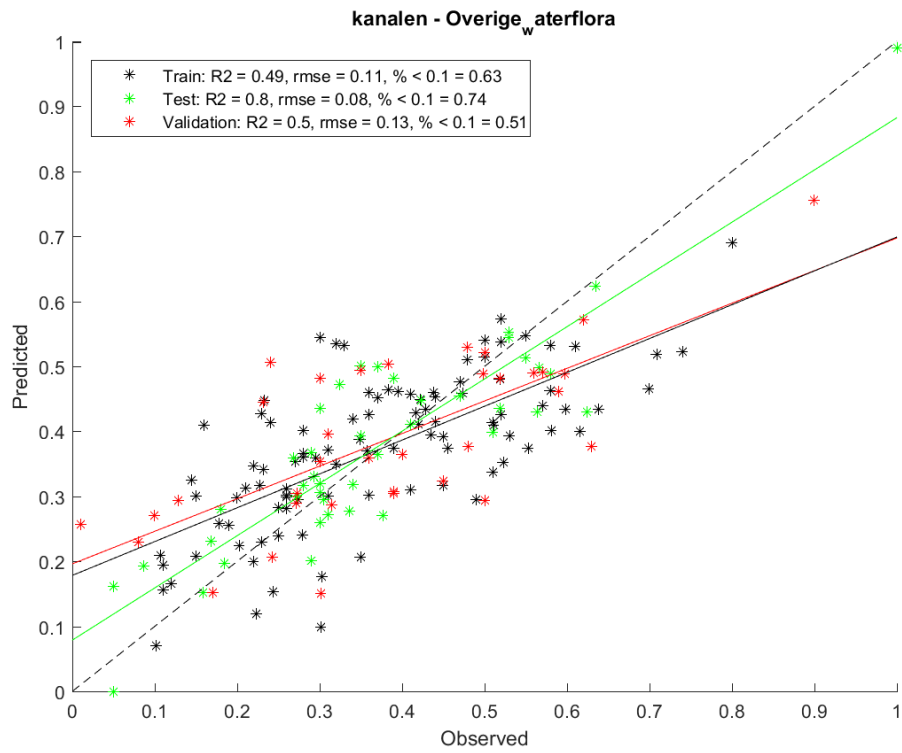
D.3 Sloten



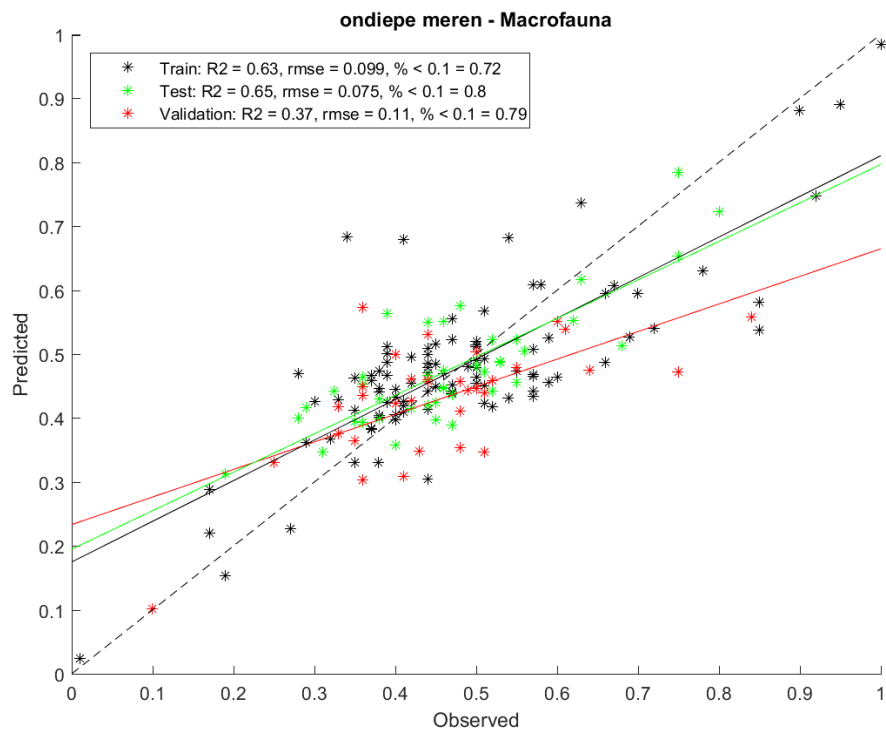
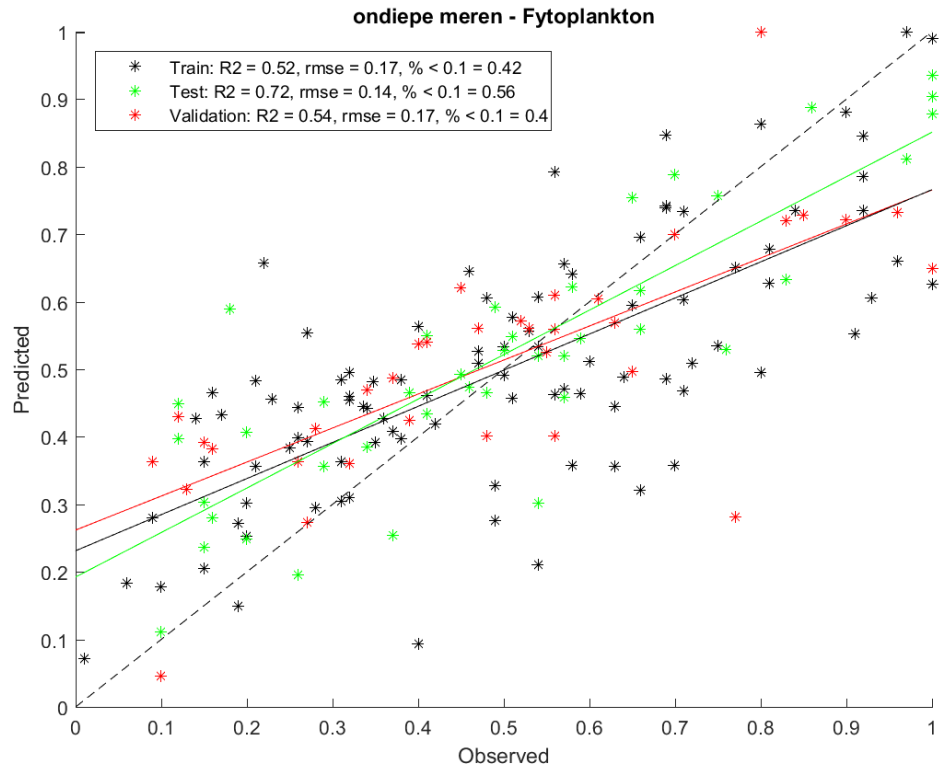


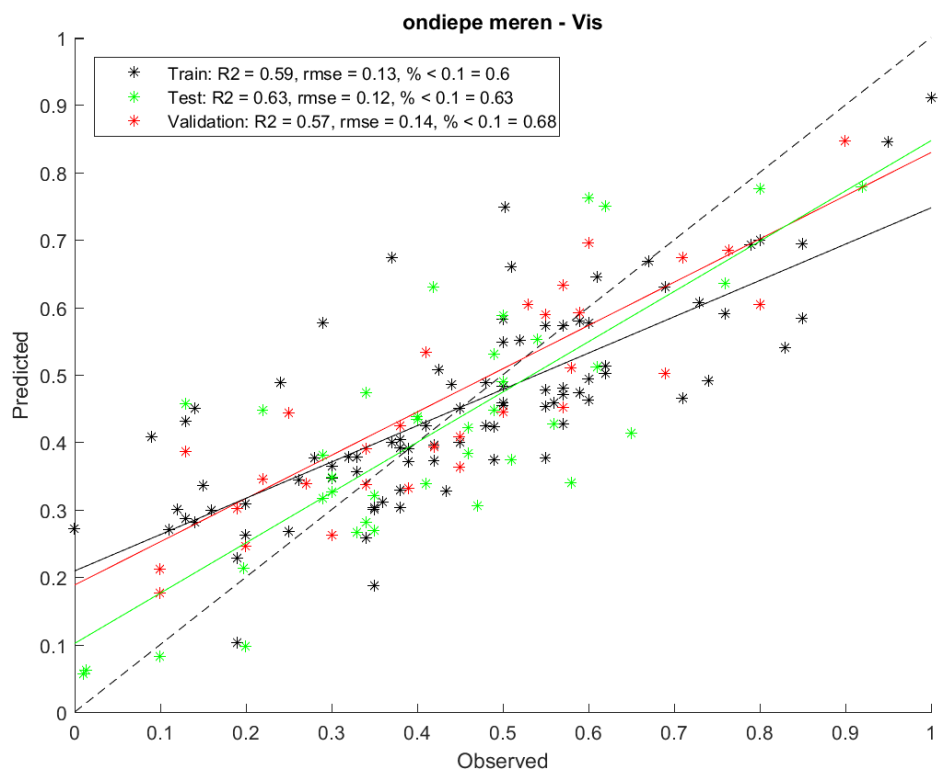
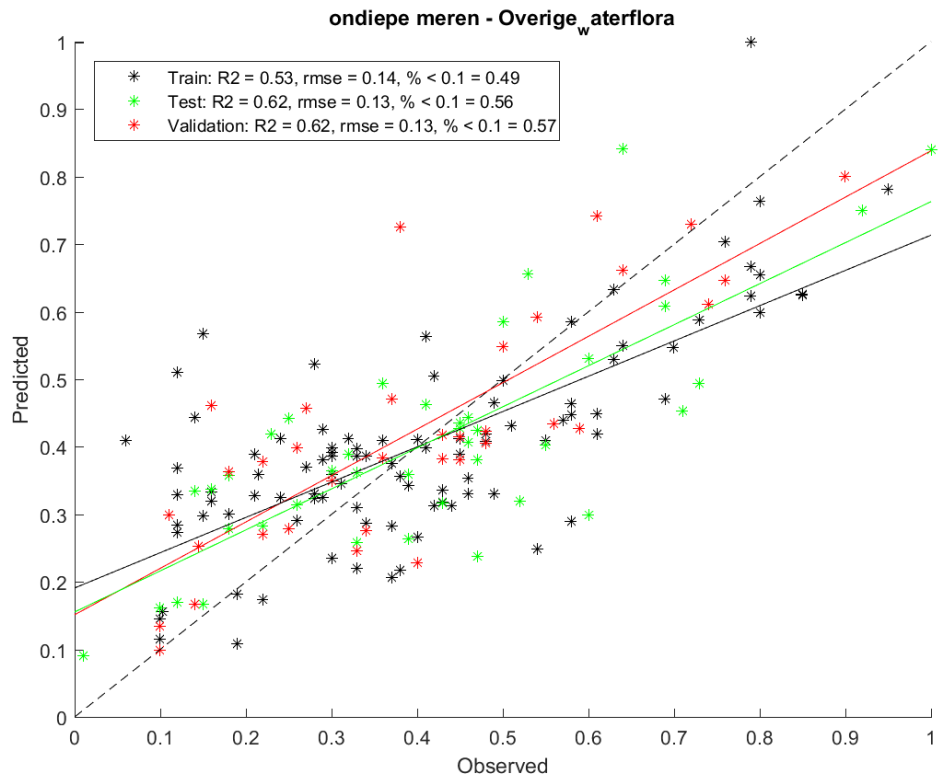
D.4 Kanalen



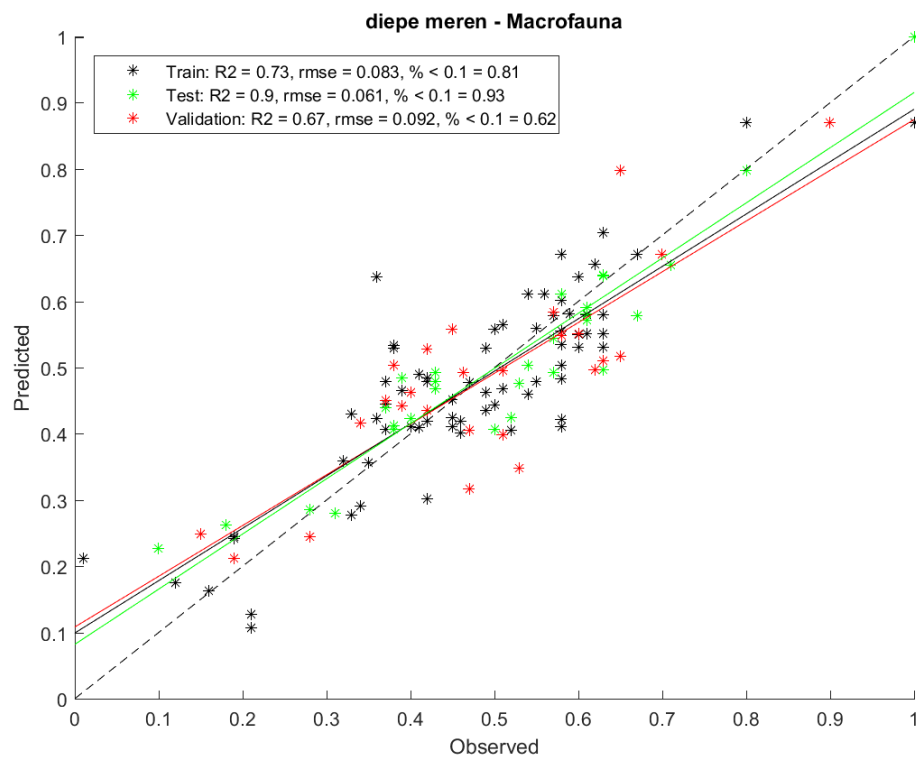
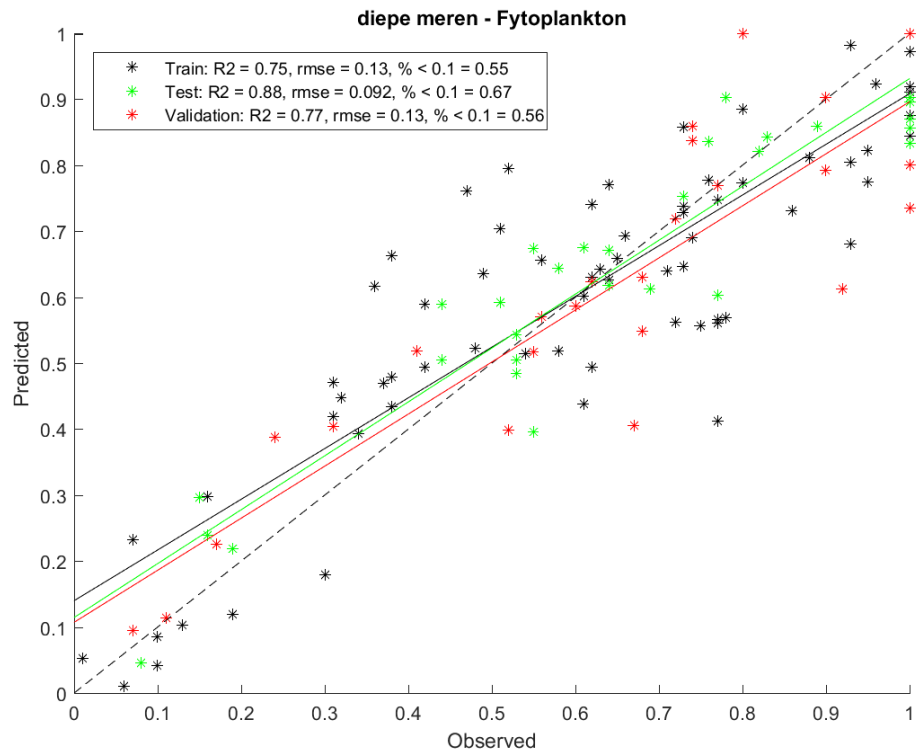


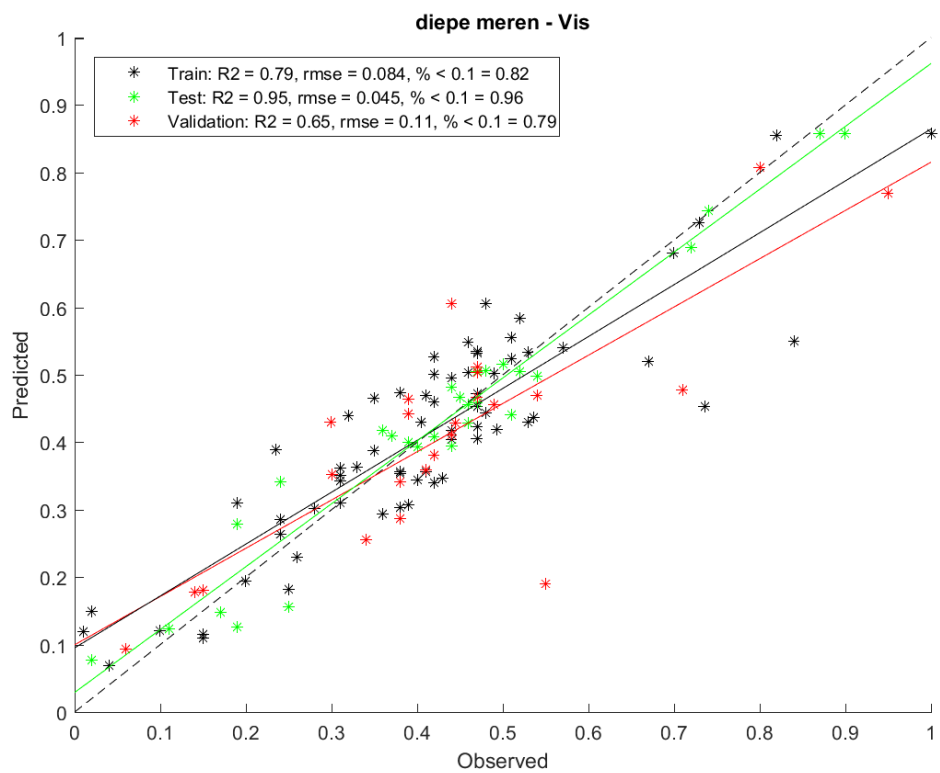
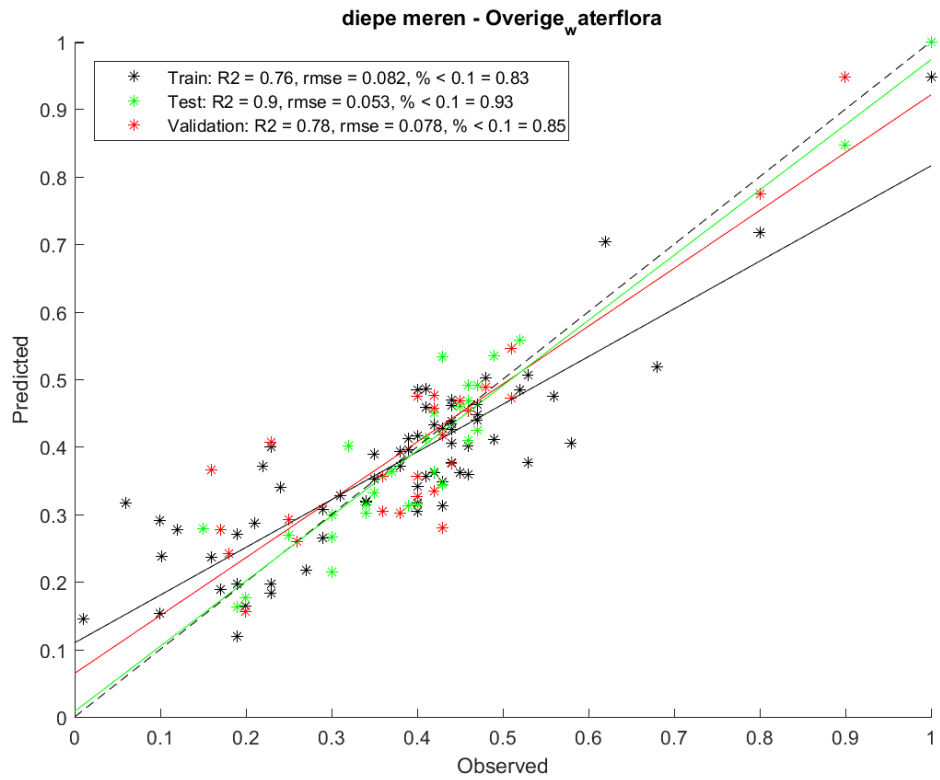
D.5 Ondiepe meren



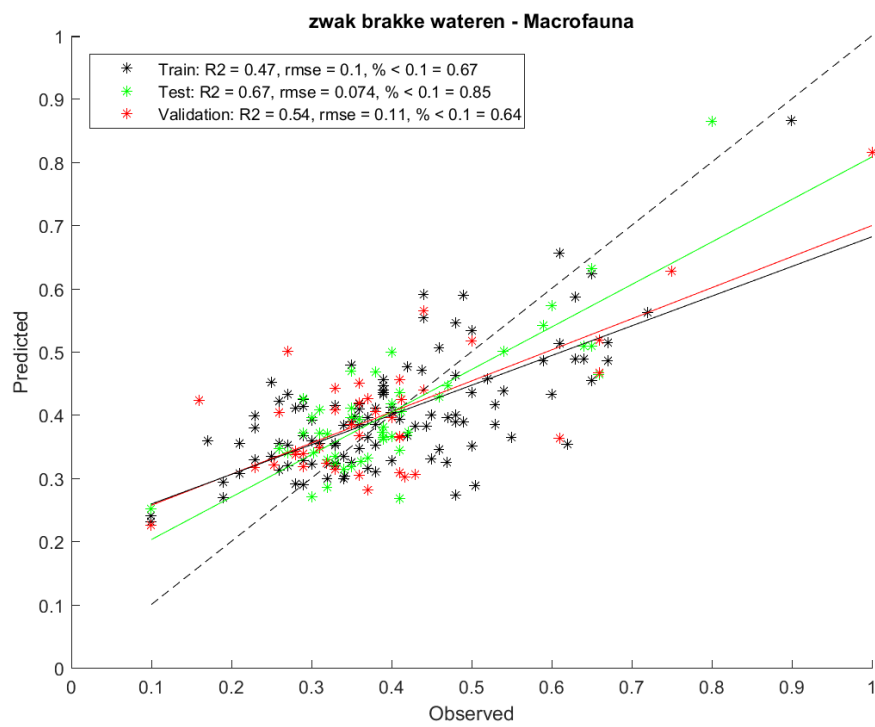
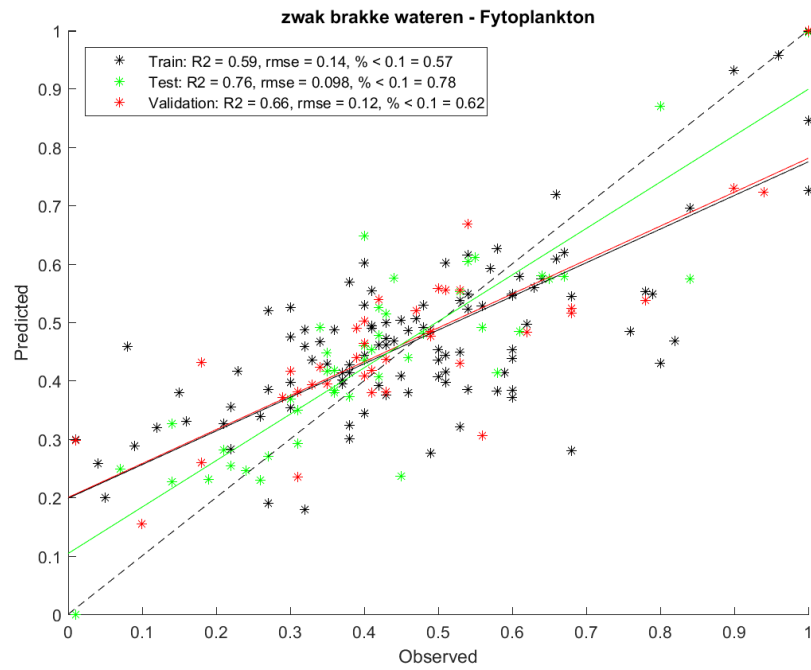


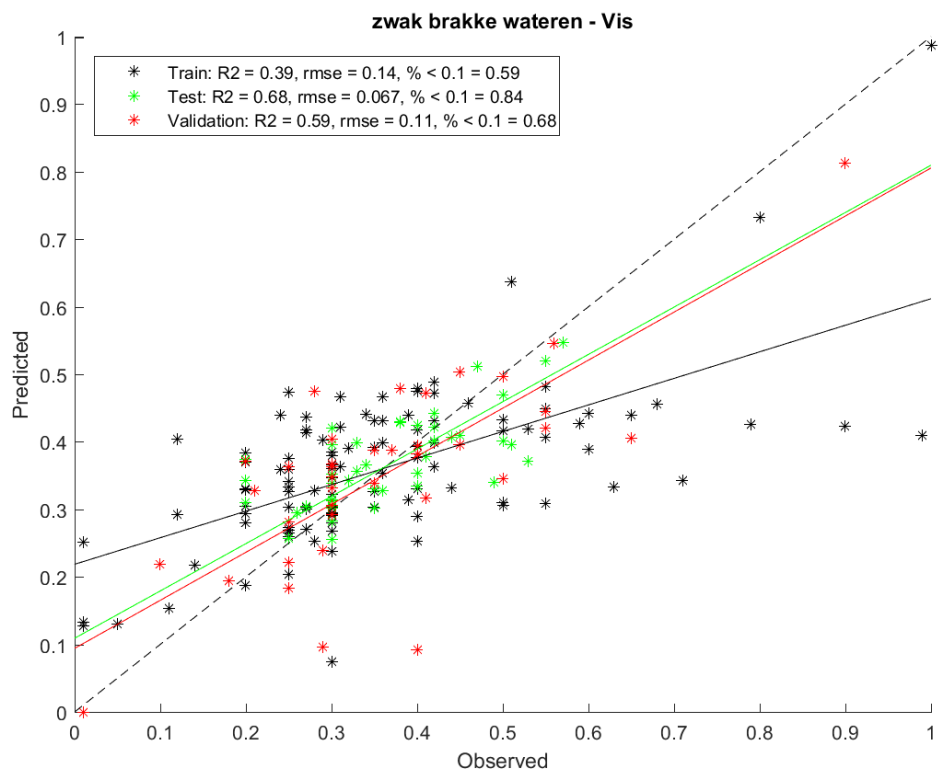
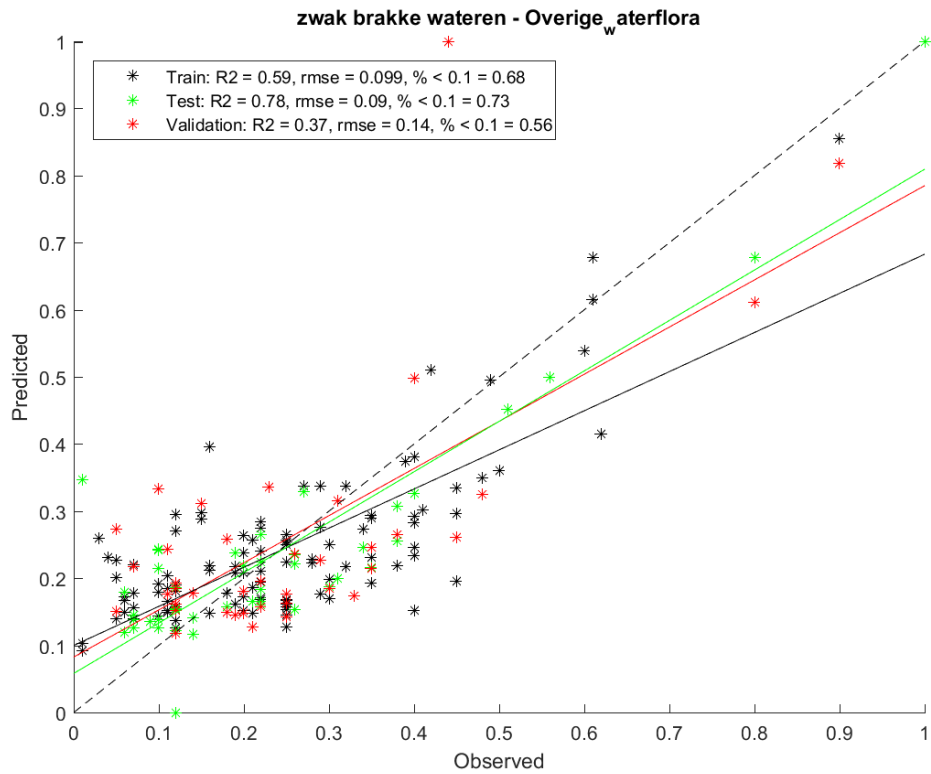
D.6 Diepe meren



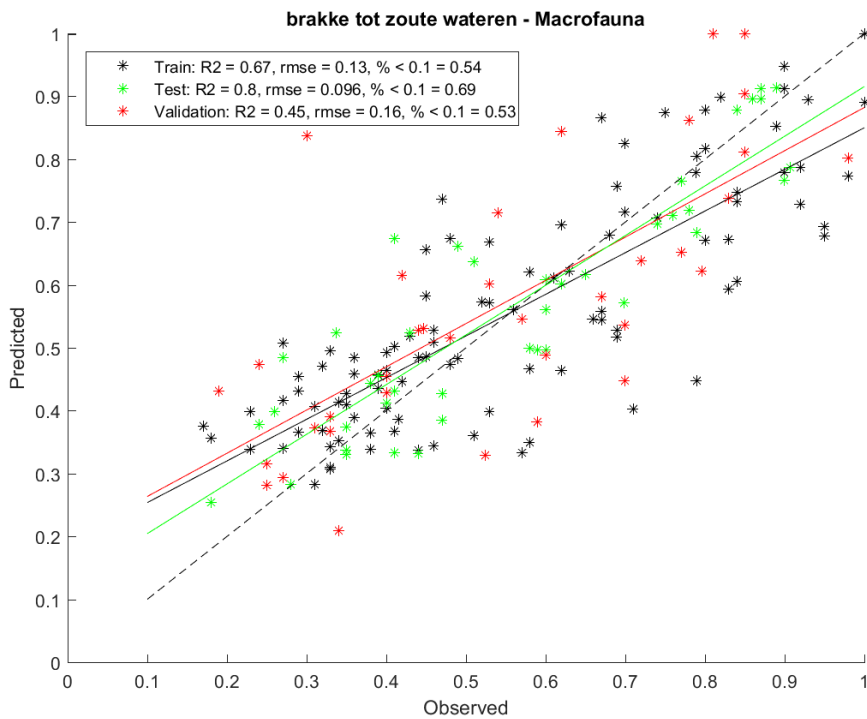
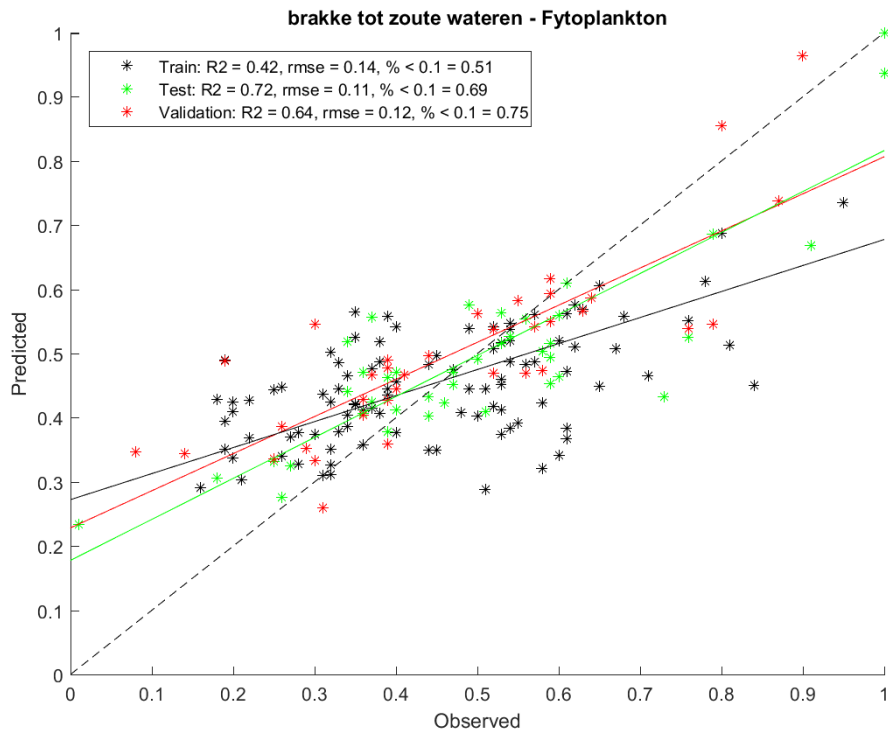


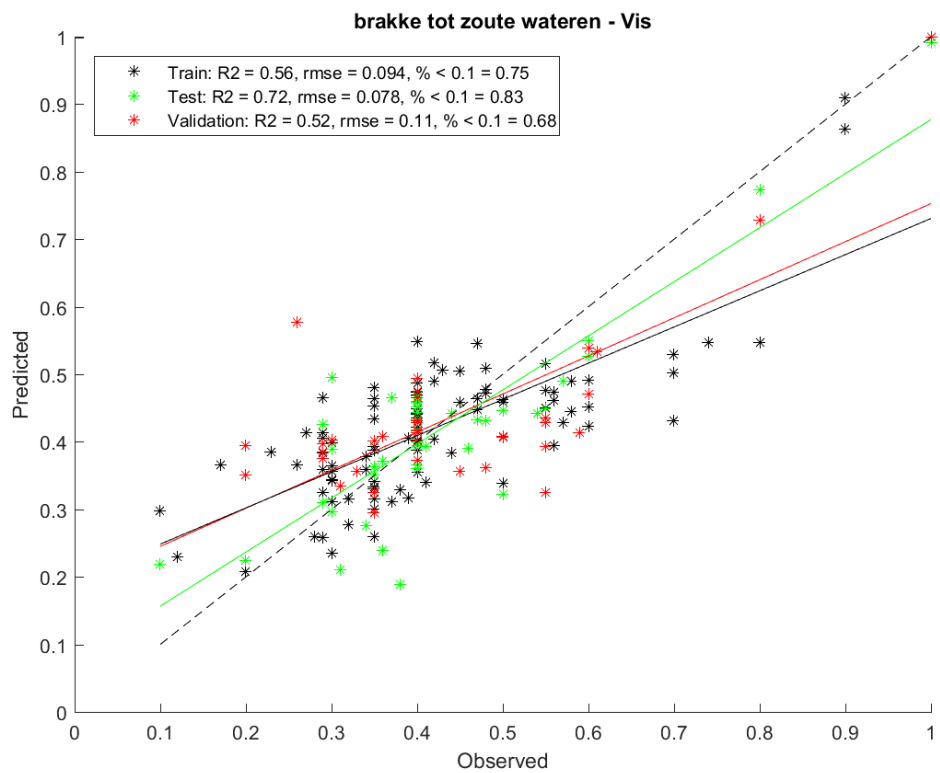
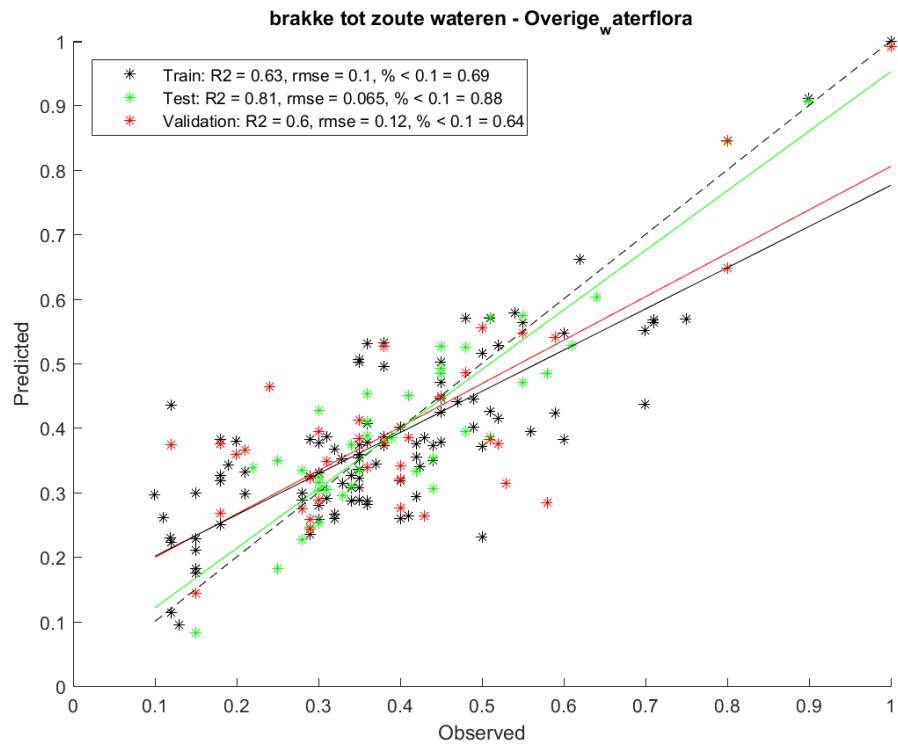
D.7 Zwak brakke wateren

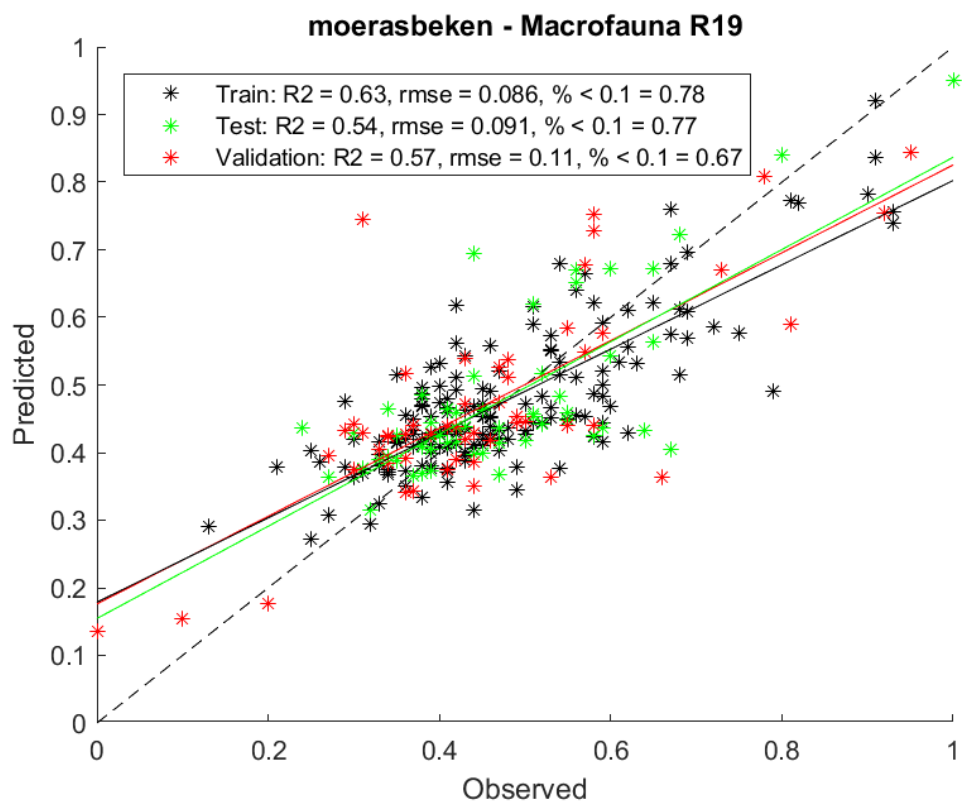
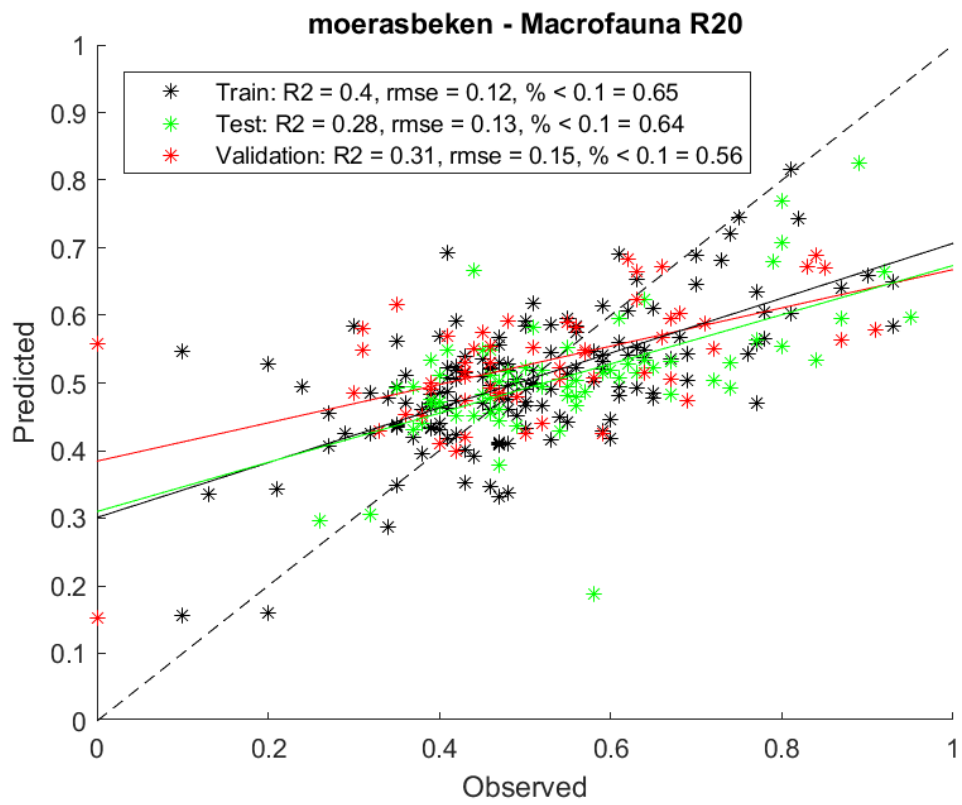


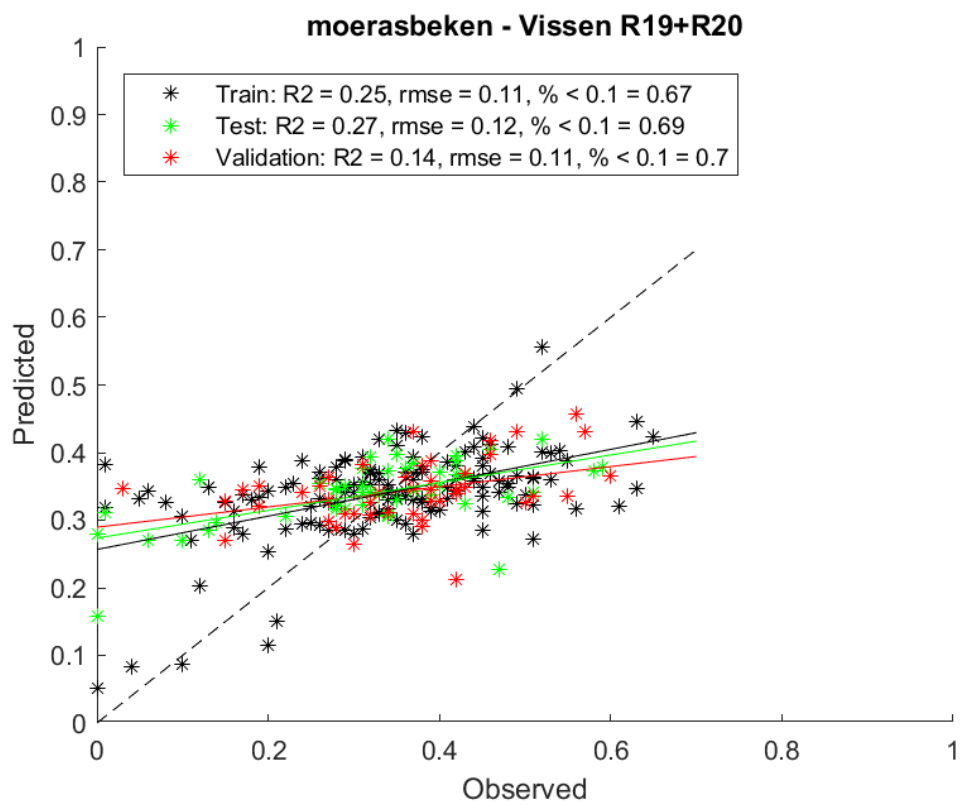
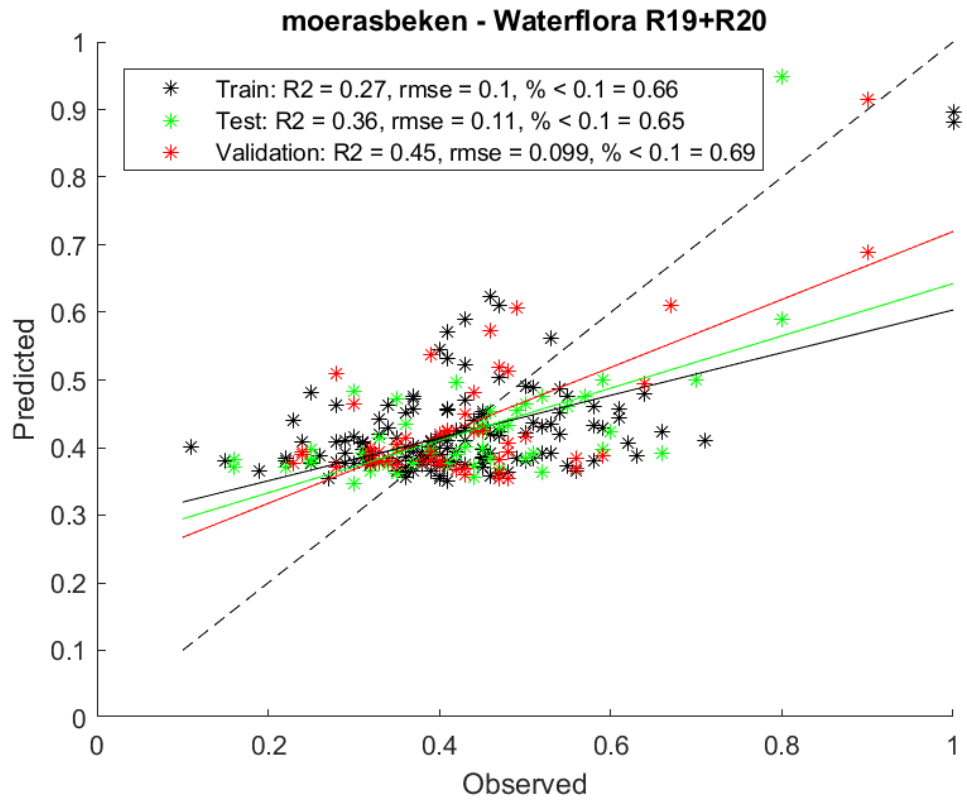


D.8 Brakke tot zoute wateren



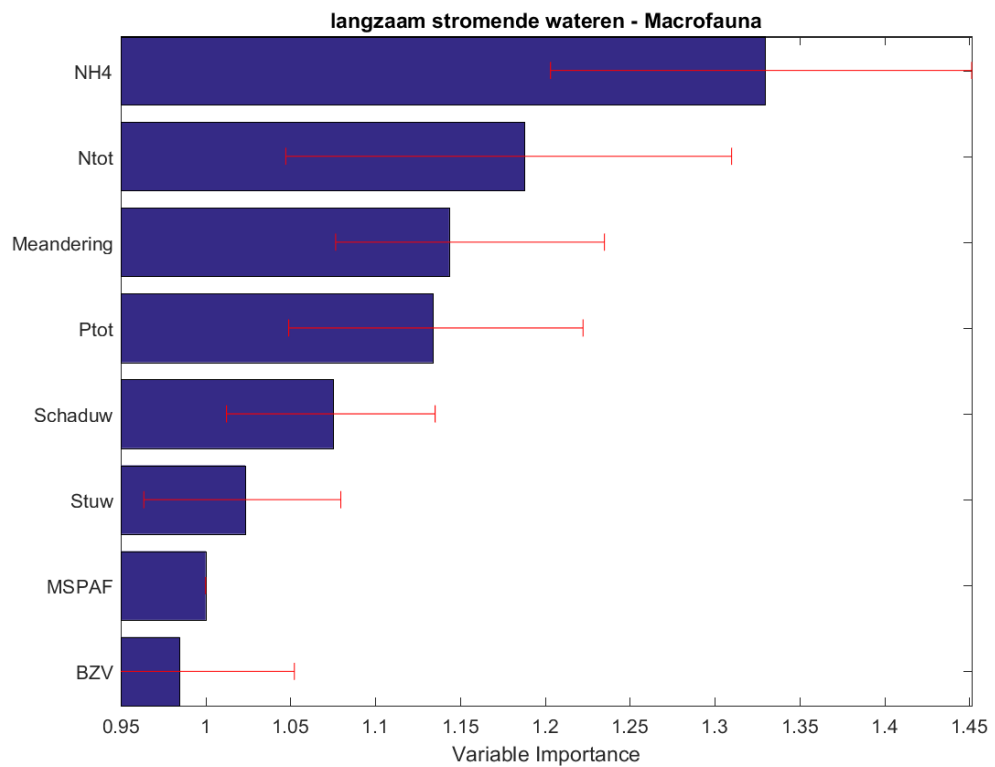


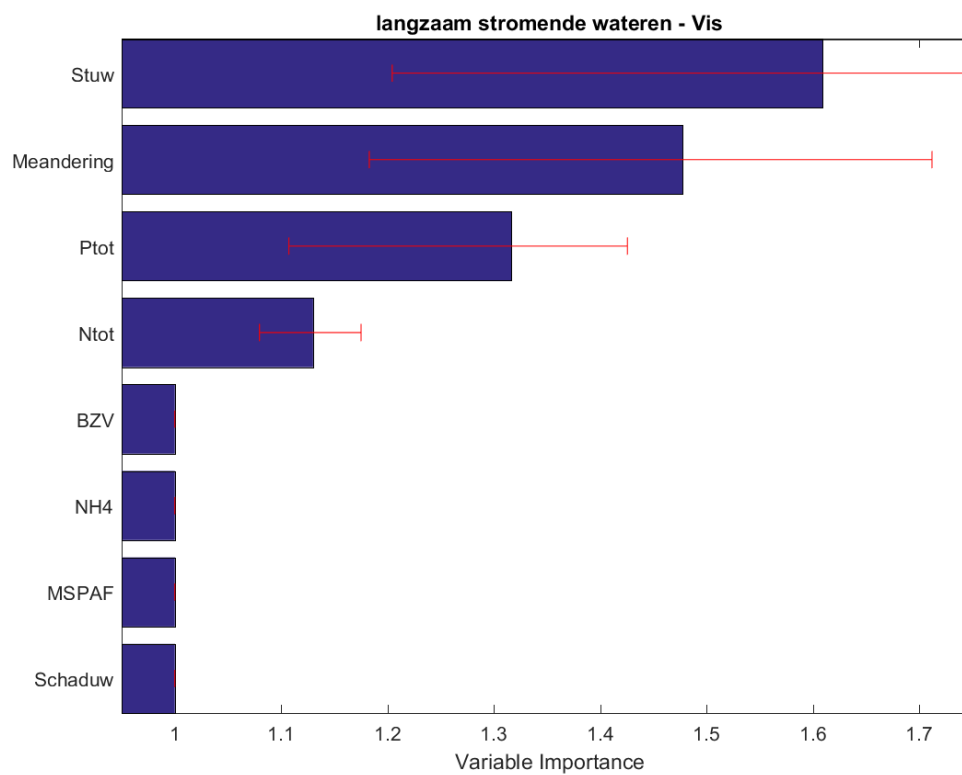
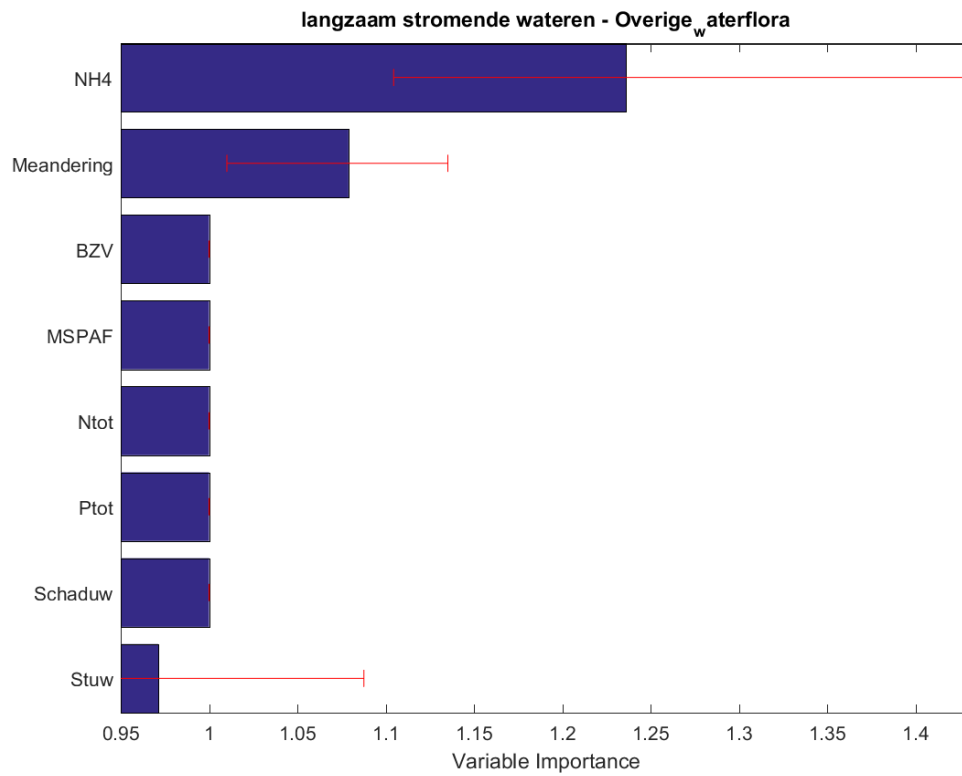




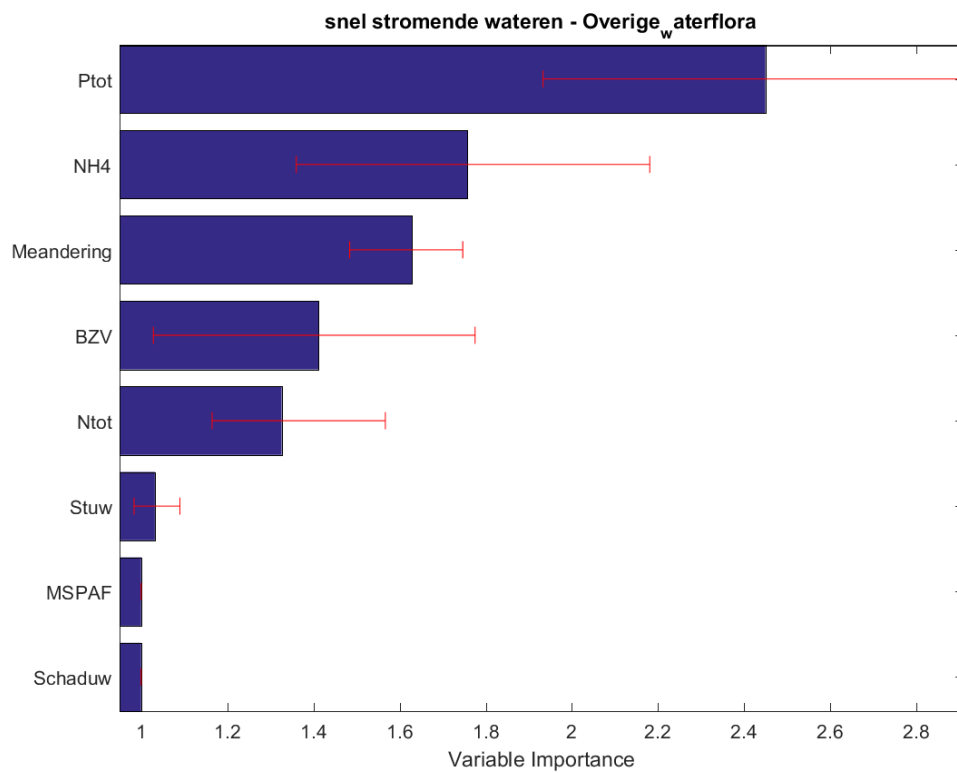
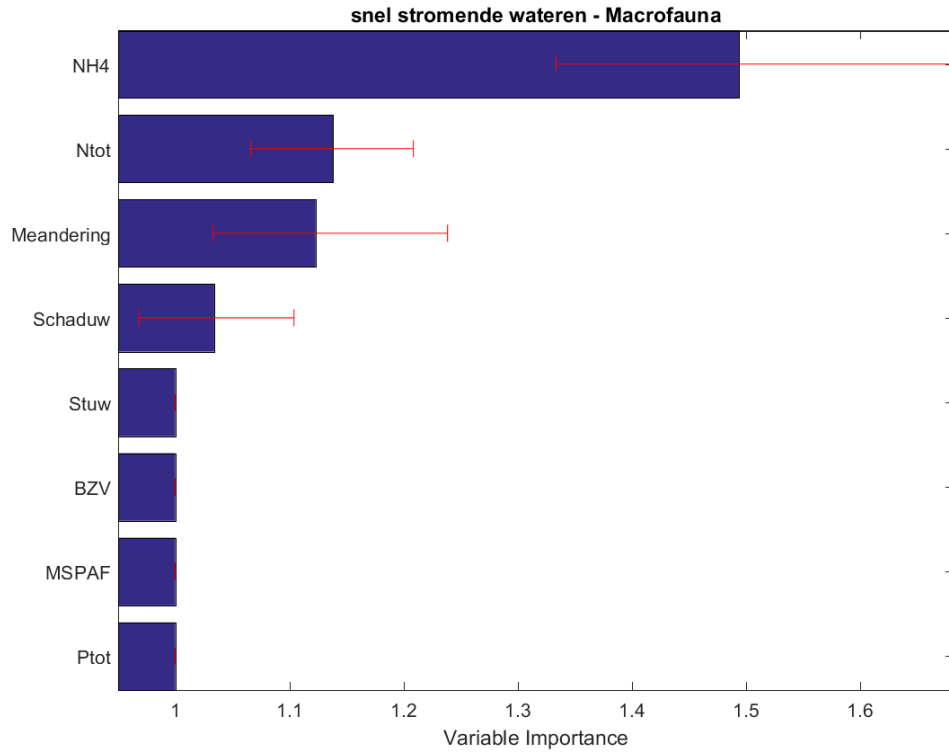
E Variable Importance PUNNs

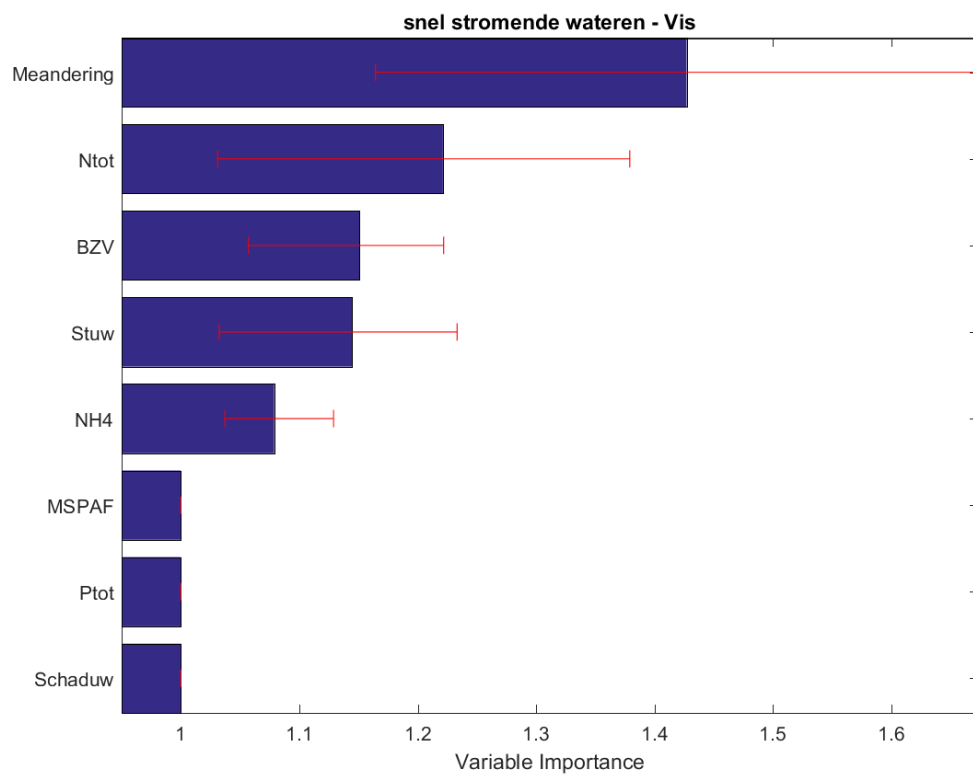
E.1 Langzaam stromende wateren



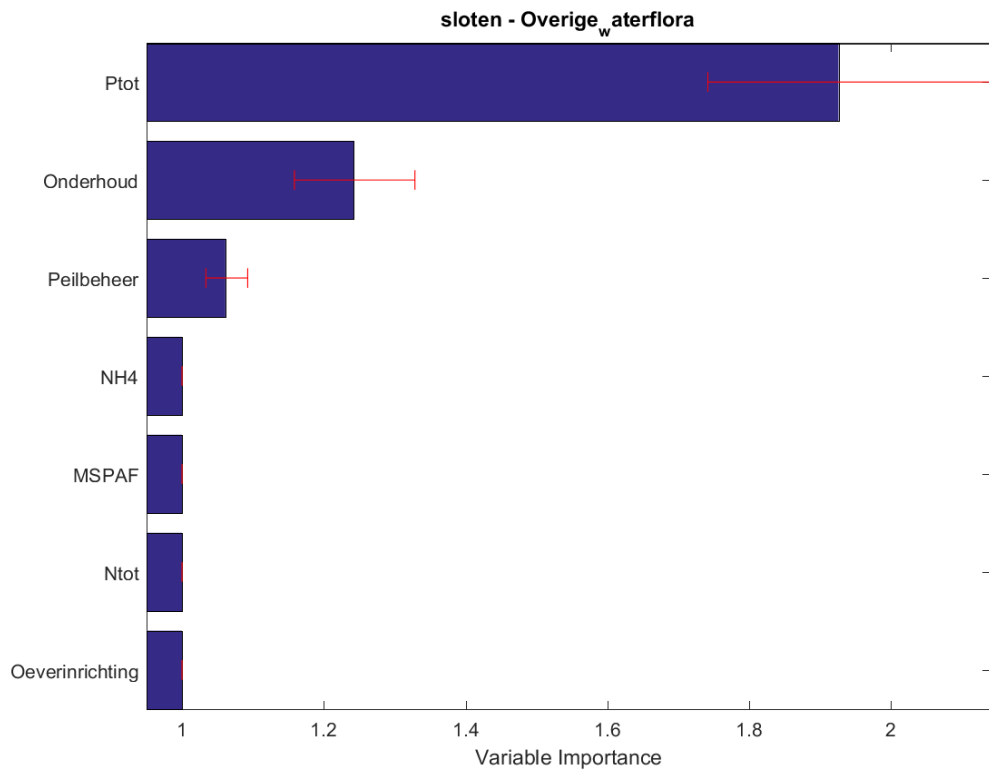
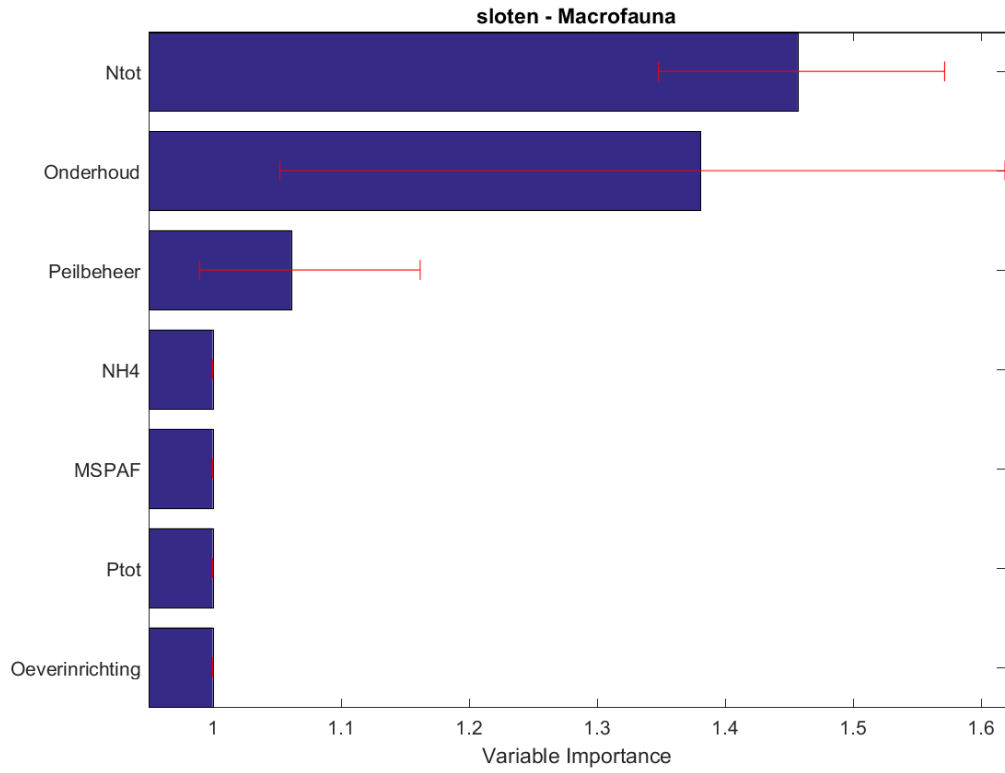


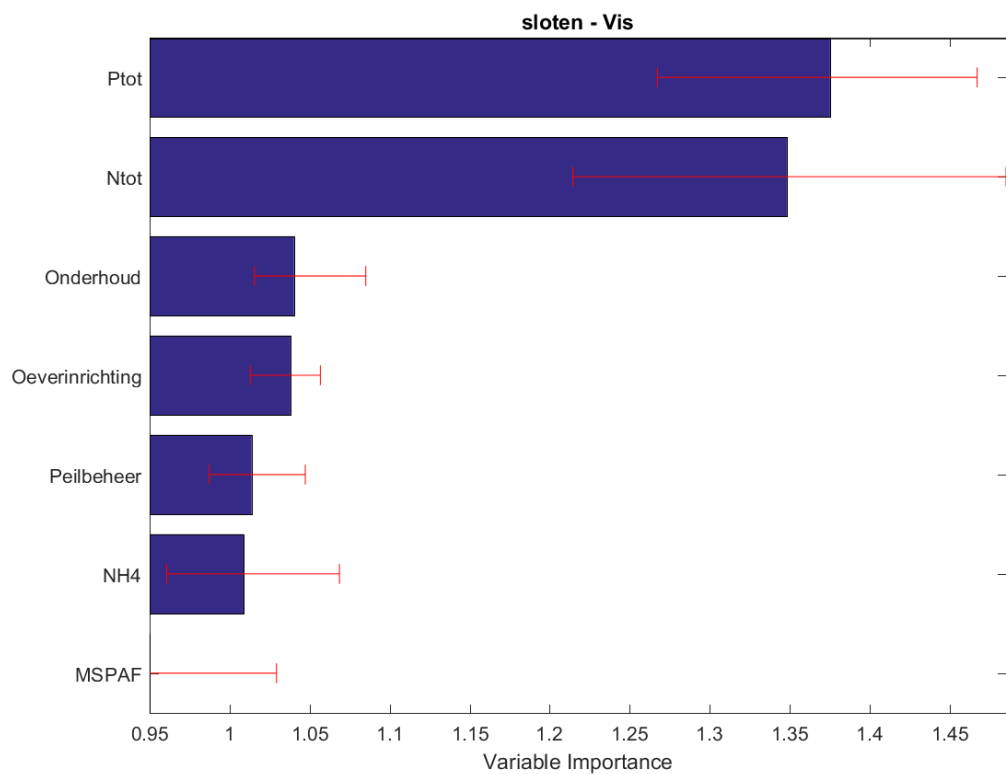
E.2 Snel stromende wateren



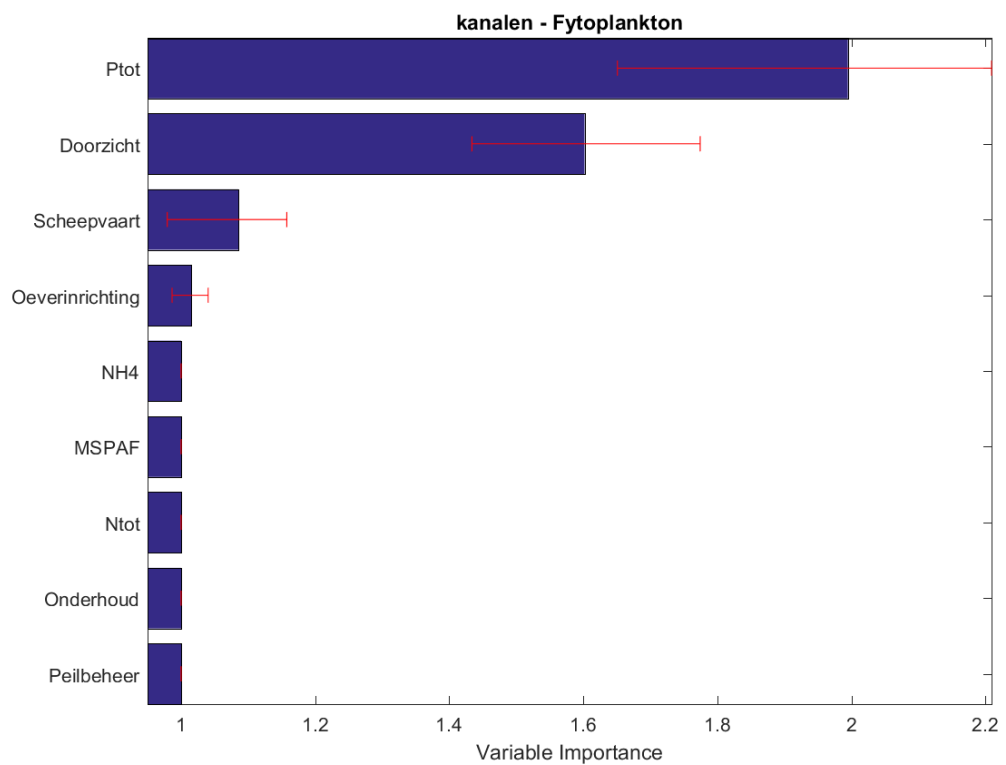


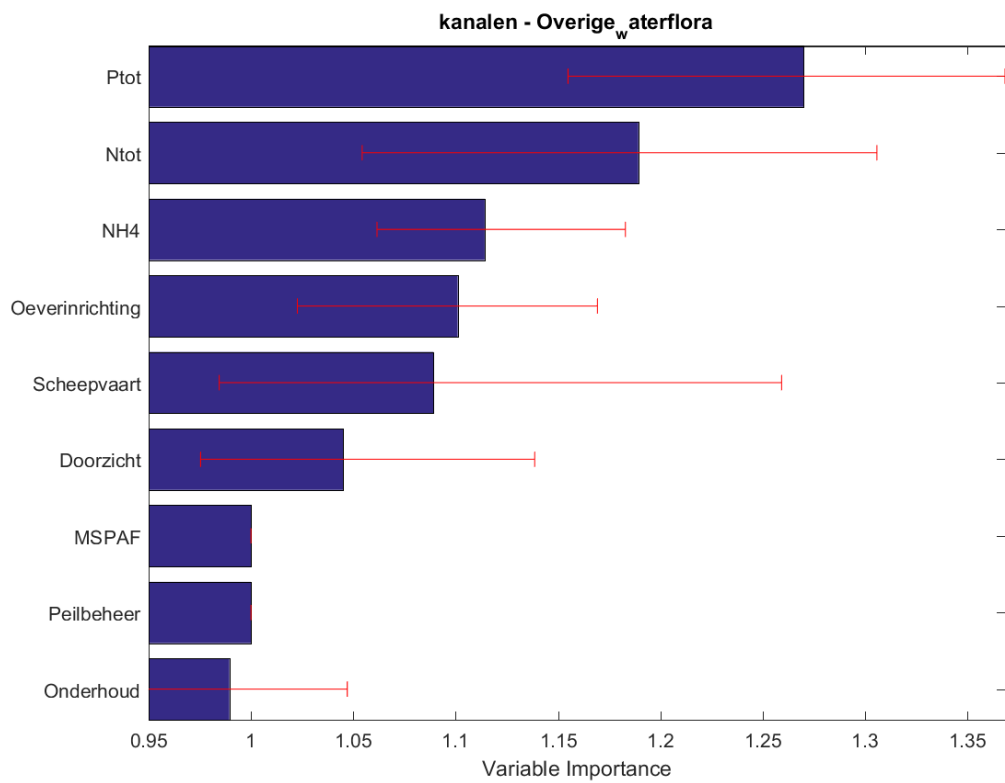
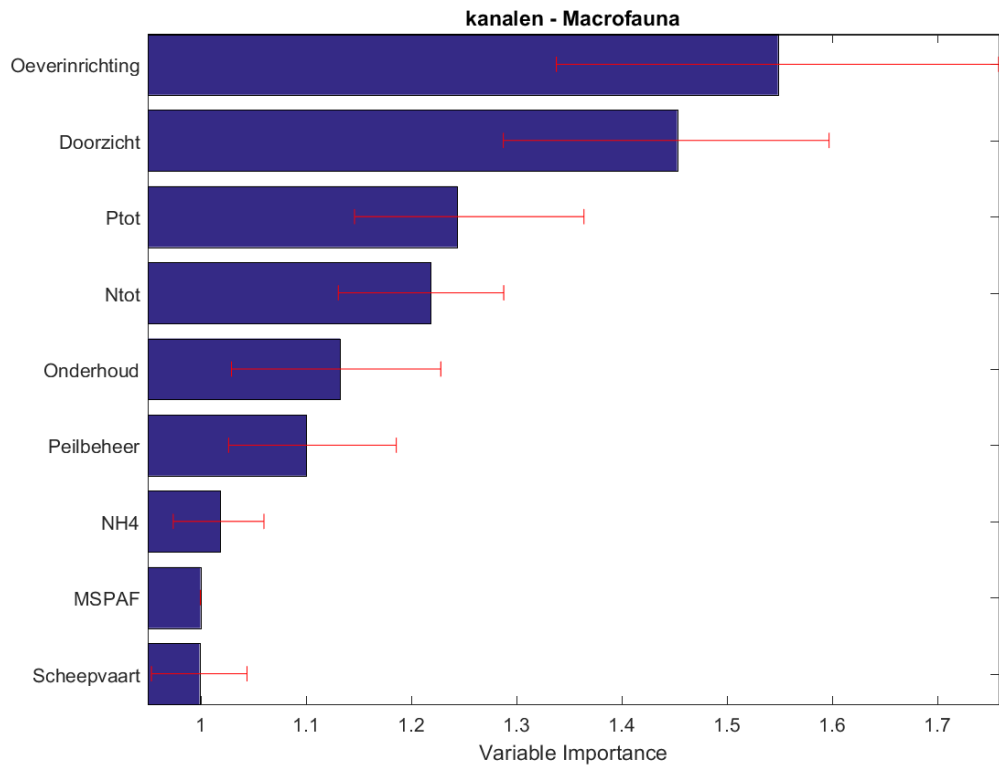
E.3 Sloten

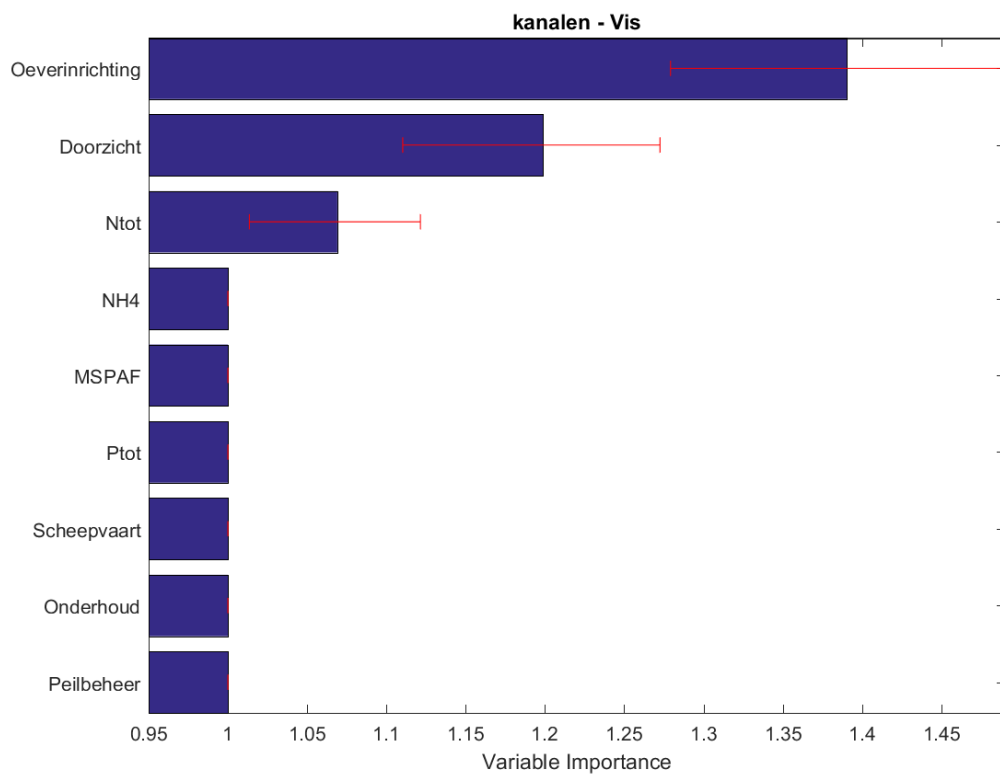




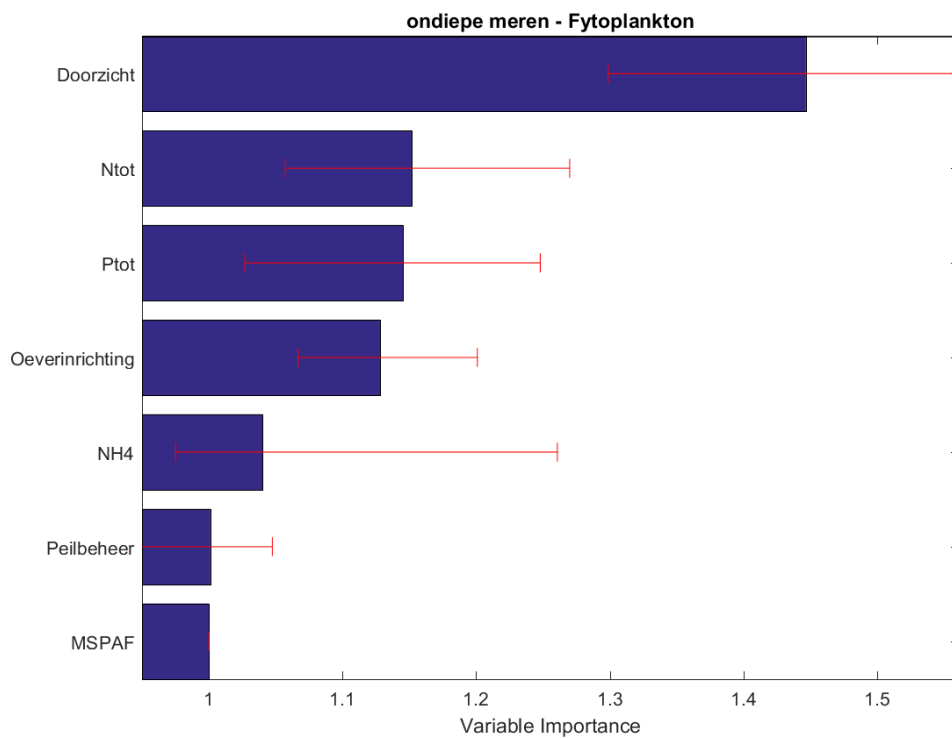
E.4 Kanalen

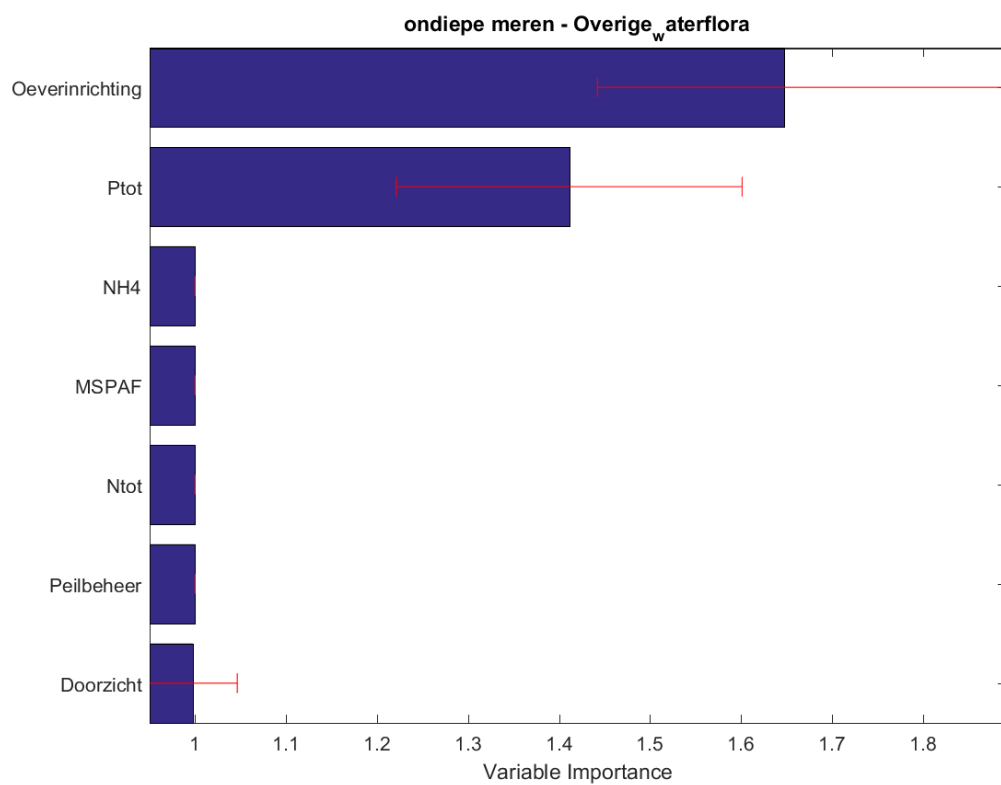
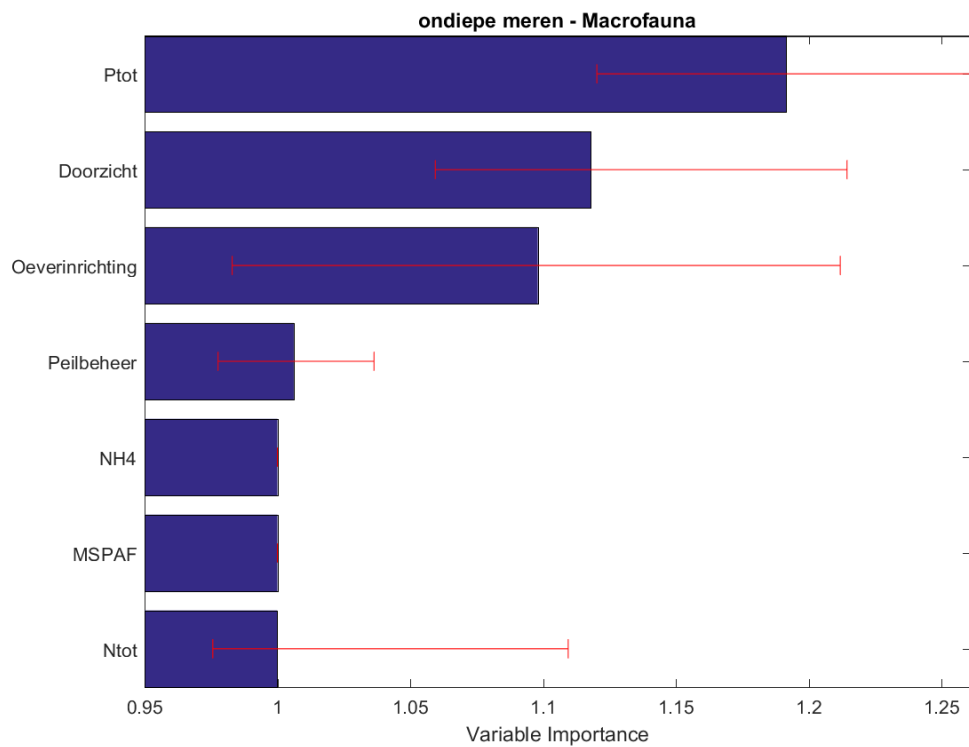


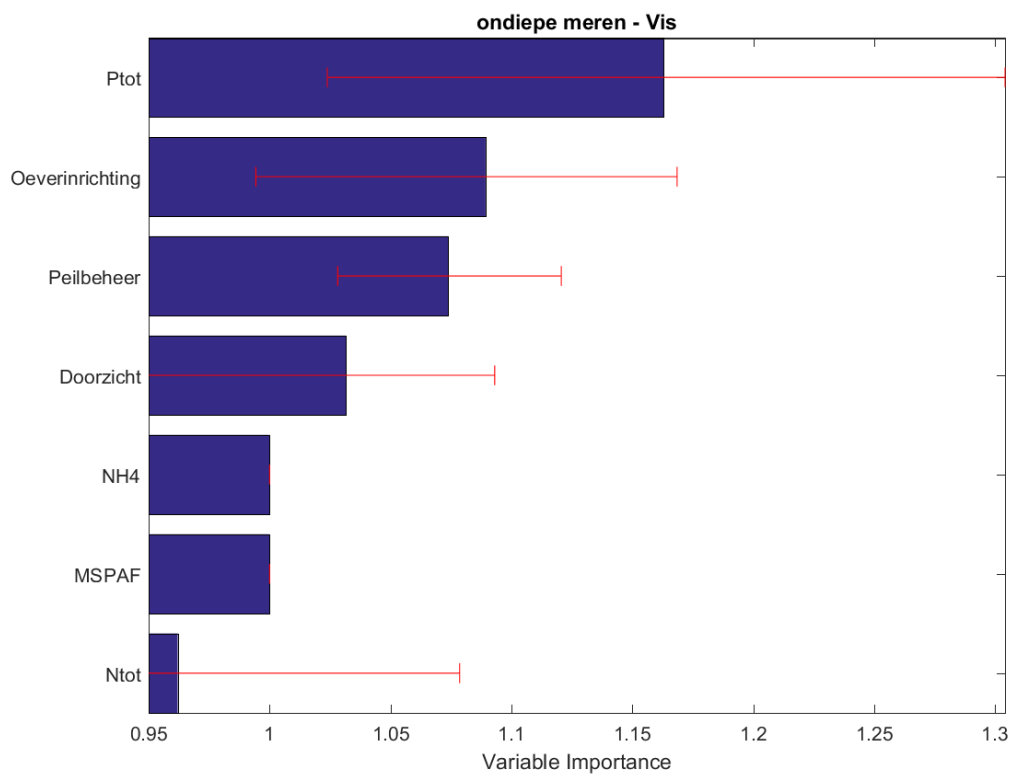




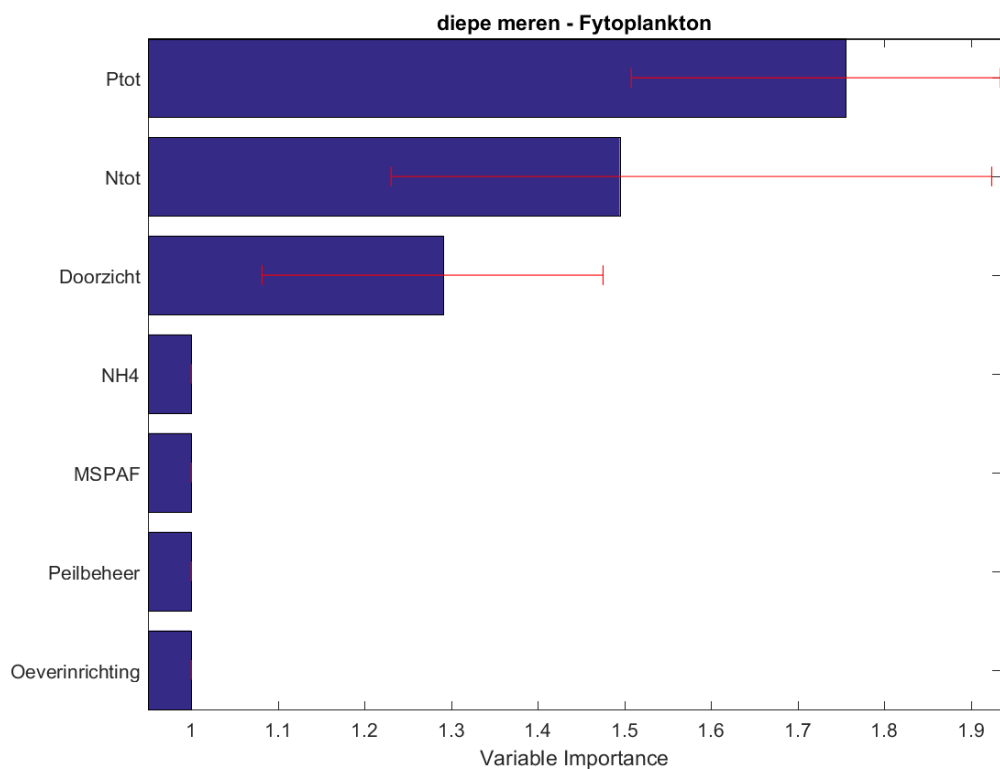
E.5 Ondiepe meren

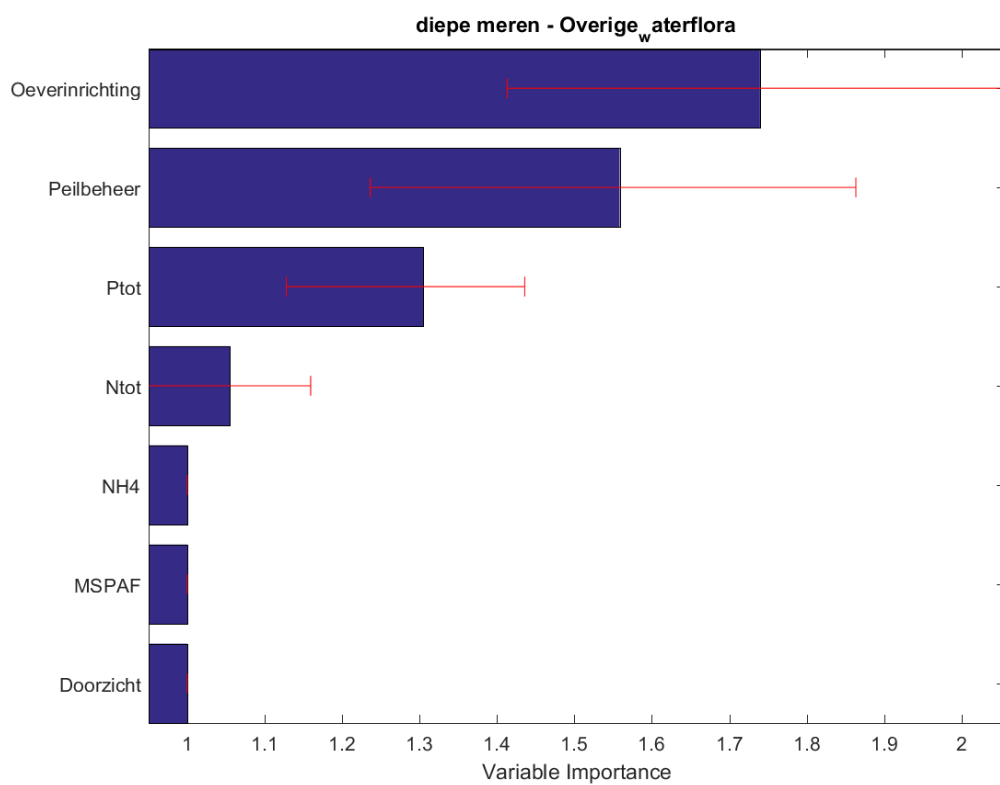
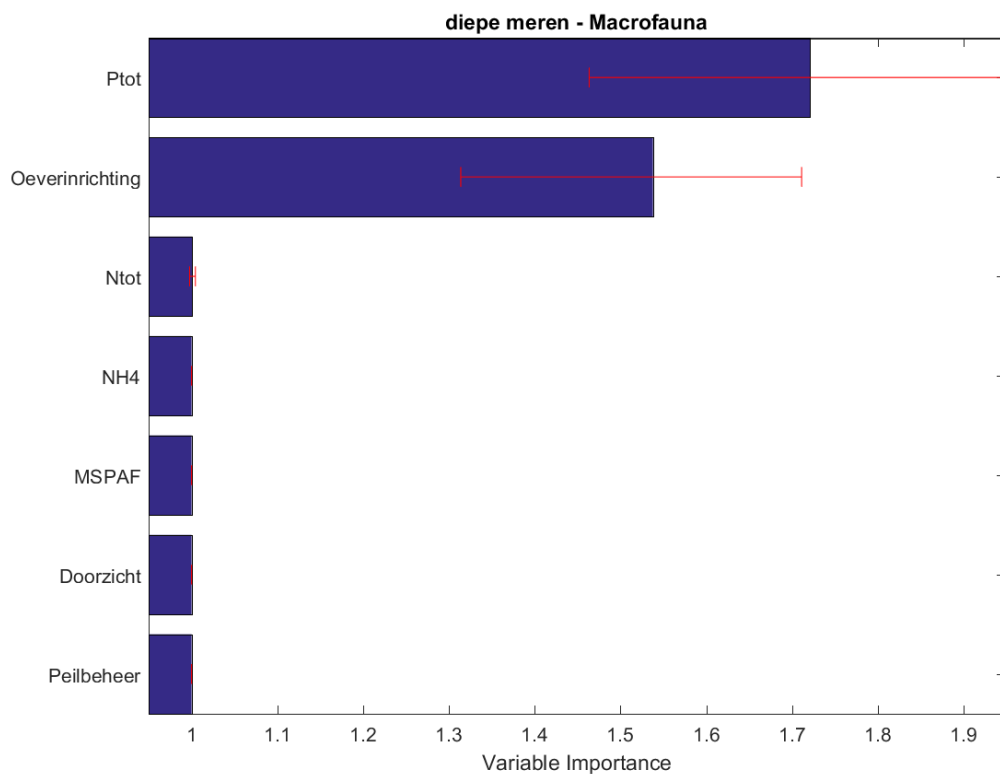


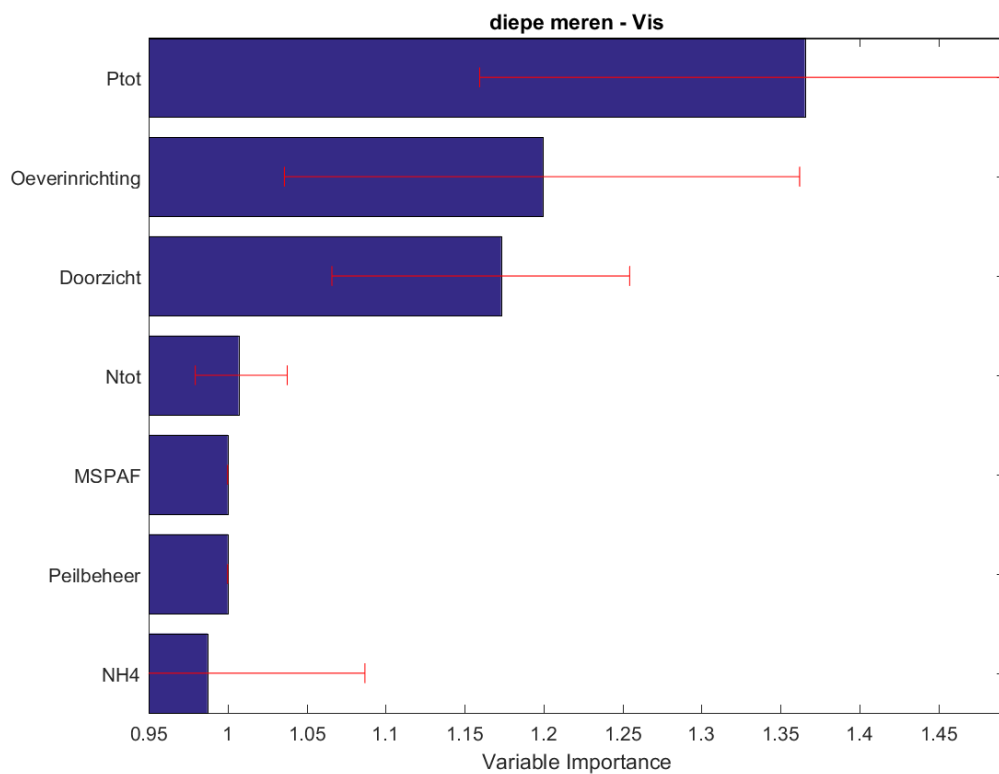




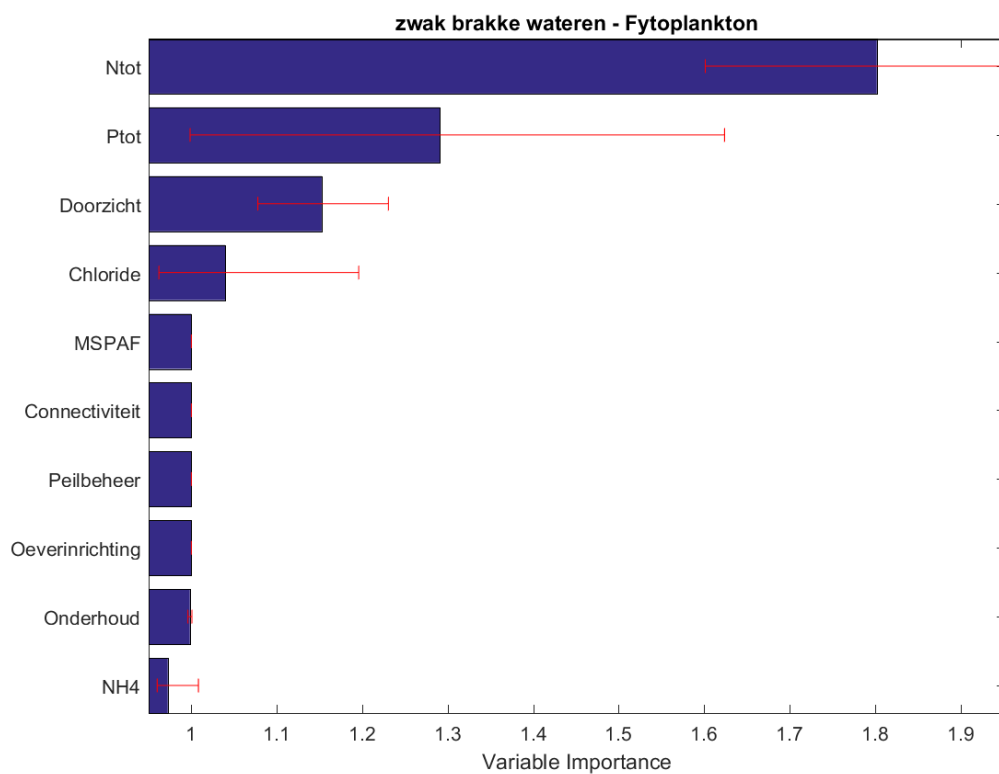
E.6 Diepe meren

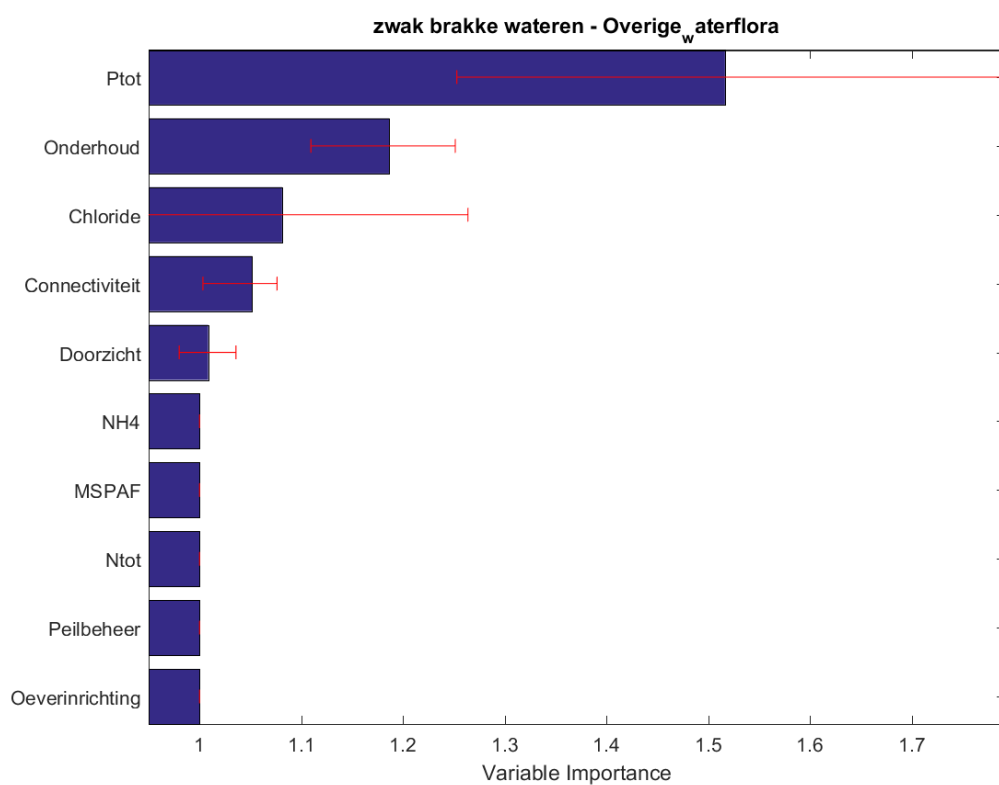
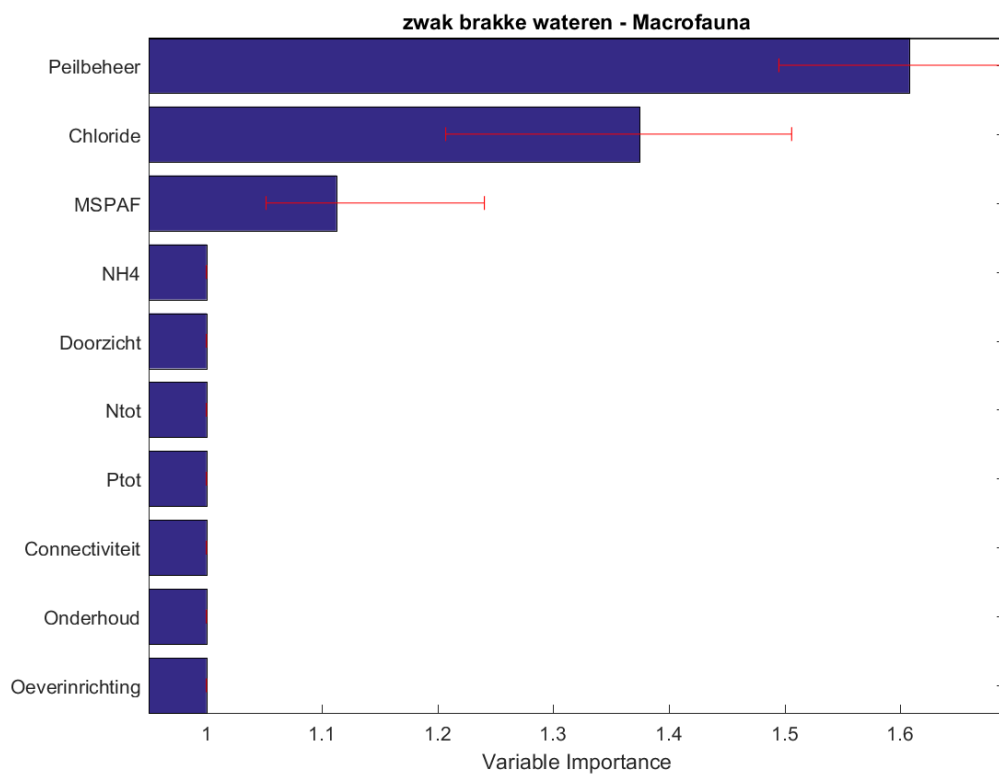


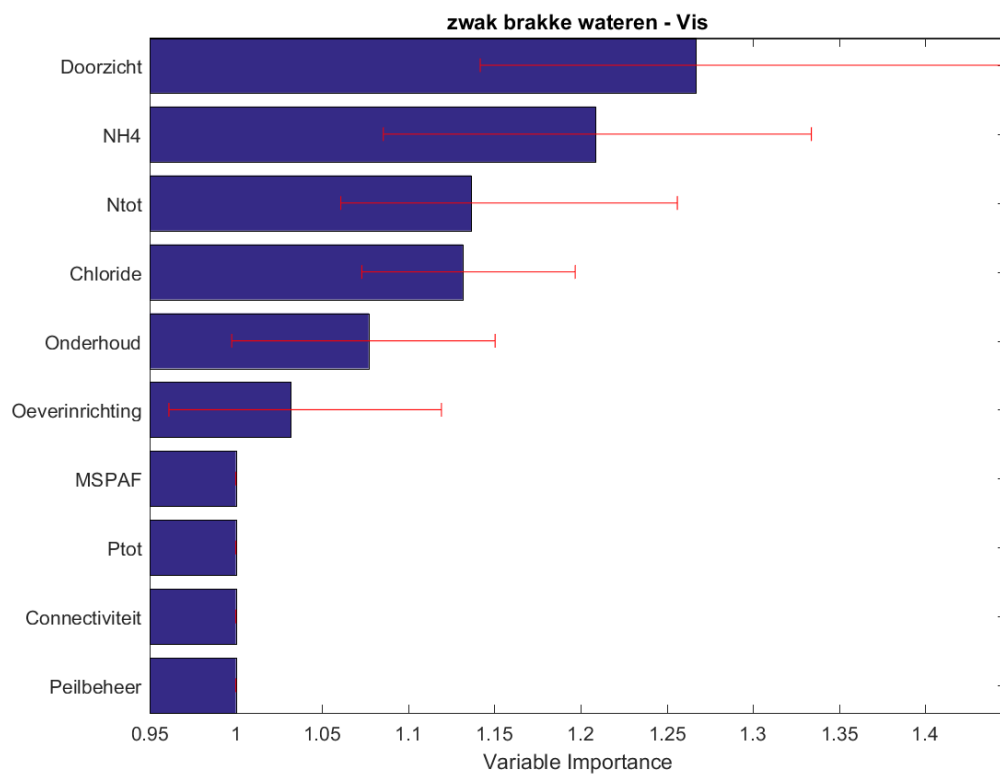




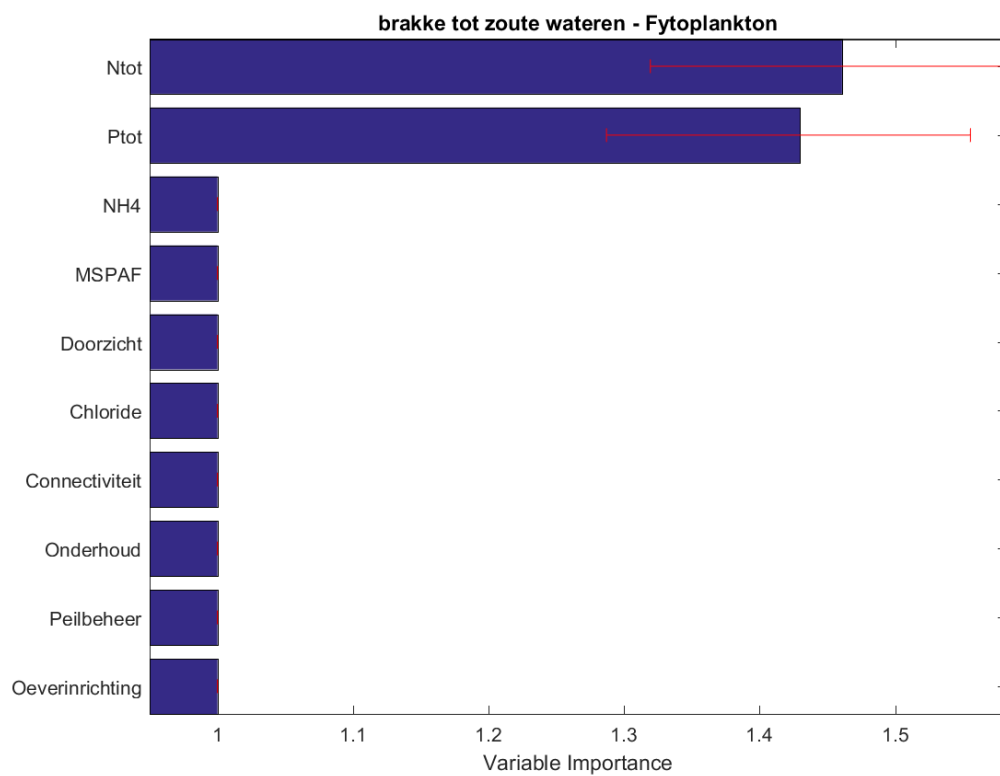
E.7 Zwak brakke wateren

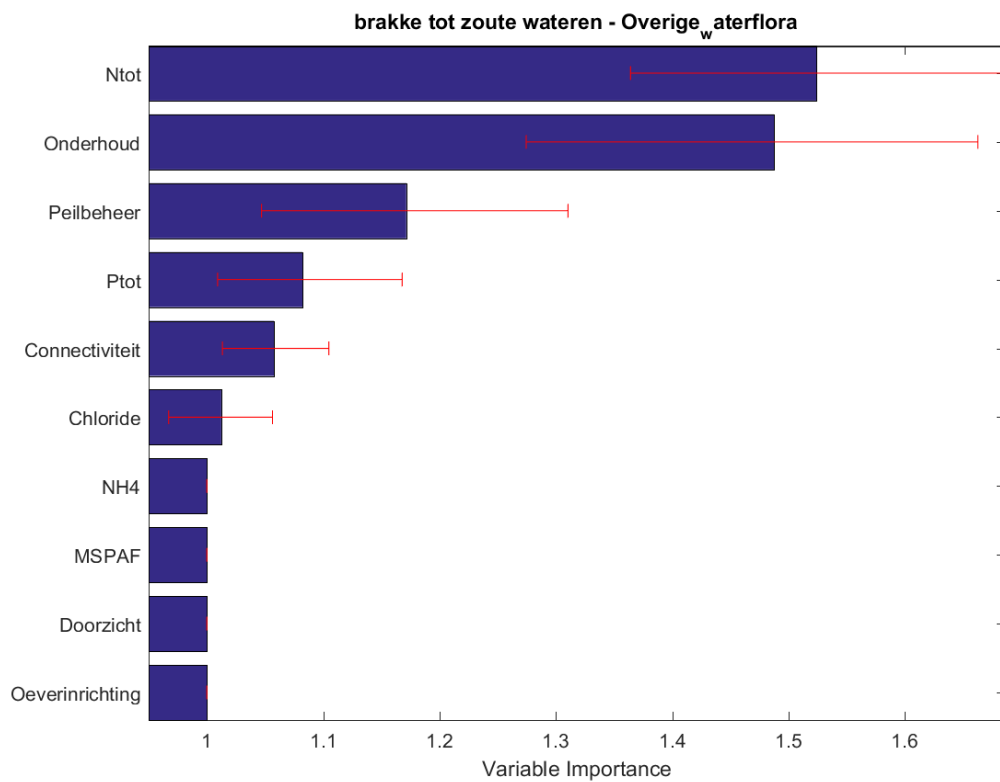
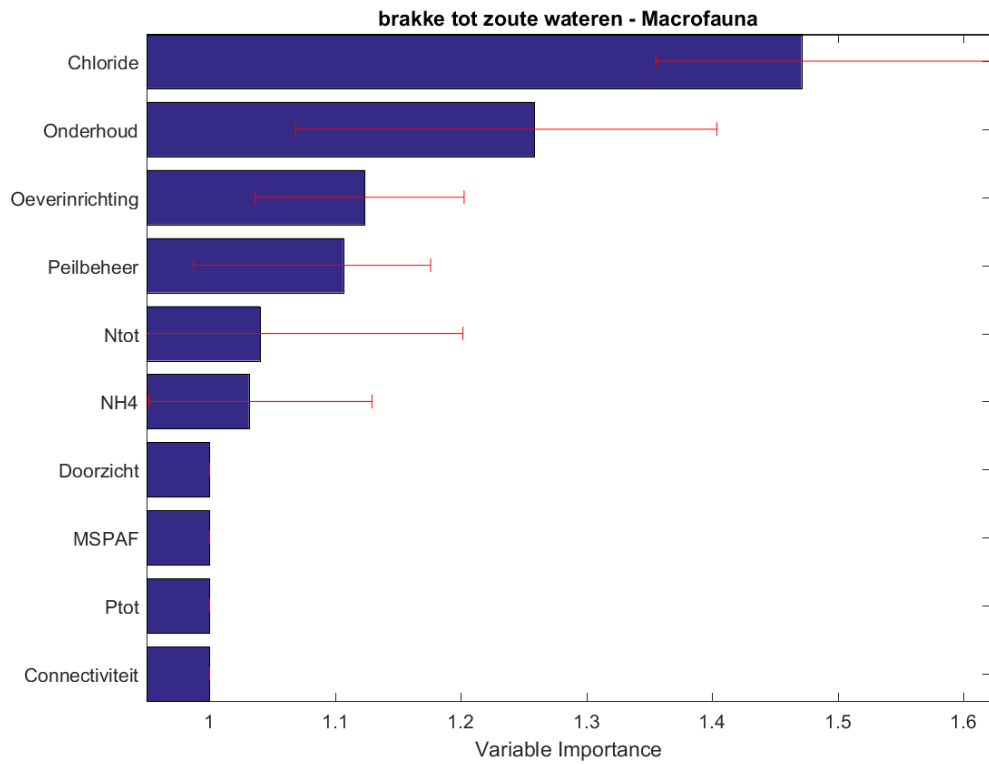


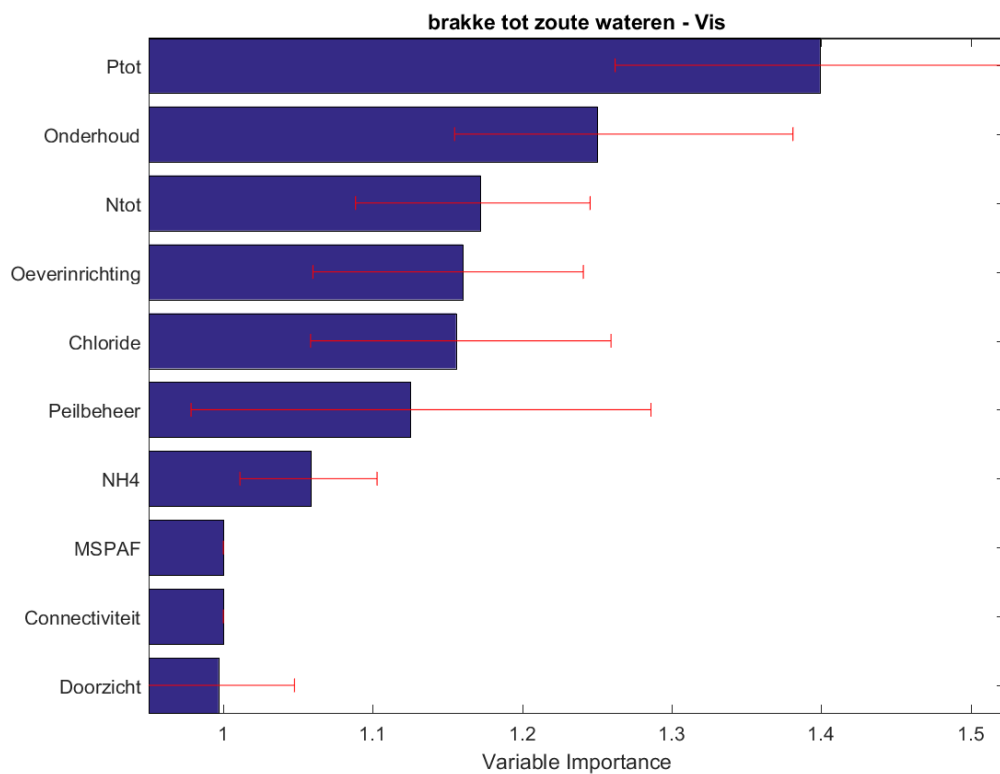




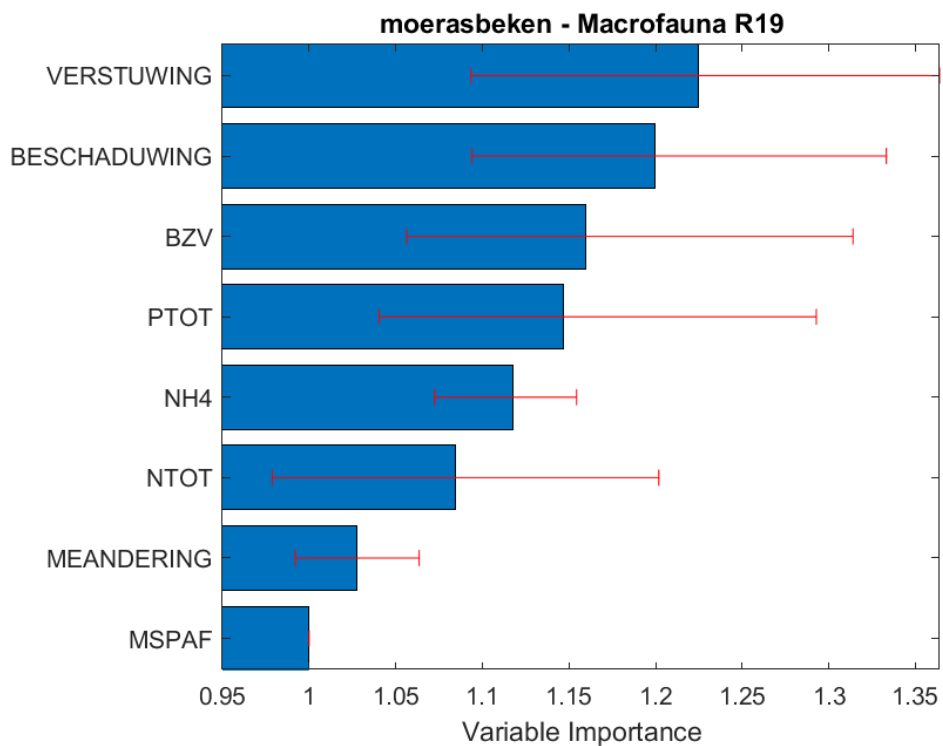
E.8 Brakke tot zoute wateren

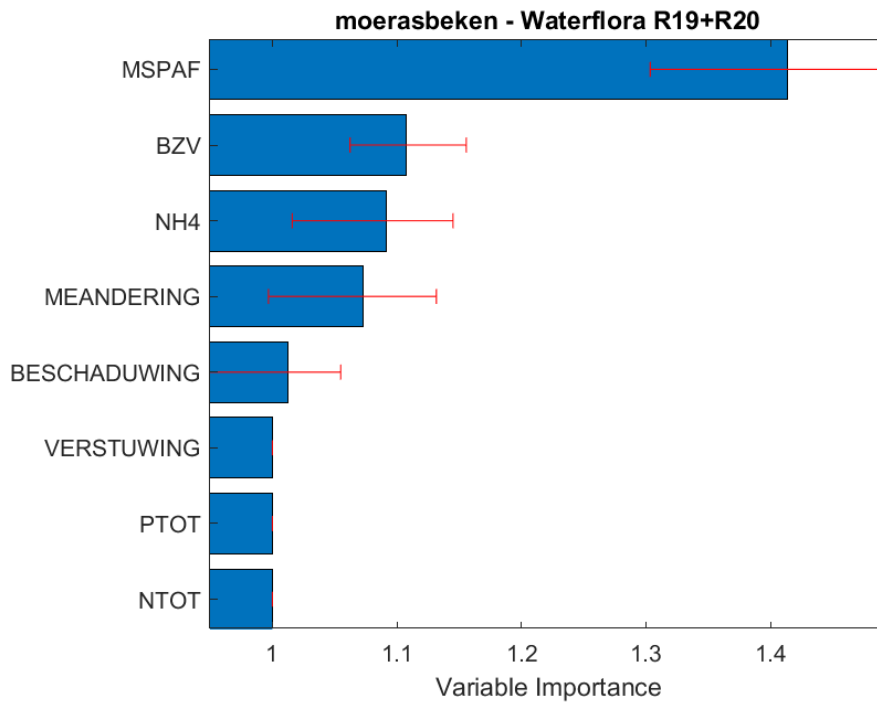
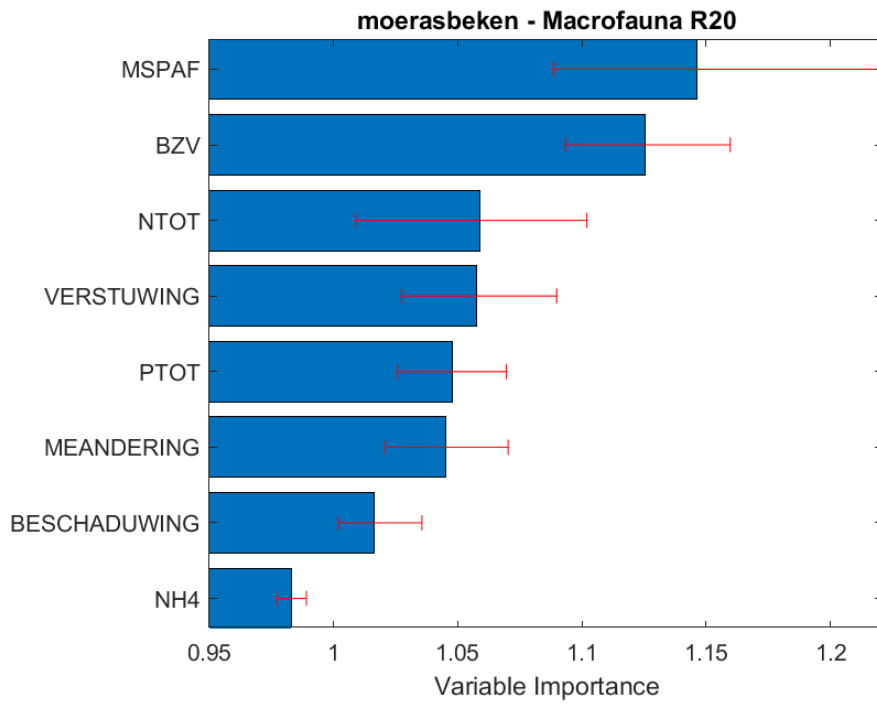




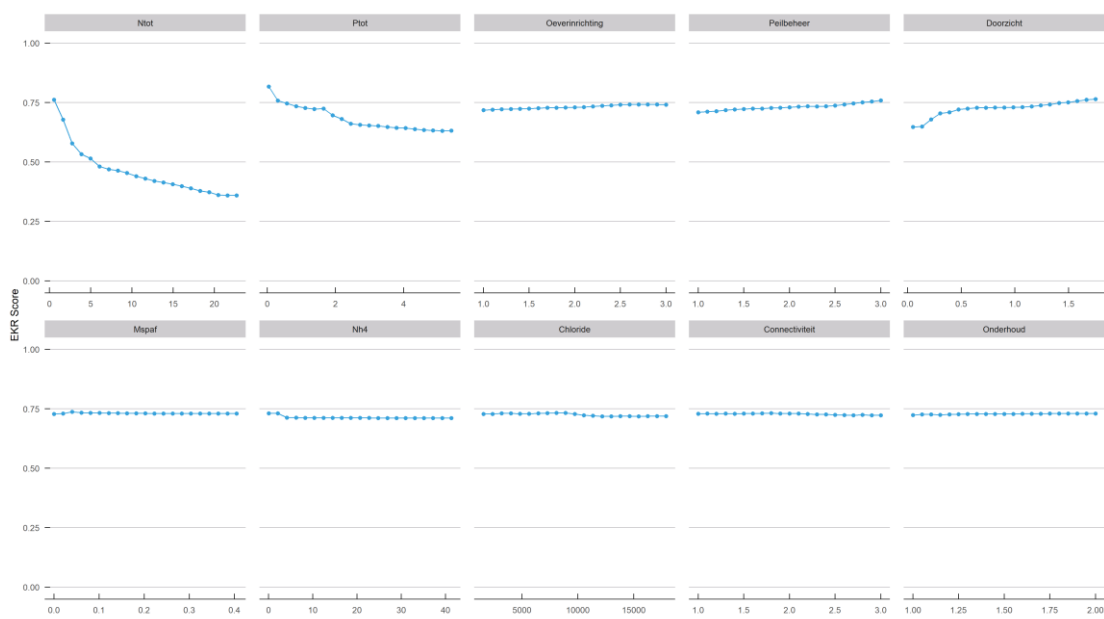


E.9 Moerasbeken

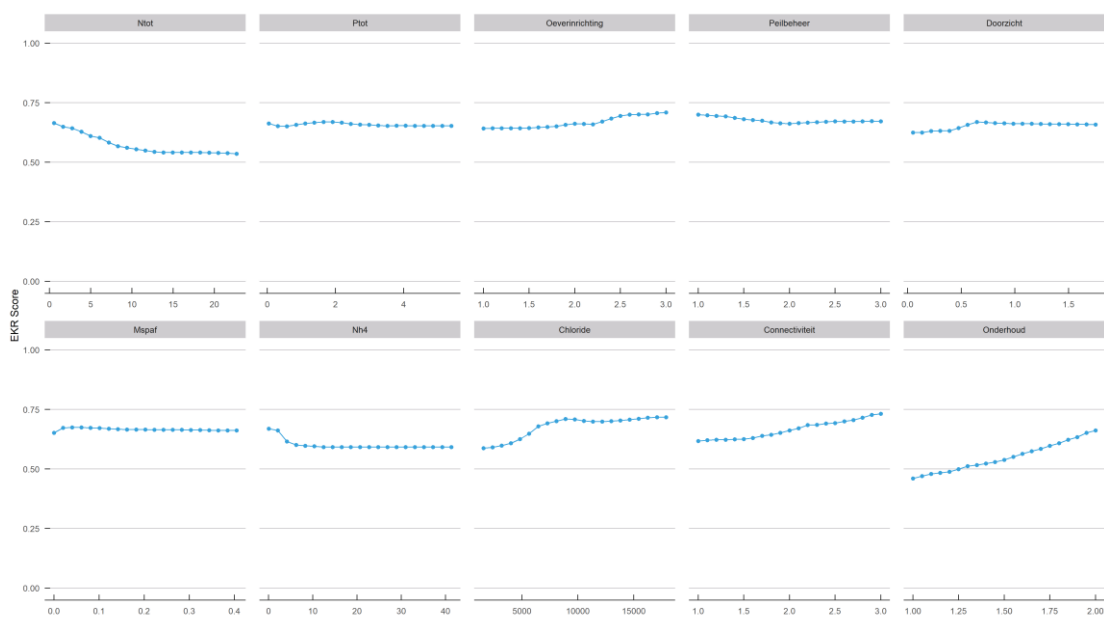




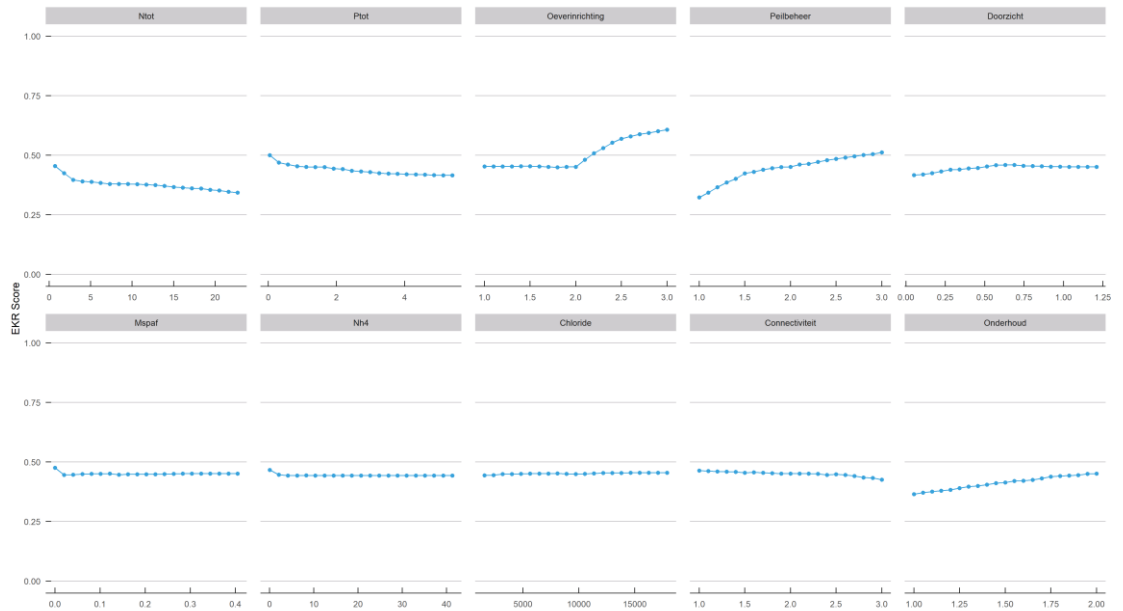
F Aanvullende resultaten random forest



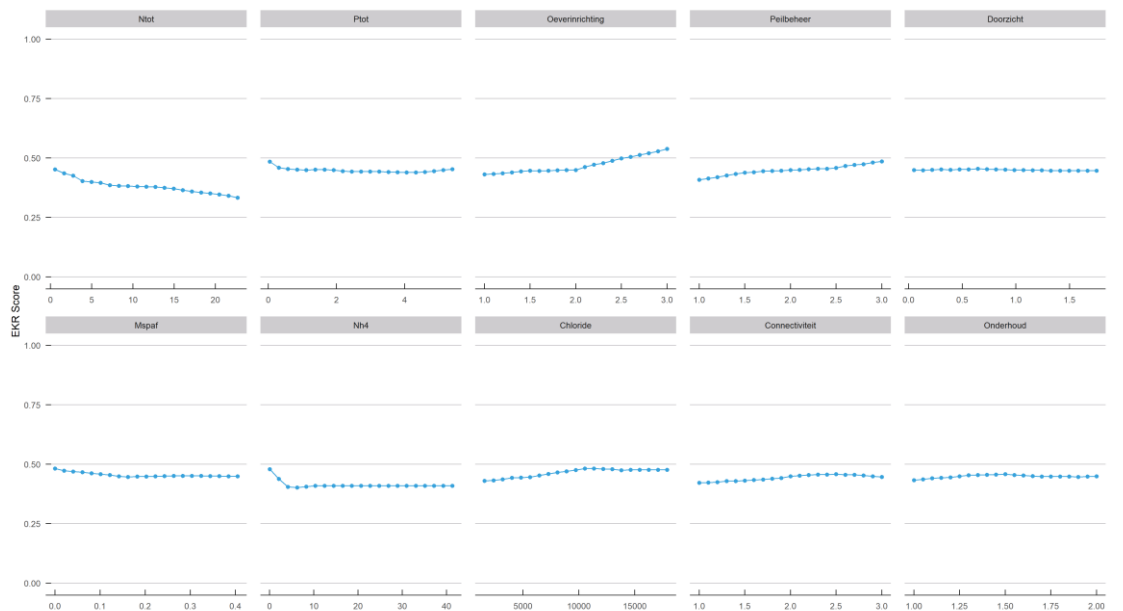
Partial dependence plot voor fytoplankton in brakke tot zoute wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



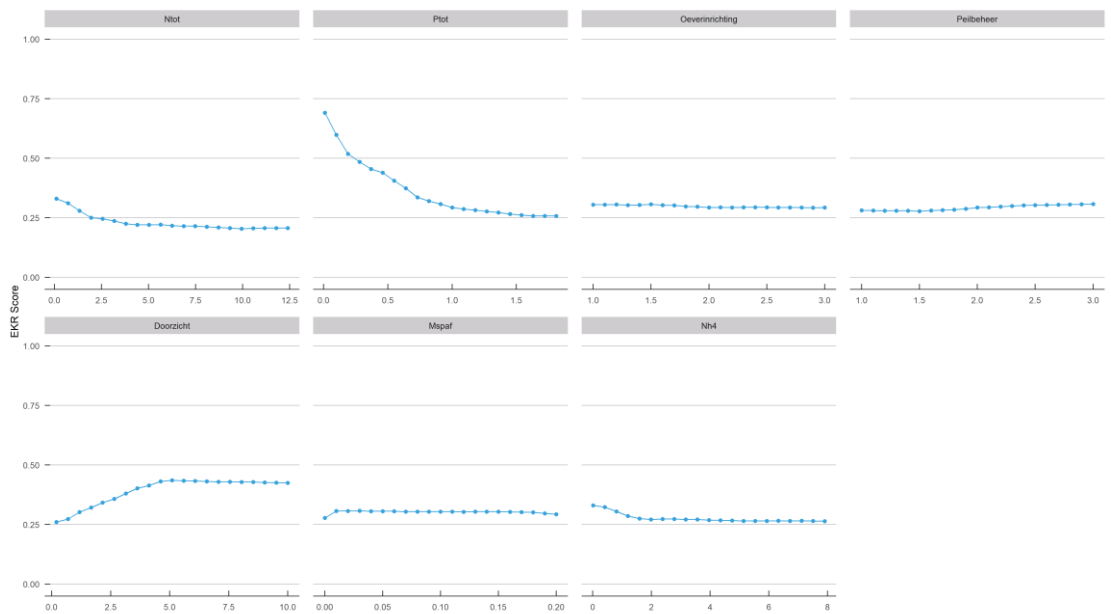
Partial dependence plot voor macrofauna in brakke tot zoute wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



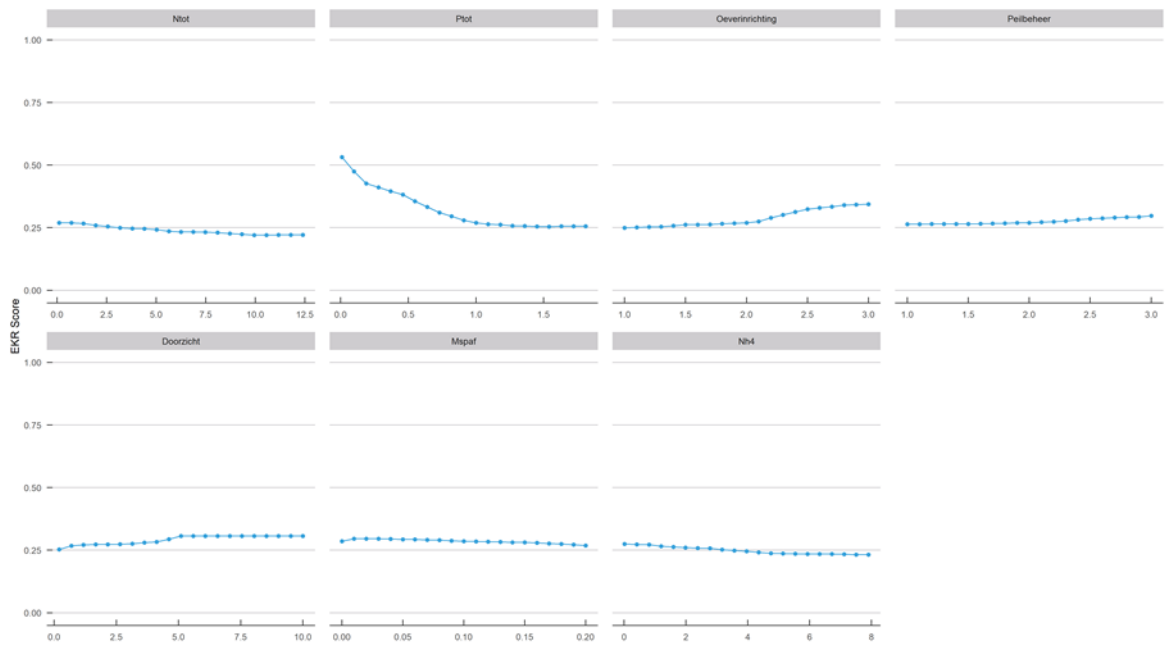
Partial dependence plot voor overige waterflora in brakke tot zoute wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



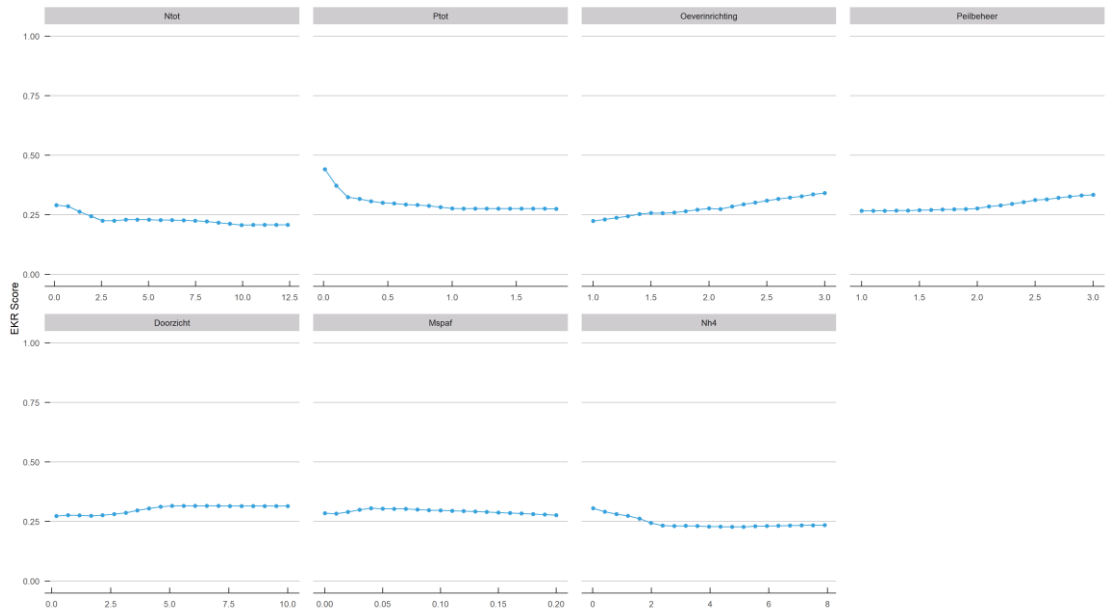
Partial dependence plot voor vis in brakke tot zoute wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



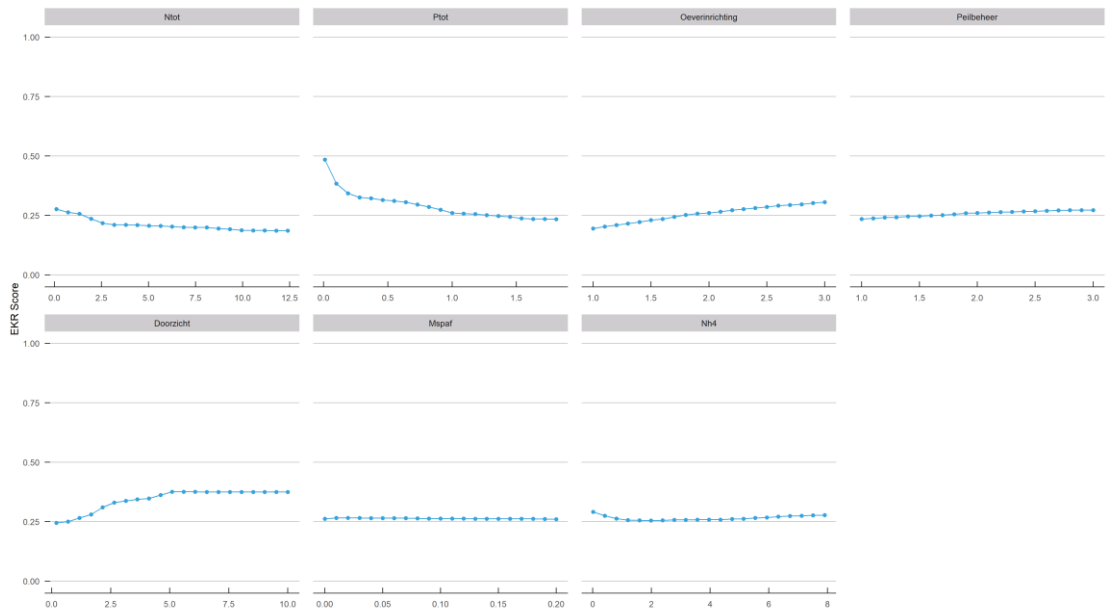
Partial dependence plot voor fytoplankton in diepe meren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



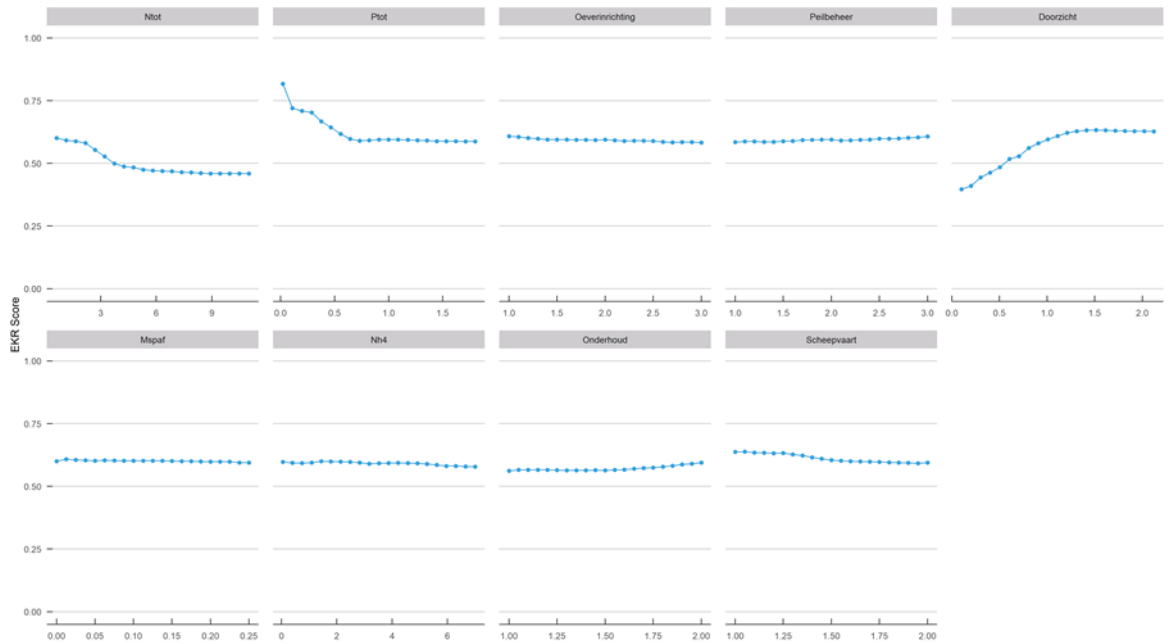
Partial dependence plot voor macrofauna in diepe meren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



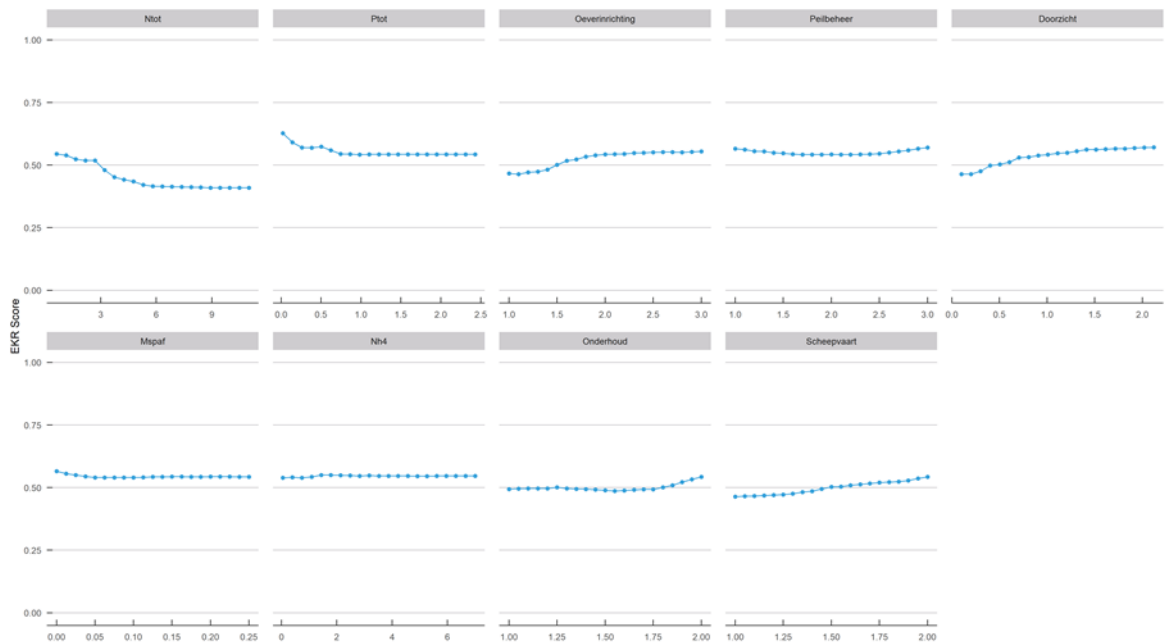
Partial dependence plot voor overige waterflora in diepe meren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



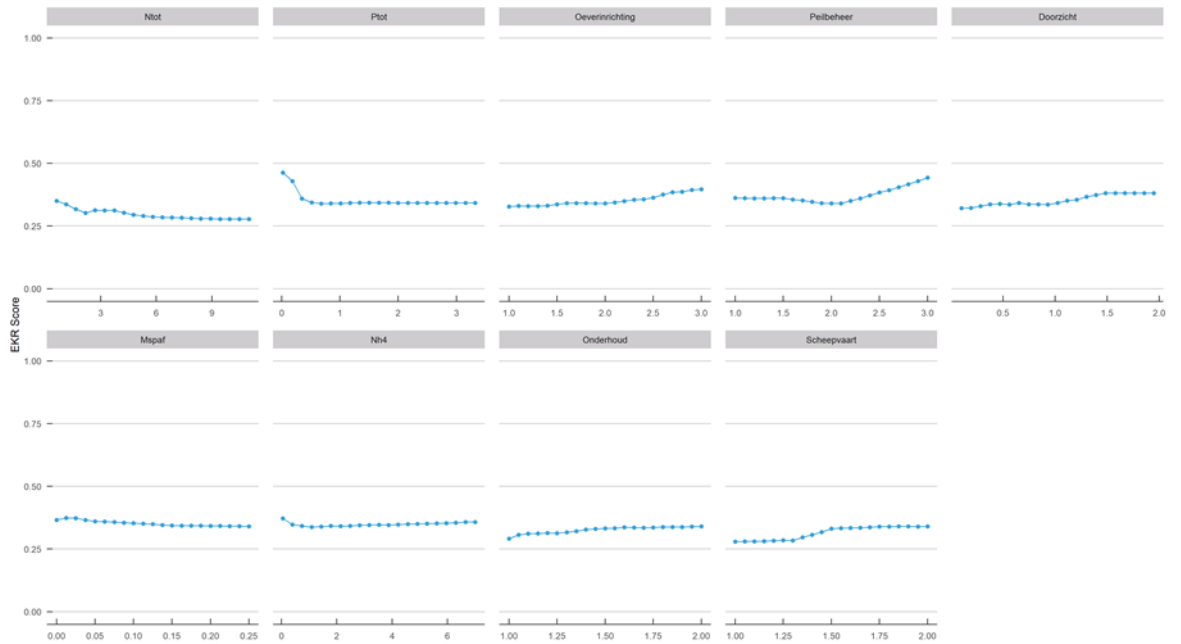
Partial dependence plot voor vis in diepe meren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



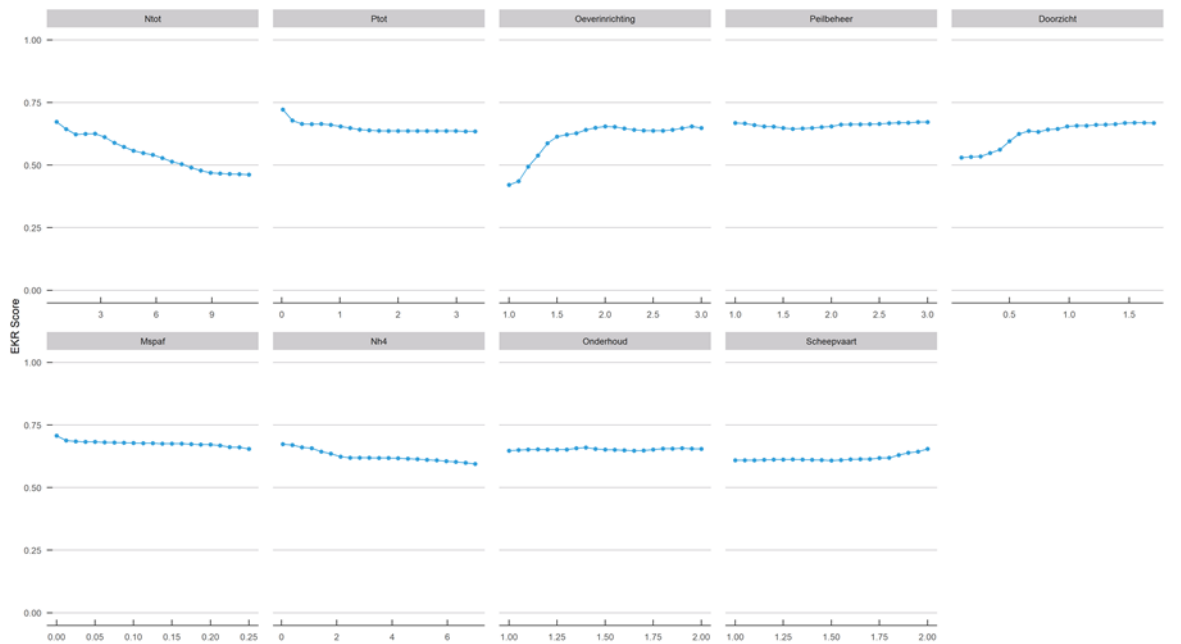
Partial dependence plot voor fytoplankton in kanalen. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



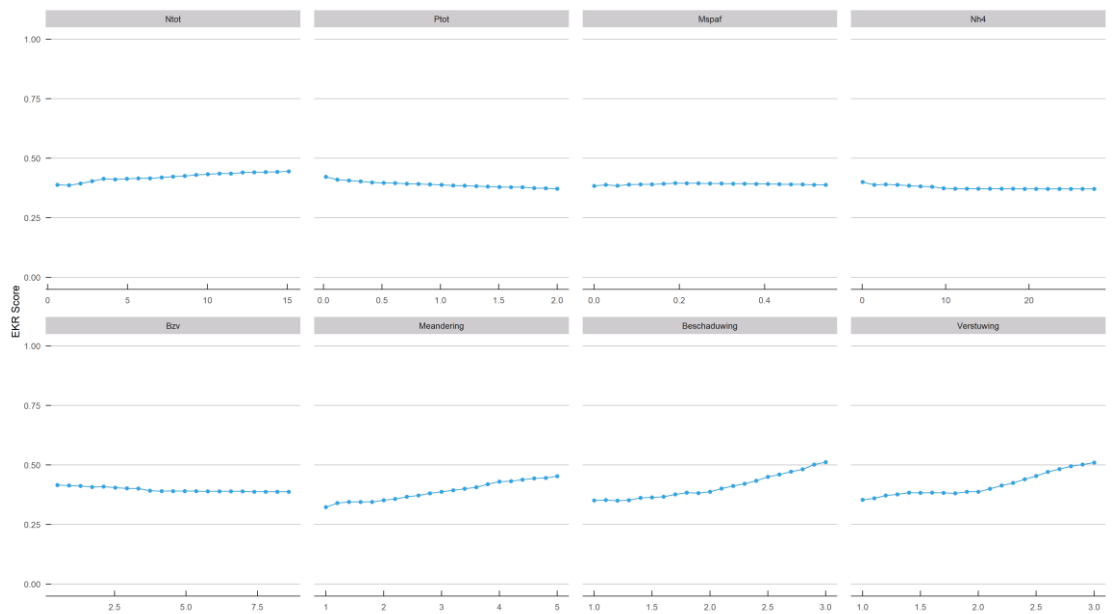
Partial dependence plot voor macrofauna in kanalen. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



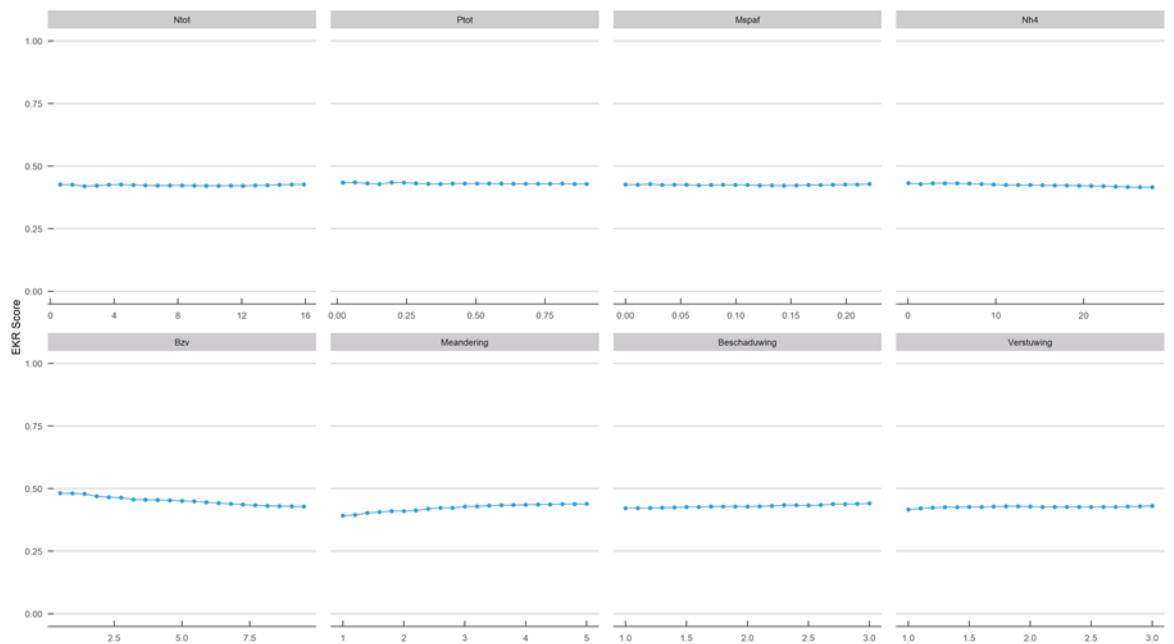
Partial dependence plot voor overige waterflora in kanalen. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



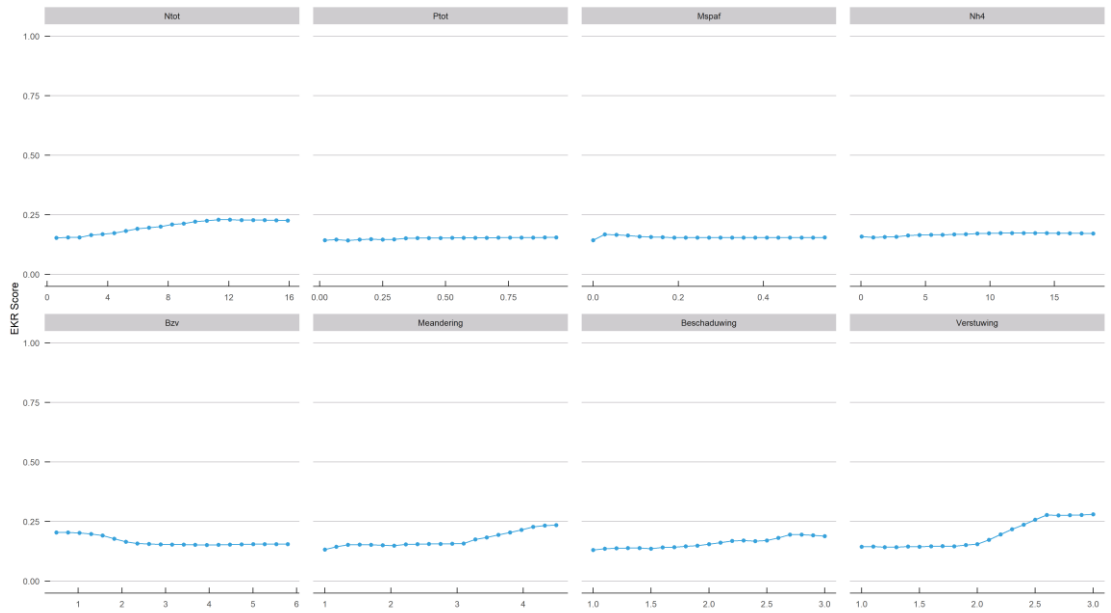
Partial dependence plot voor vis in kanalen. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



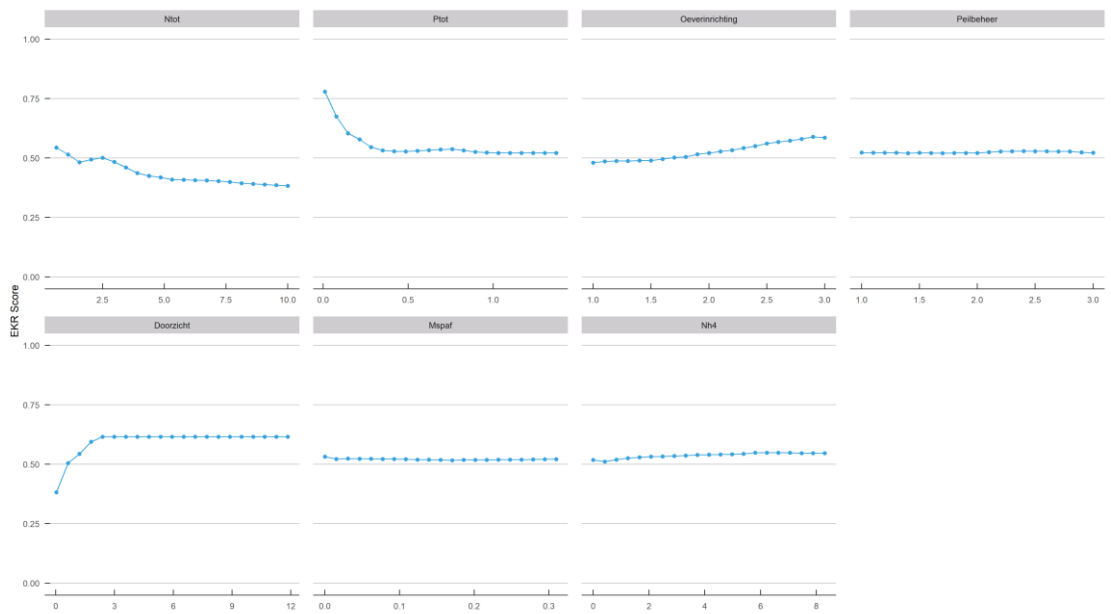
Partial dependence plot voor macrofauna in langzaam stromende wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



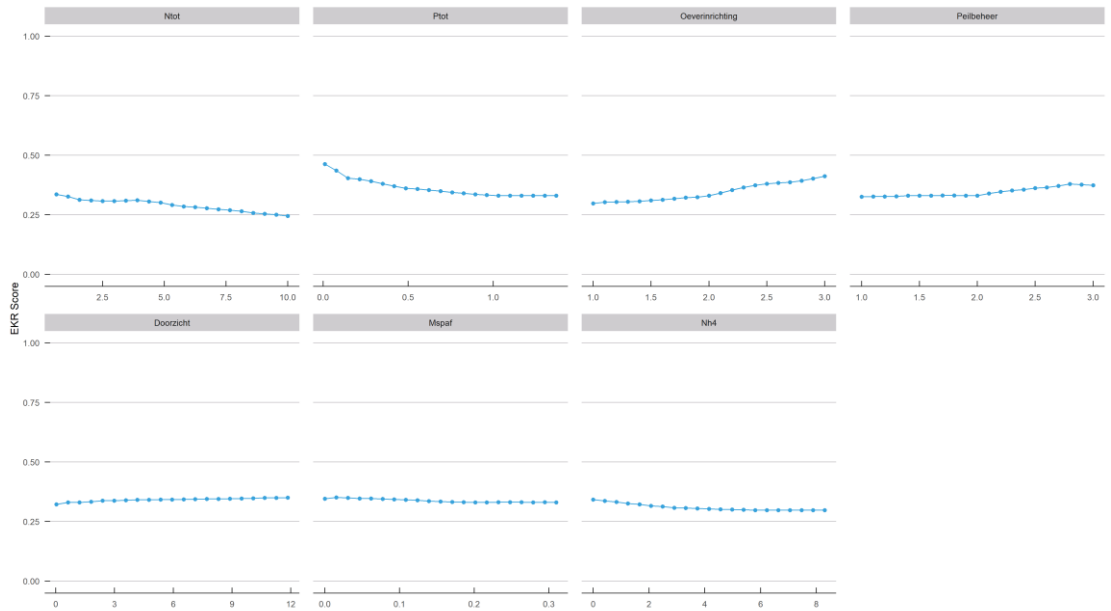
Partial dependence plot voor overige waterflora in langzaam stromende wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



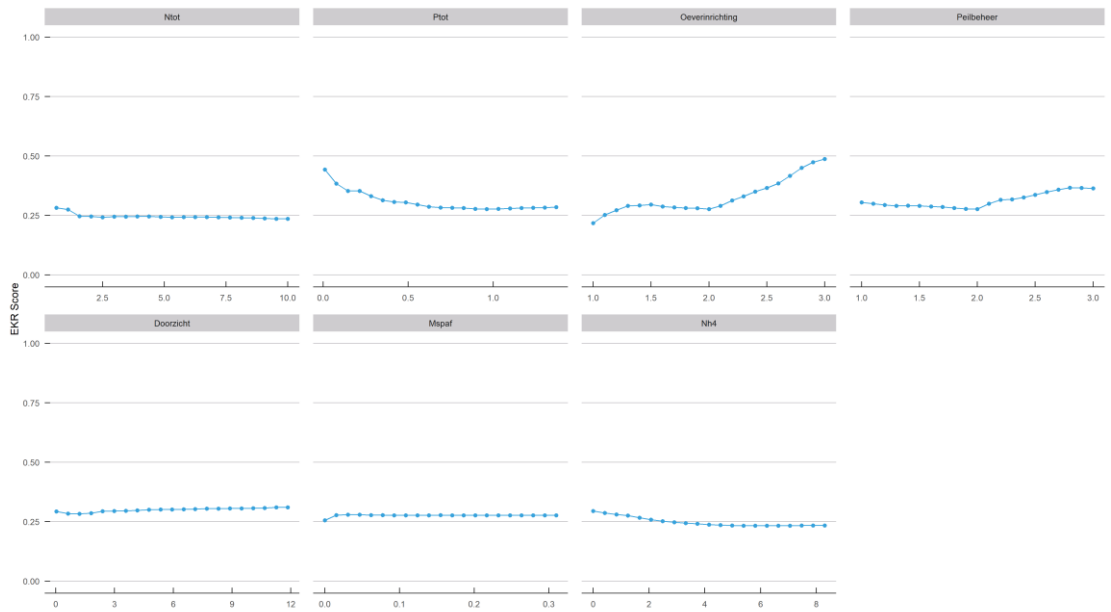
Partial dependence plot voor vis in langzaam stromende wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



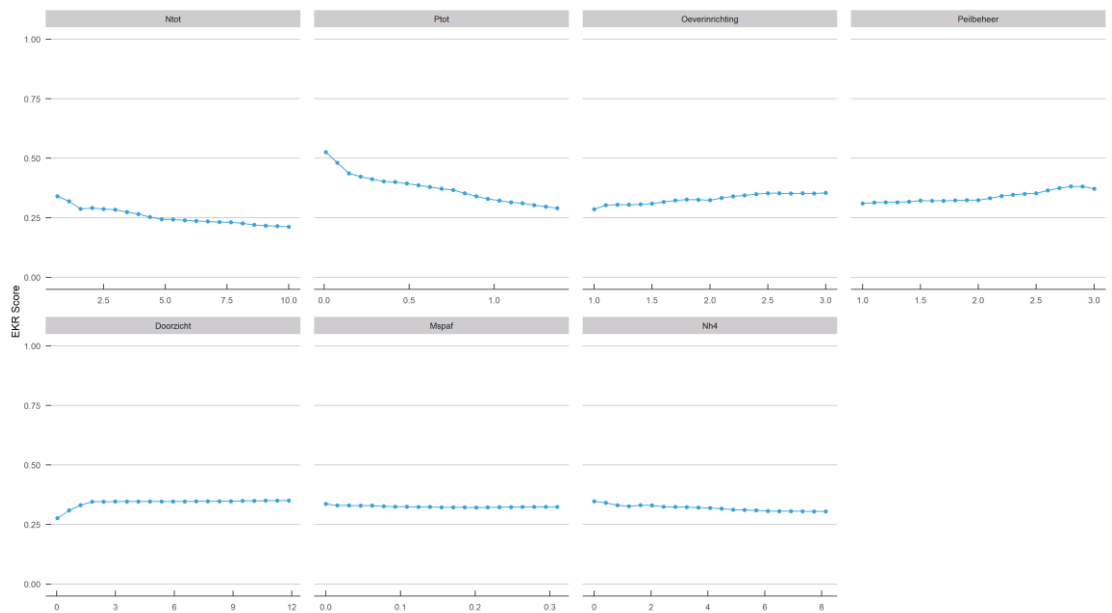
Partial dependence plot voor fytoplankton in ondiepe meren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



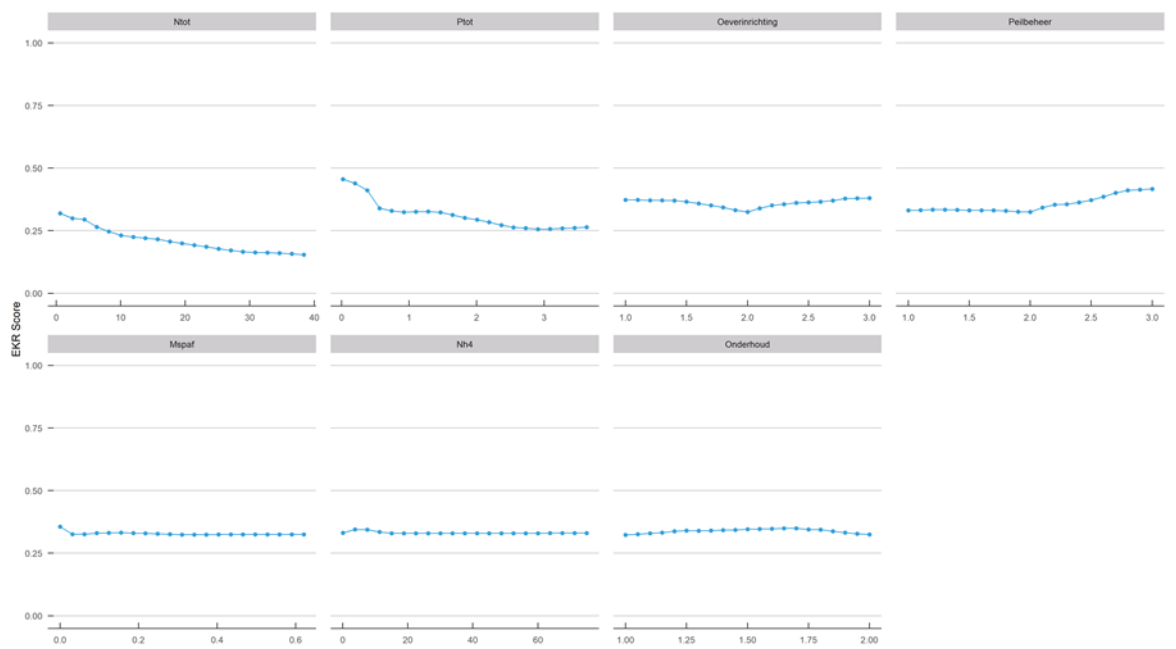
Partial dependence plot voor macrofauna in ondiepe meren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



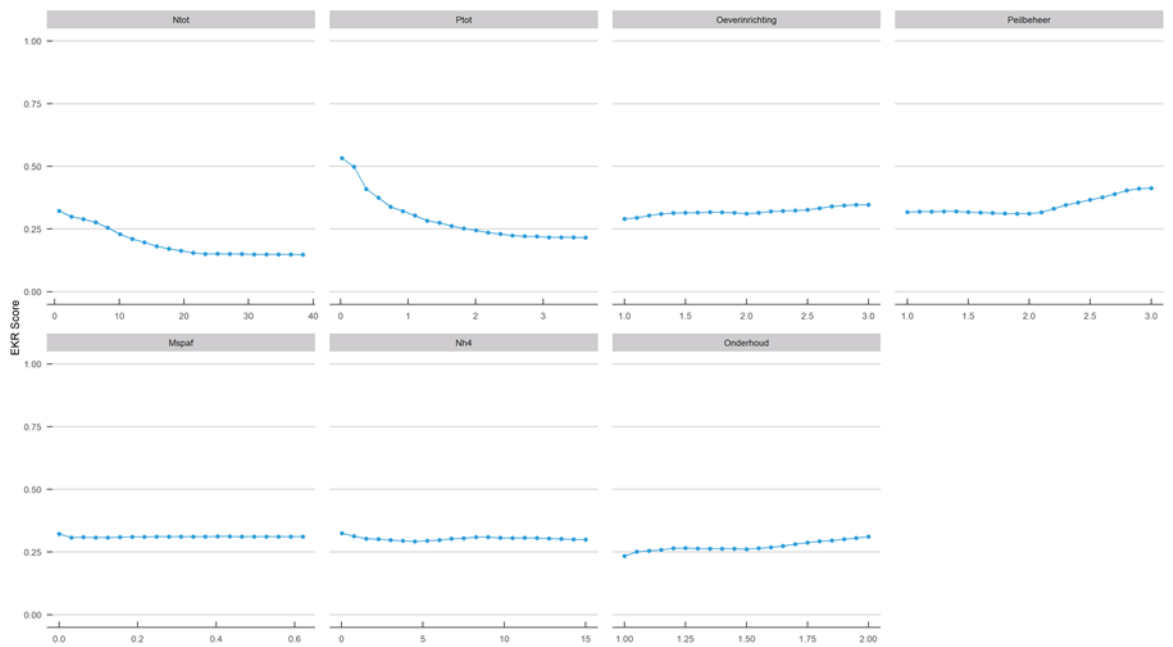
Partial dependence plot voor overige waterflora in ondiepe meren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



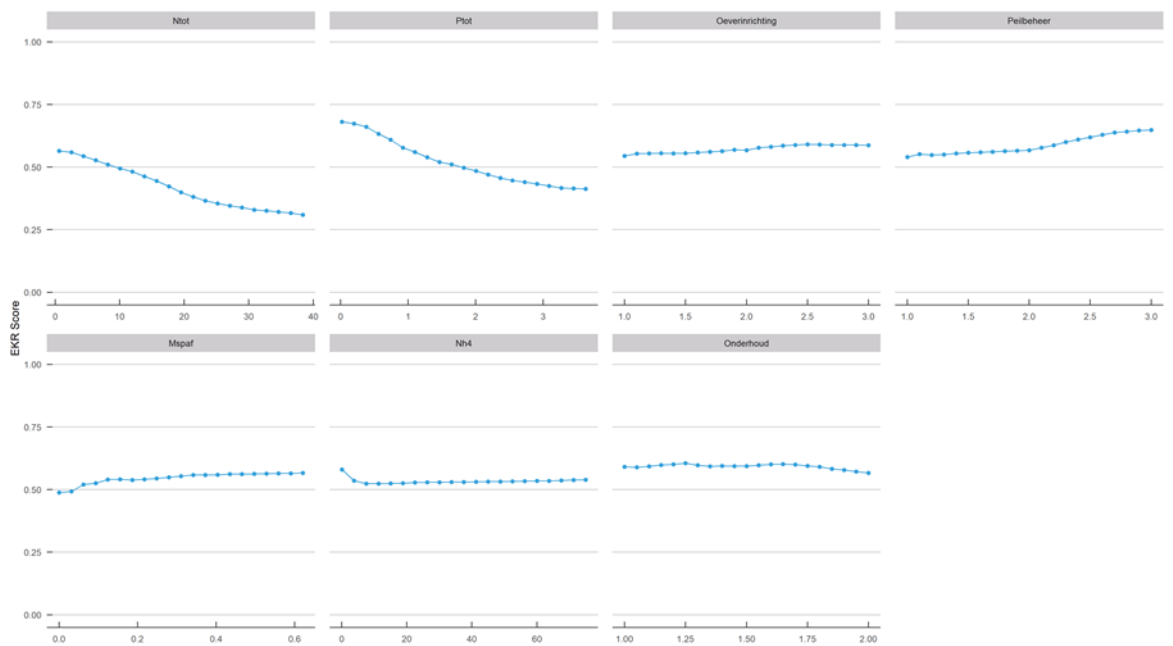
Partial dependence plot voor vis in ondiepe meren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



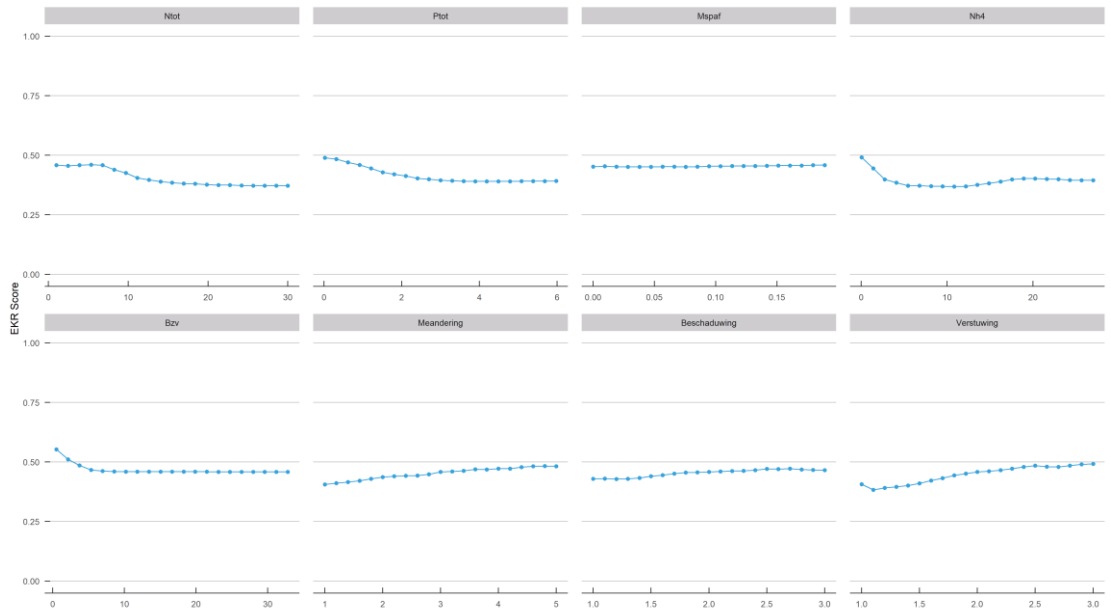
Partial dependence plot voor macrofauna in sloten. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



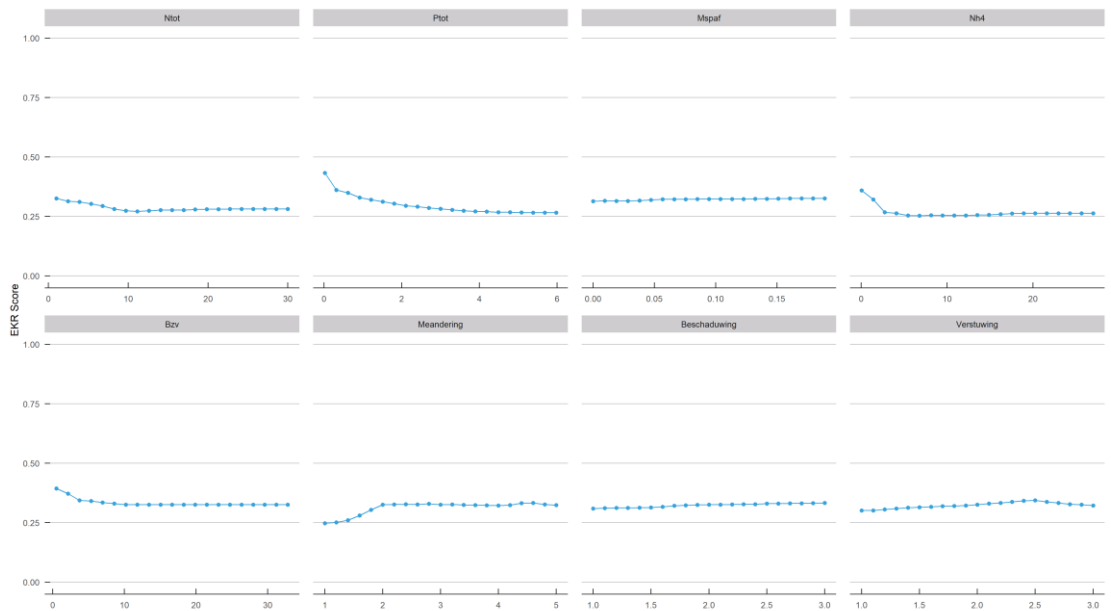
Partial dependence plot voor overige waterflora in sloten. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



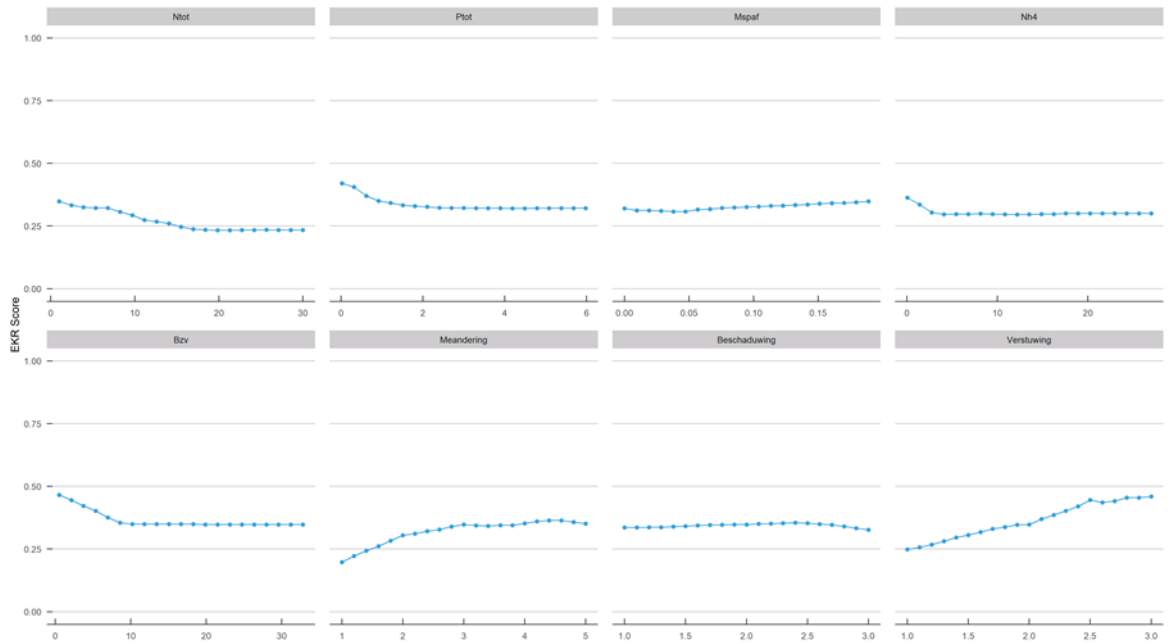
Partial dependence plot voor vis in sloten. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



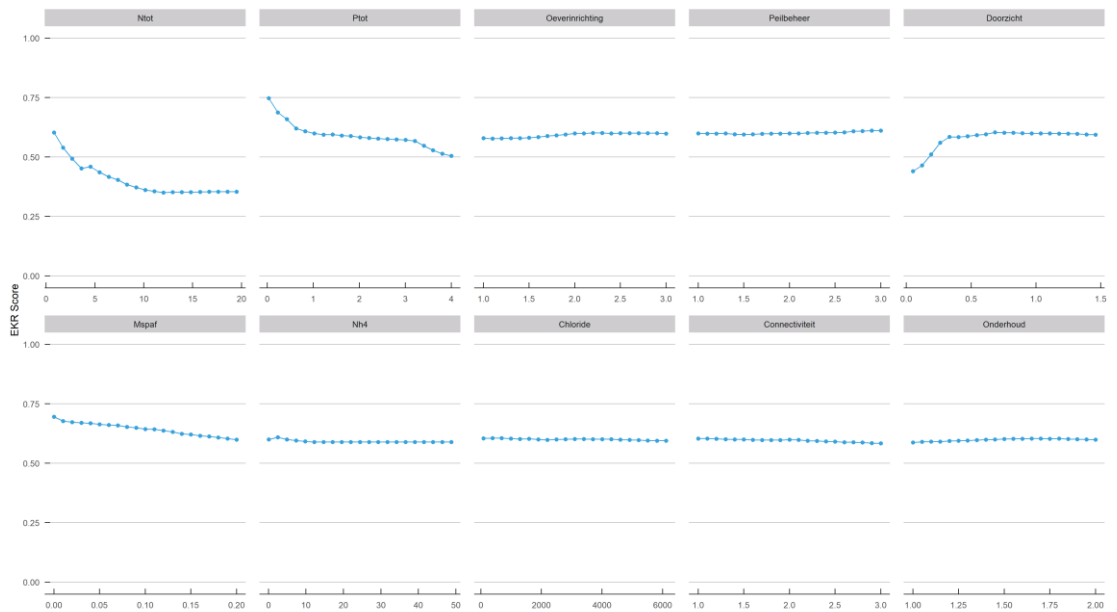
Partial dependence plot voor macrofauna in snelstromende wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



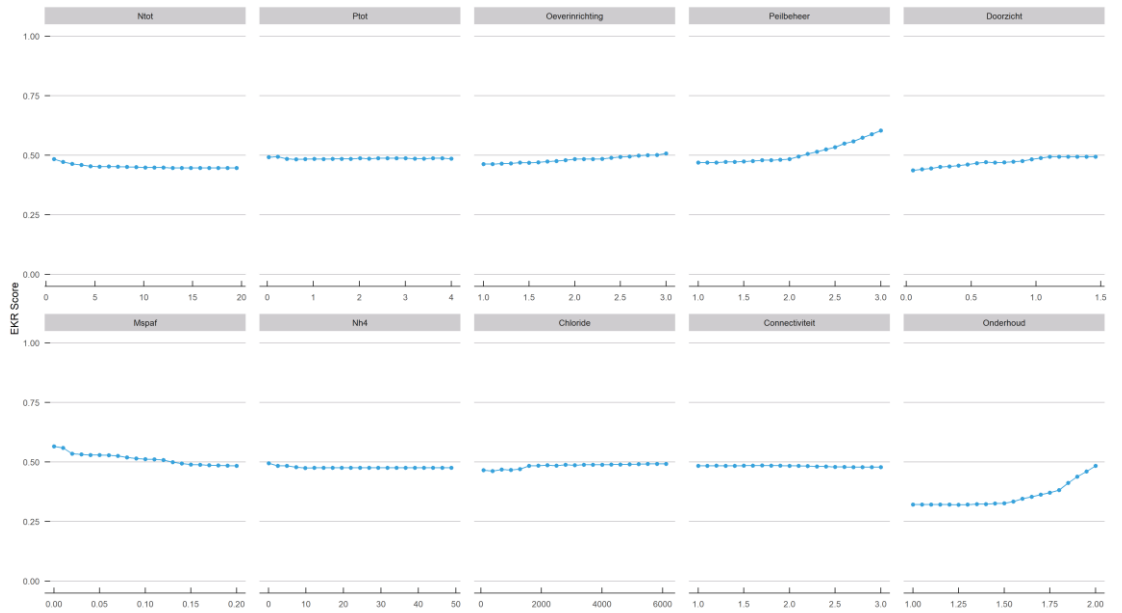
Partial dependence plot voor overige waterflora in snelstromende wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



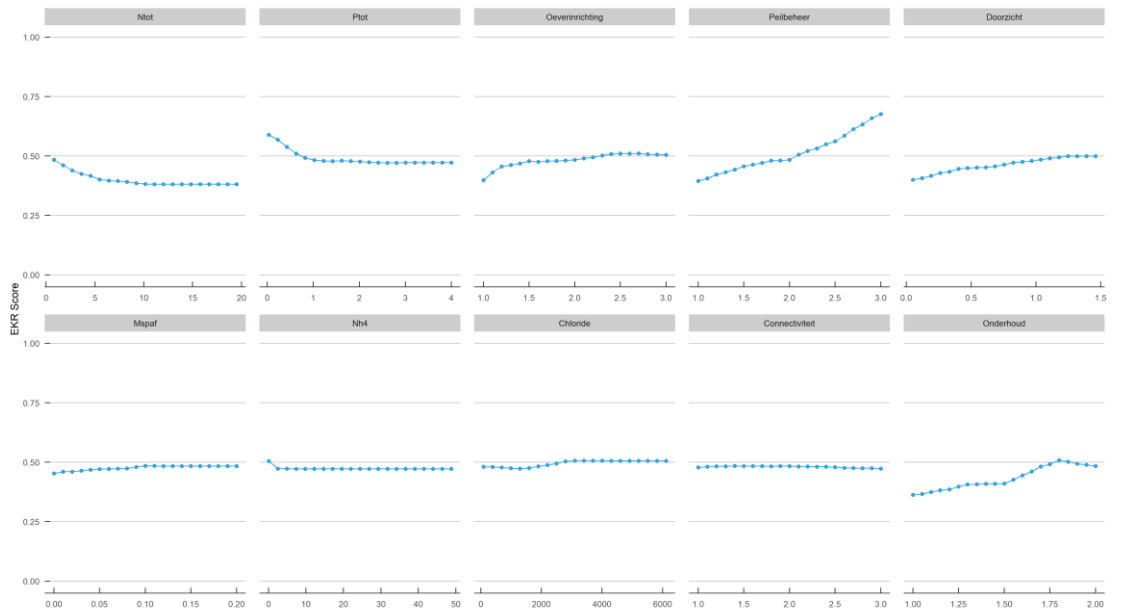
Partial dependence plot voor vis in snelstromende wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



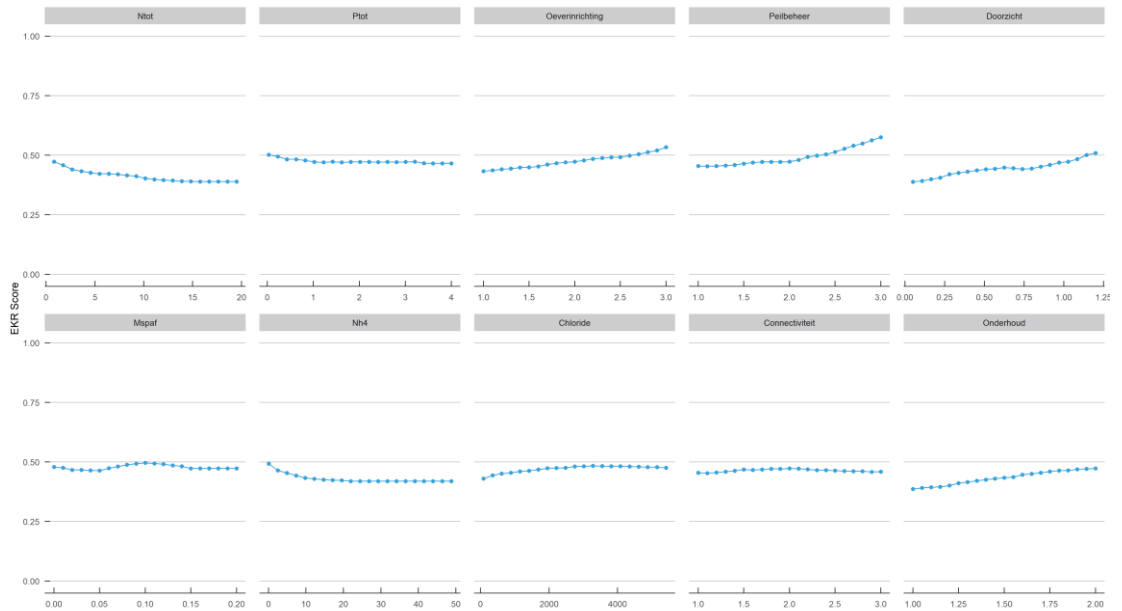
Partial dependence plot voor fytoplankton in zwak brakke wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



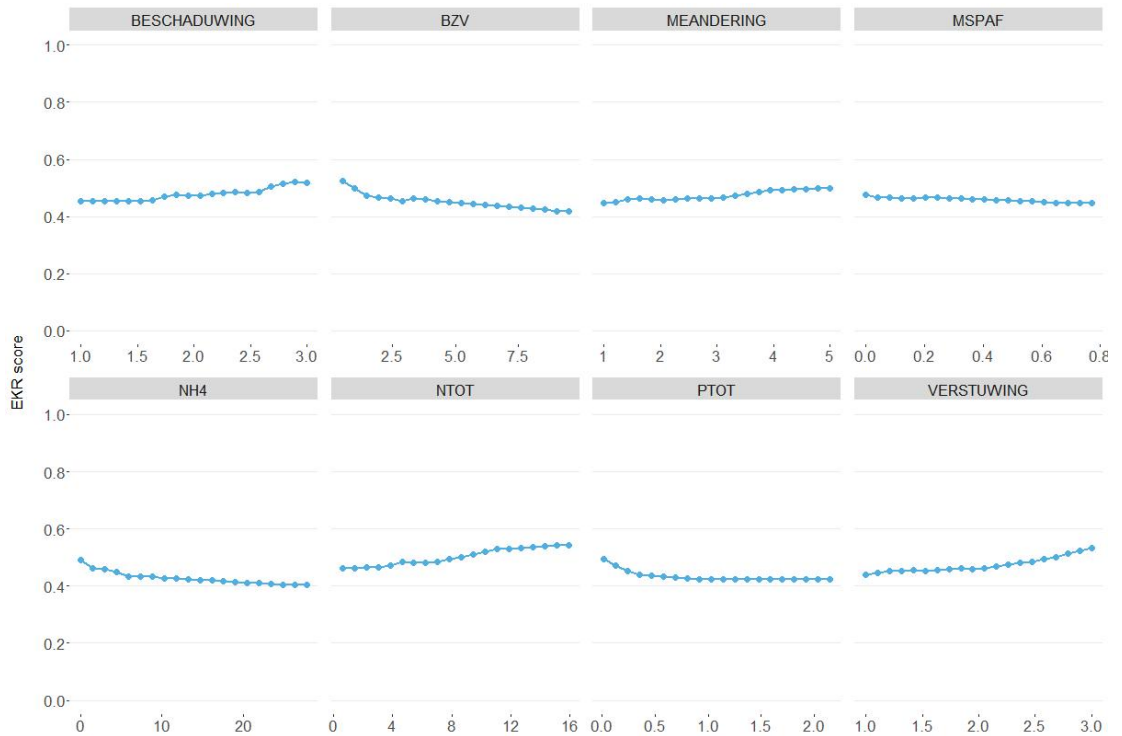
Partial dependence plot voor macrofauna in zwak brakke wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



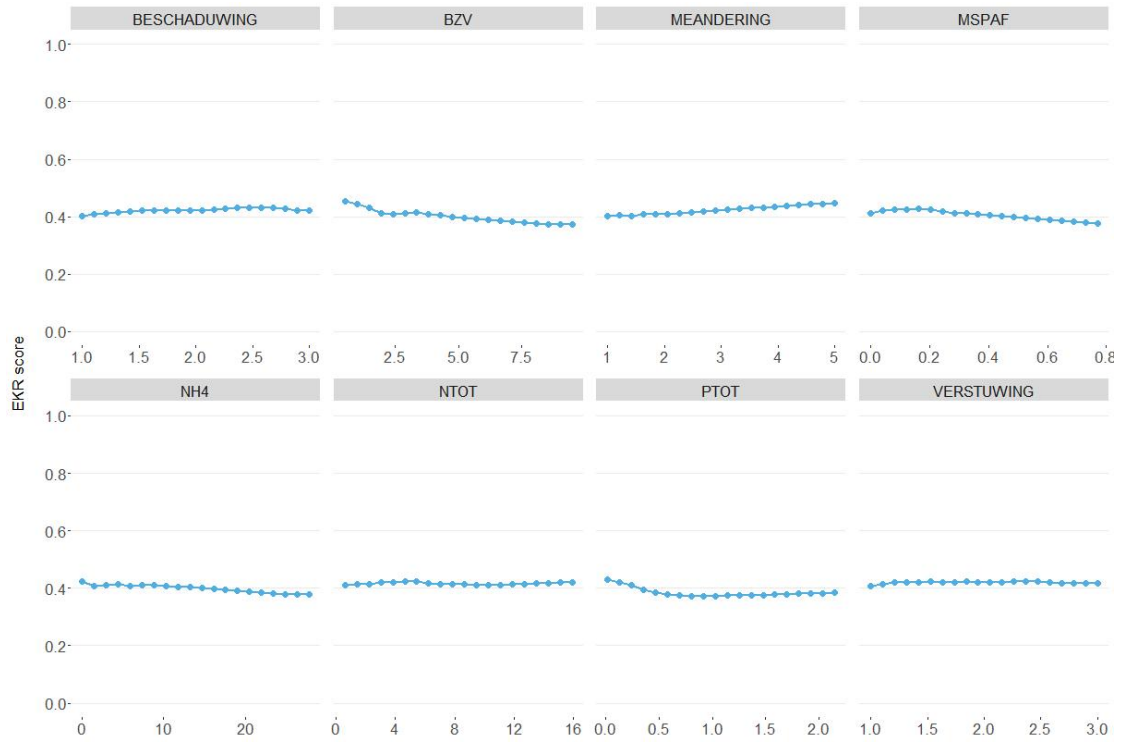
Partial dependence plot voor overige waterflora in zwak brakke wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



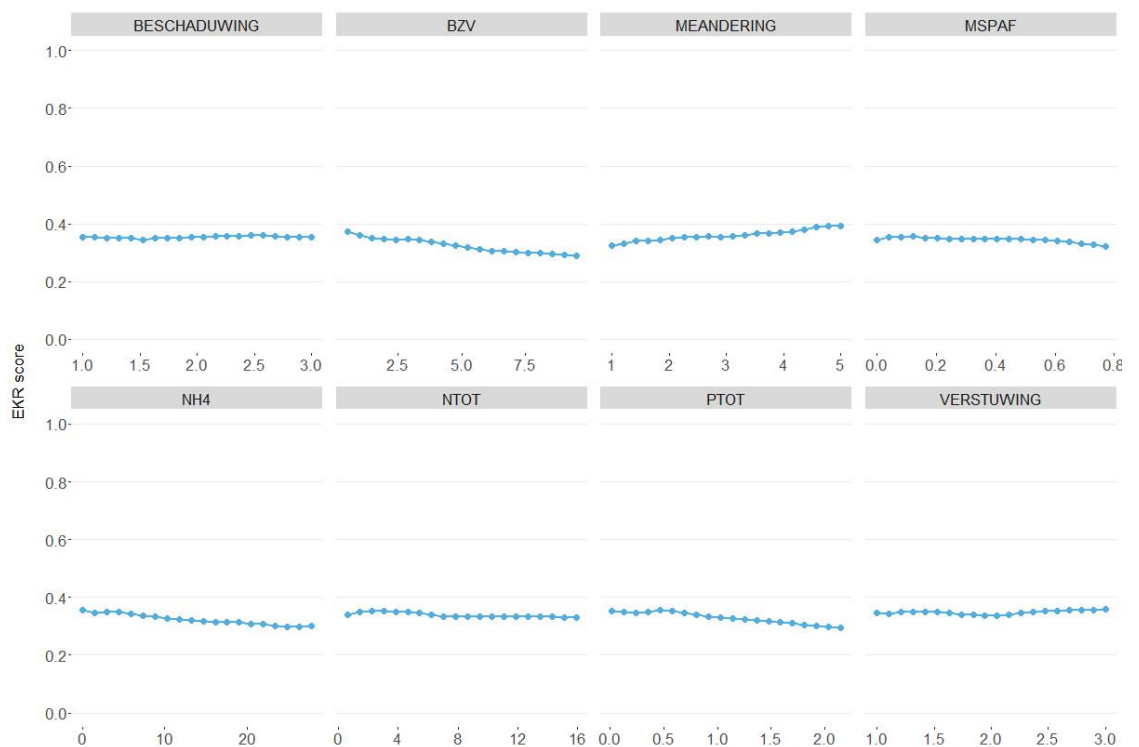
Partial dependence plot voor vis in zwak brakke wateren. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



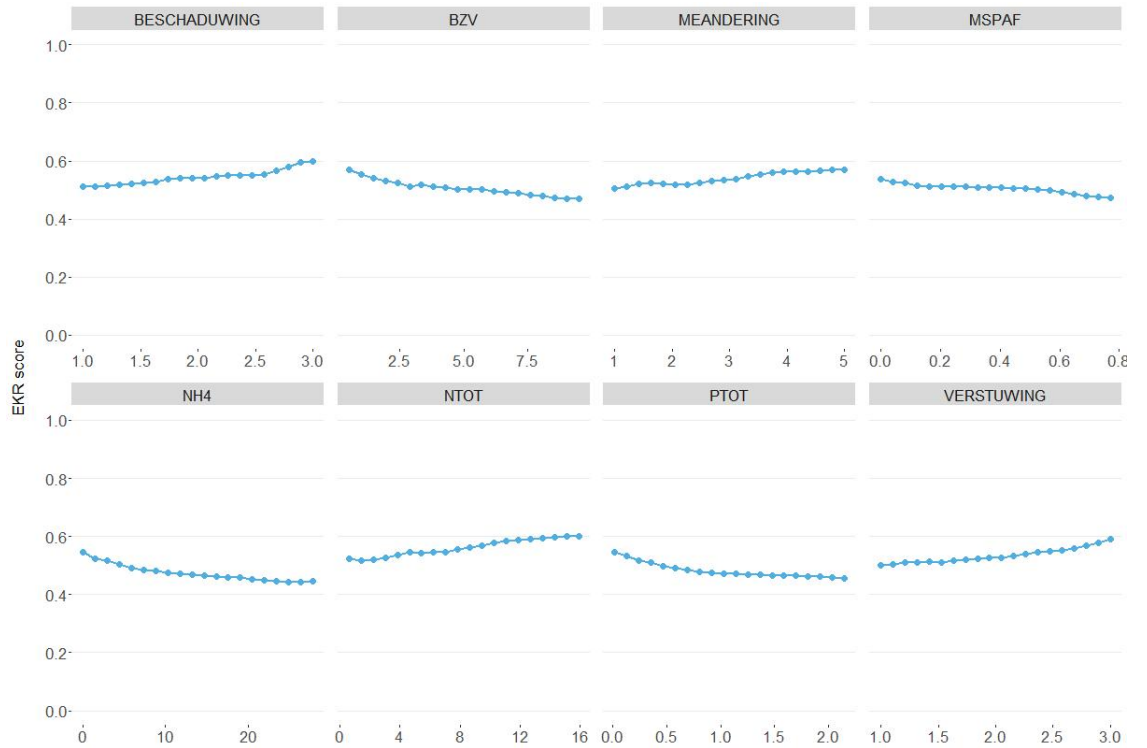
Partial dependence plot voor macrofauna in doorstroommoerassen. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



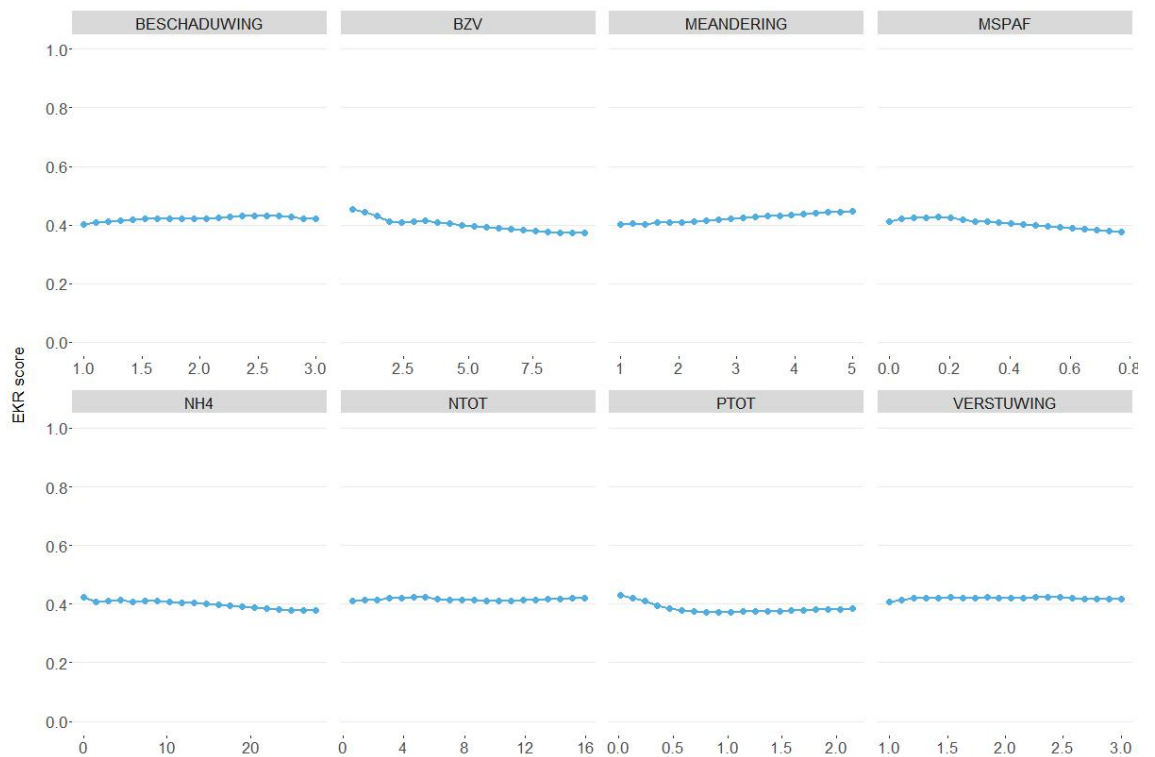
Partial dependence plot voor overige waterflora in doorstroommoerassen. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



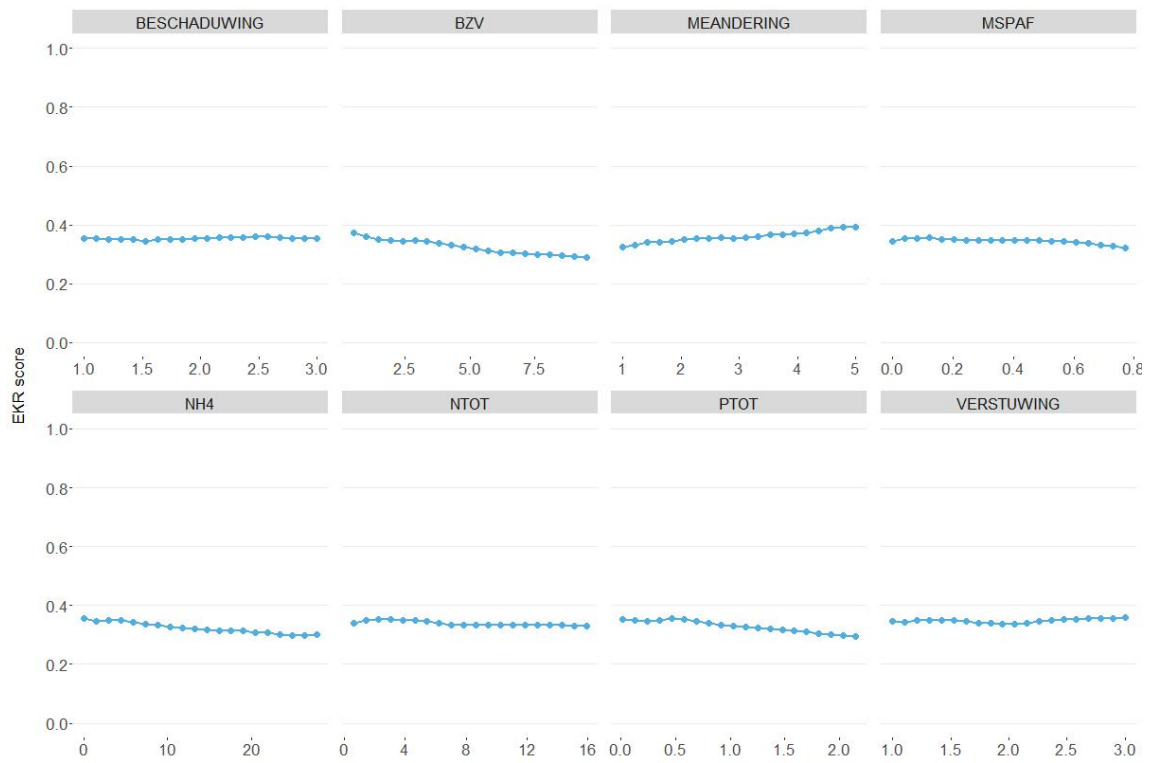
Partial dependence plot voor vis in doorstroommoerassen. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



Partial dependence plot voor macrofauna in moerasbeken. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.



Partial dependence plot voor overige waterflora in moerasbeken. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.

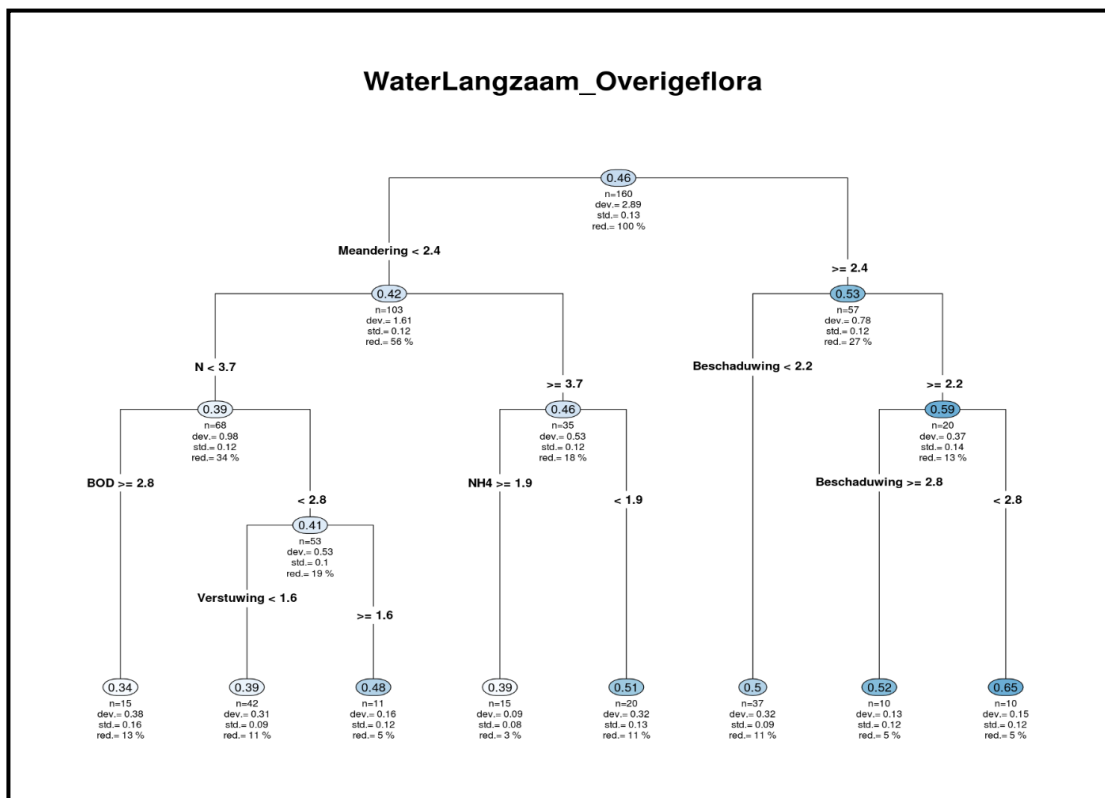


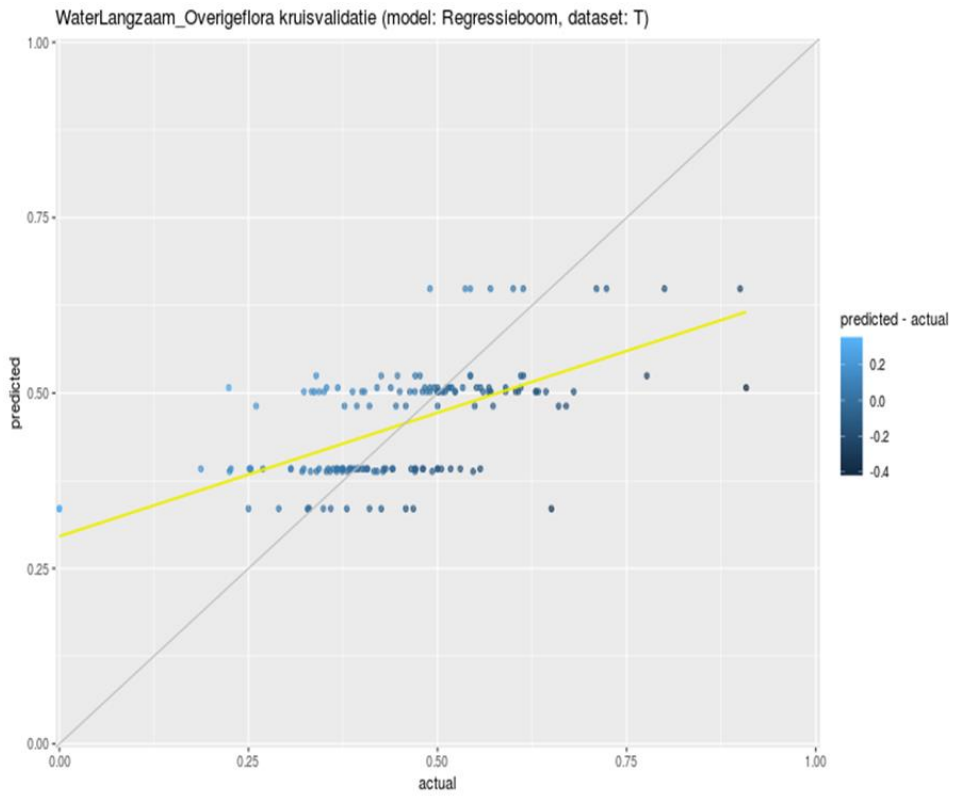
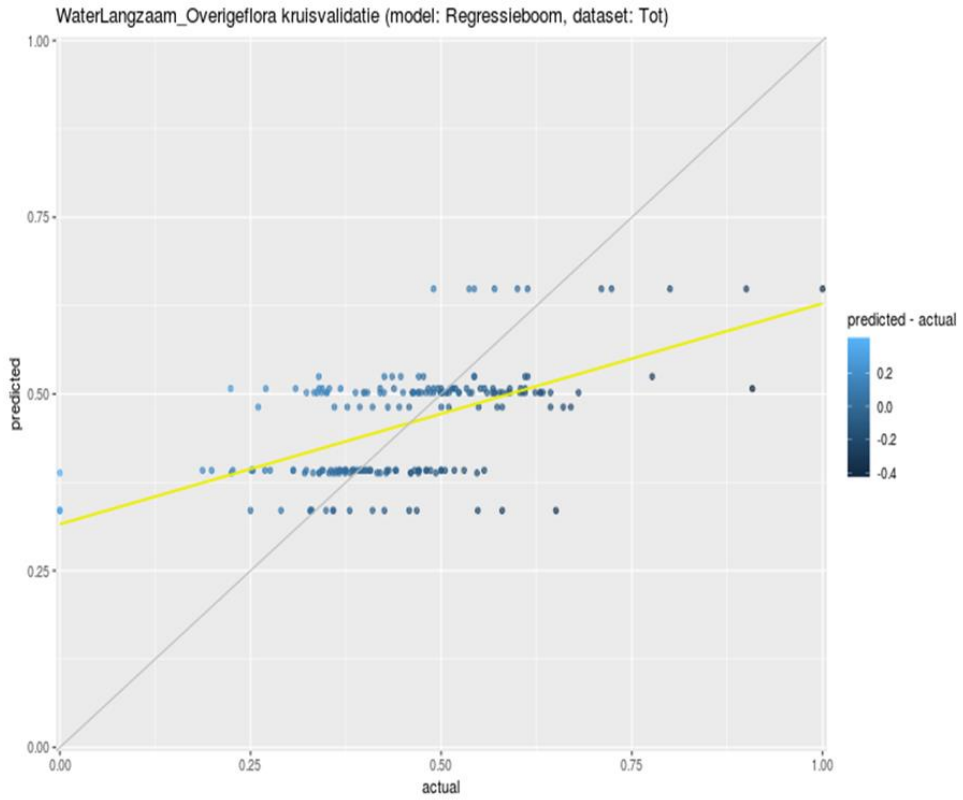
Partial dependence plot voor vis in moerasbeken. De blauwe lijn geeft het verloop per stuurvariabele aan waarbij de andere variabelen op referentiewaarde worden gehouden.

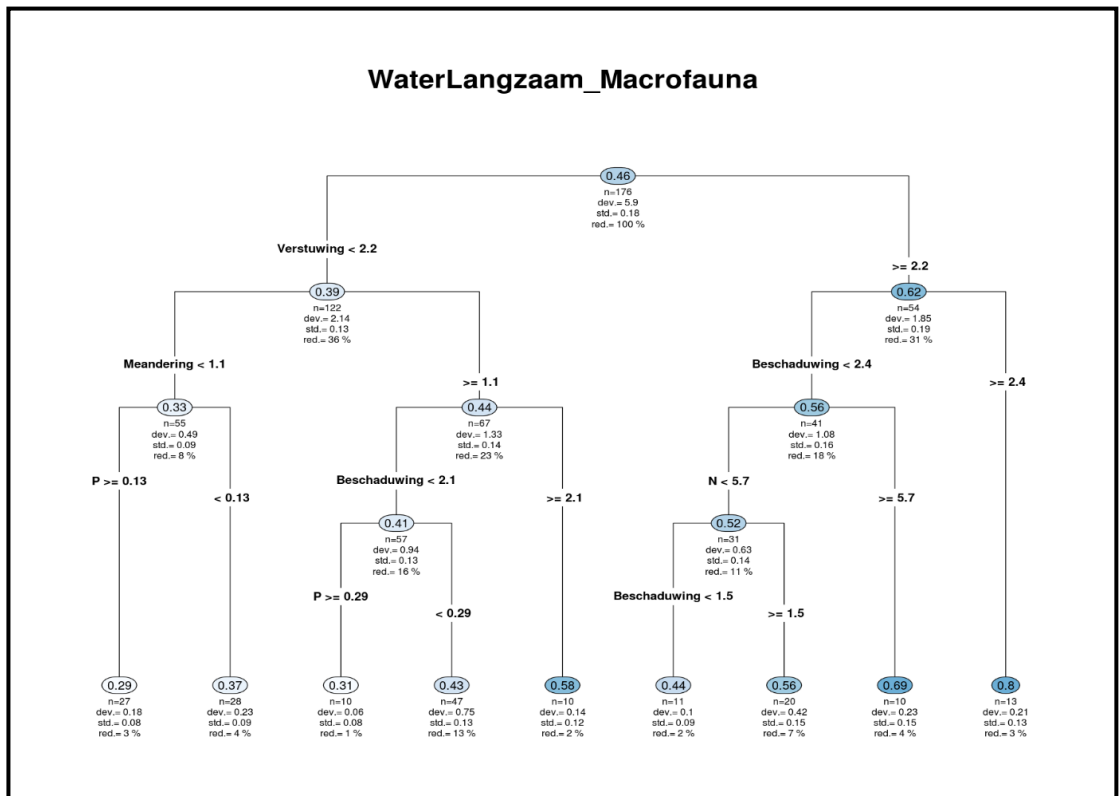
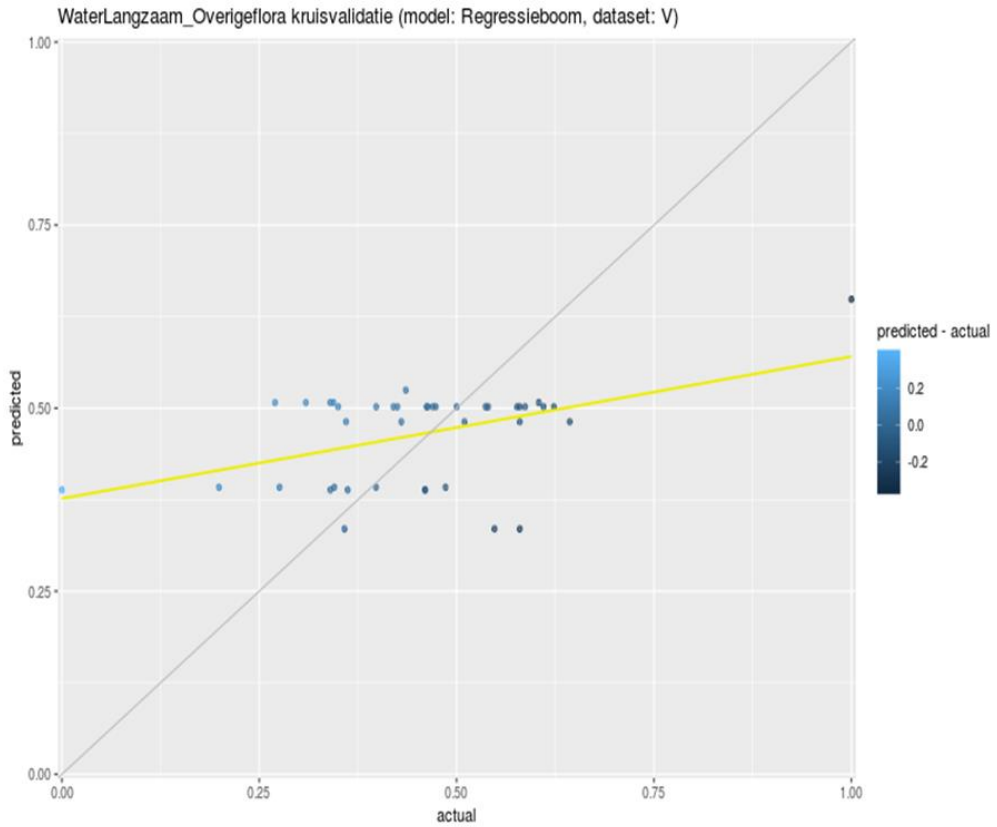
G Aanvullende resultaten regressiebomen

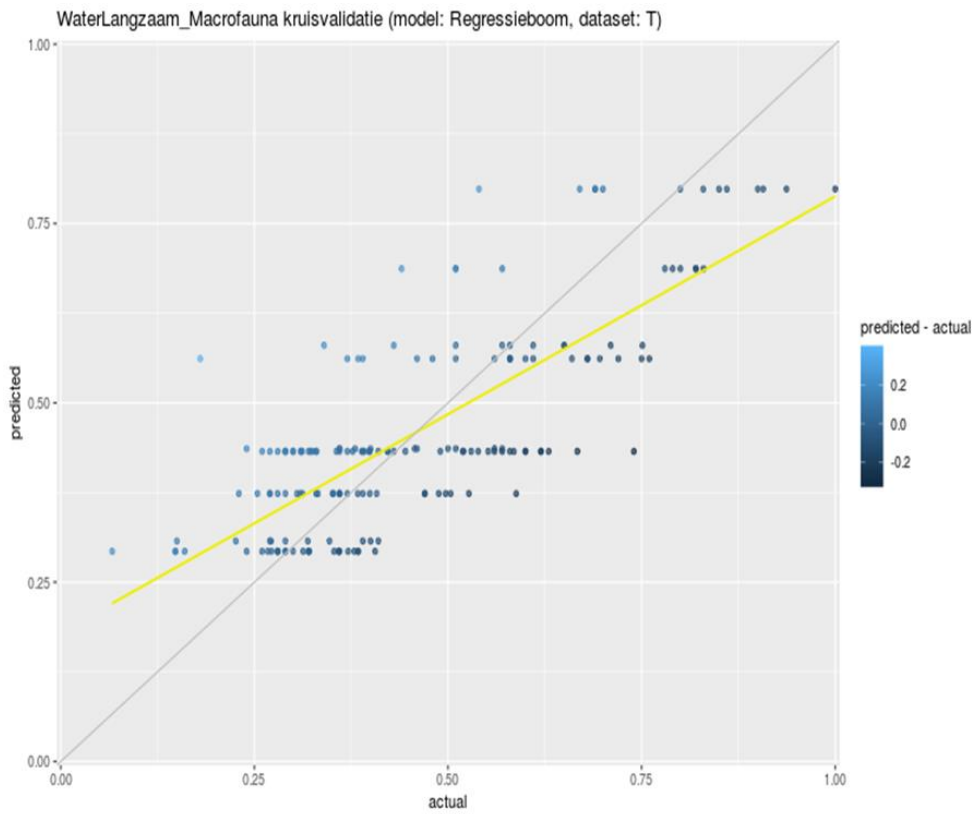
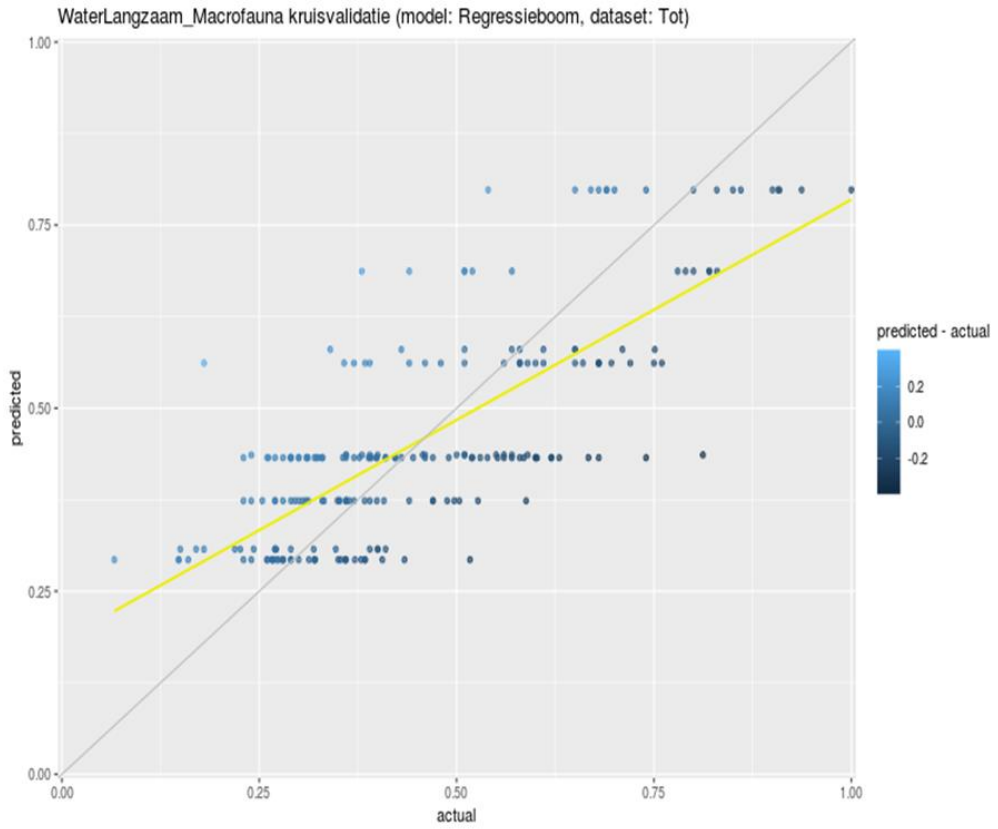
In de figuren in deze bijlage zijn de geschatte regressiebomen op basis van de trainingsdata weergegeven. Het minimaal aantal wateren per eindknoop (leaf) is 10. Naast de regressiebomen worden in deze bijlage ook de werkelijke versus voorspelde EKR scores getoond (kruisvalidatie).

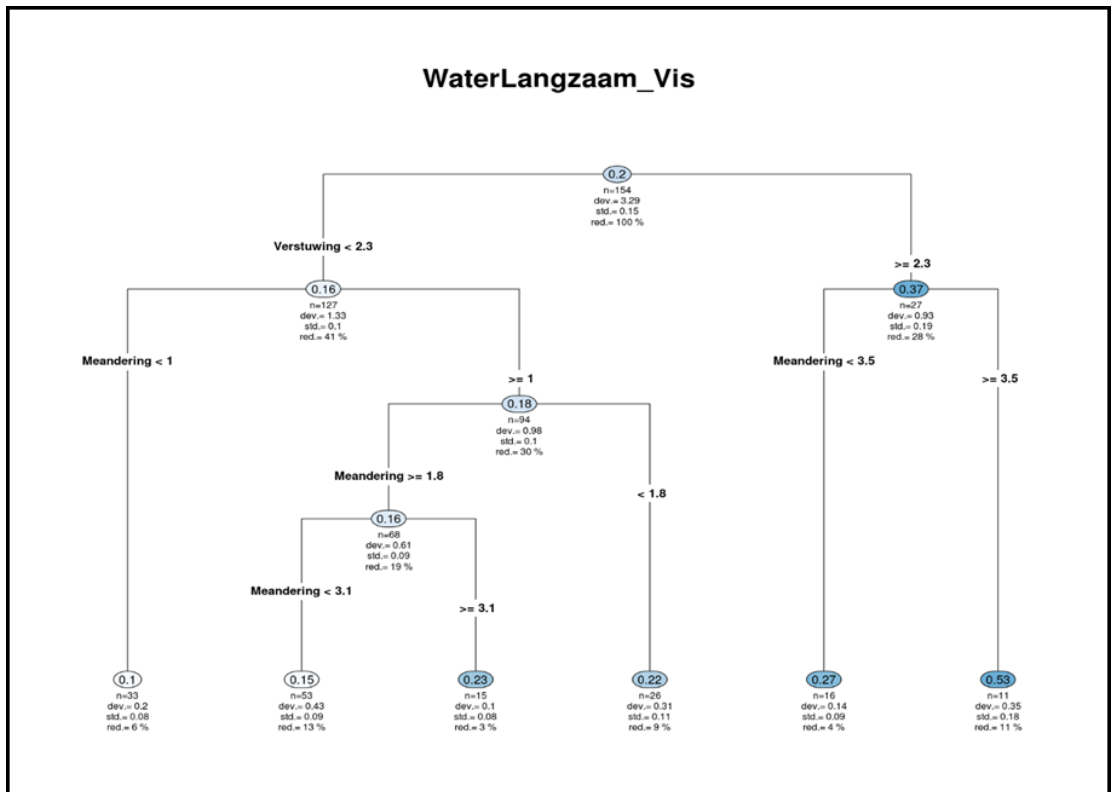
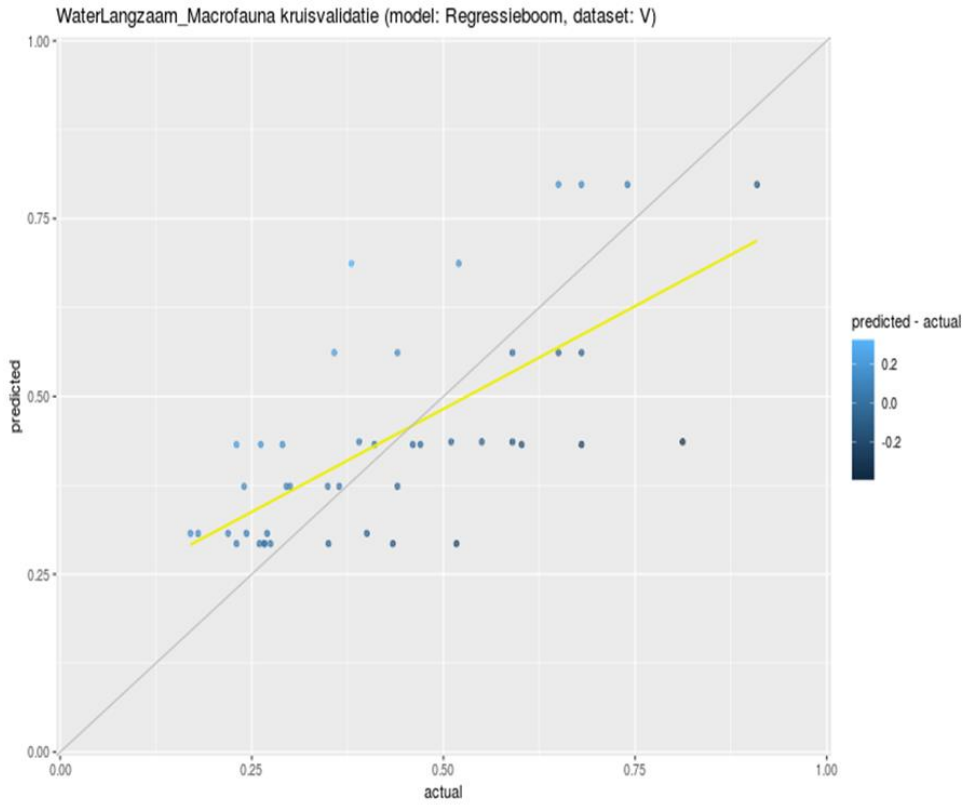
G.1 Langzaam stromende wateren

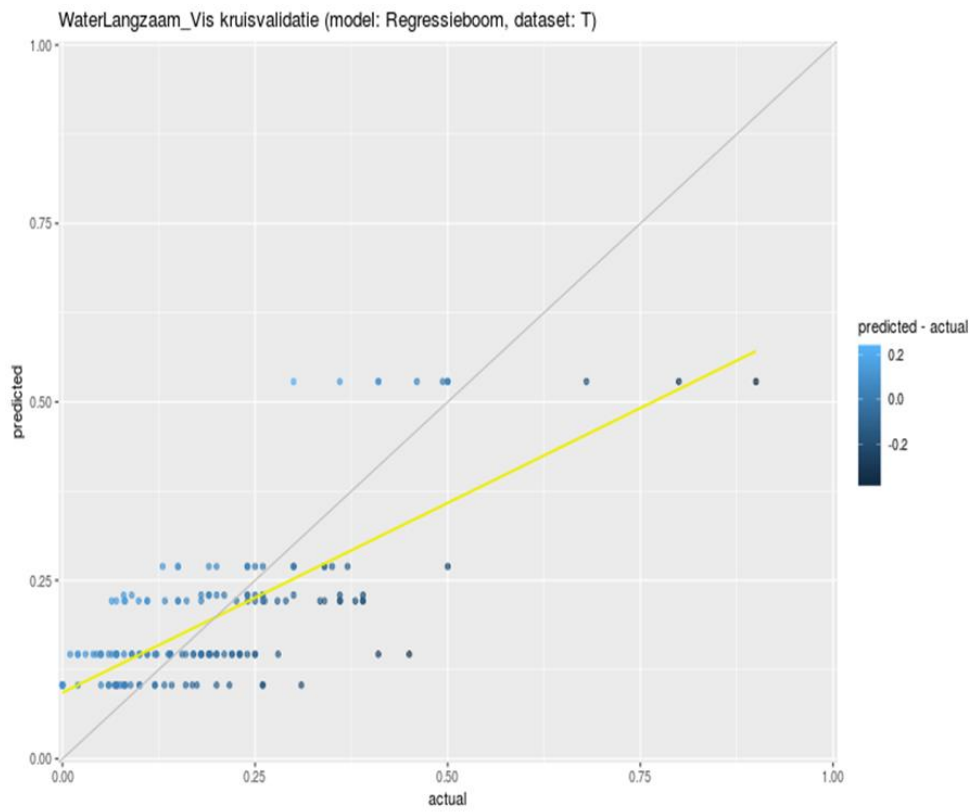
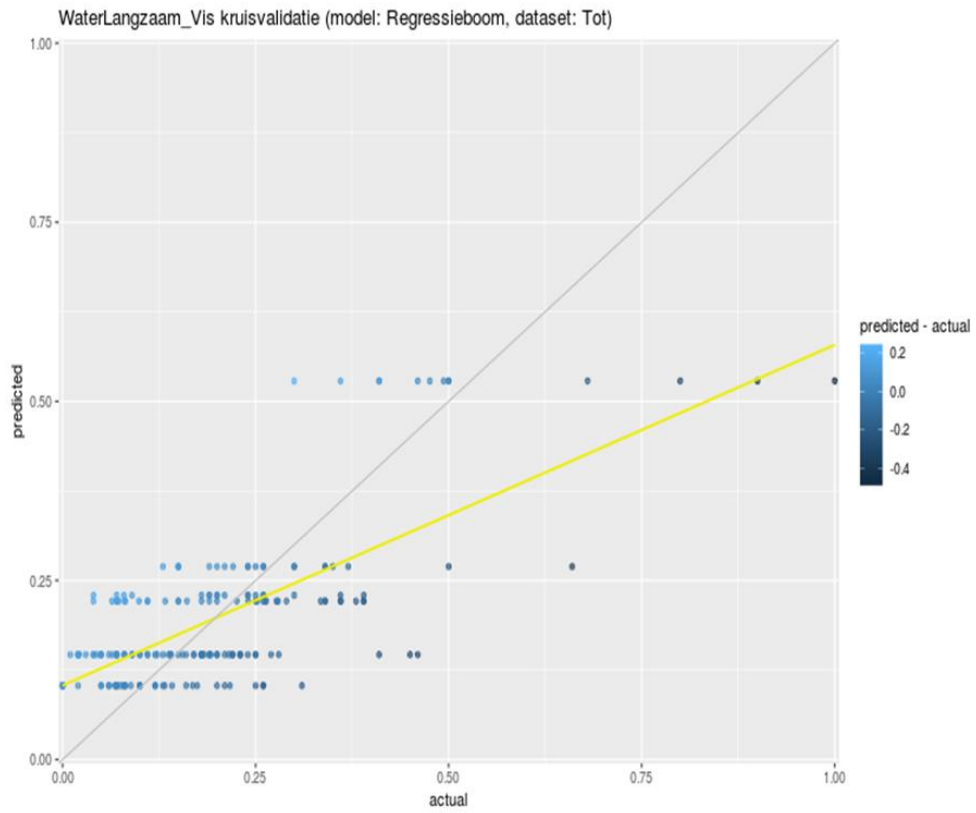


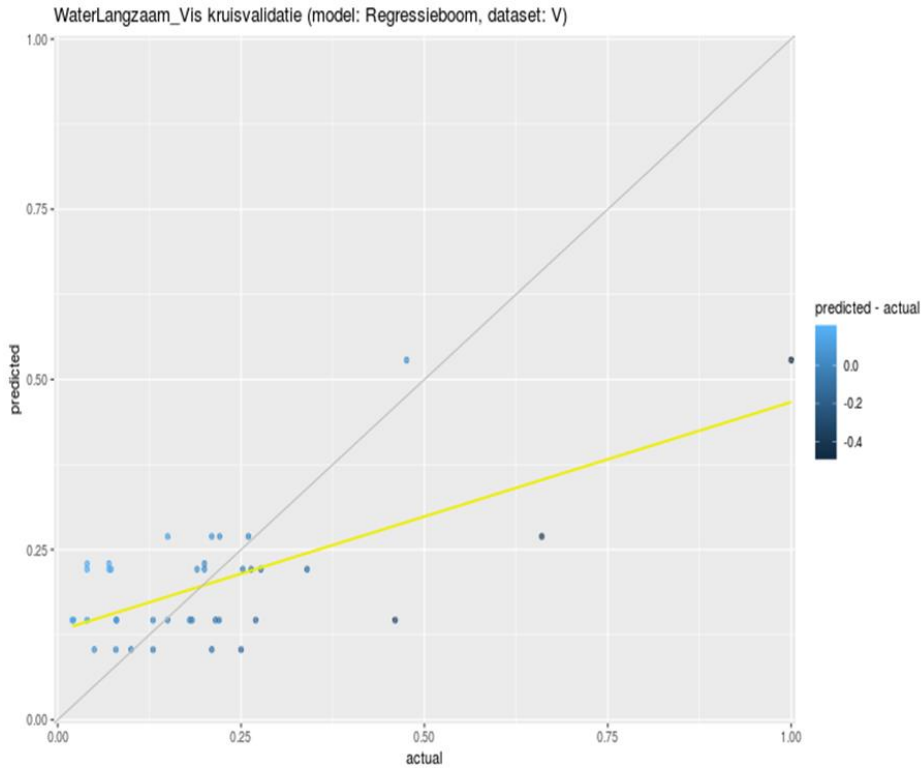




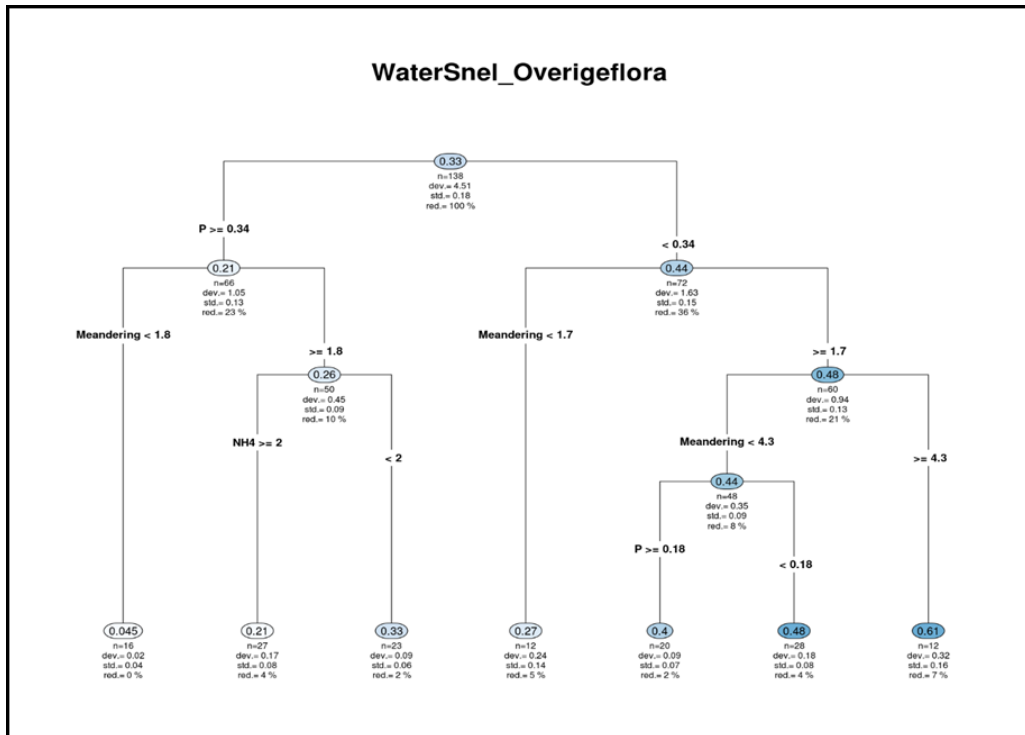


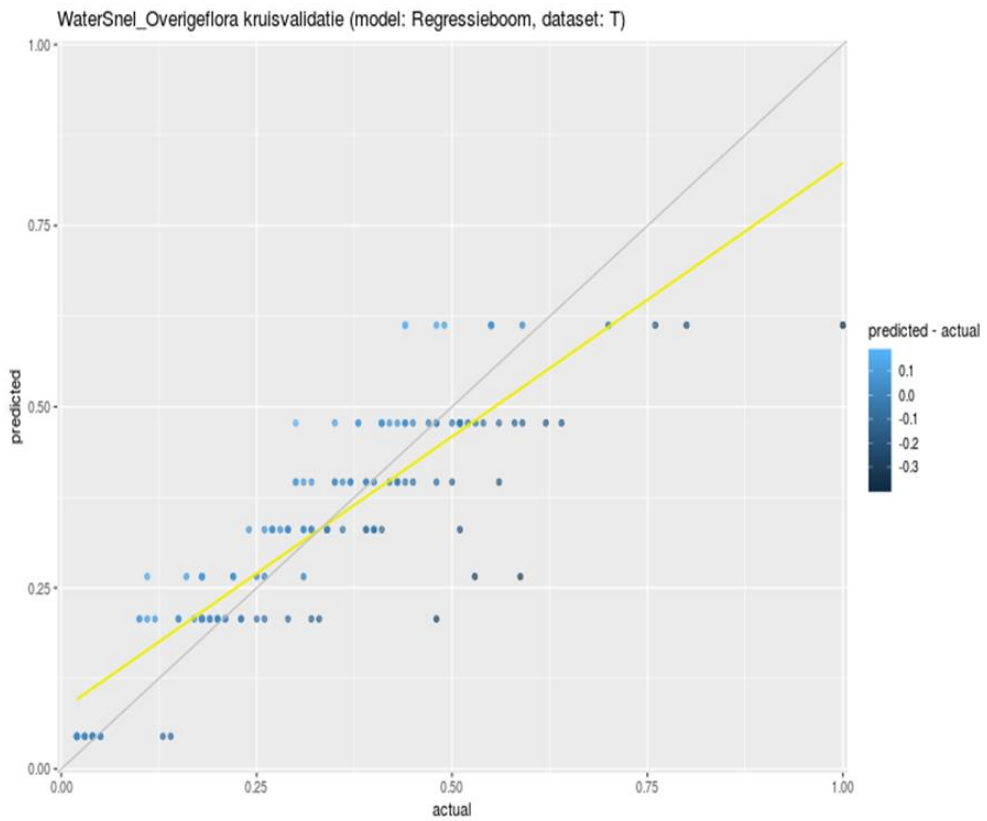
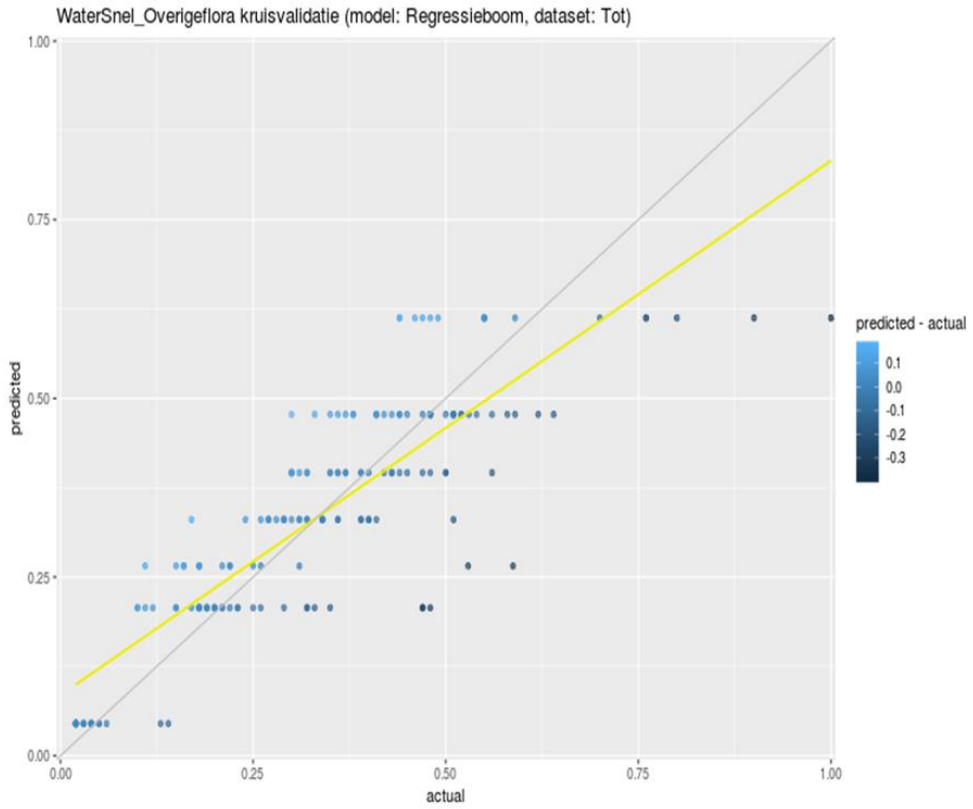


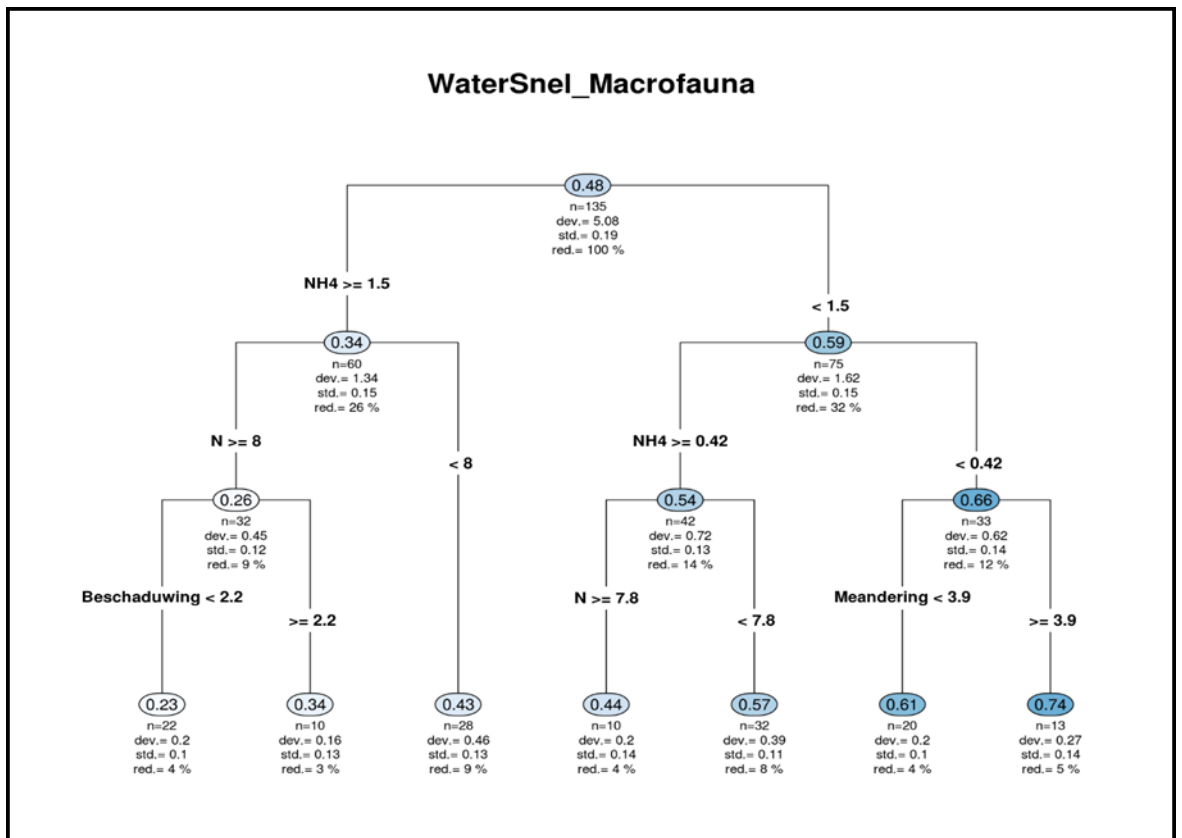
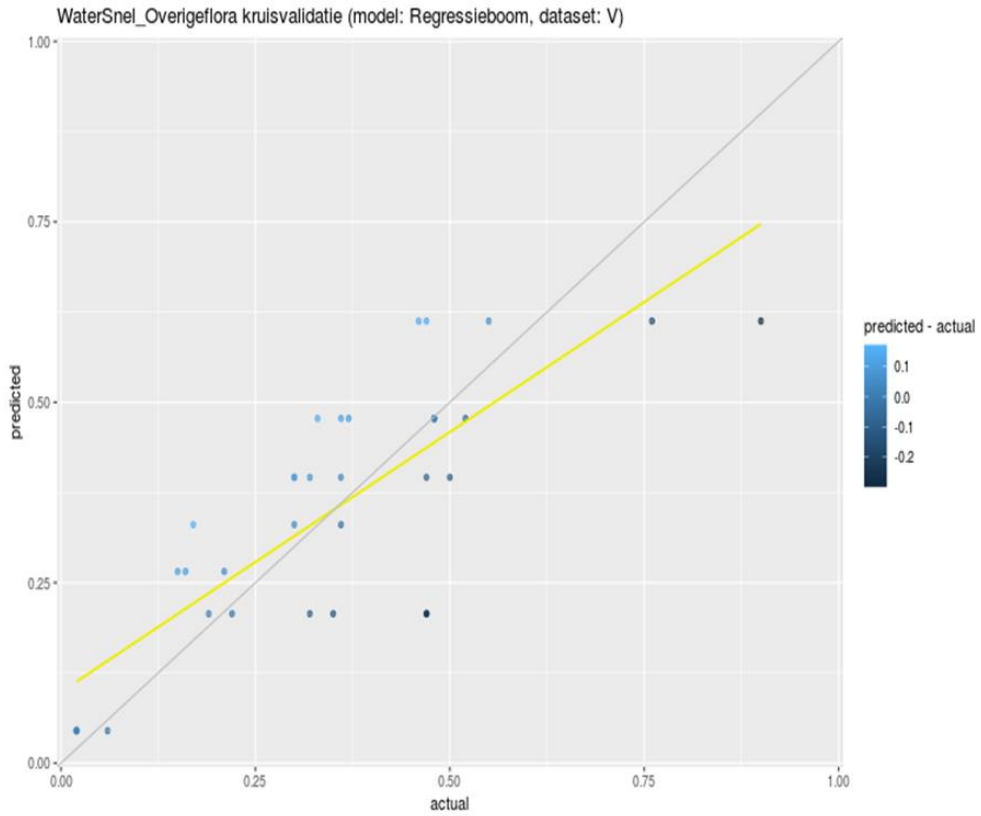


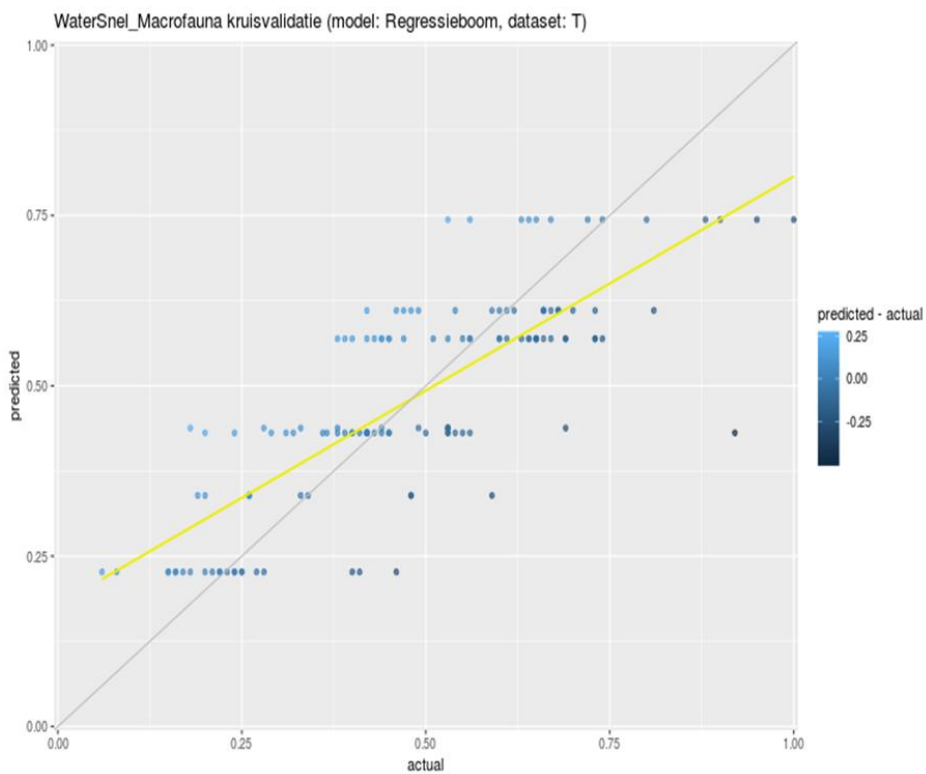
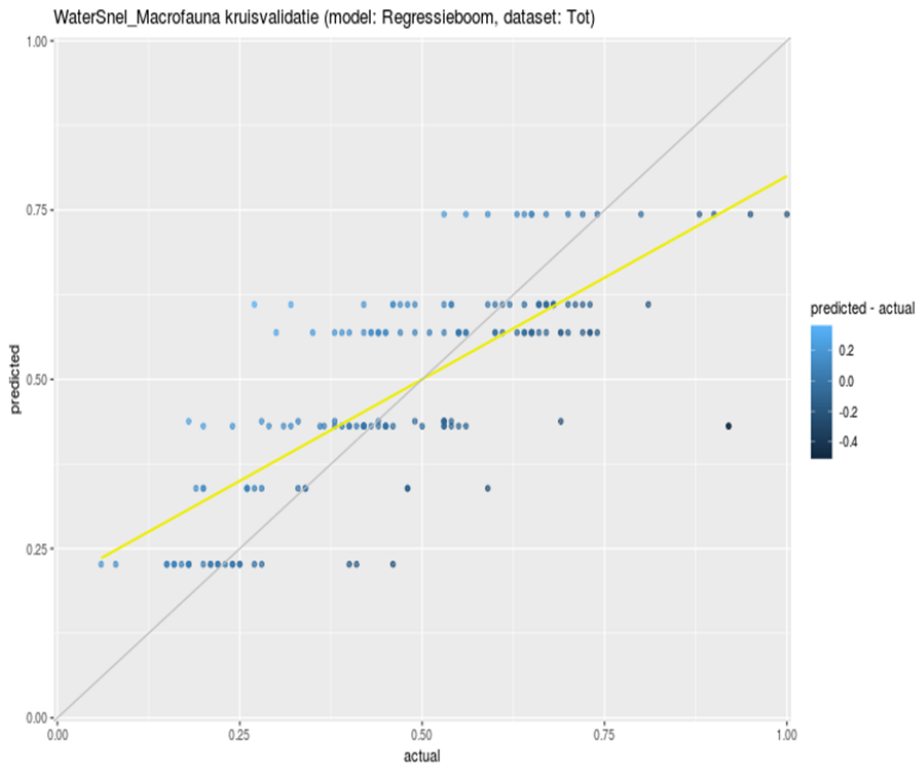


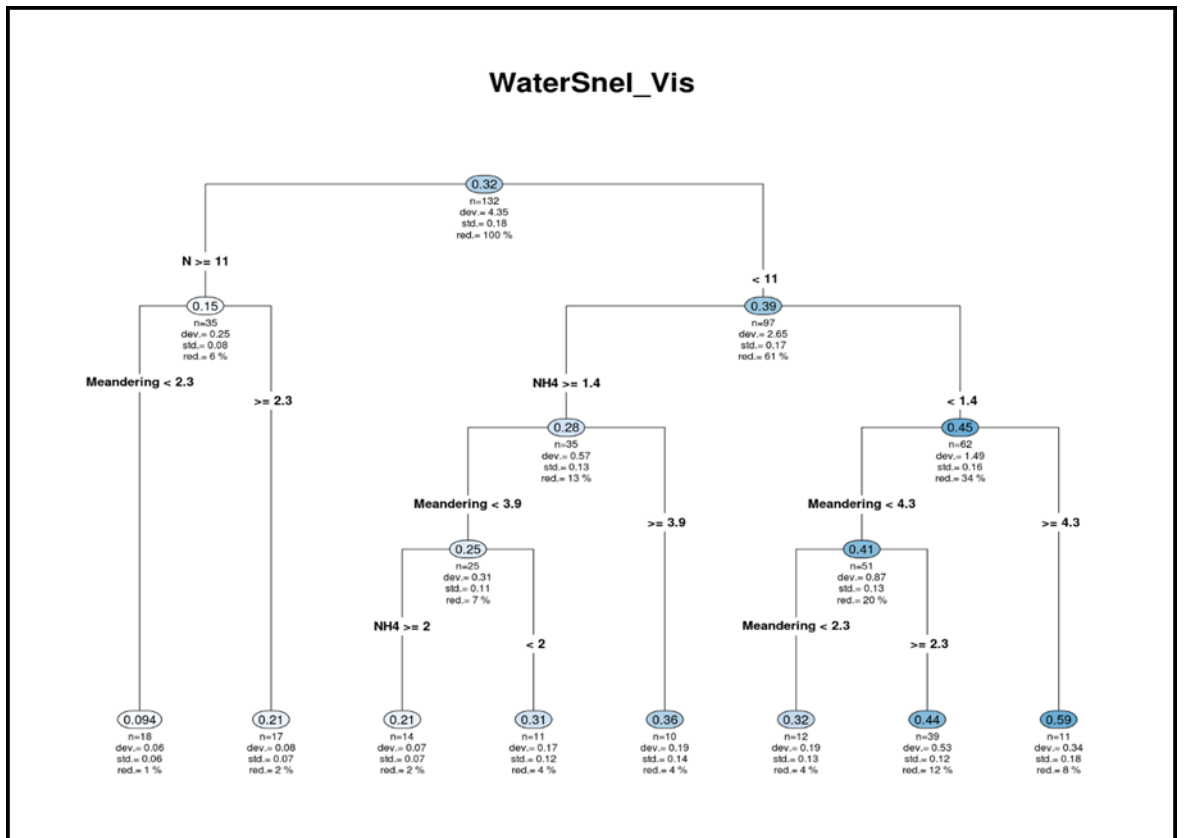
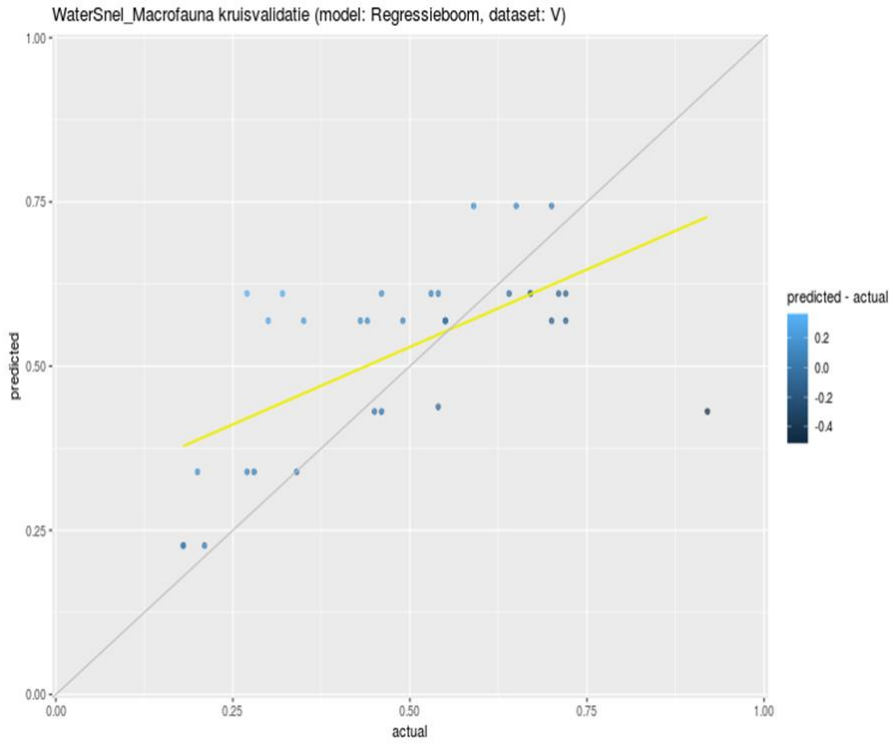
G.2 Snel stromende wateren

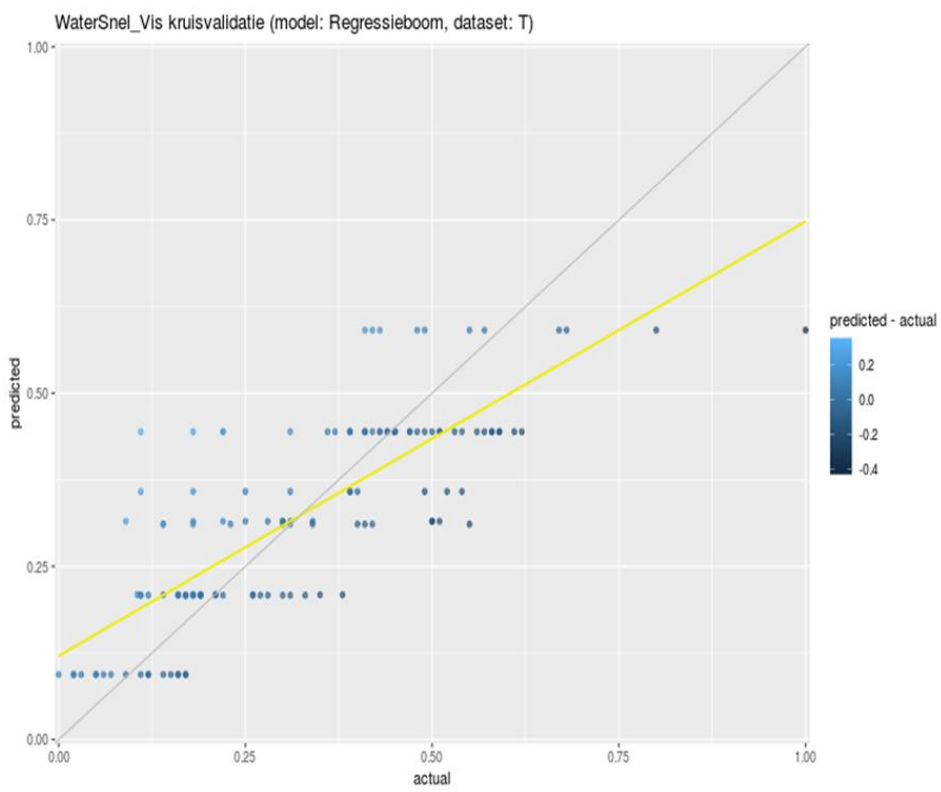
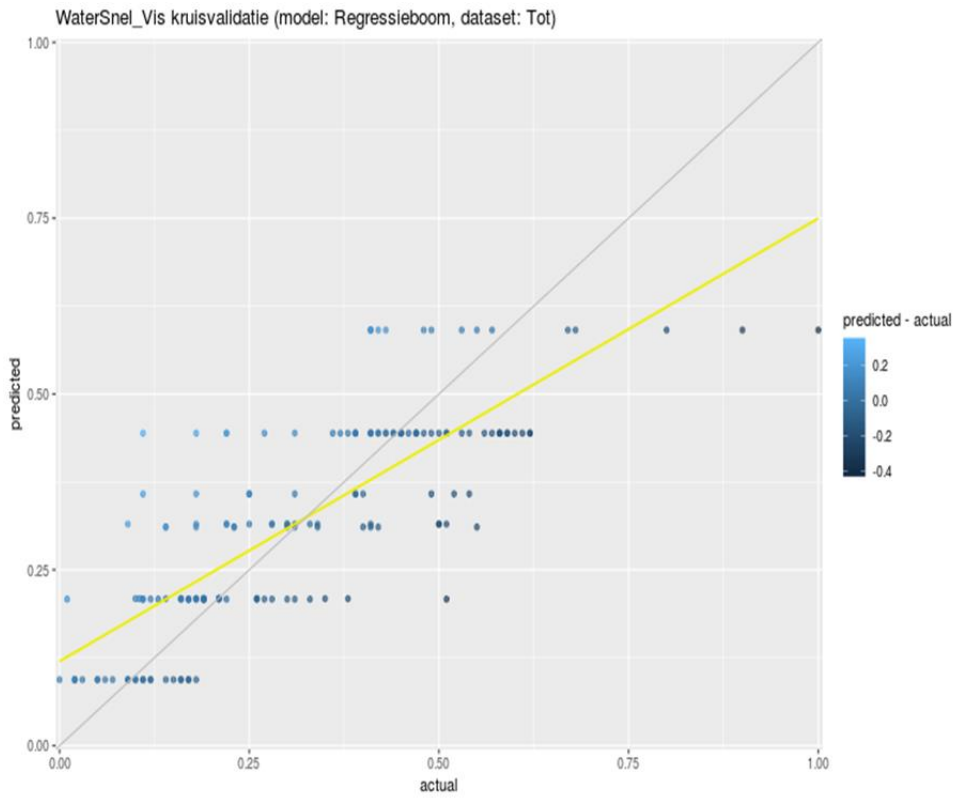


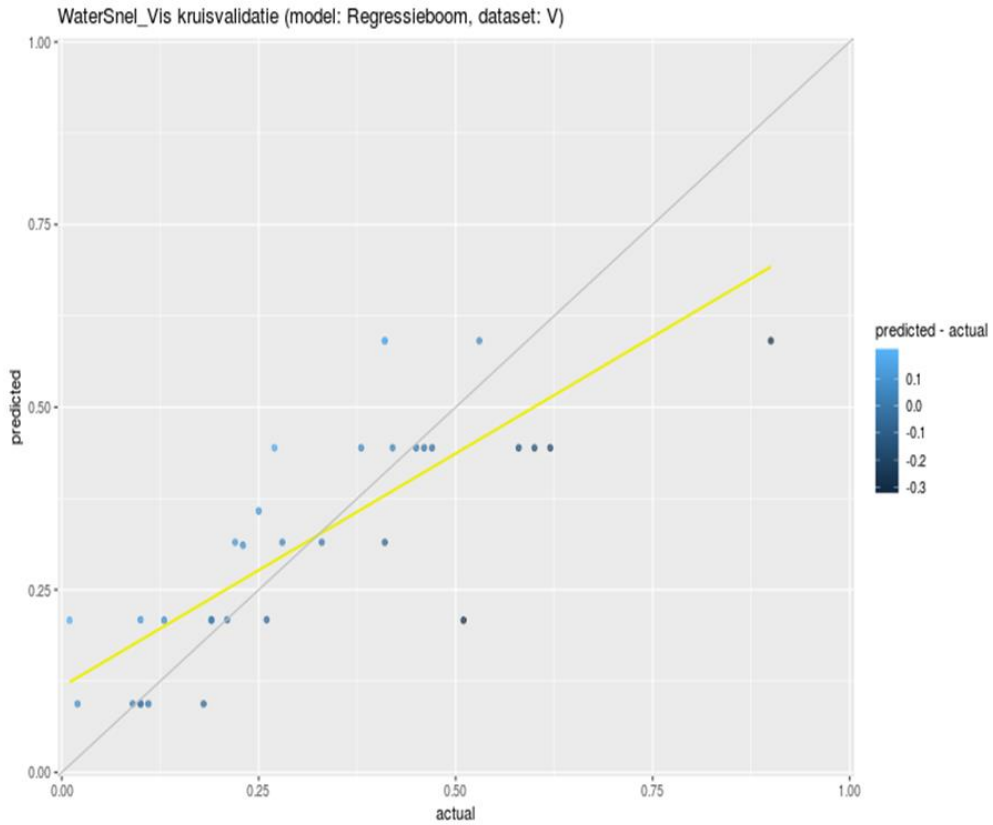




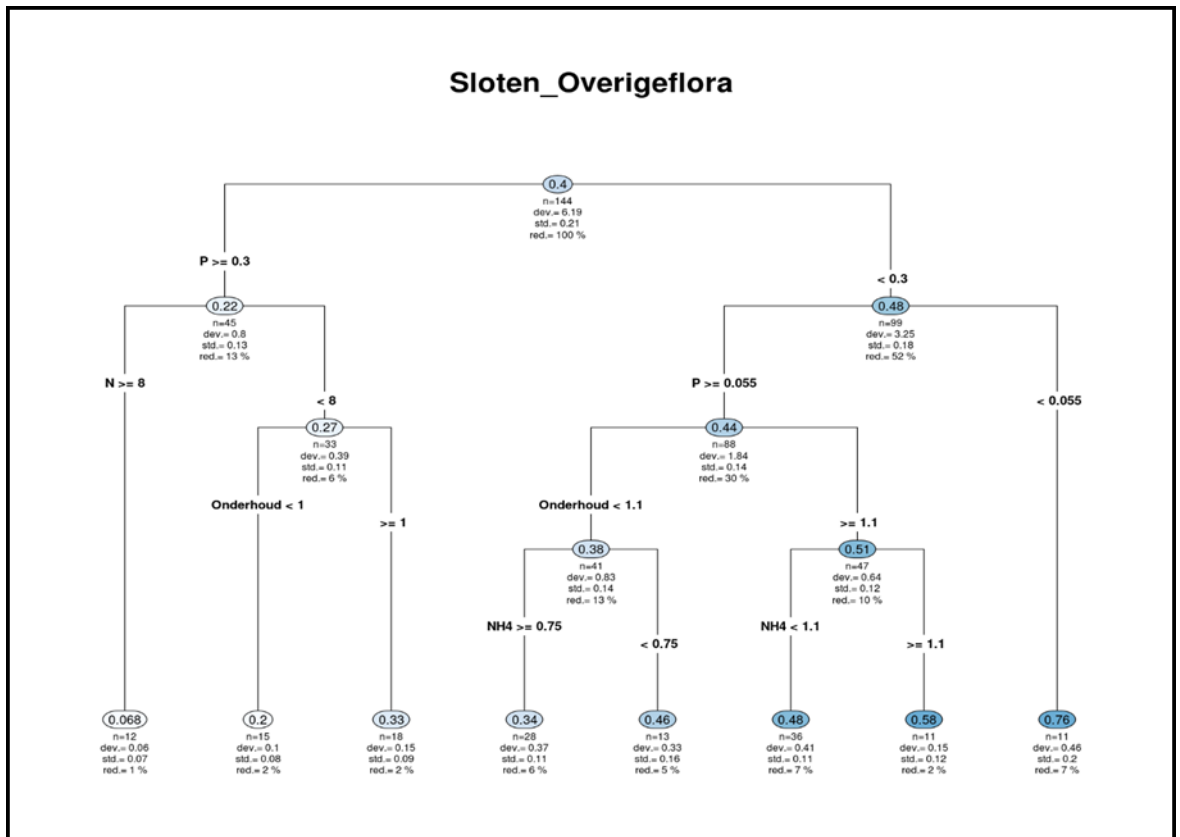


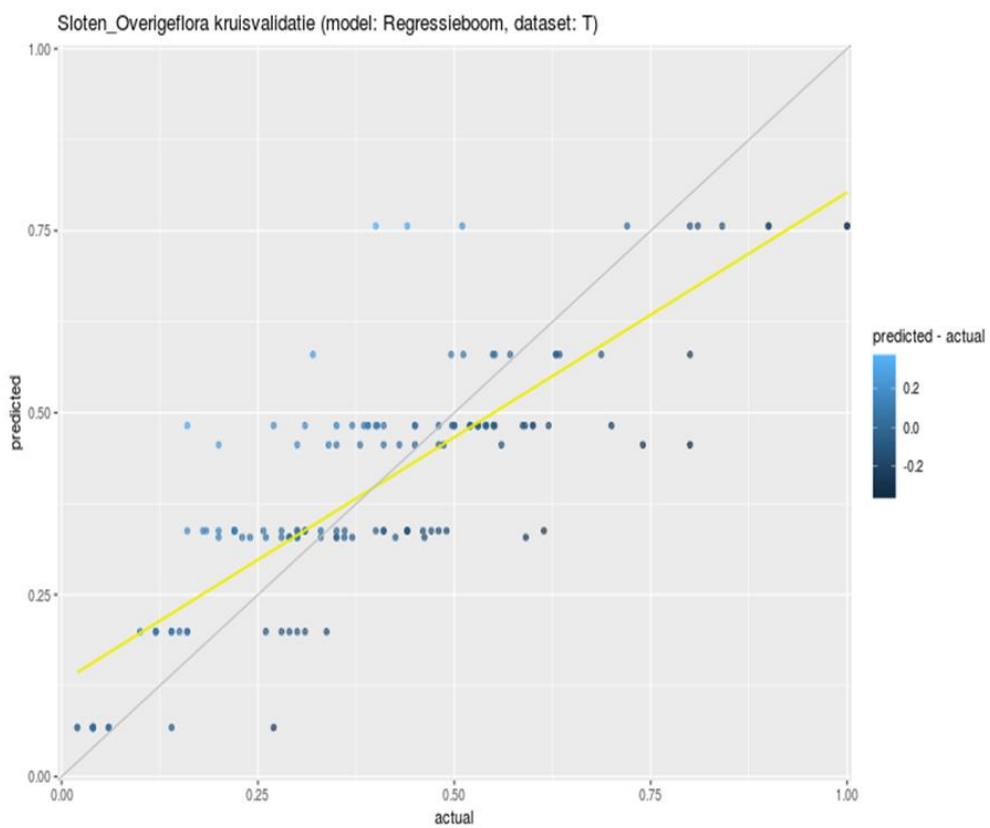
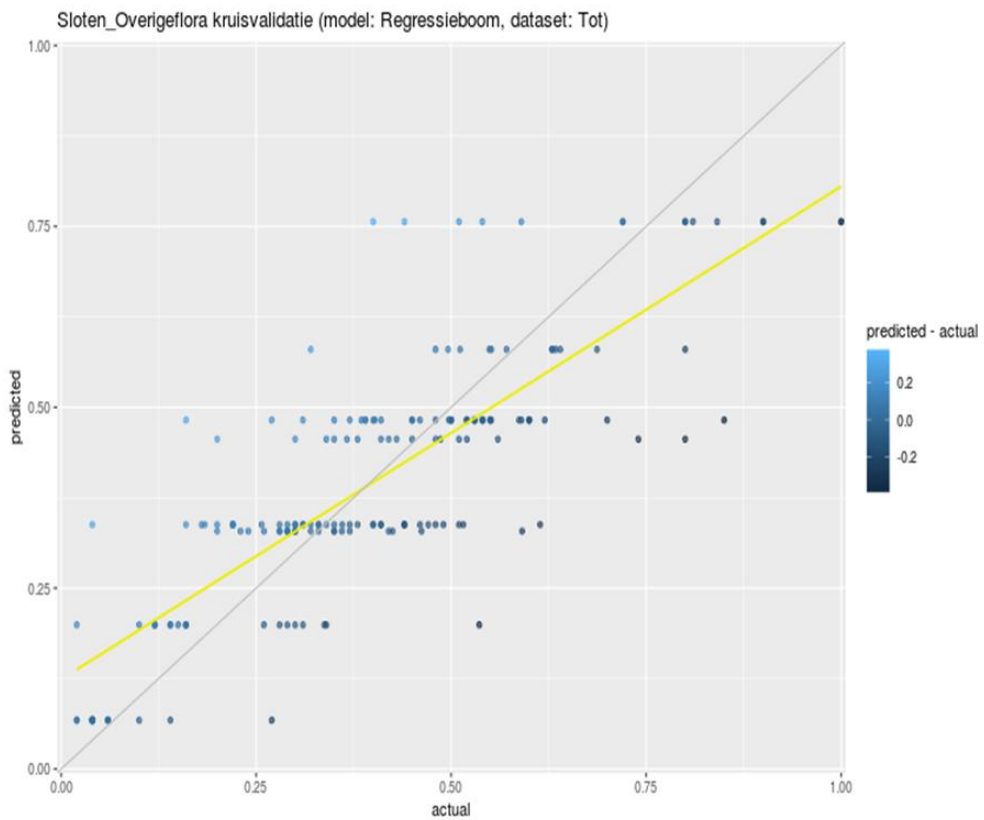


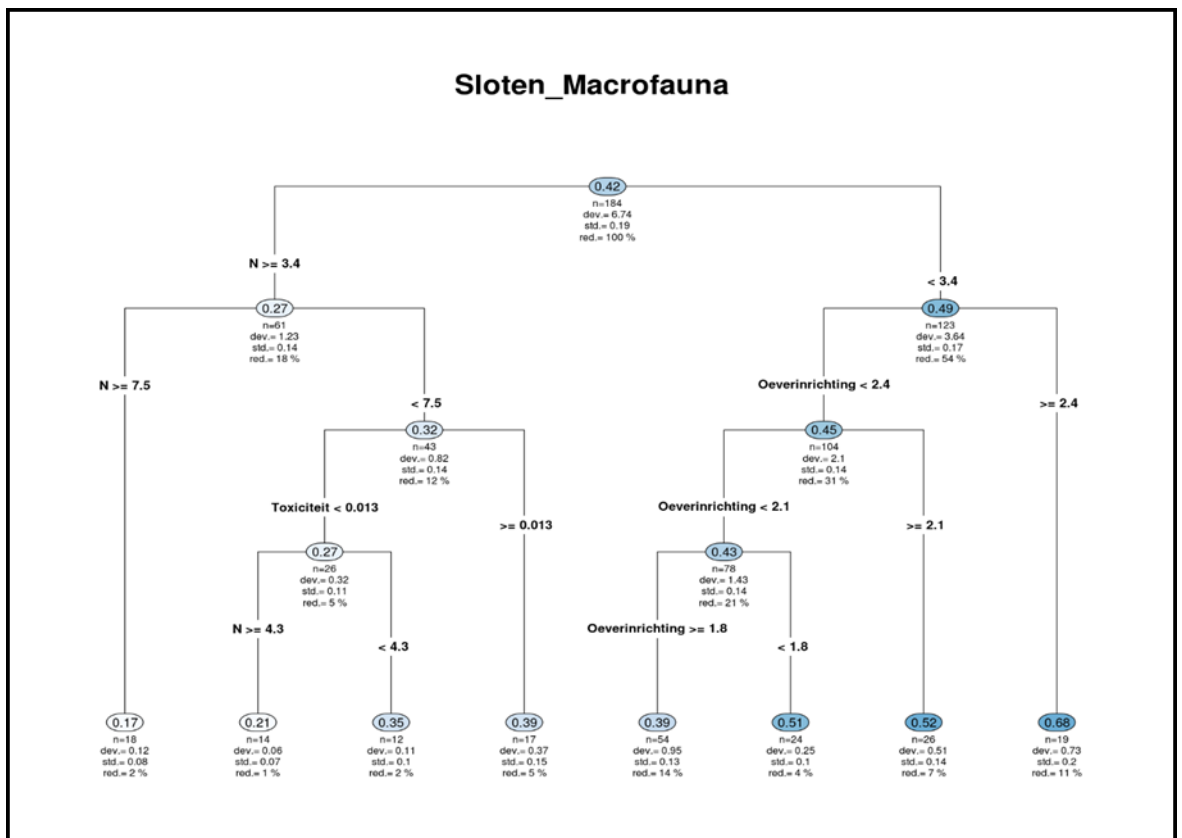
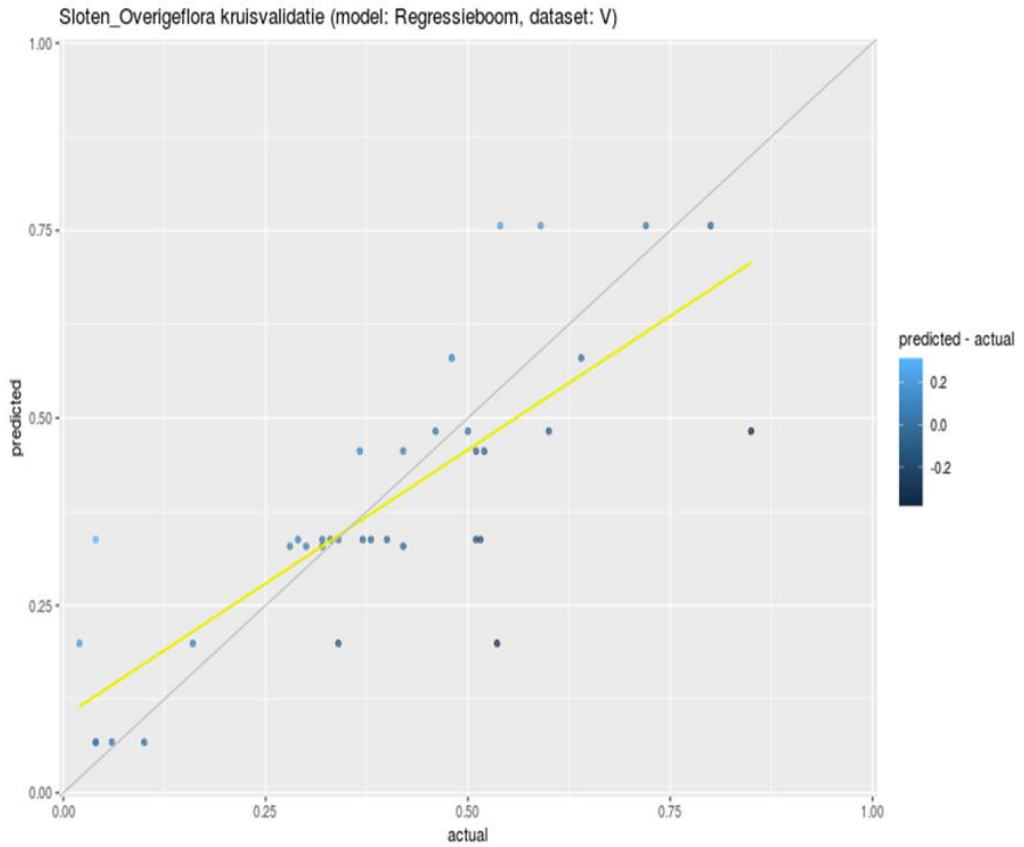


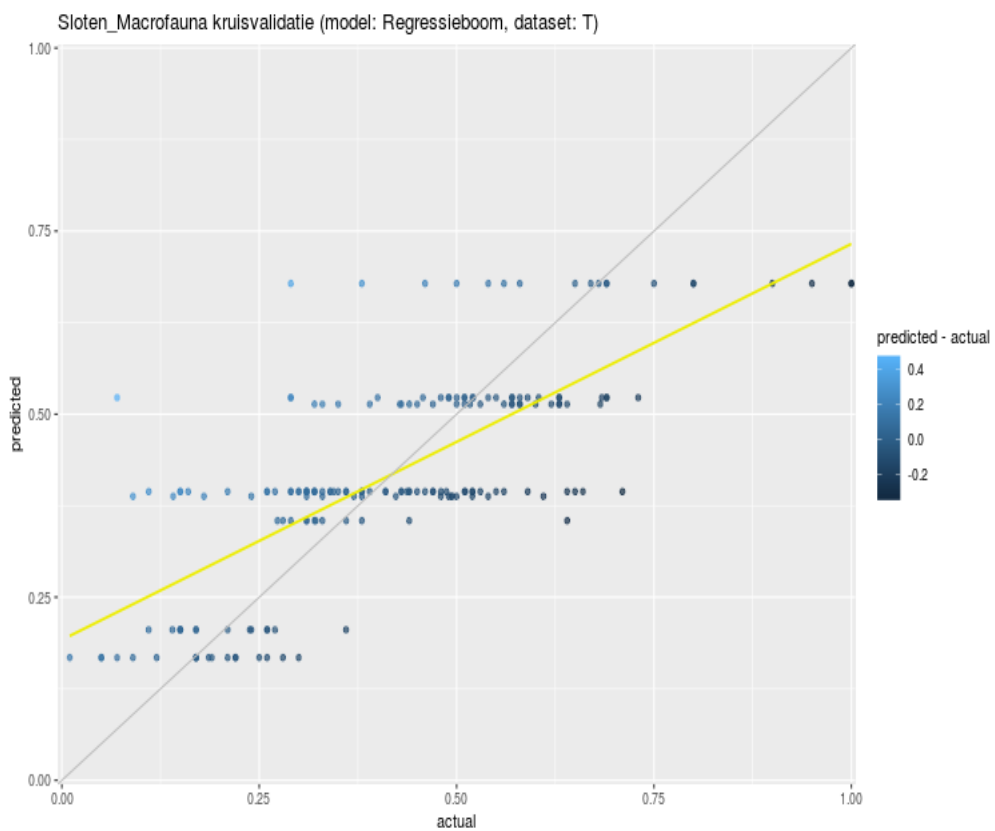
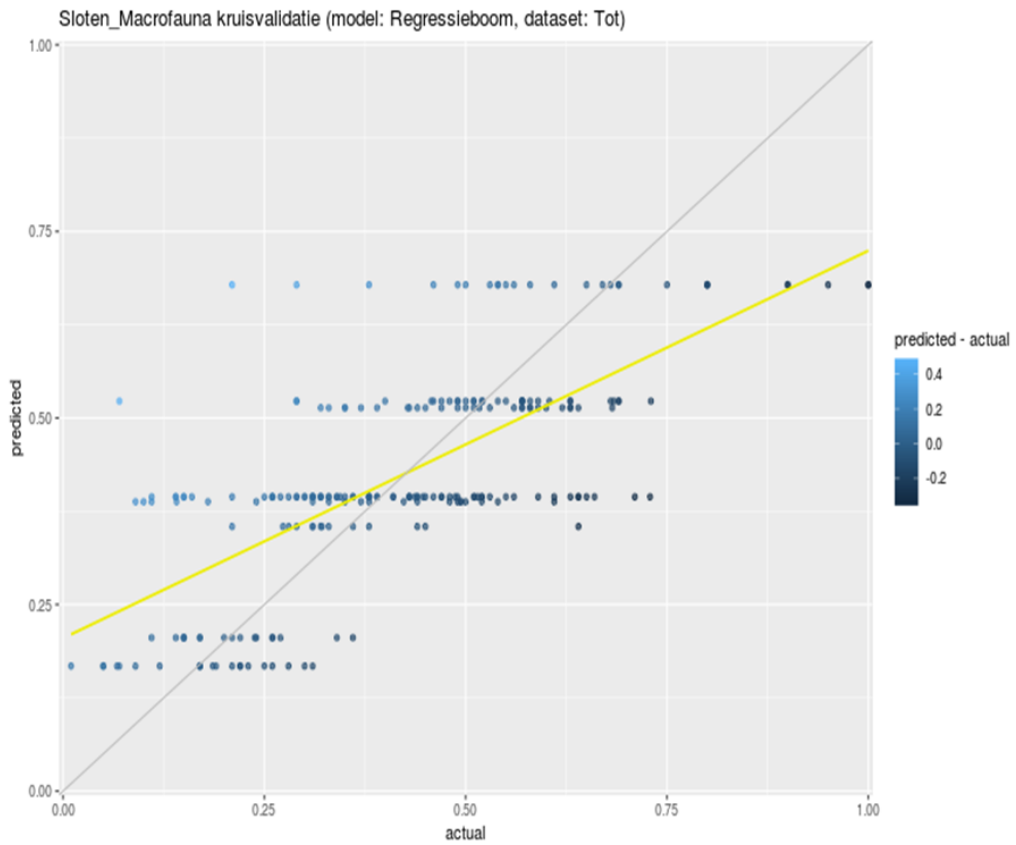


G.3 Sloten

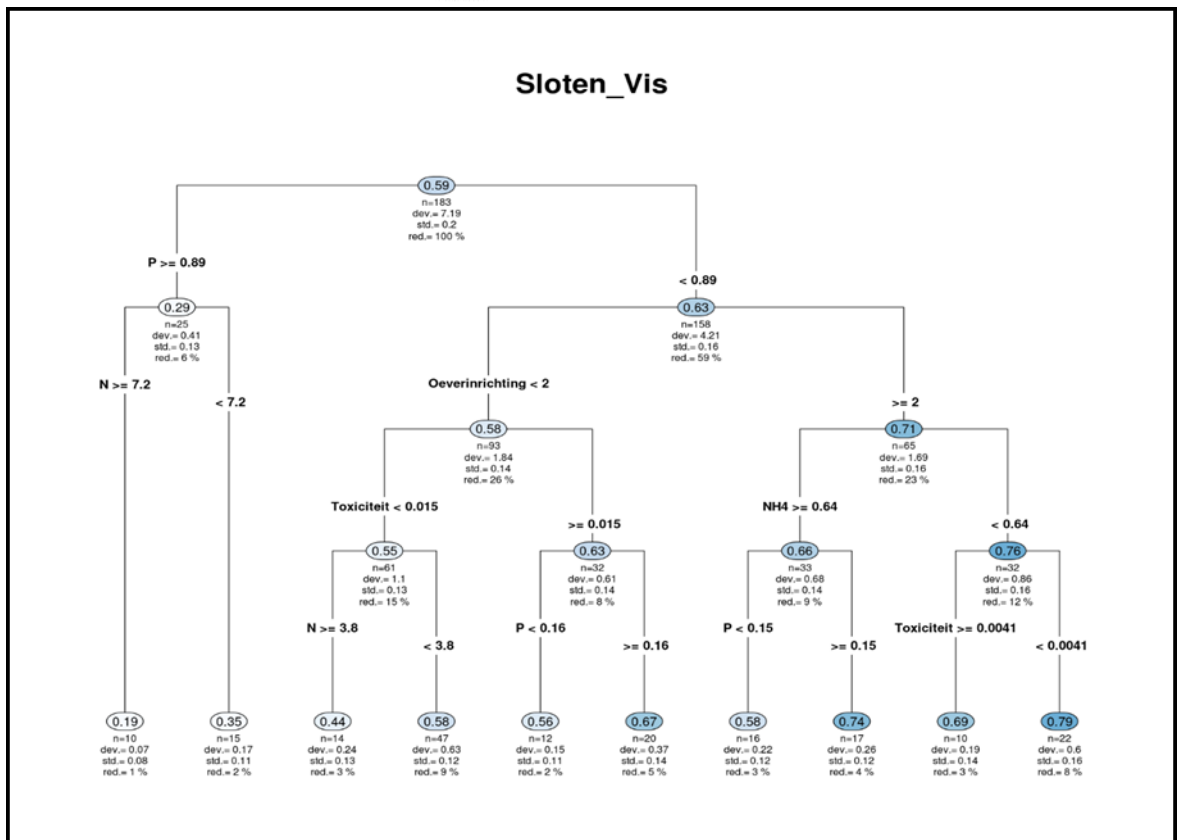
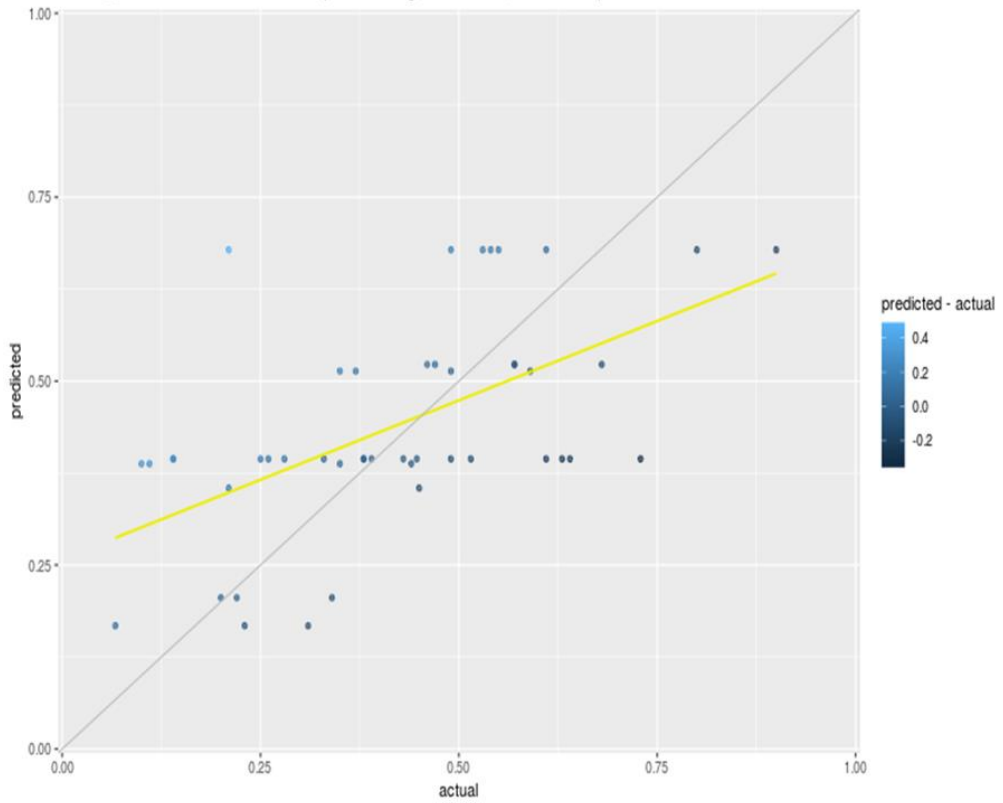


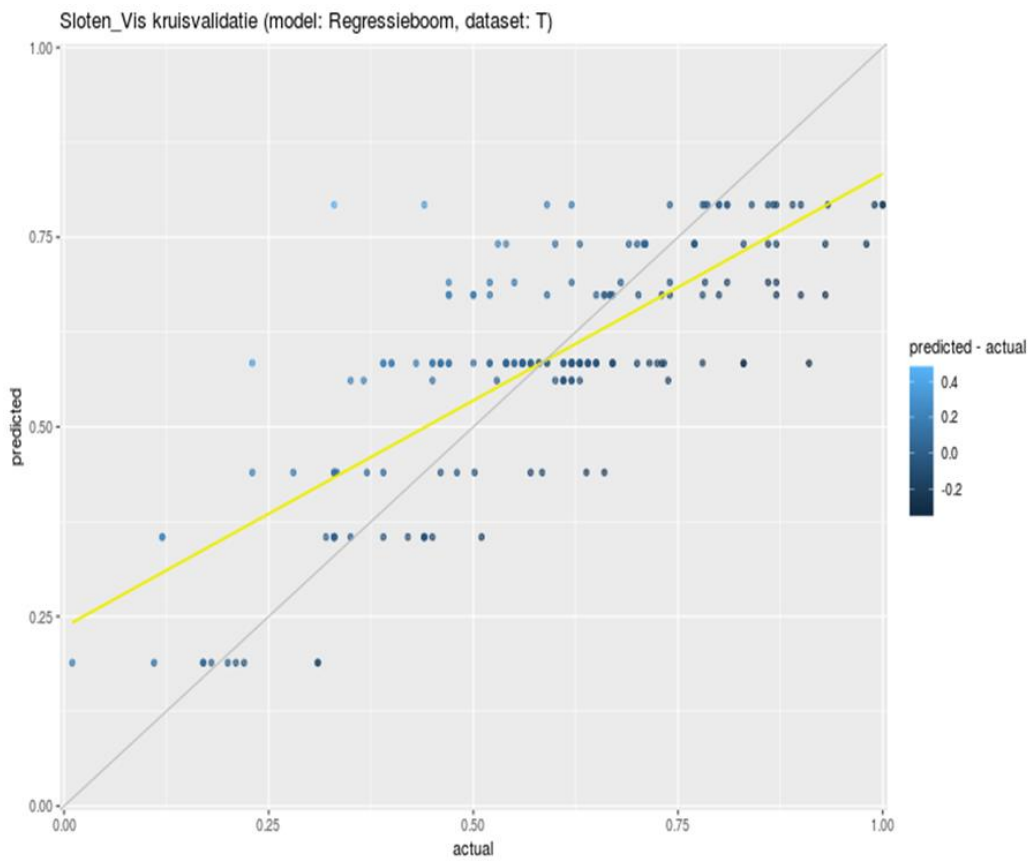
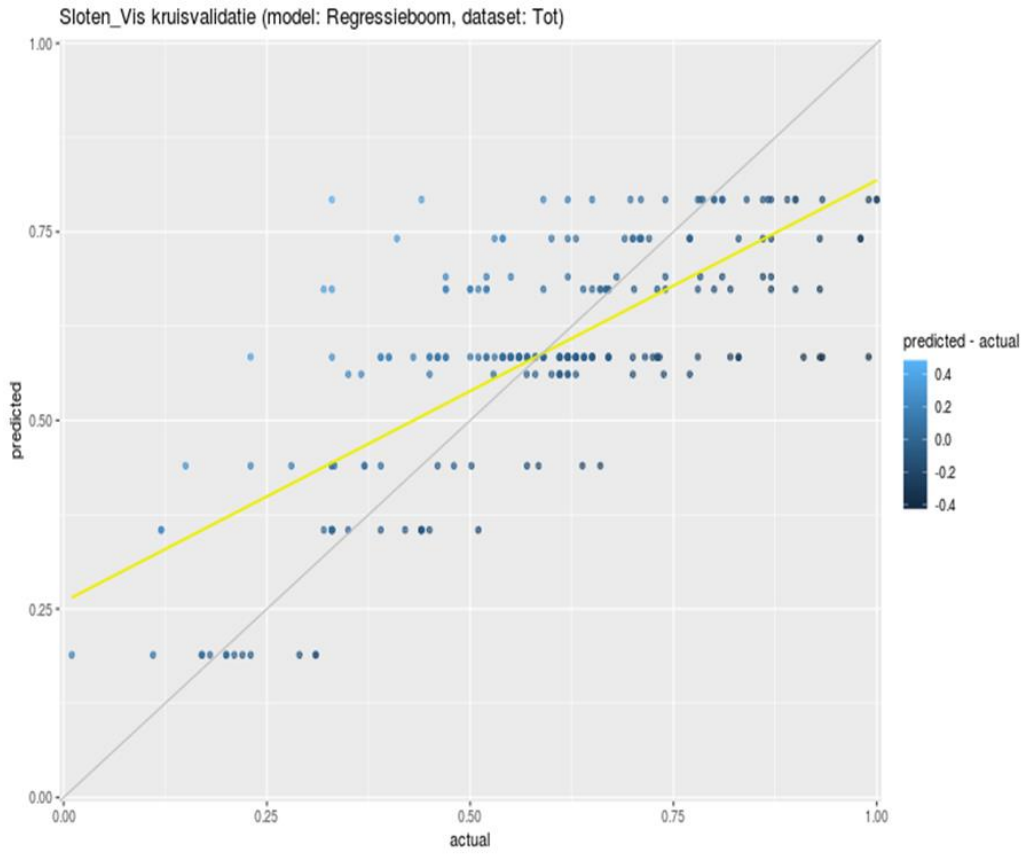


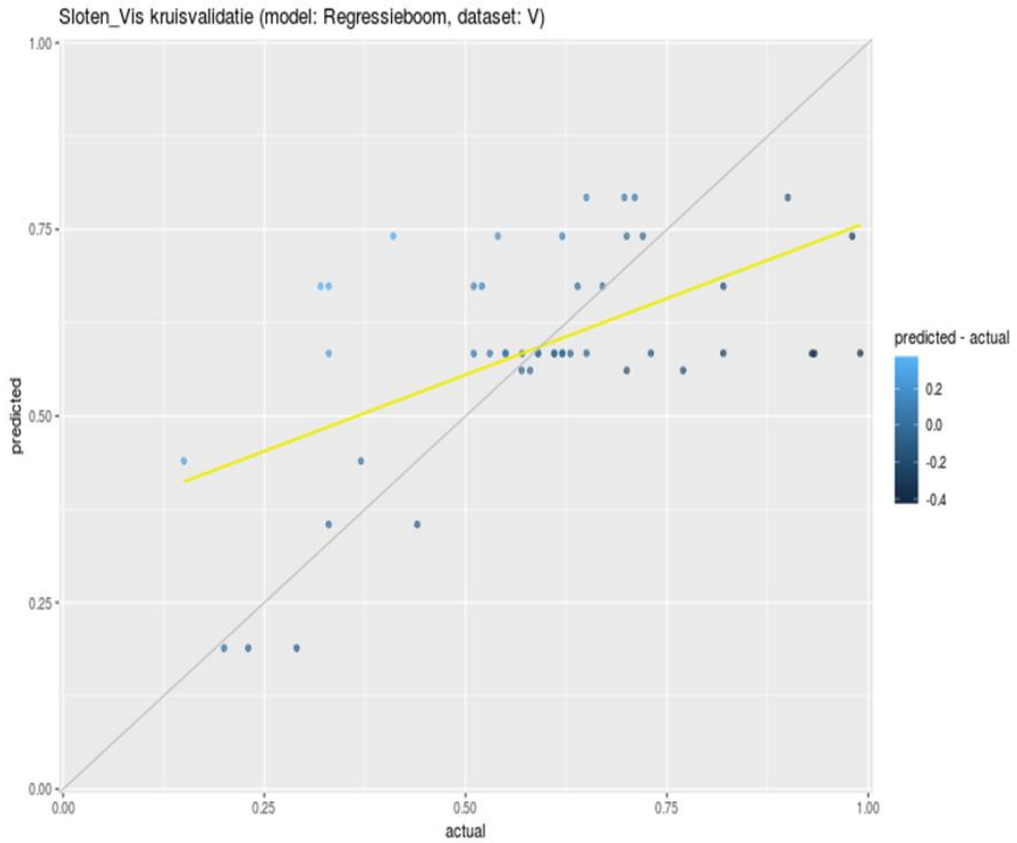




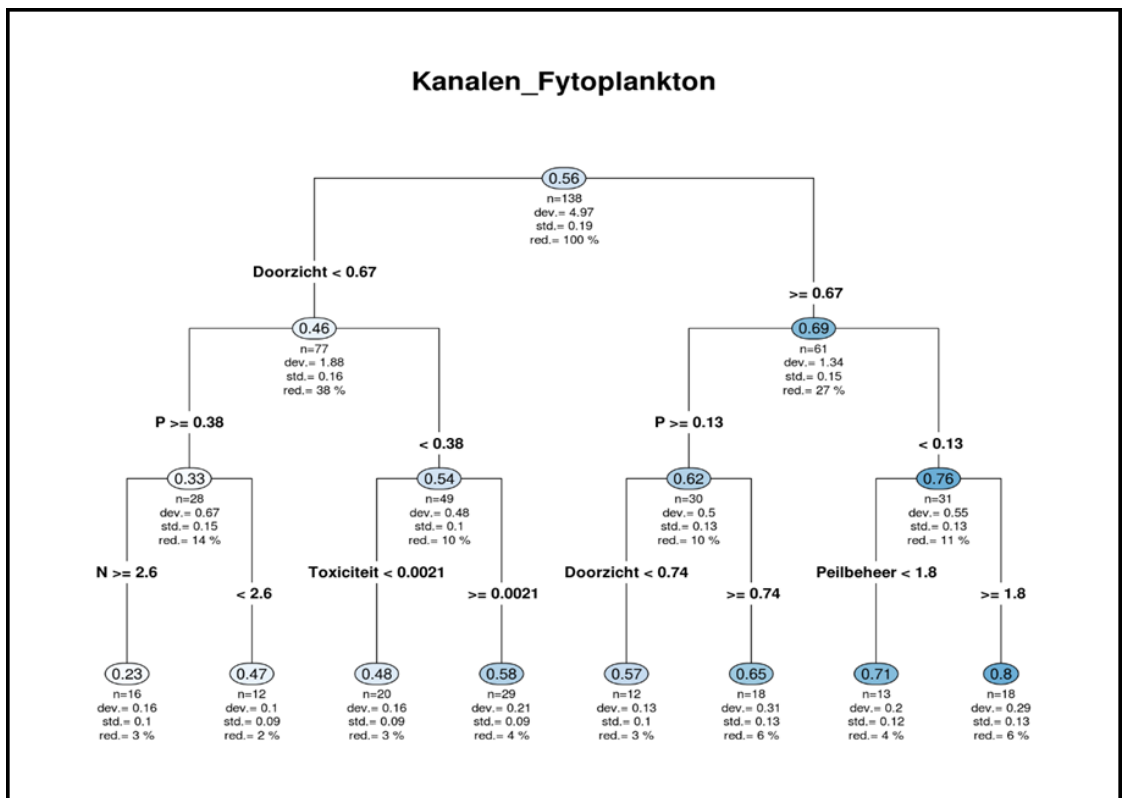
Sloten_Macrofauna kruisvalidatie (model: Regressieboom, dataset: V)

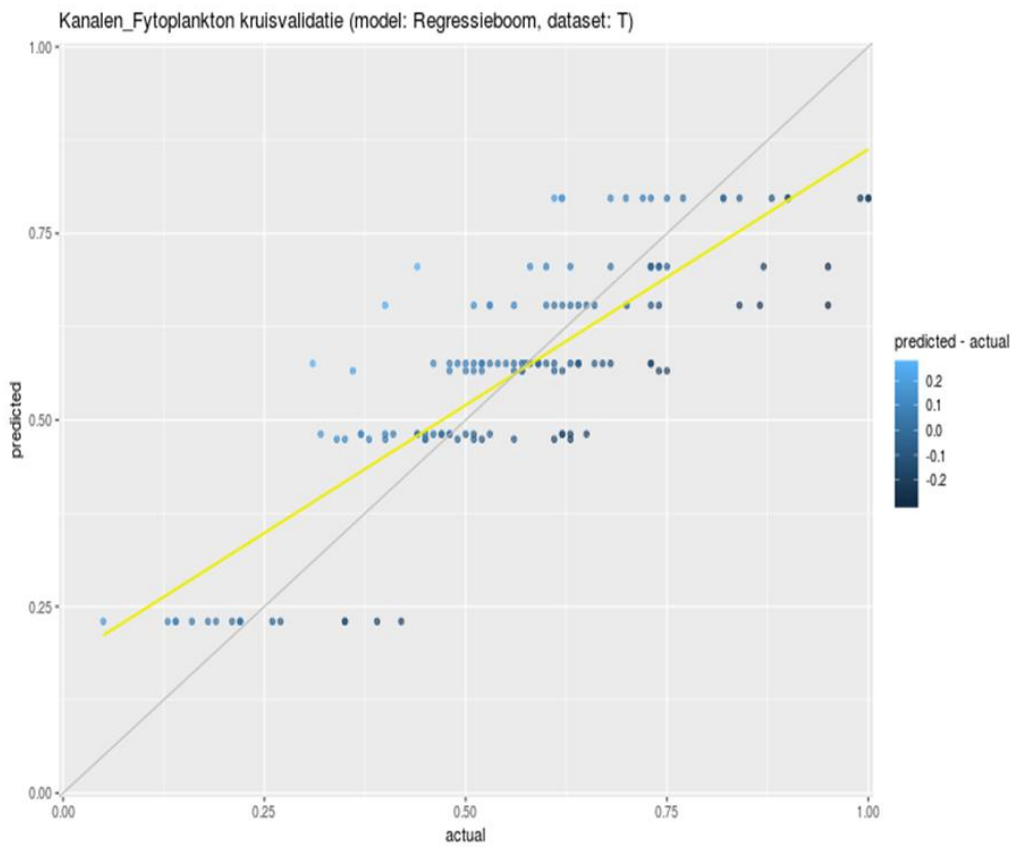
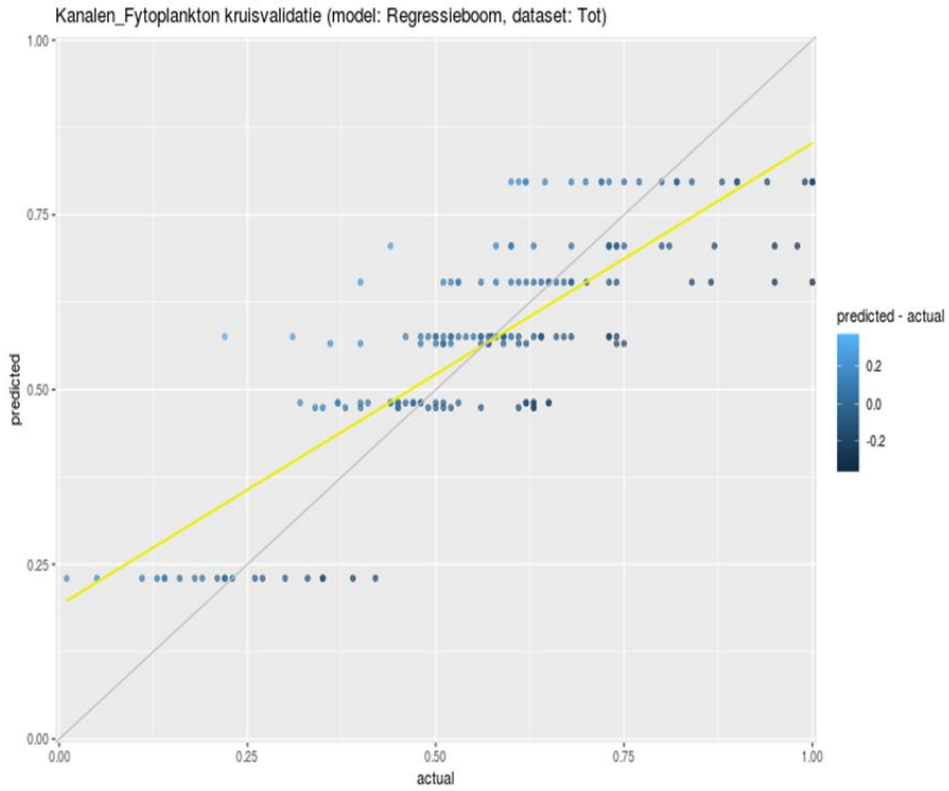


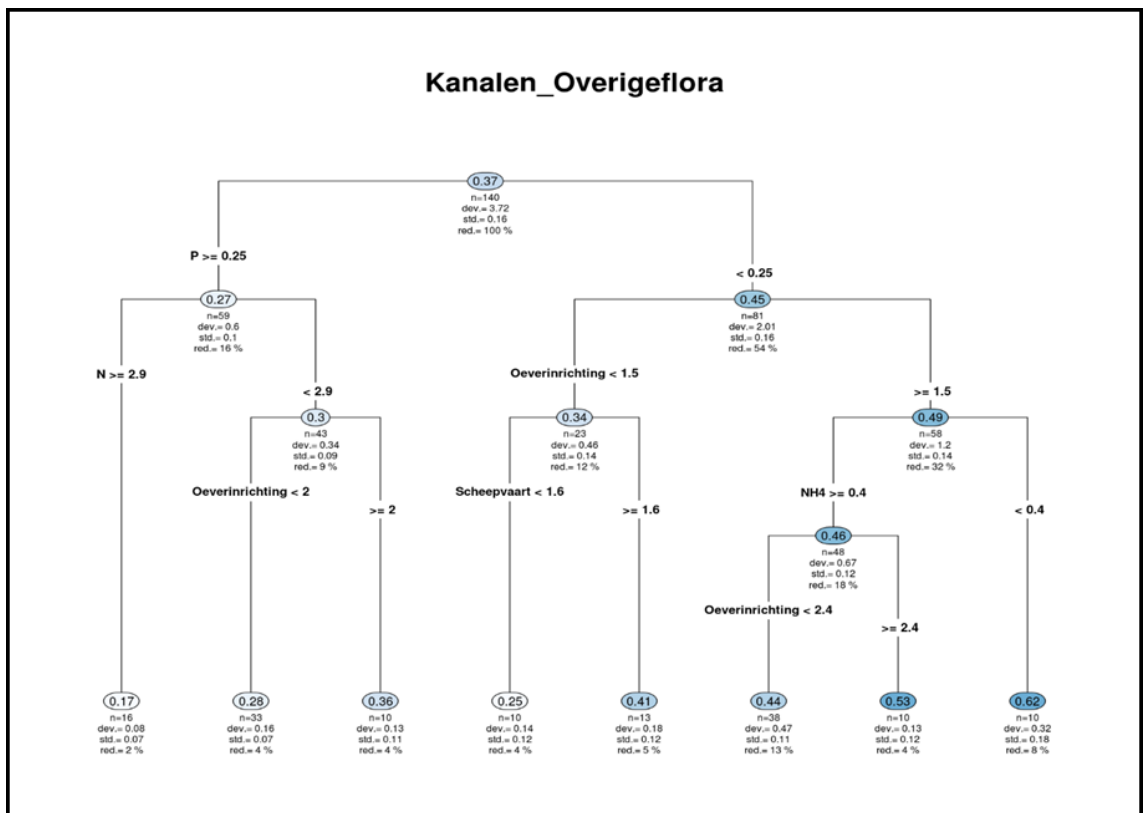
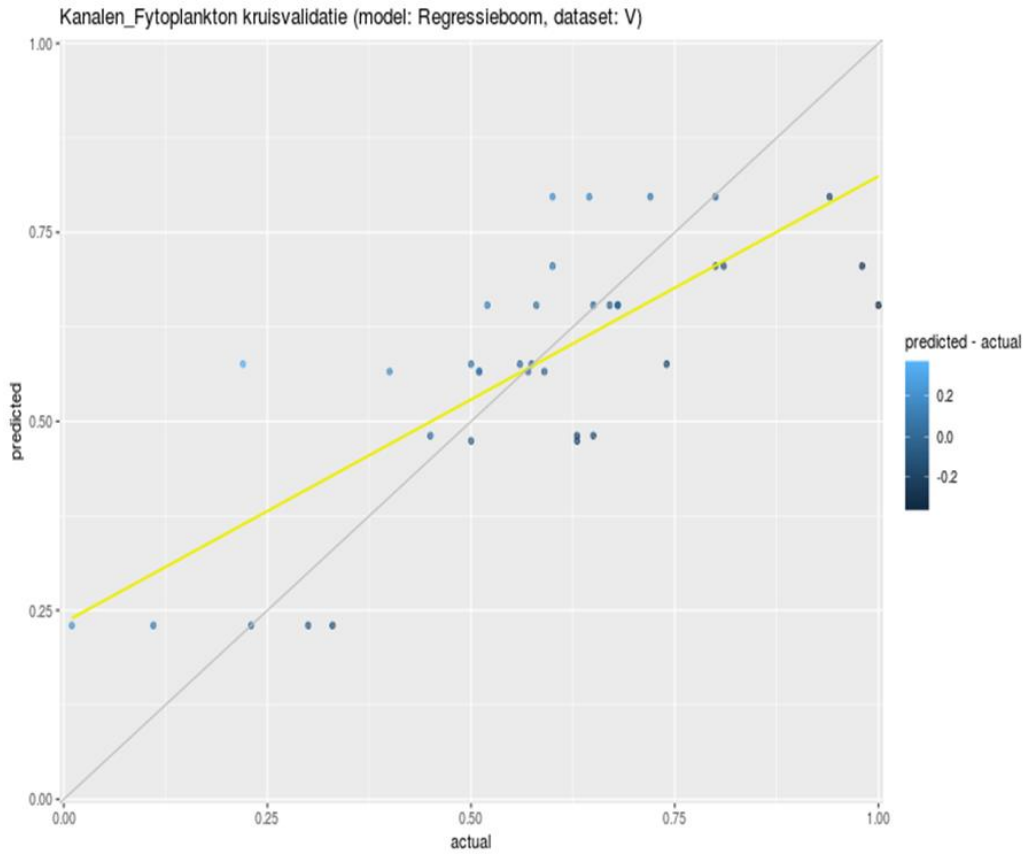


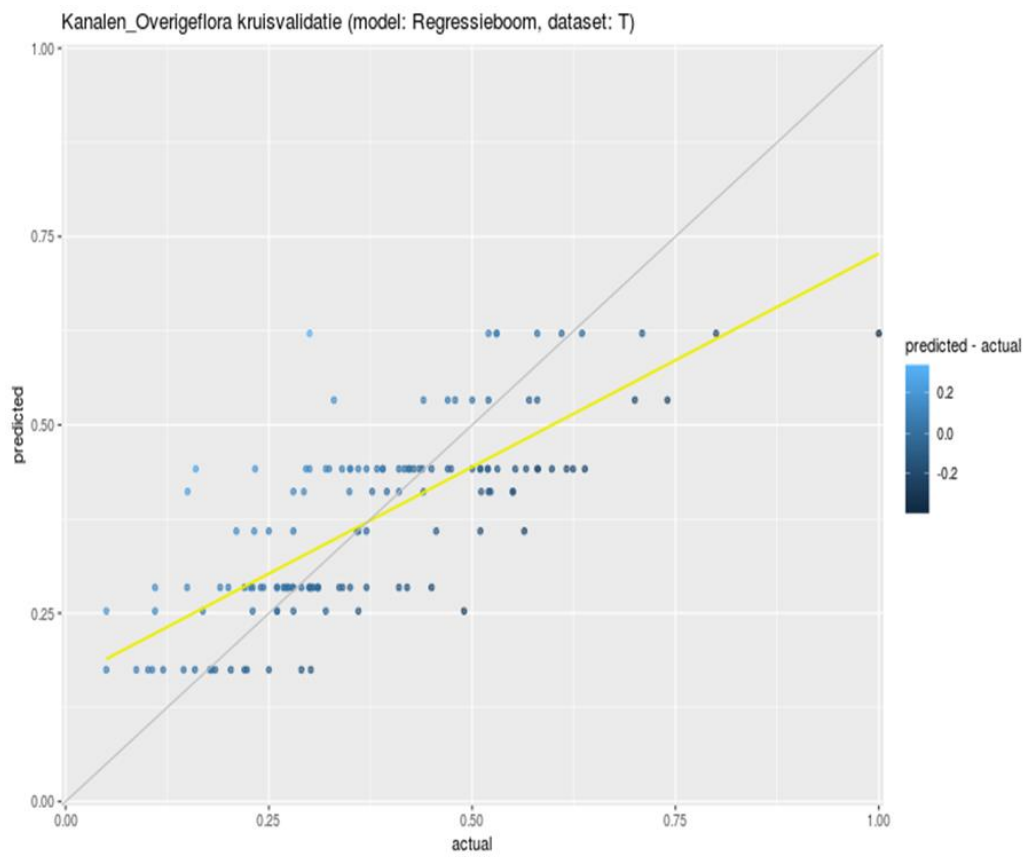
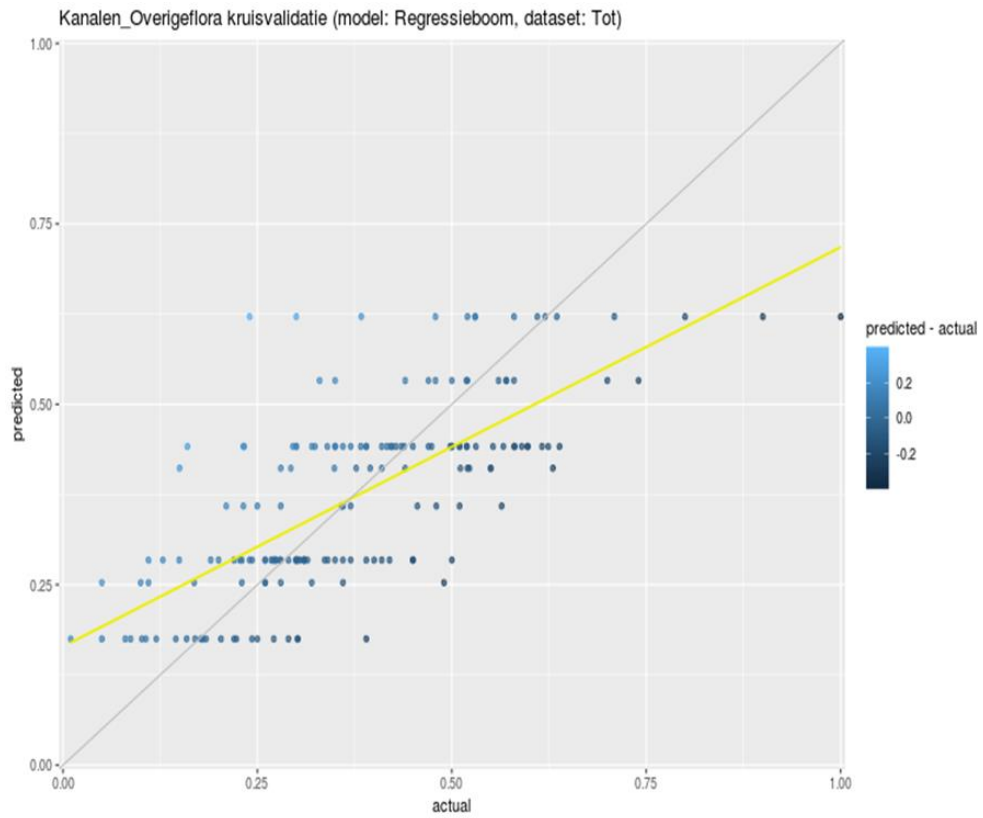


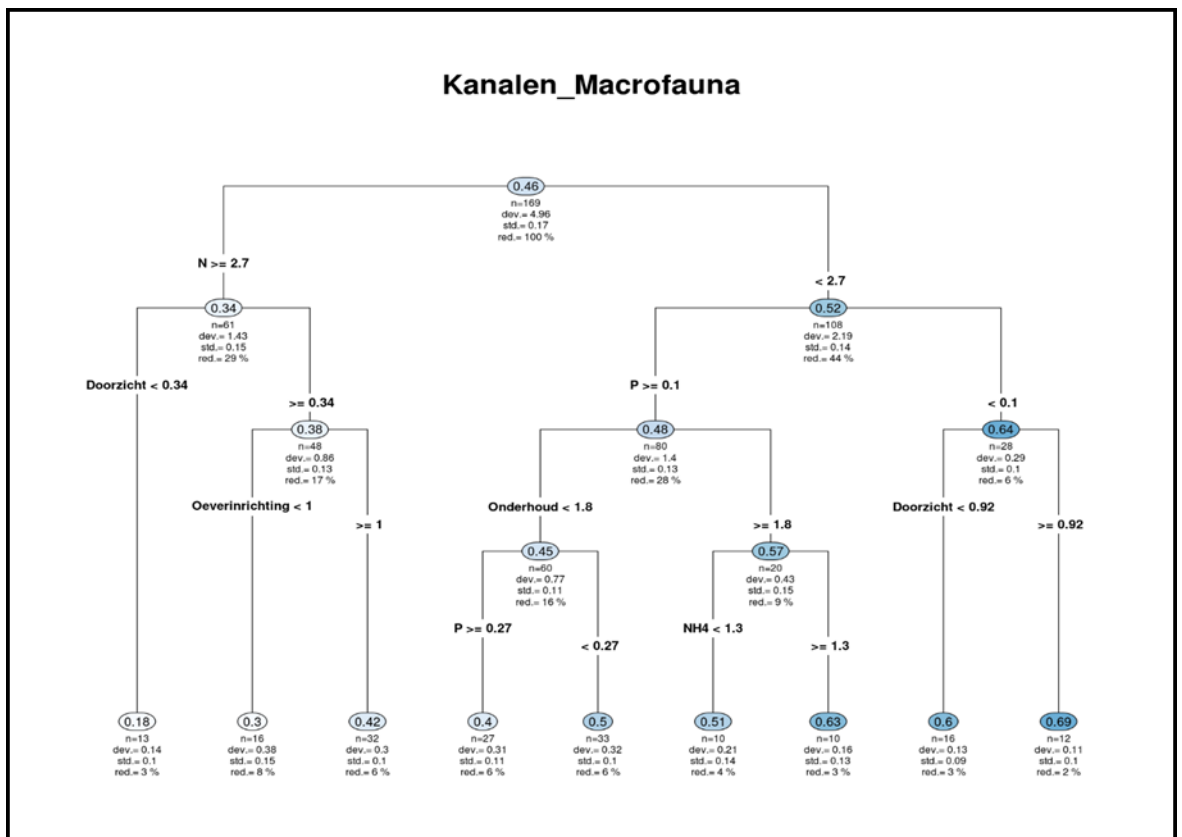
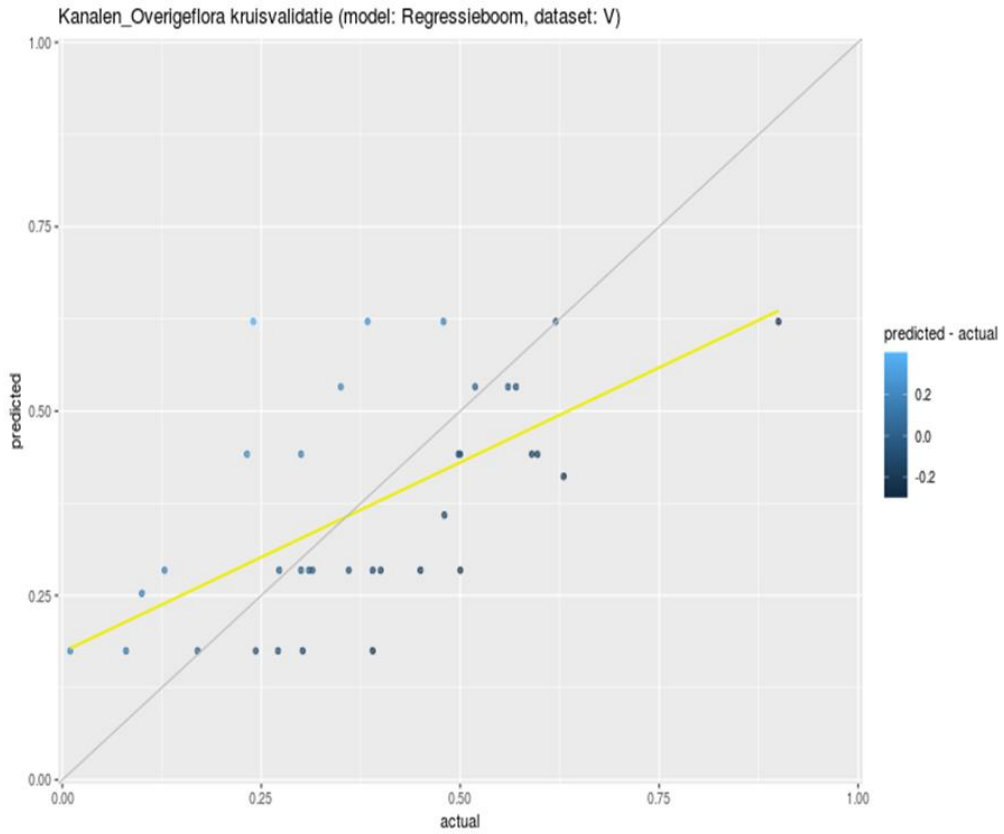
G.4 Kanalen

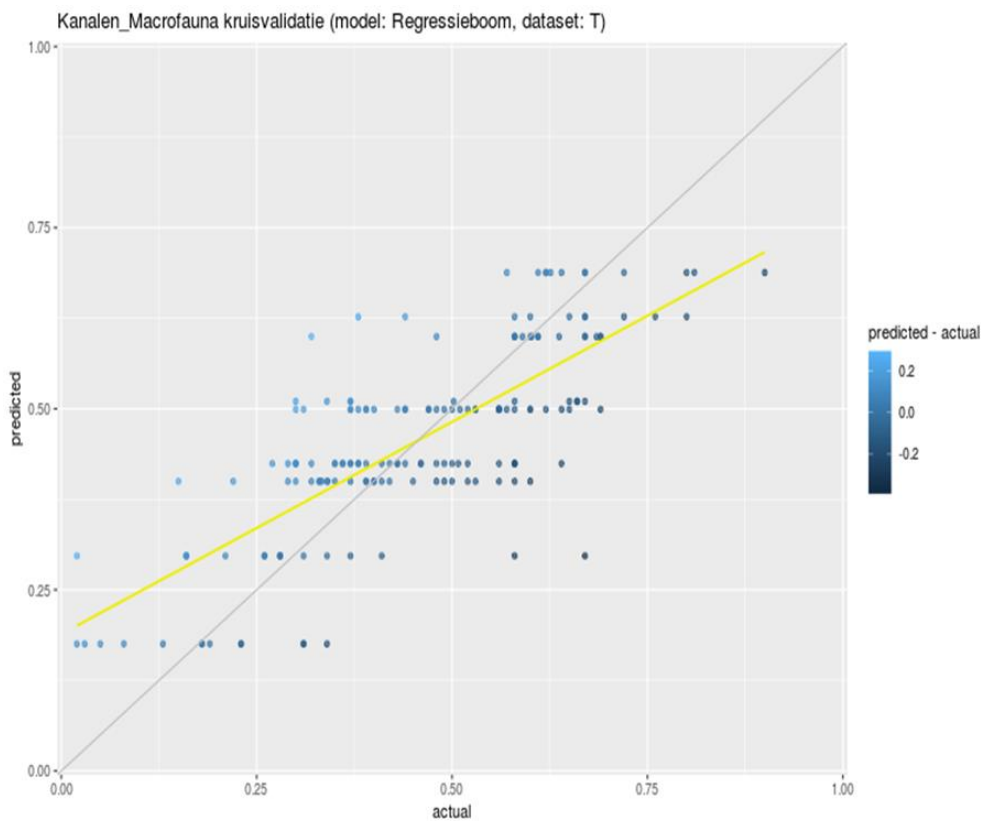
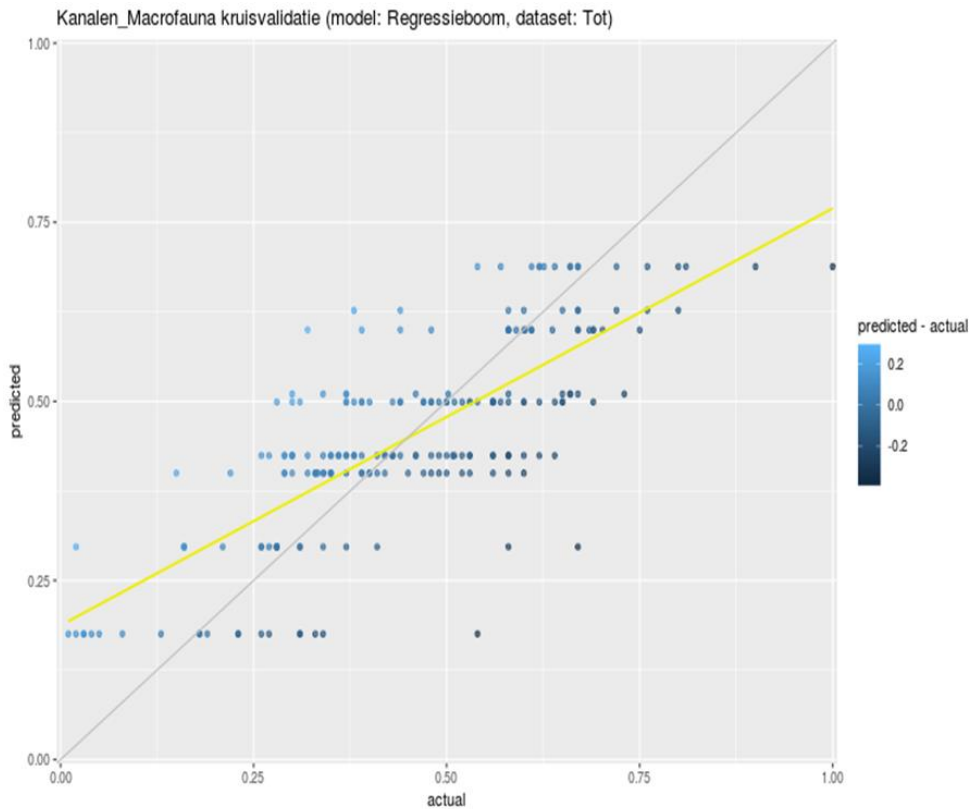


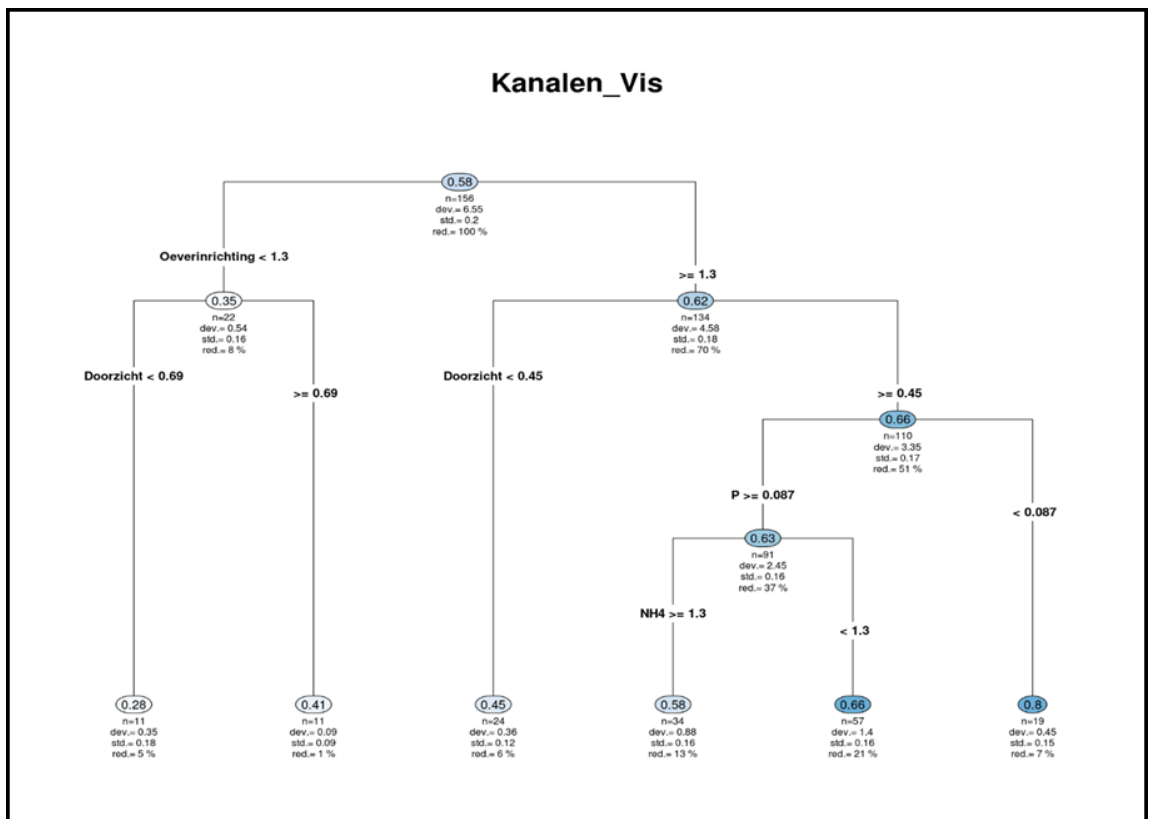
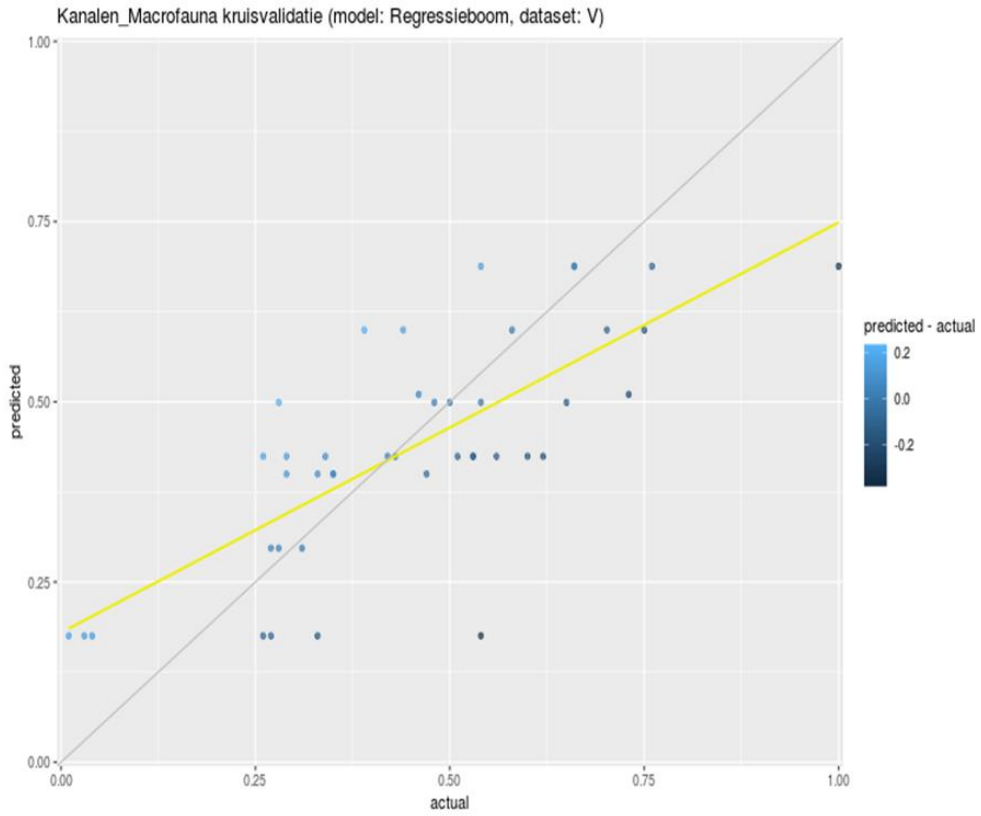


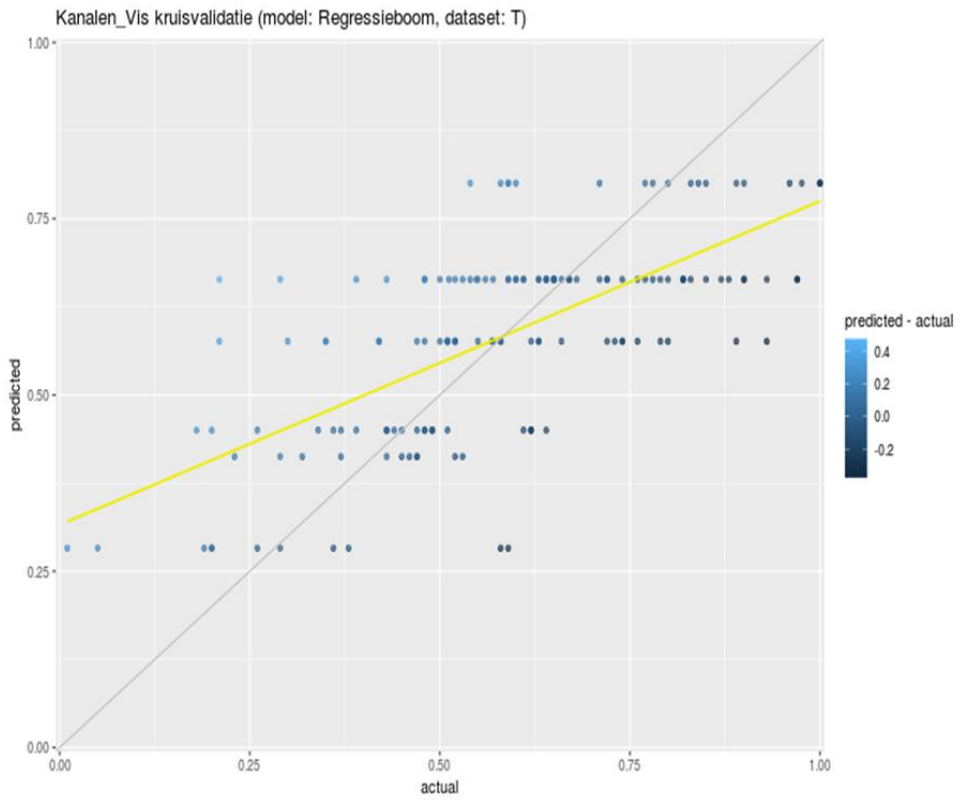
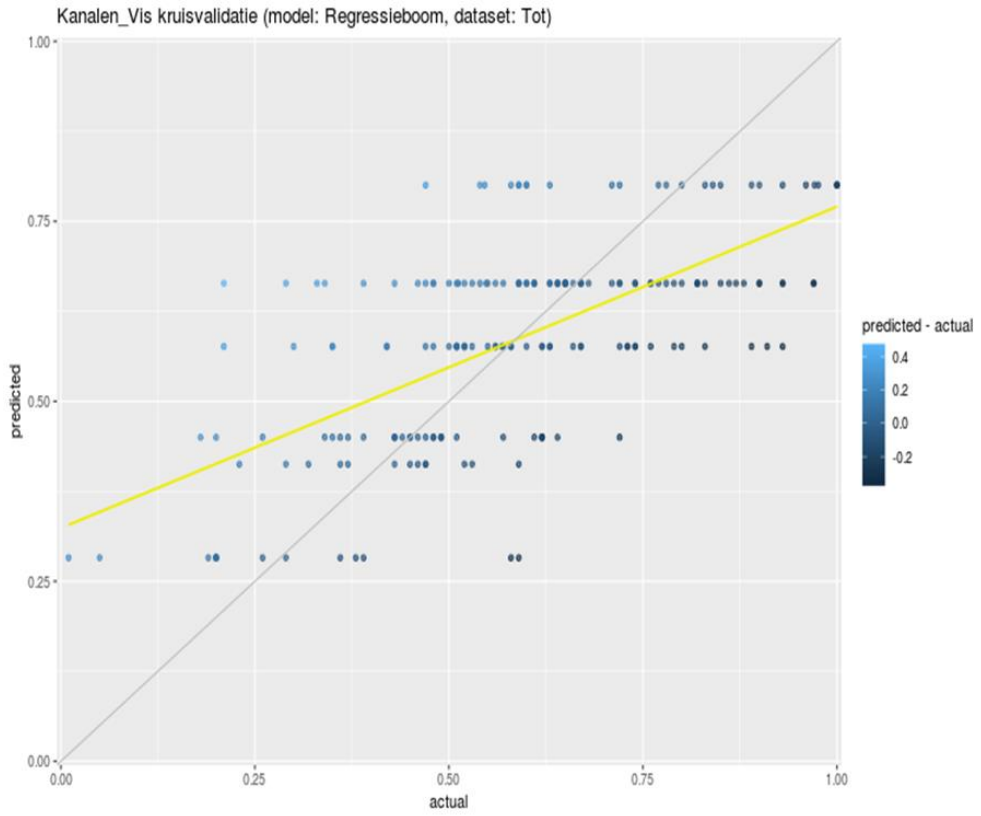


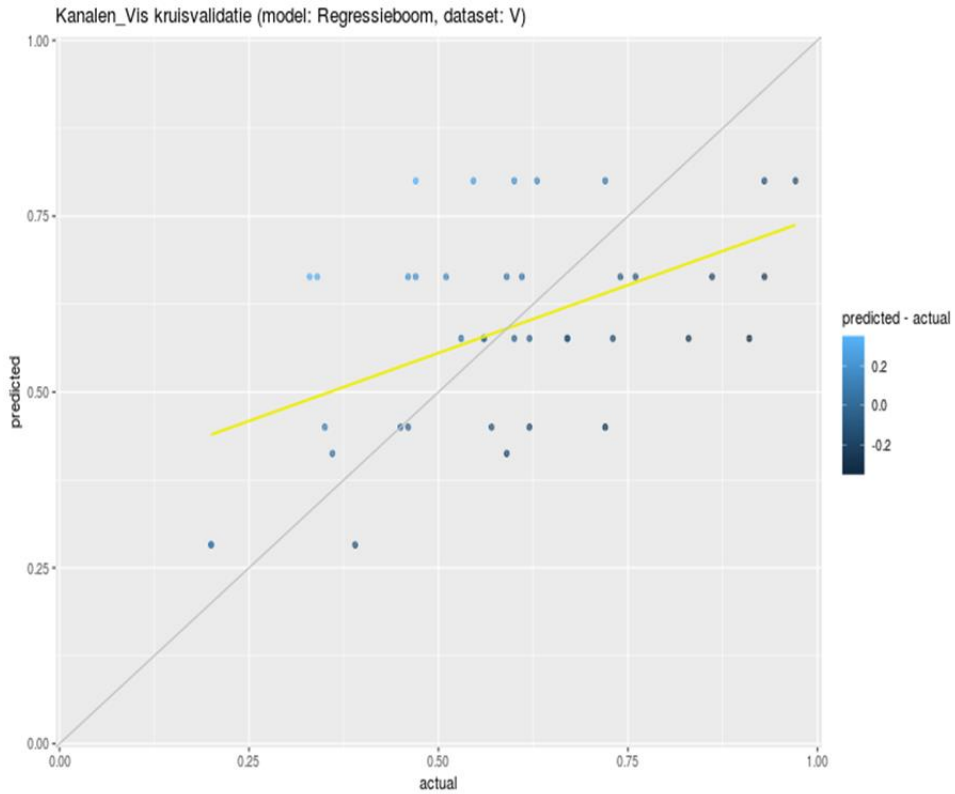




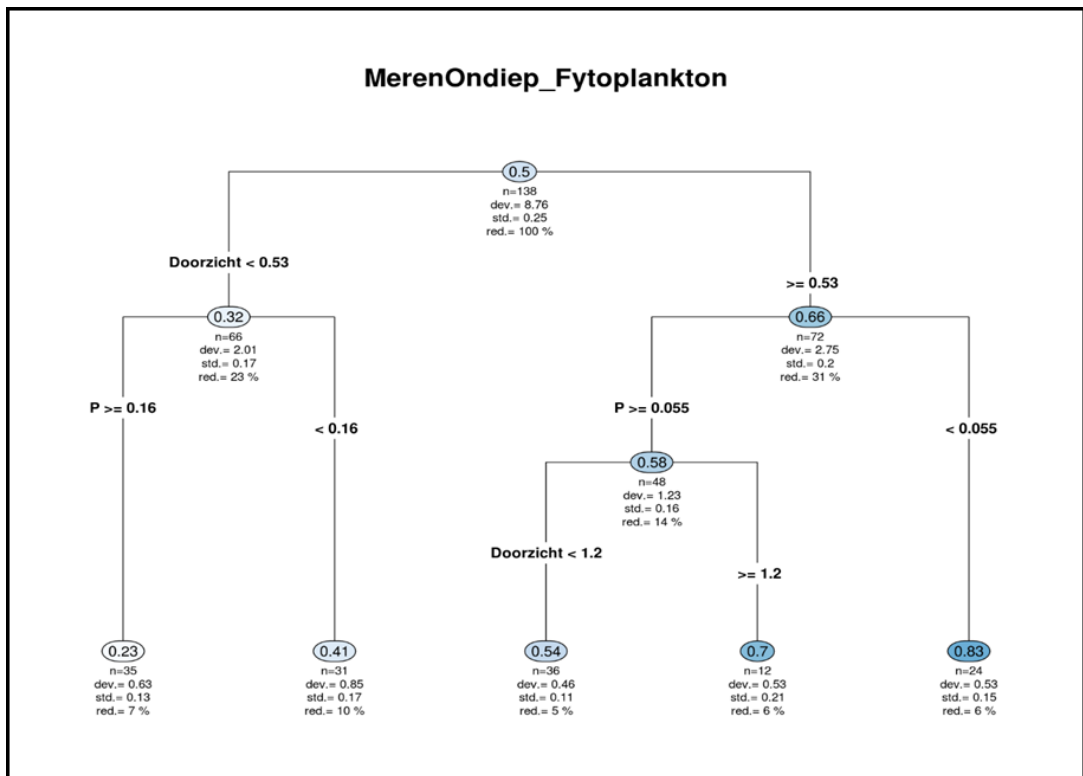


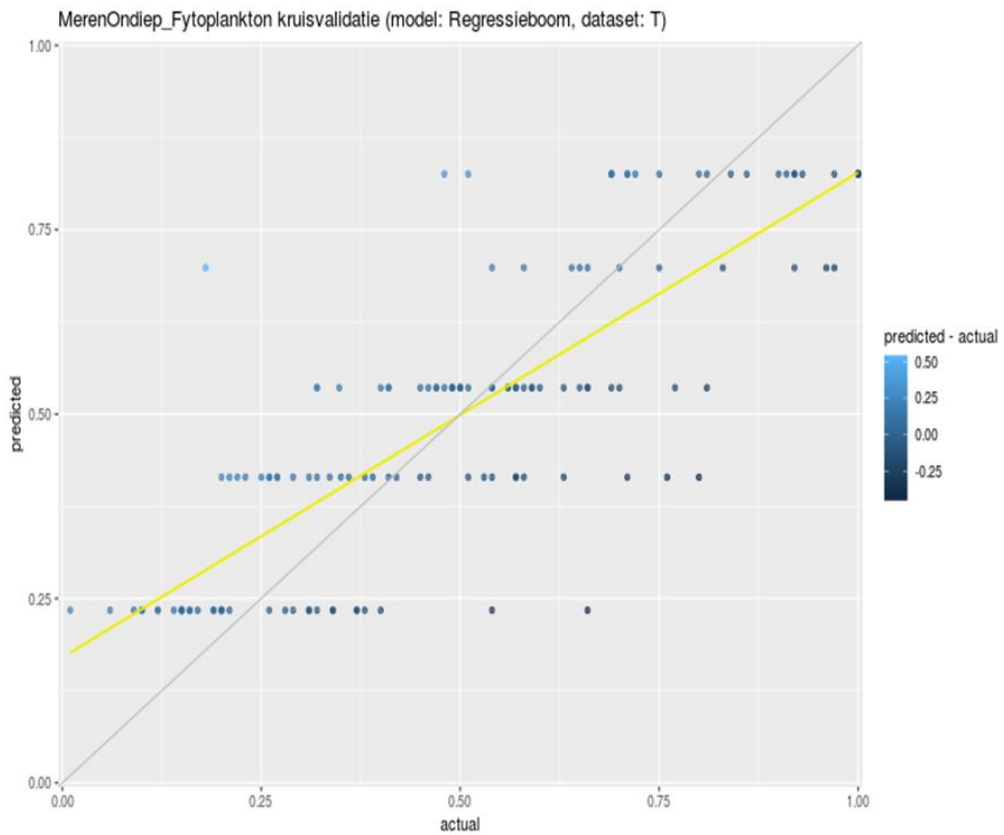
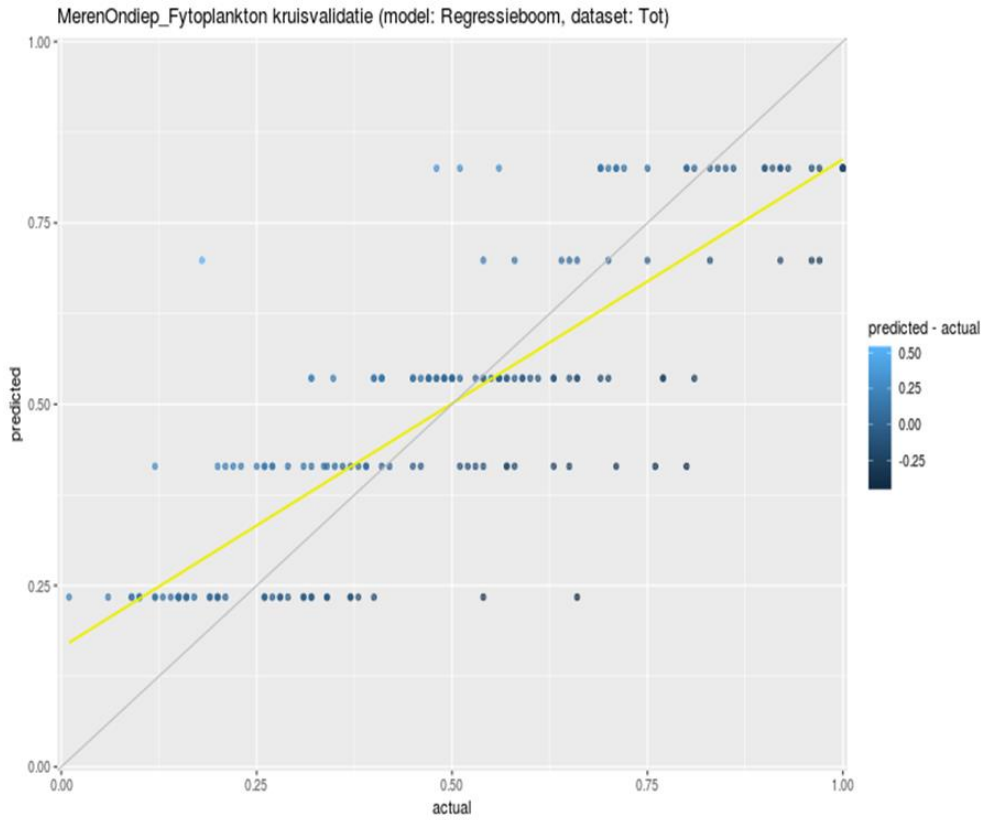


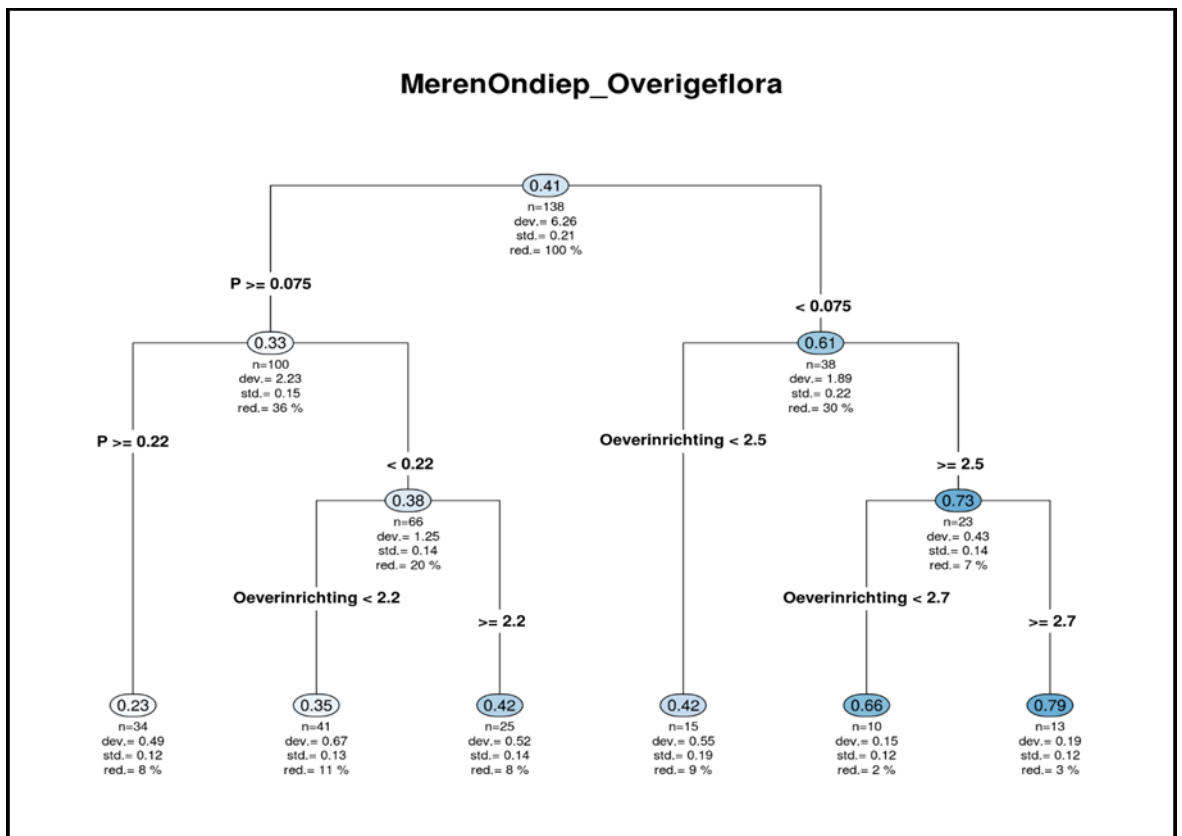
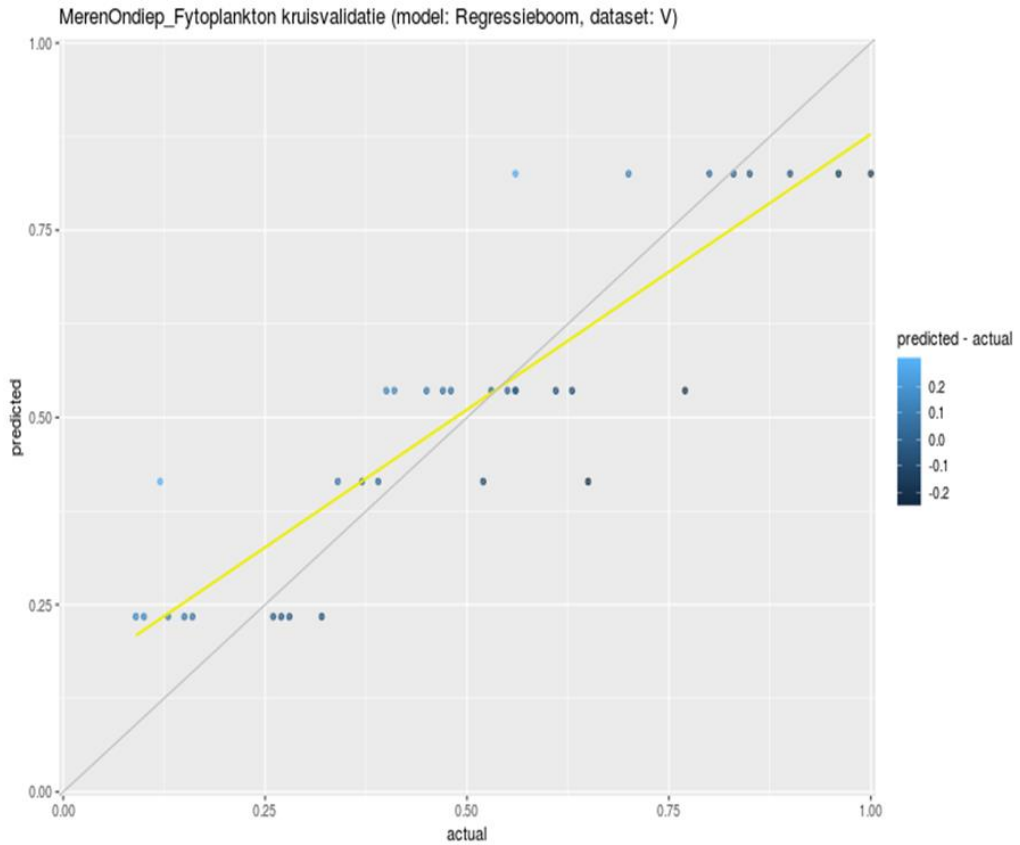


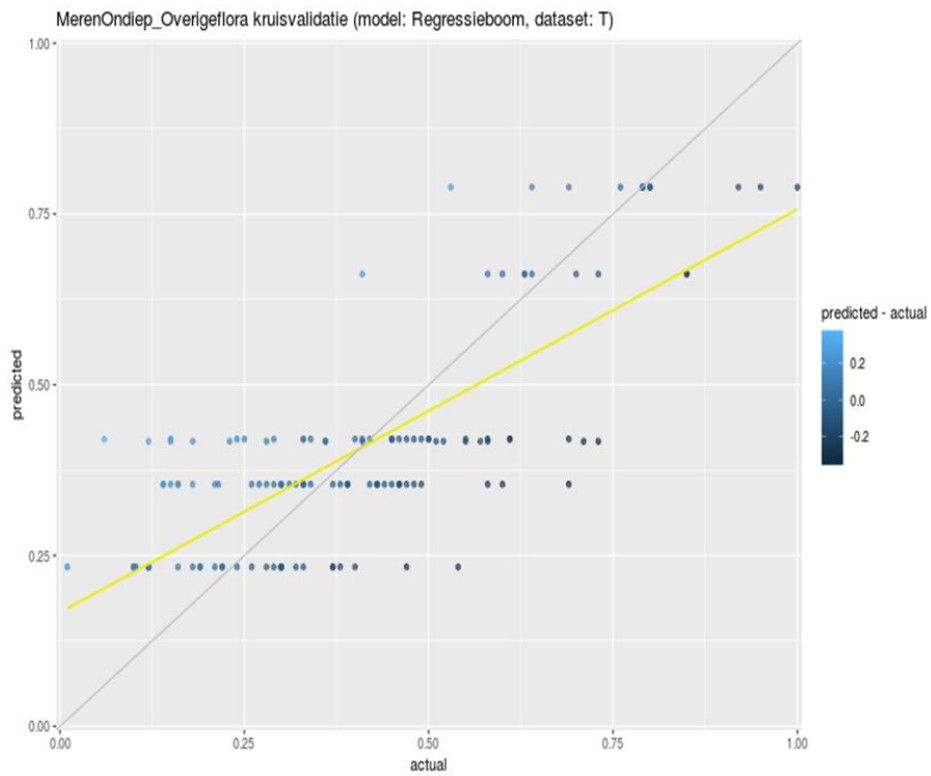
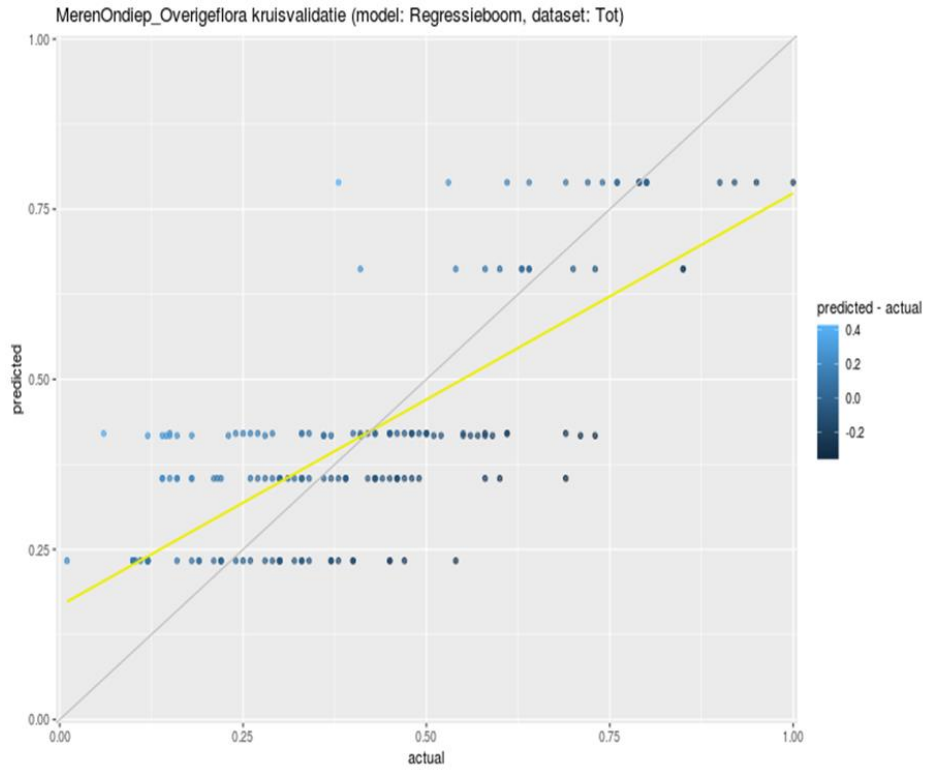


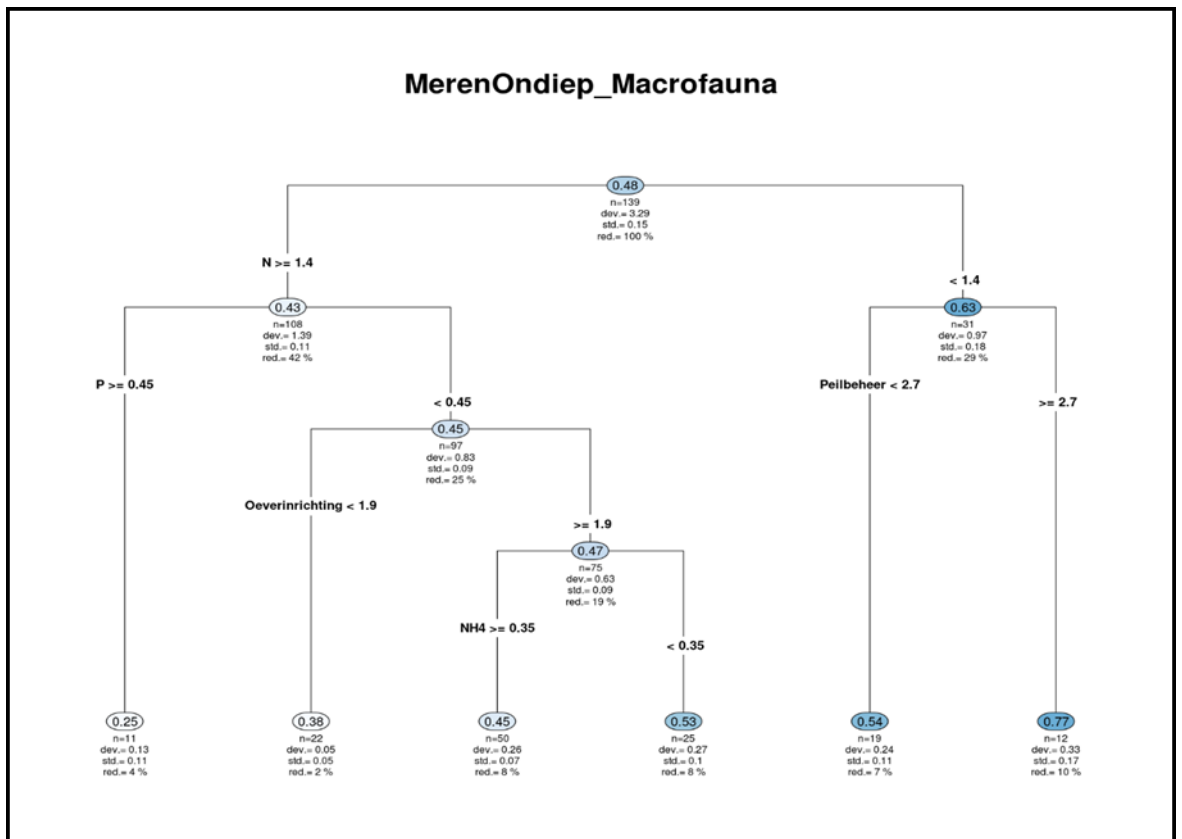
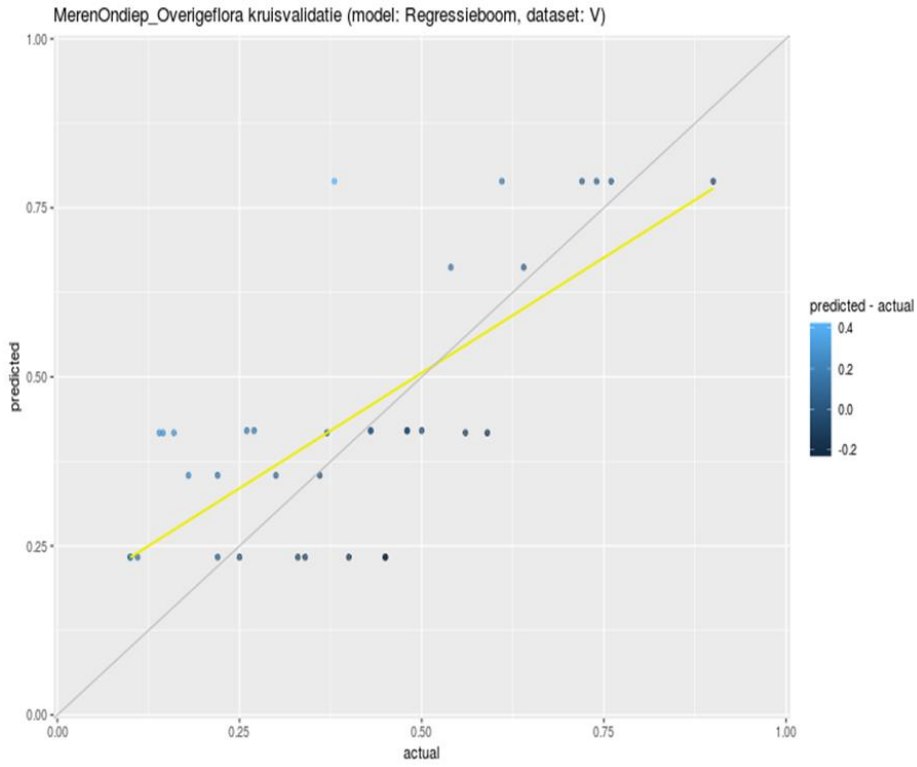
G.5 Ondiepe meren

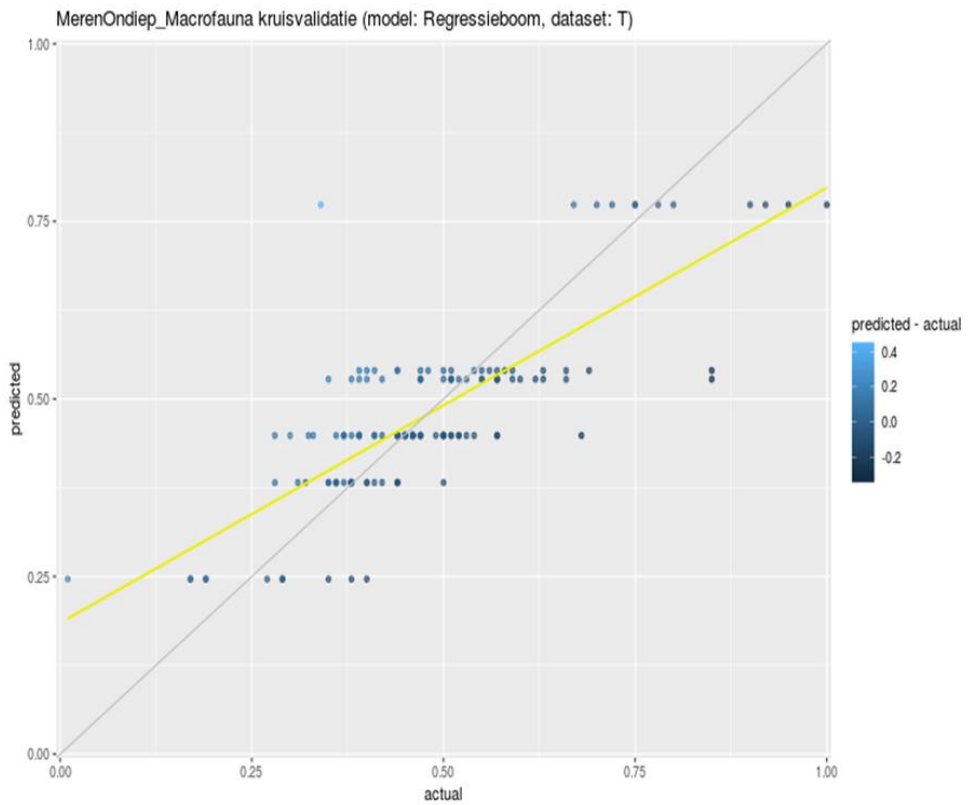
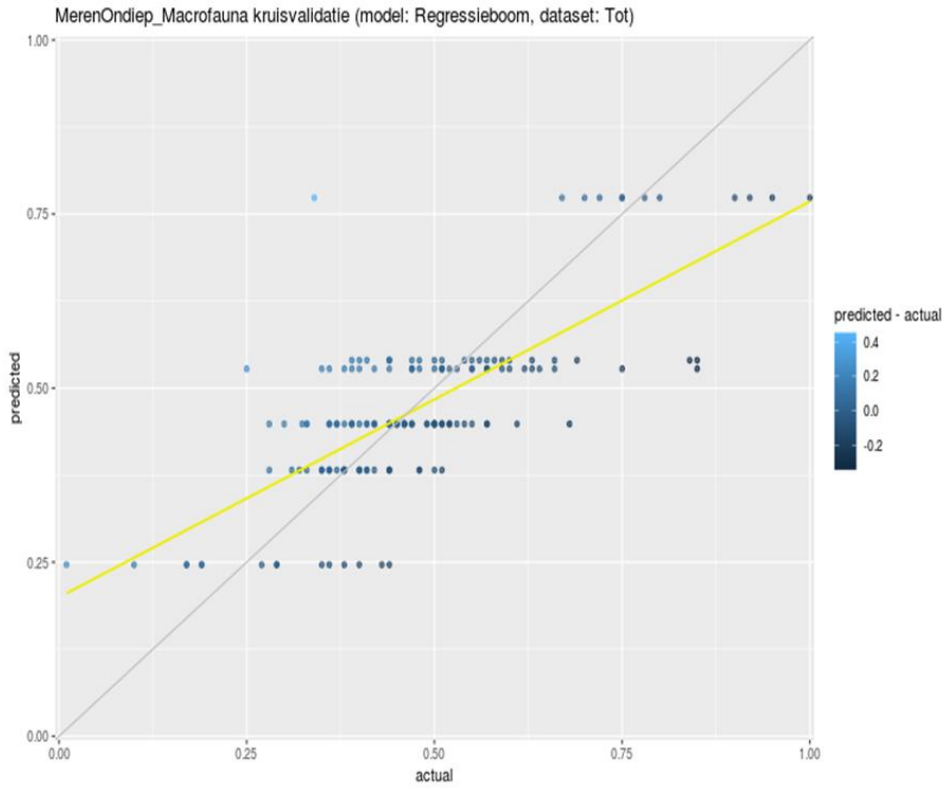


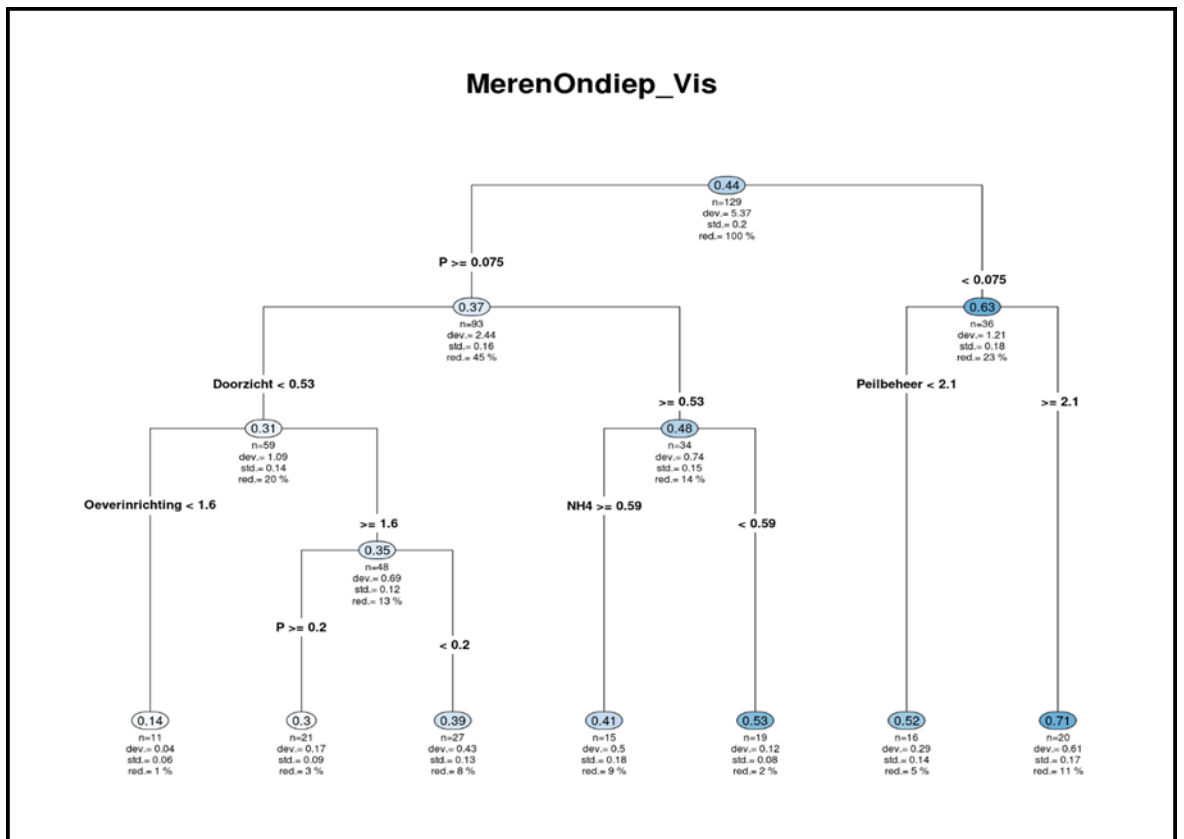
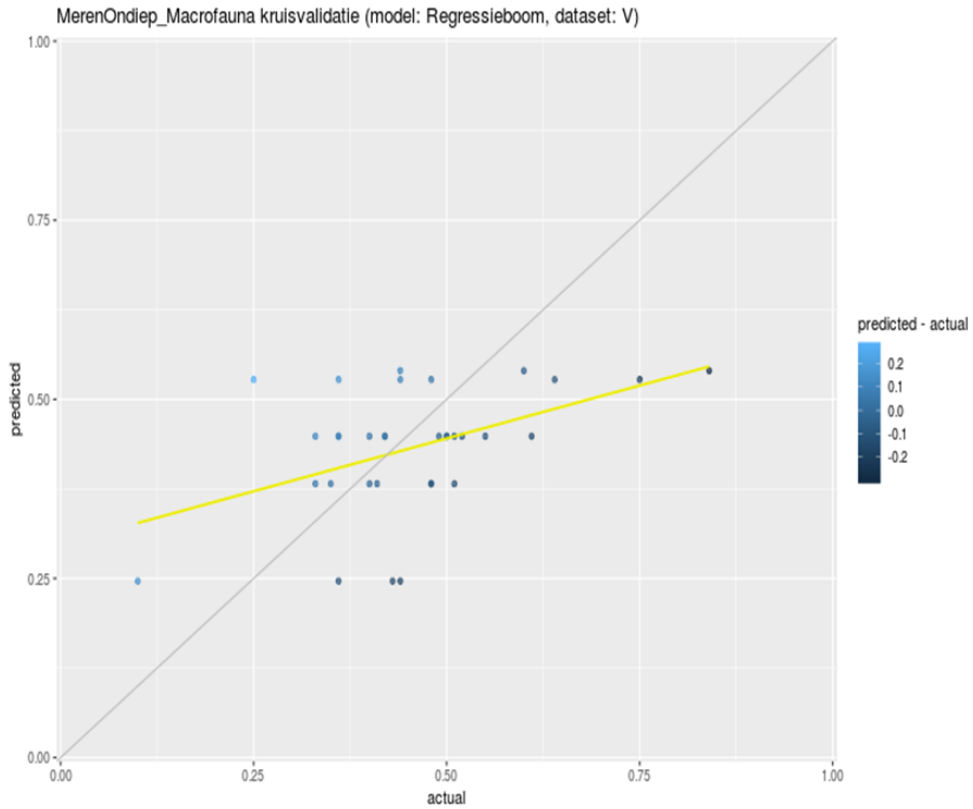


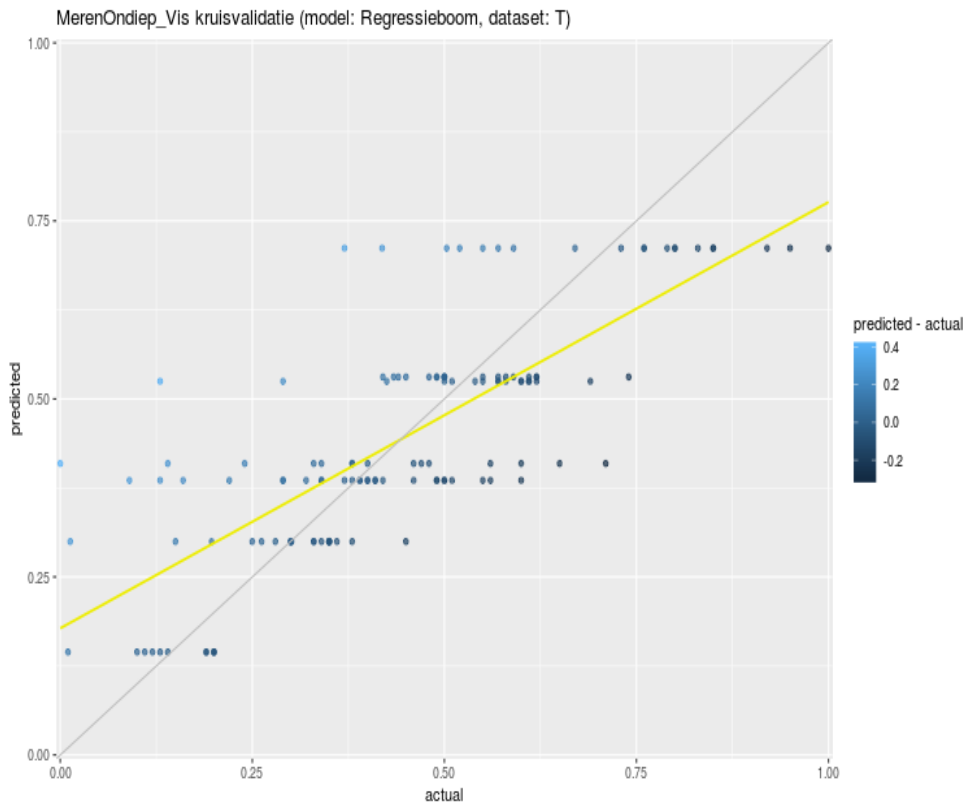
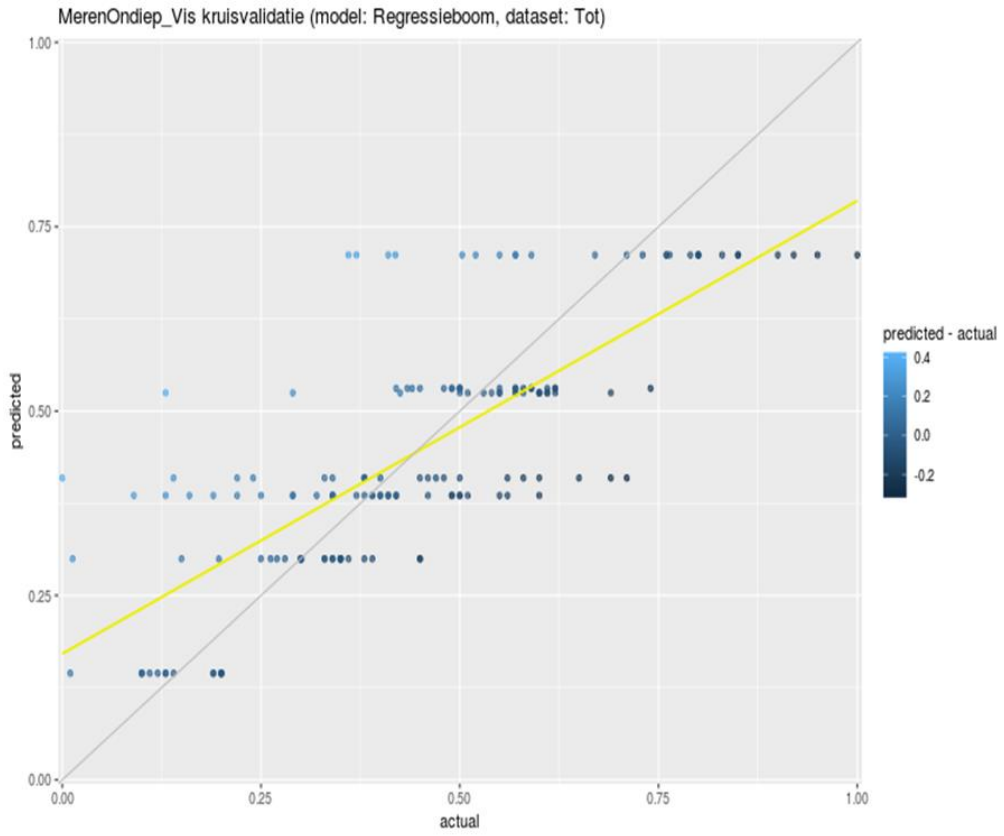


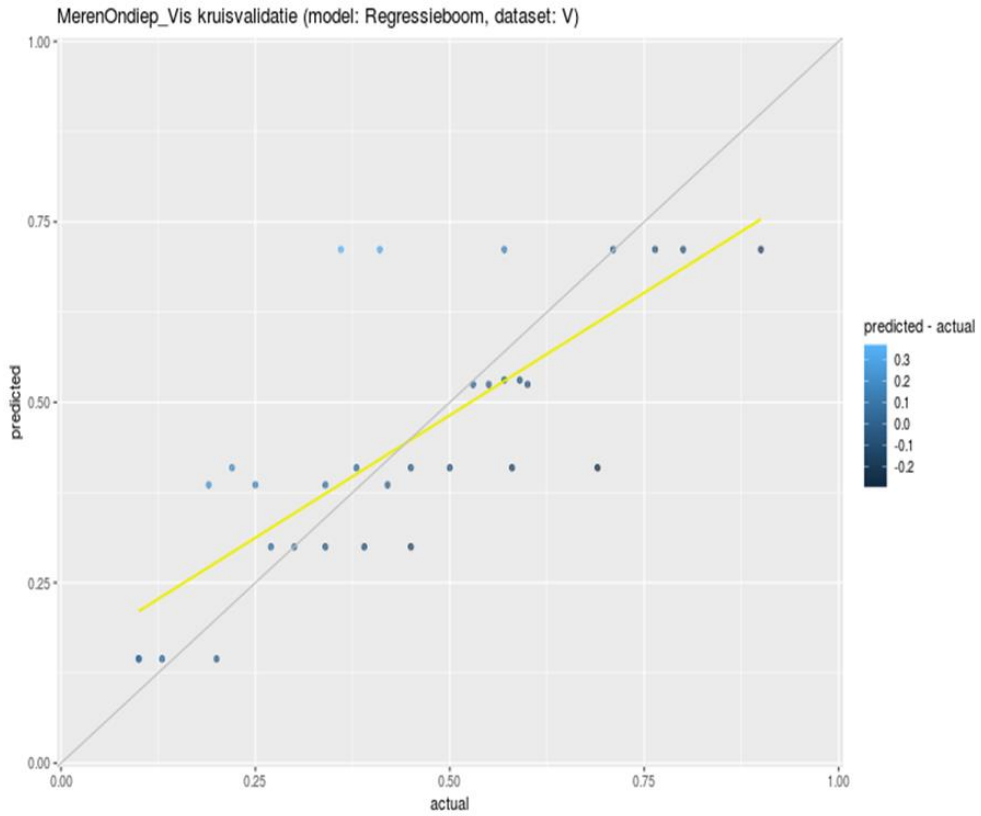




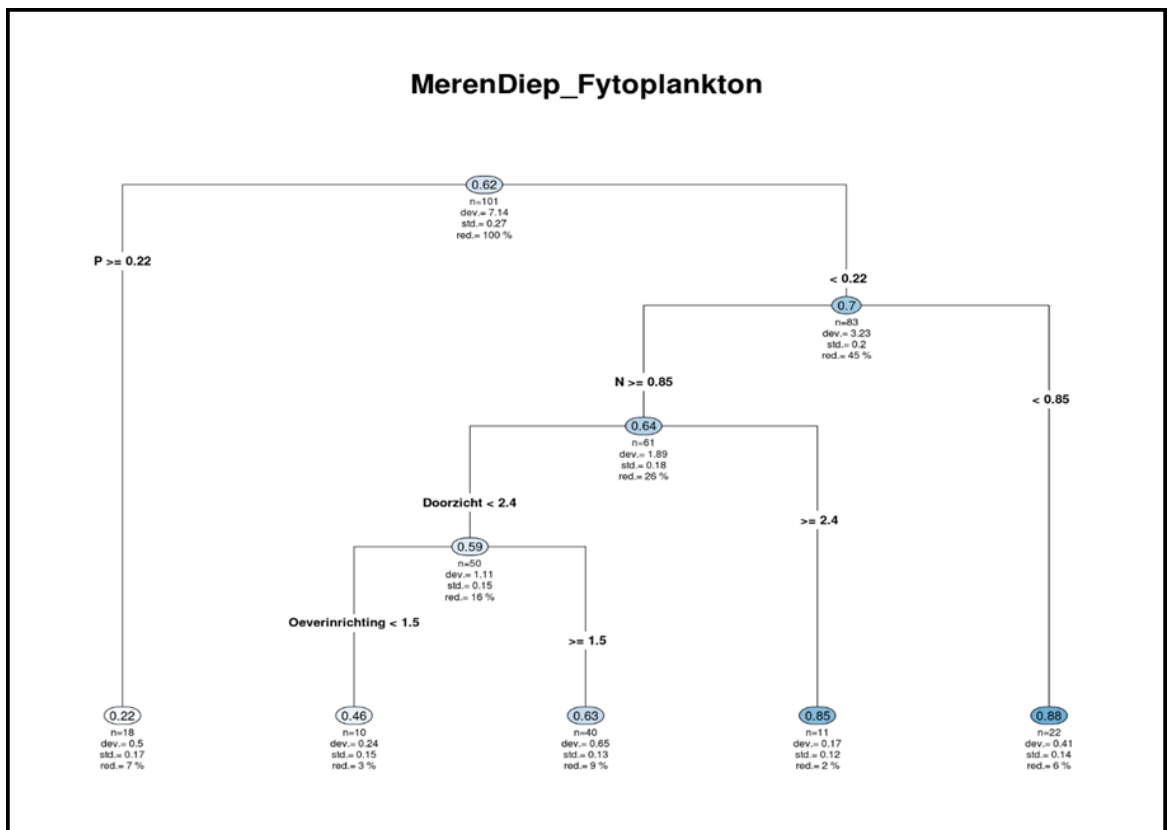


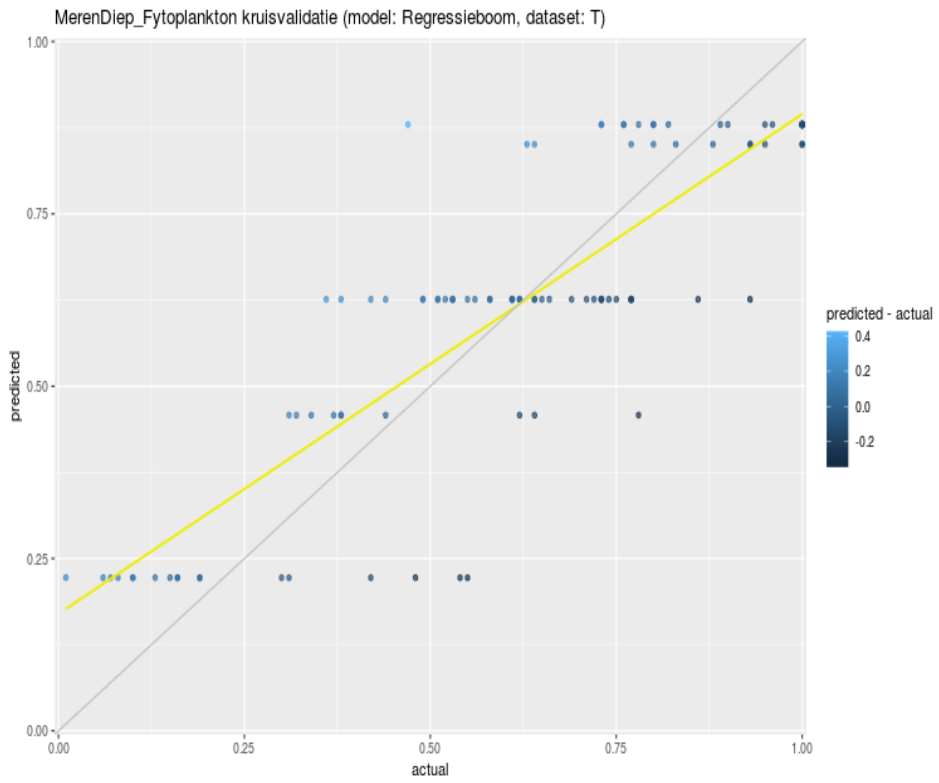
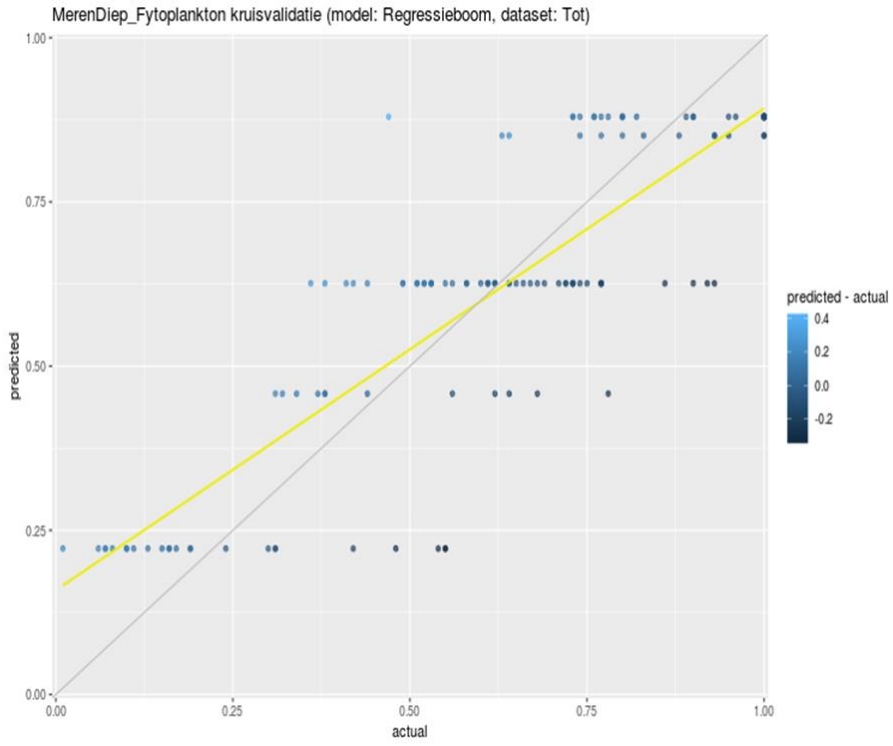


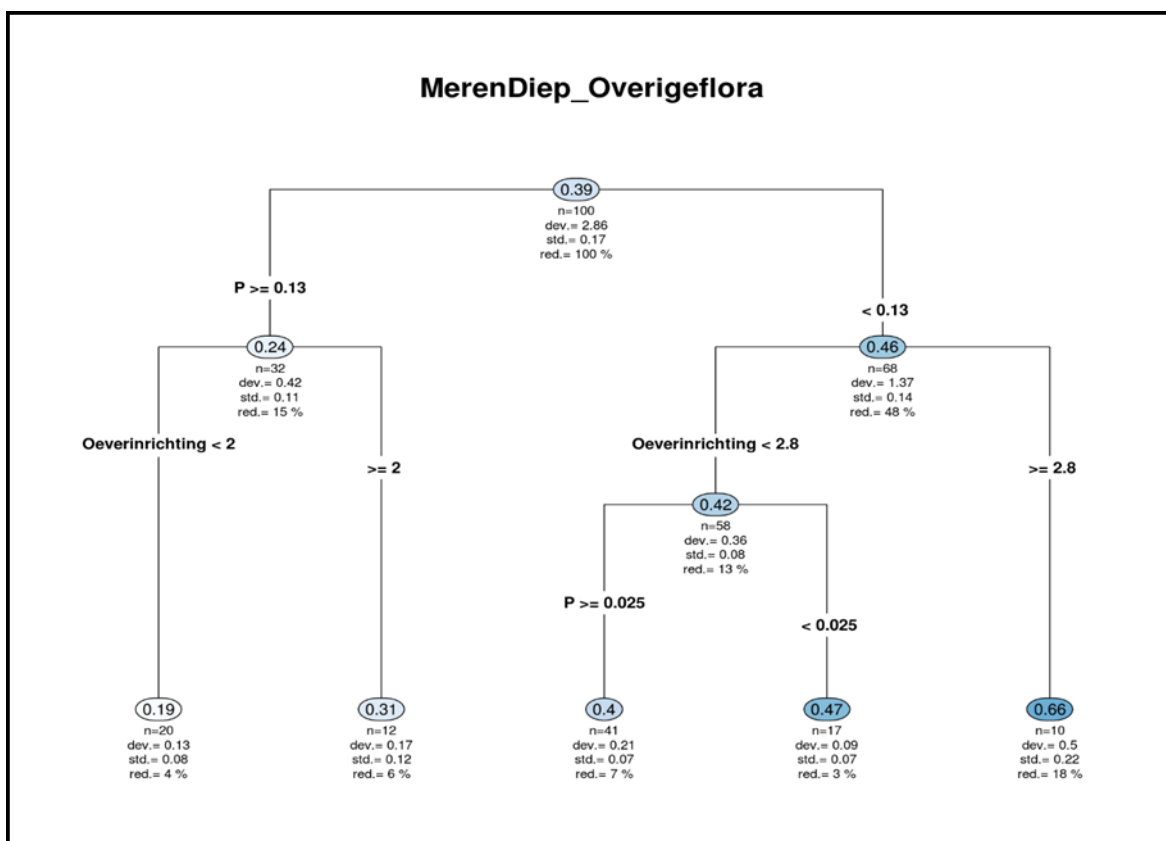
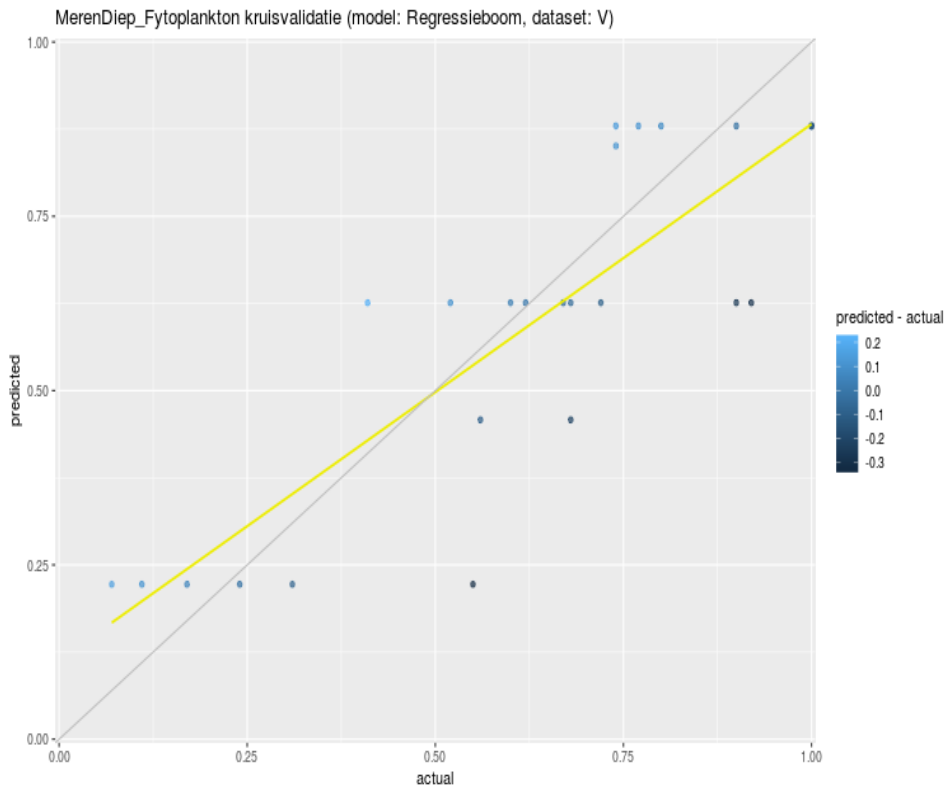


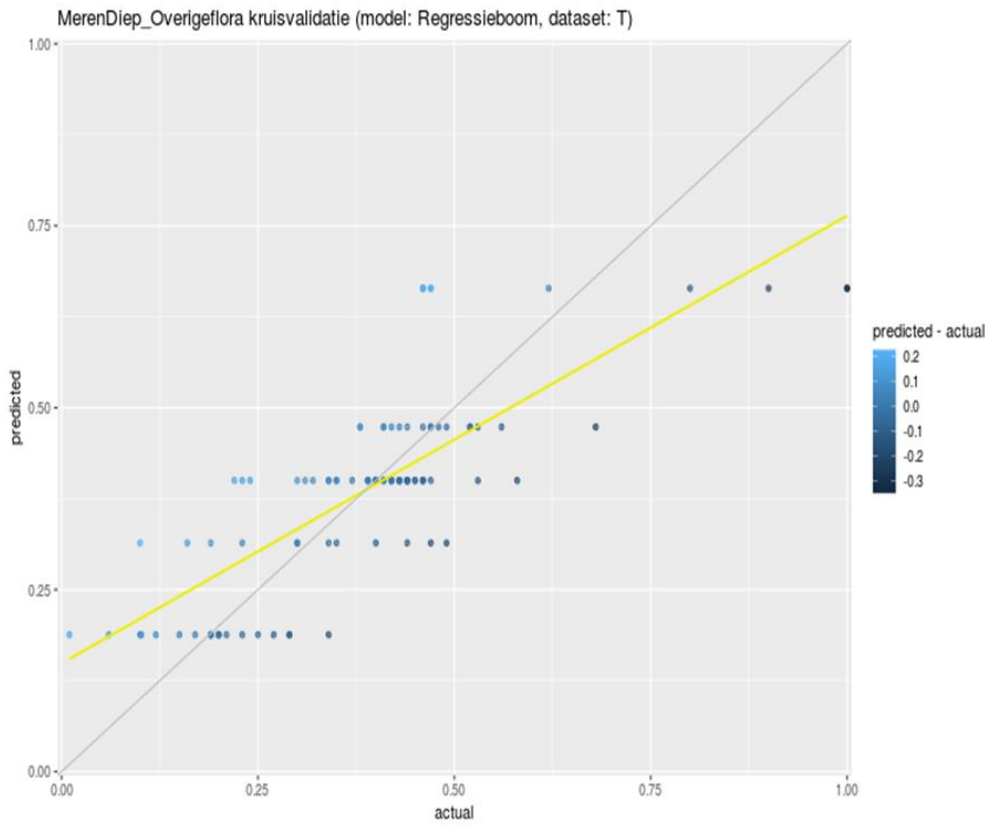
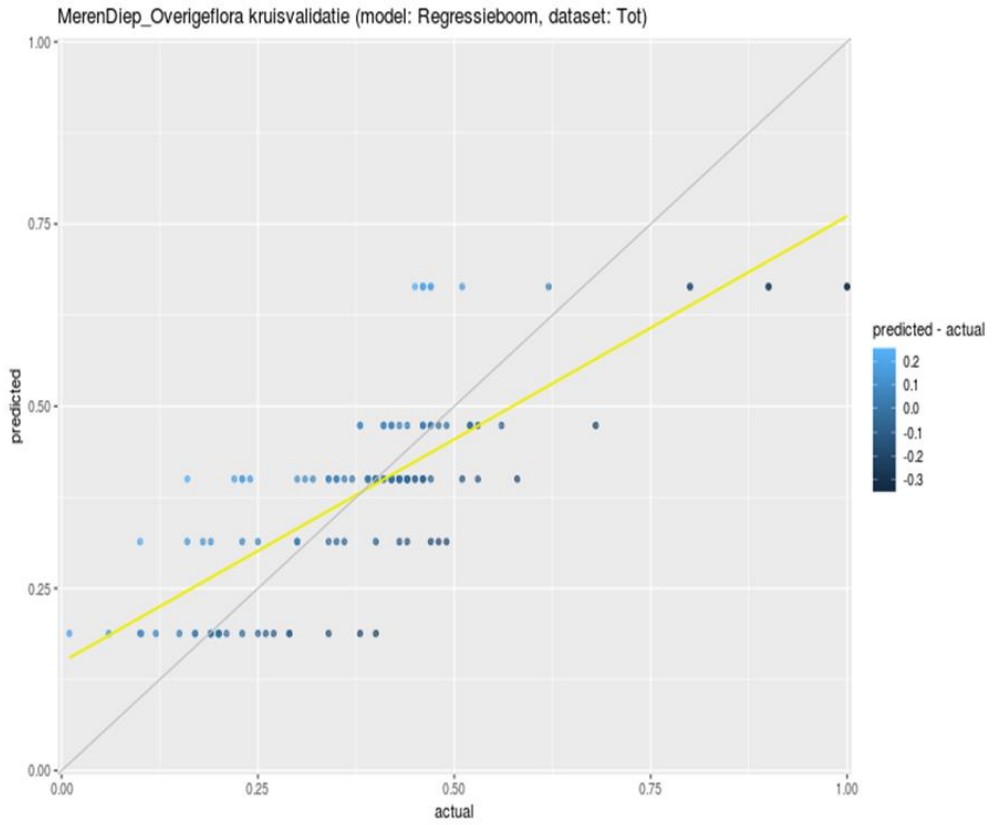


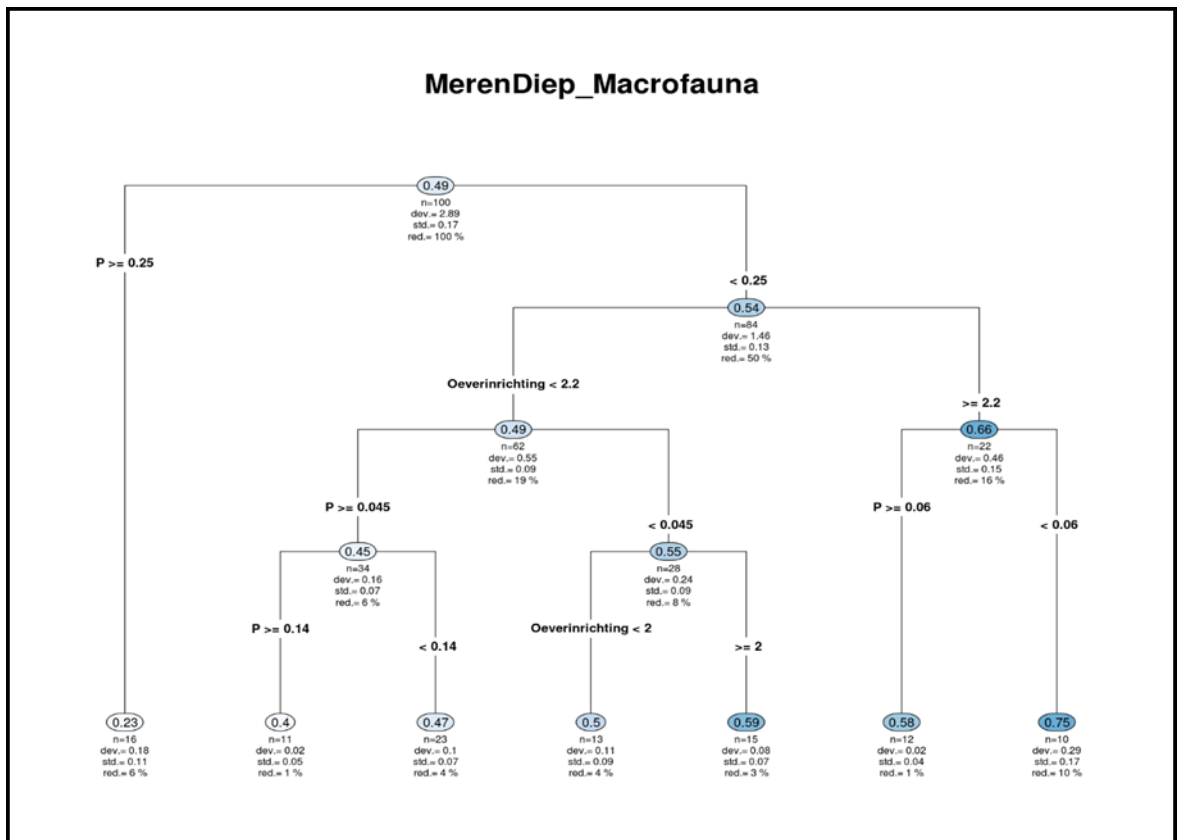
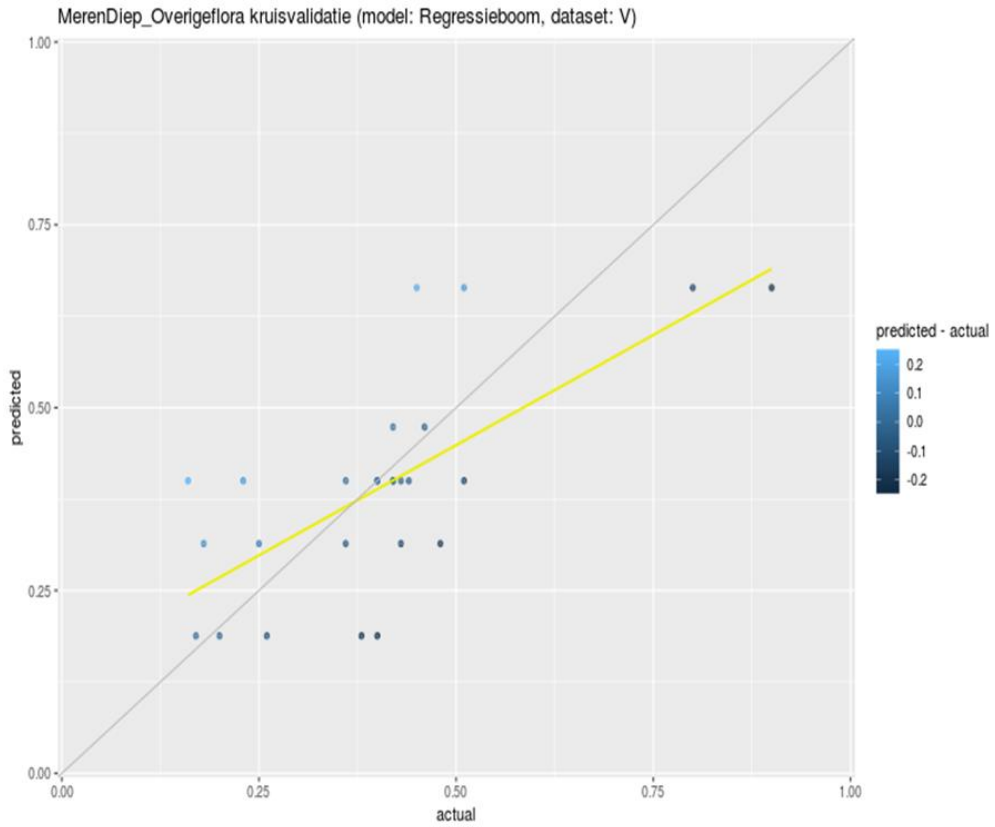
G.6 Diepe meren

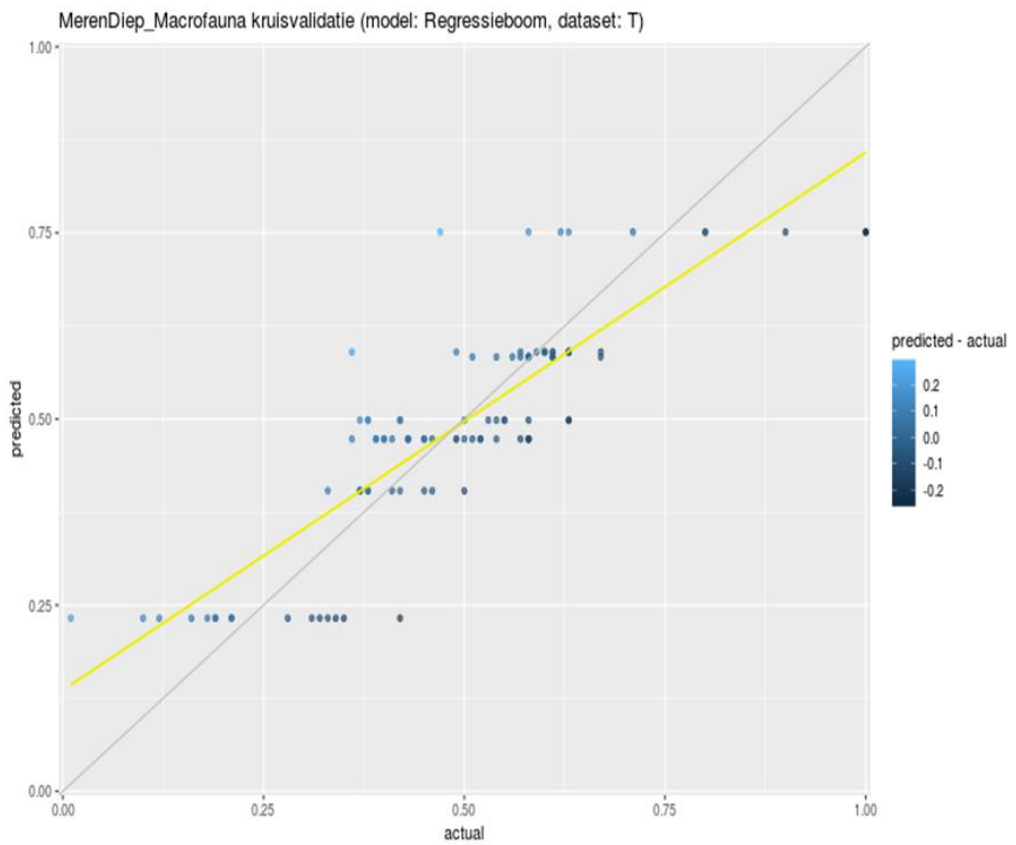
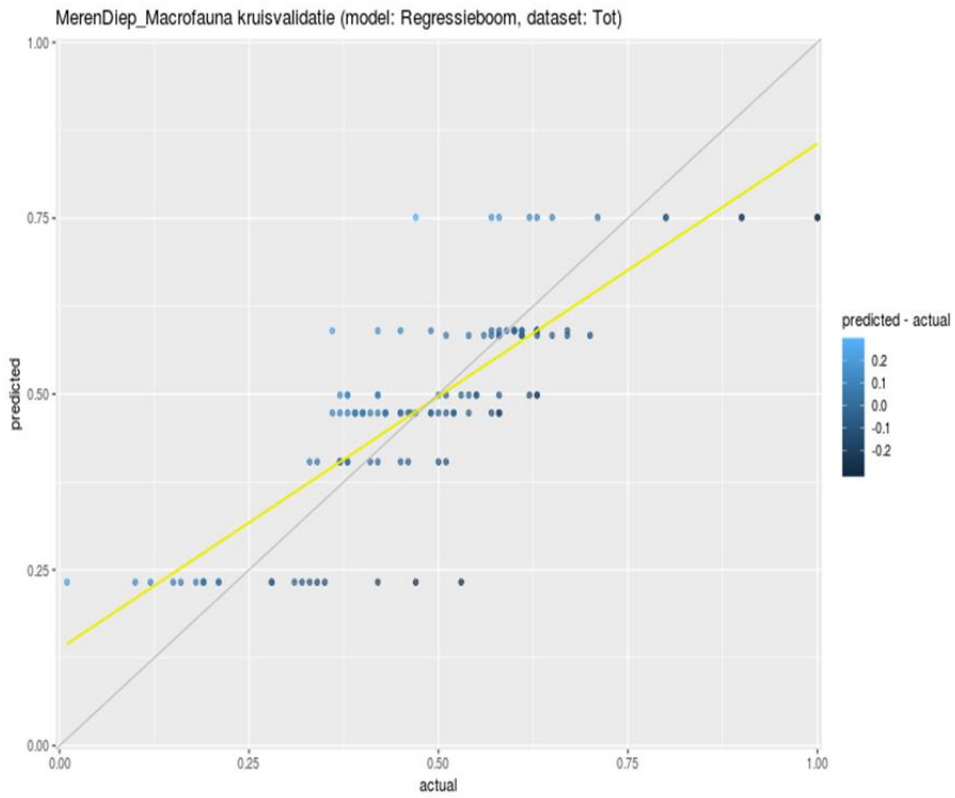


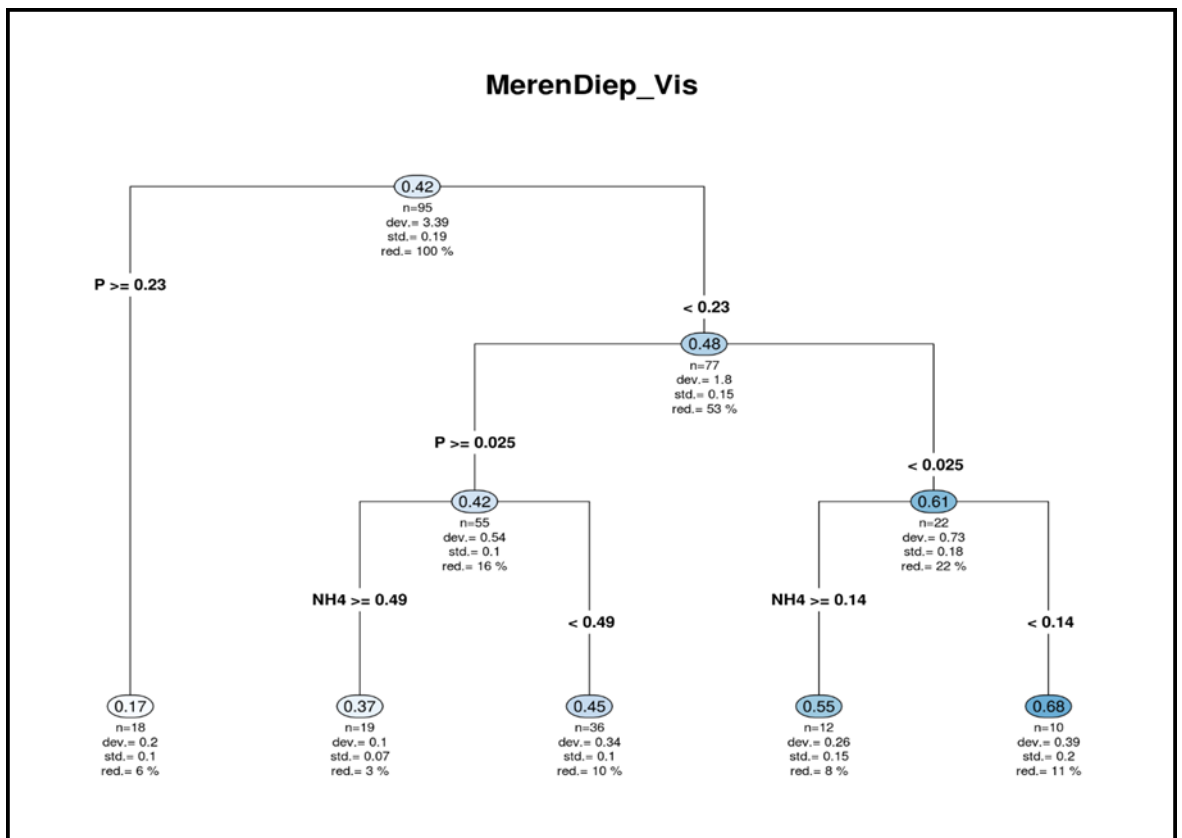
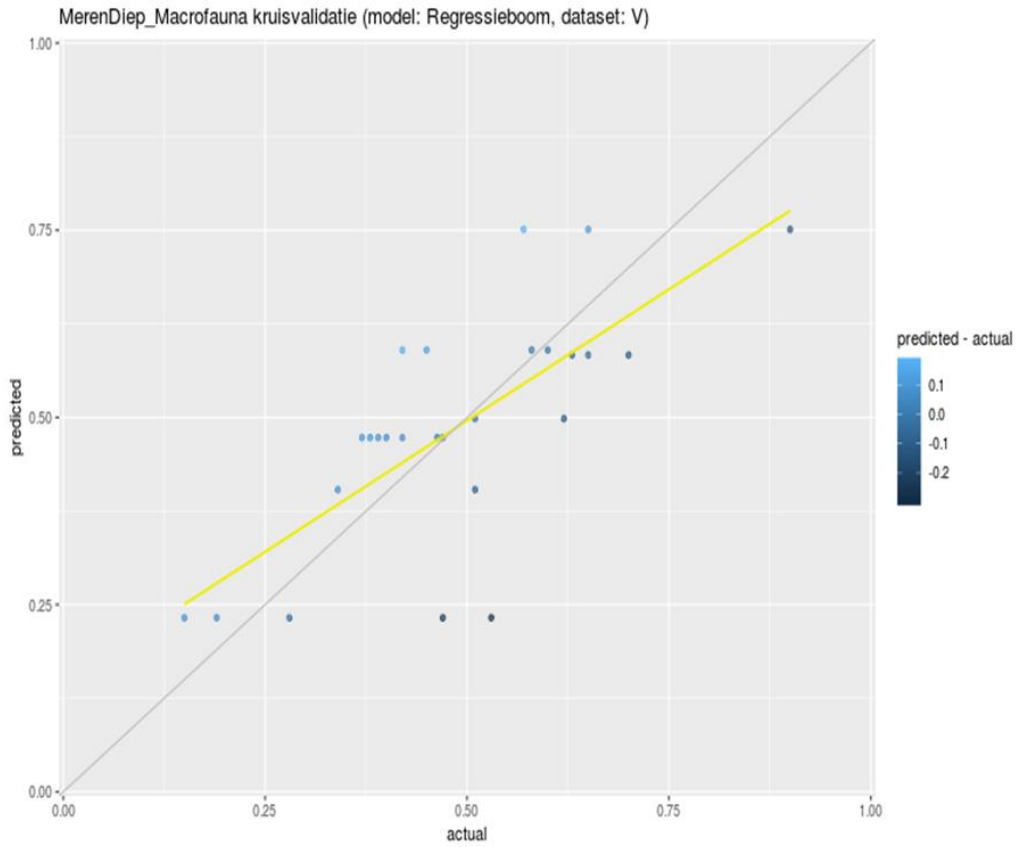


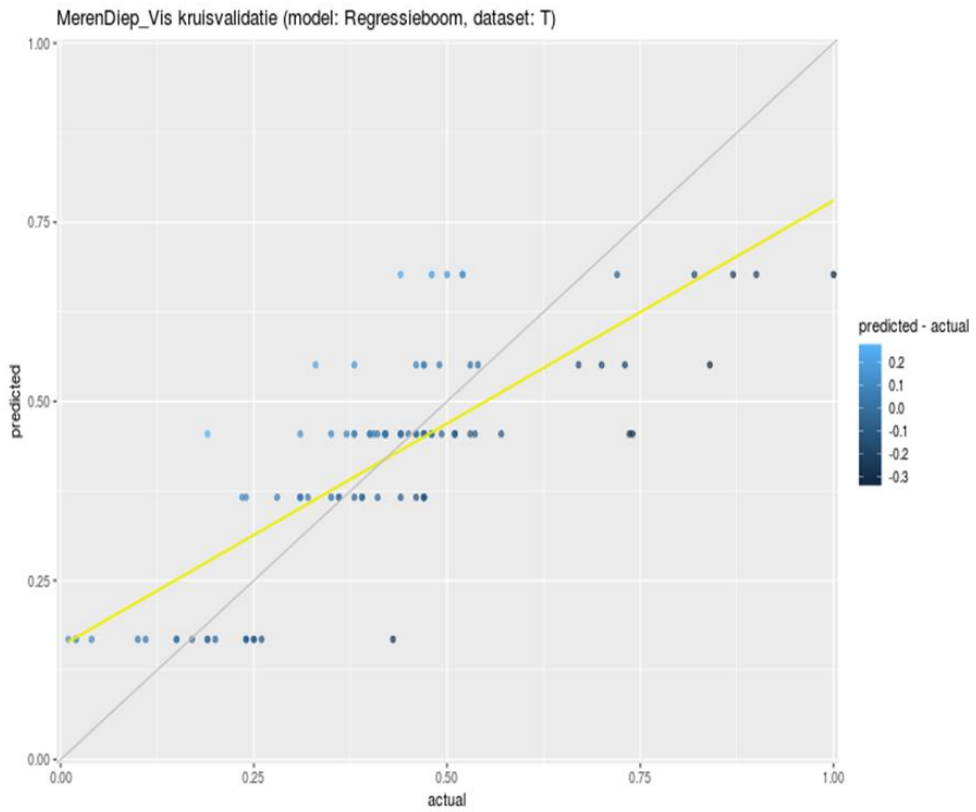
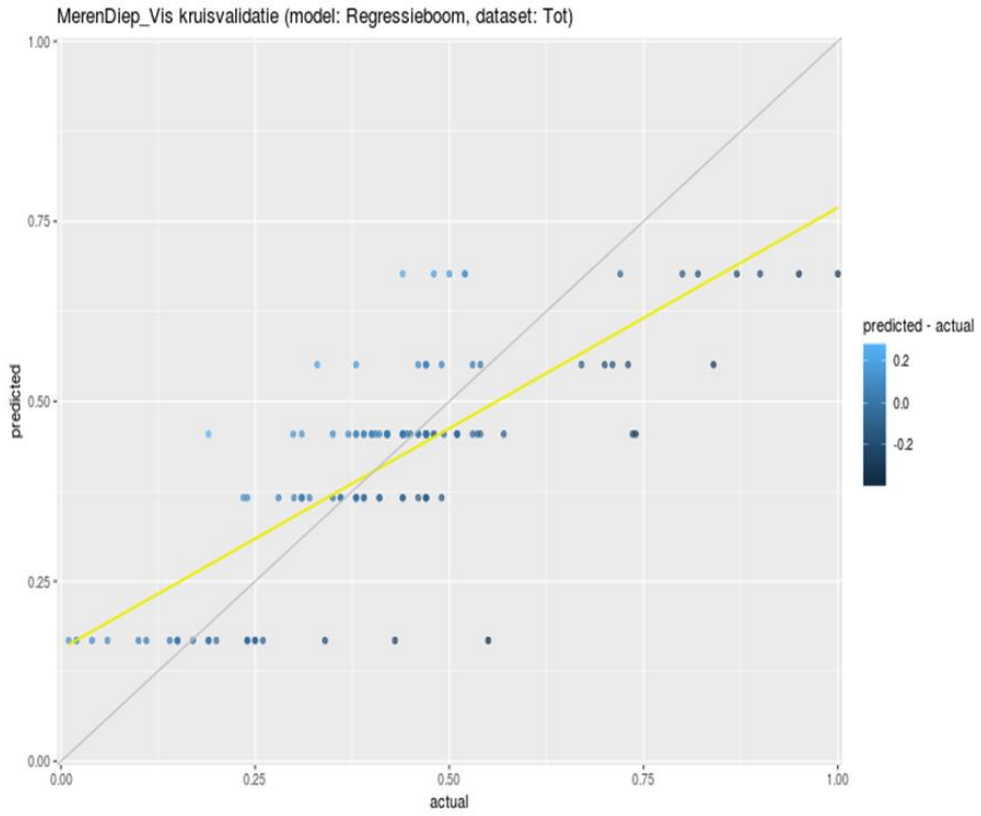


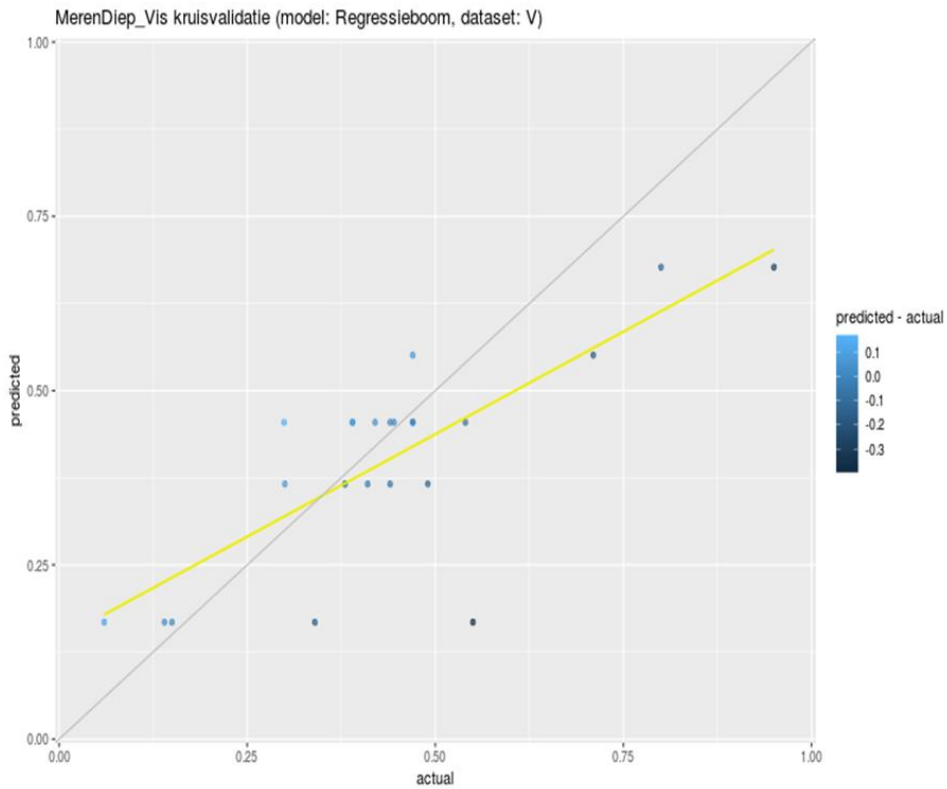




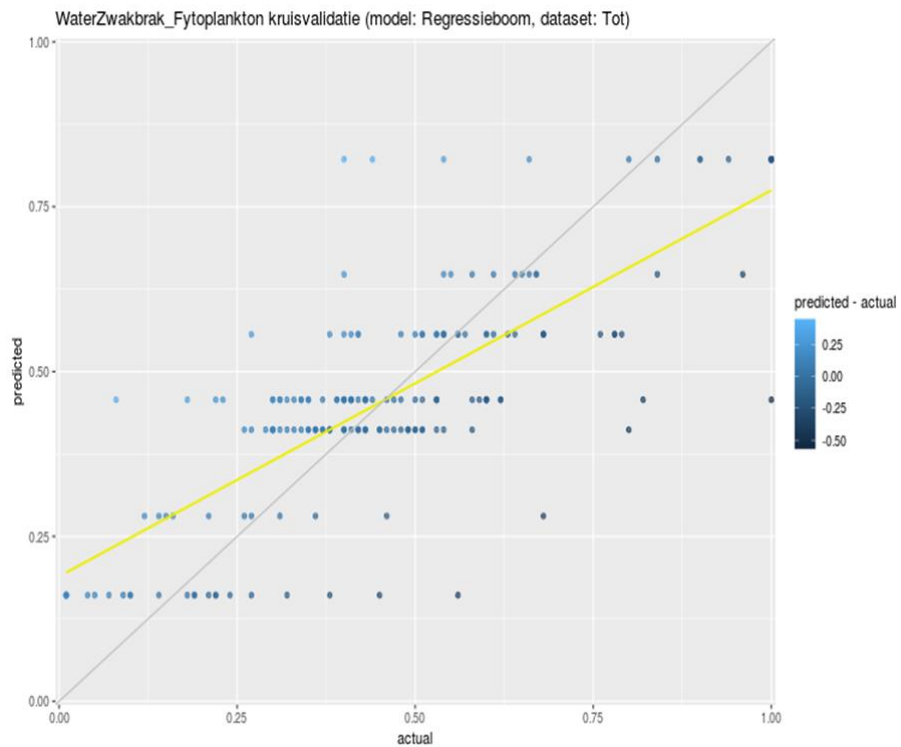
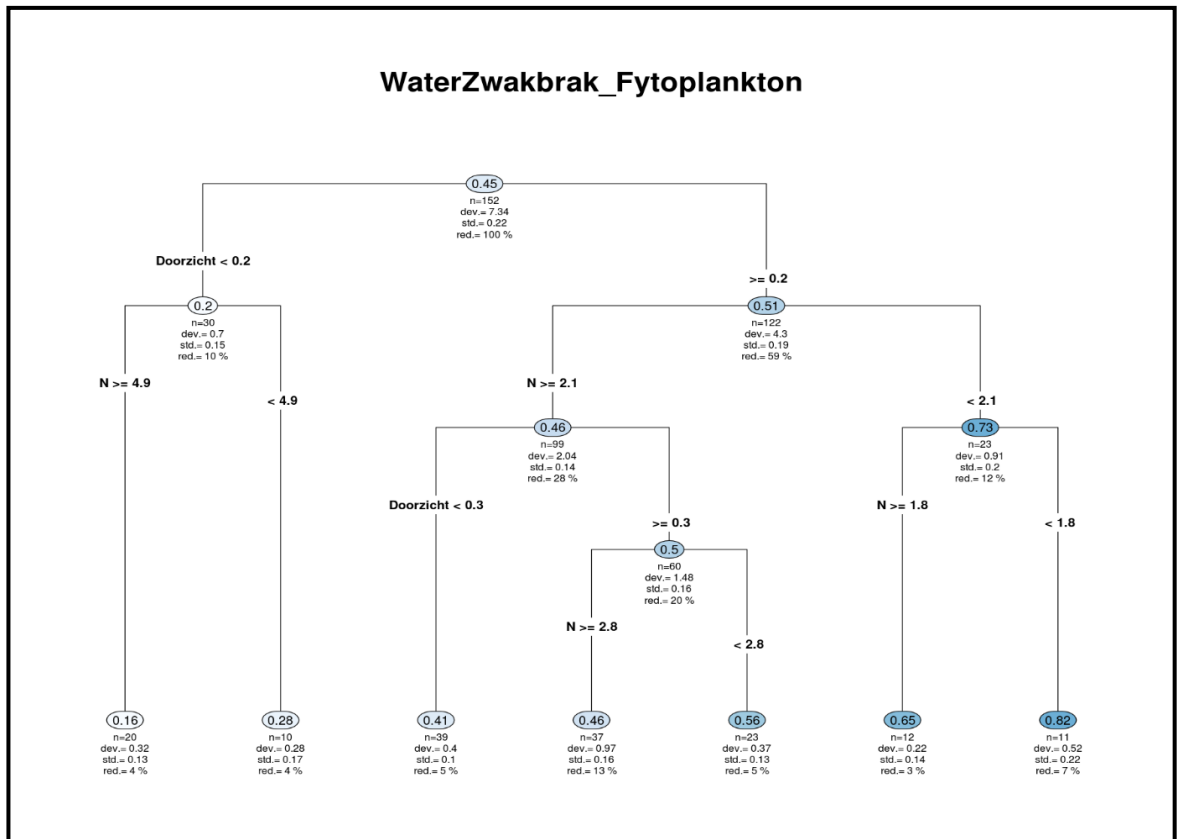


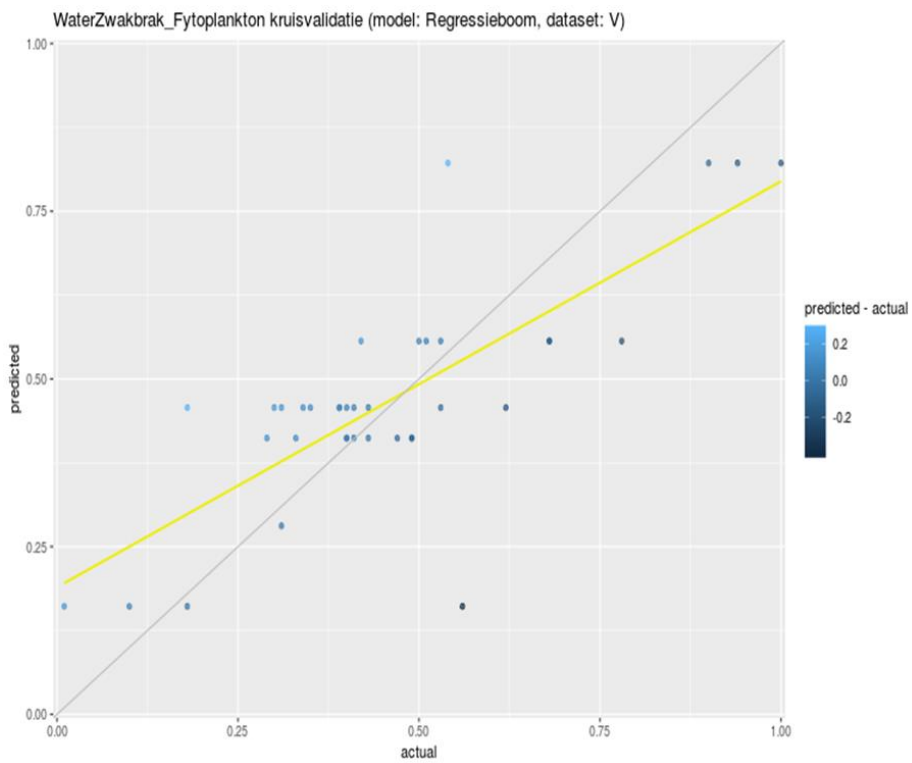
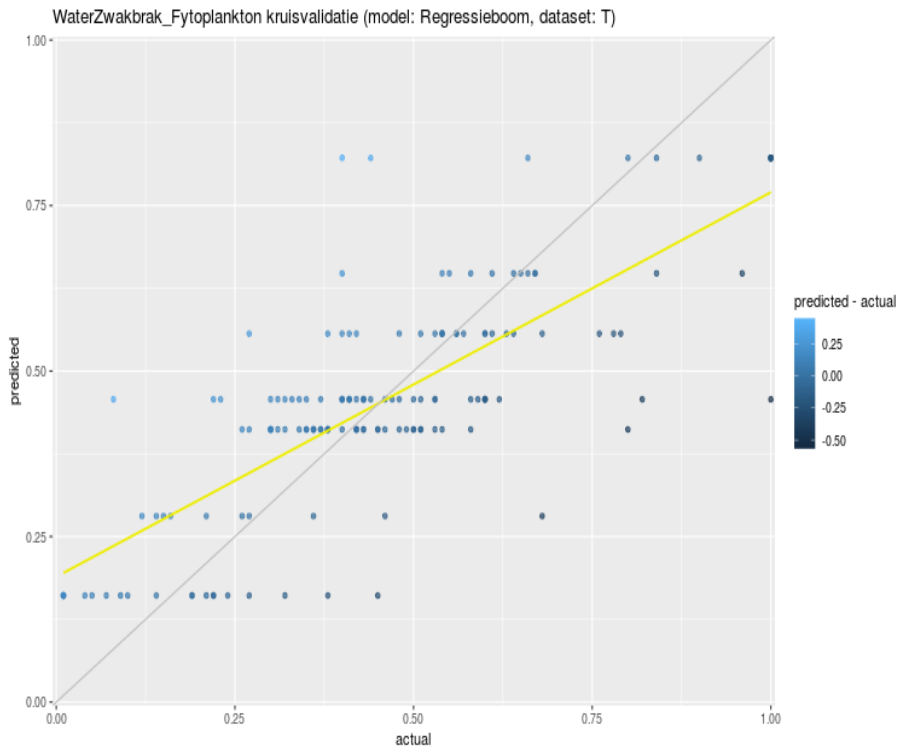




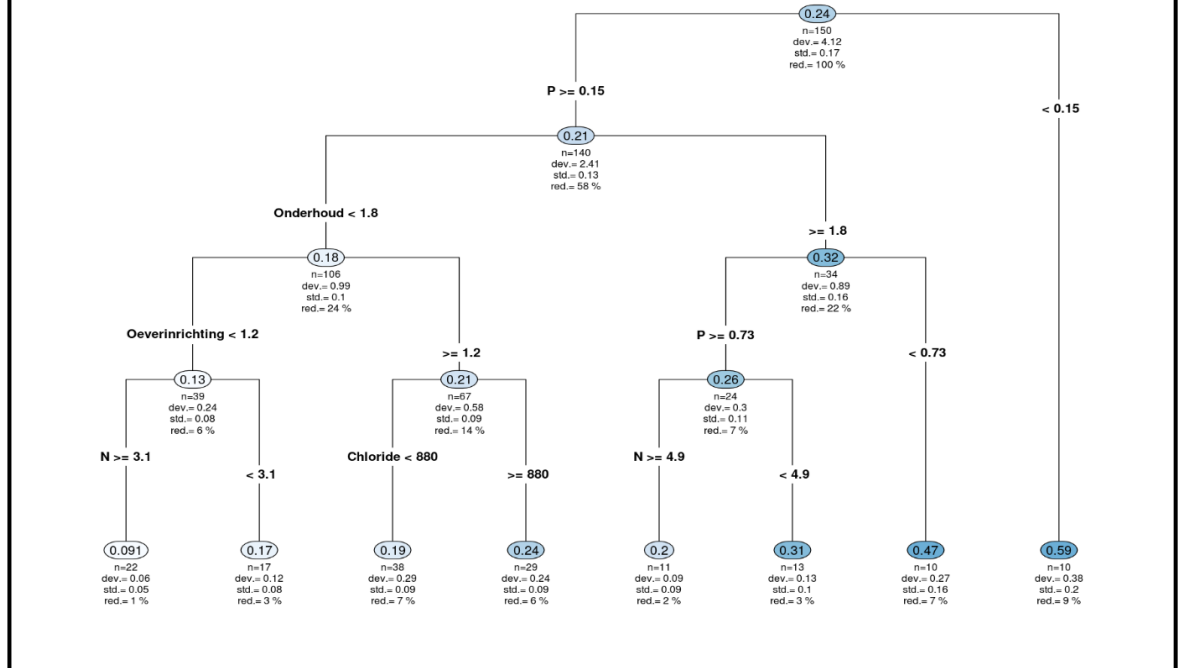


G.7 Zwak brakke wateren

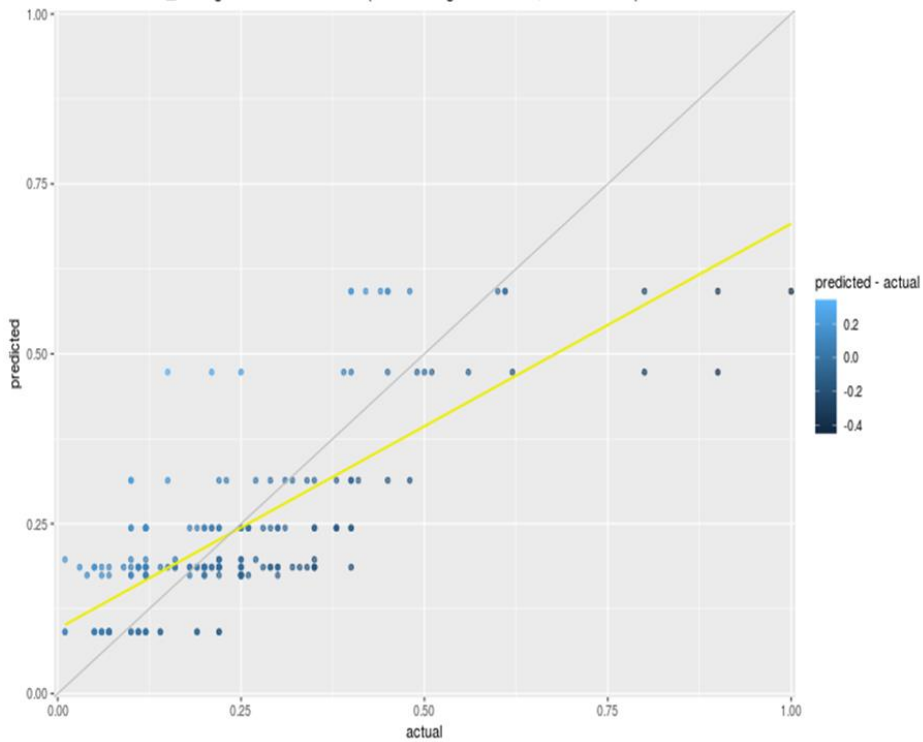


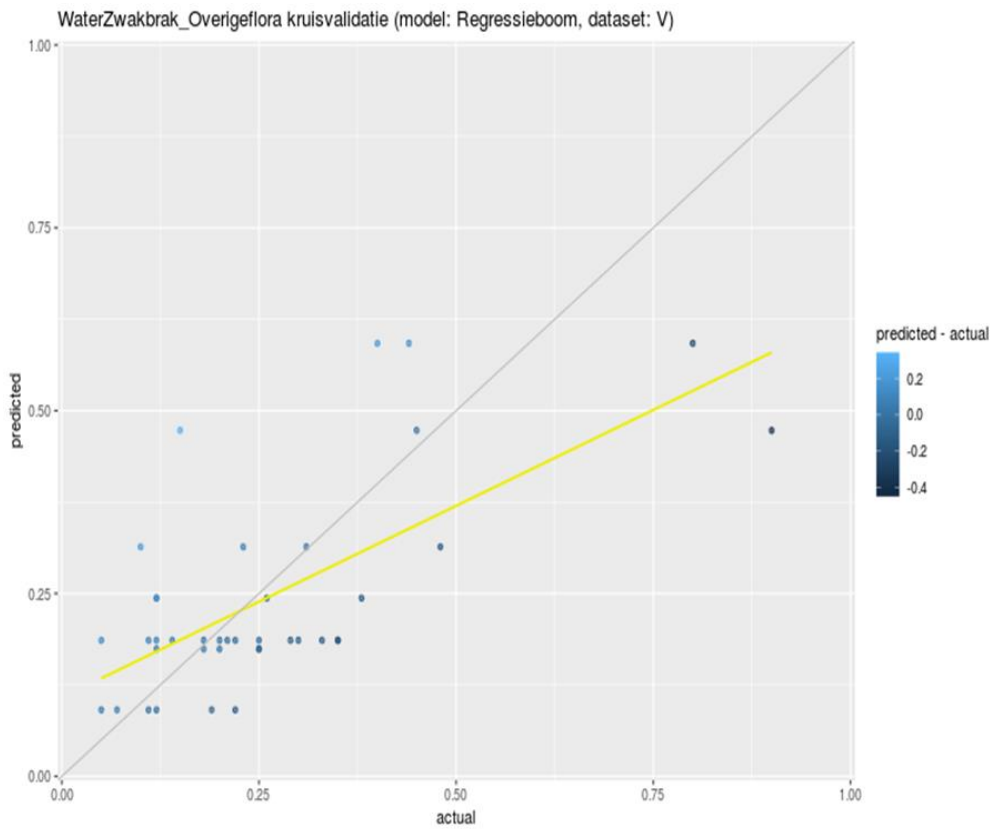
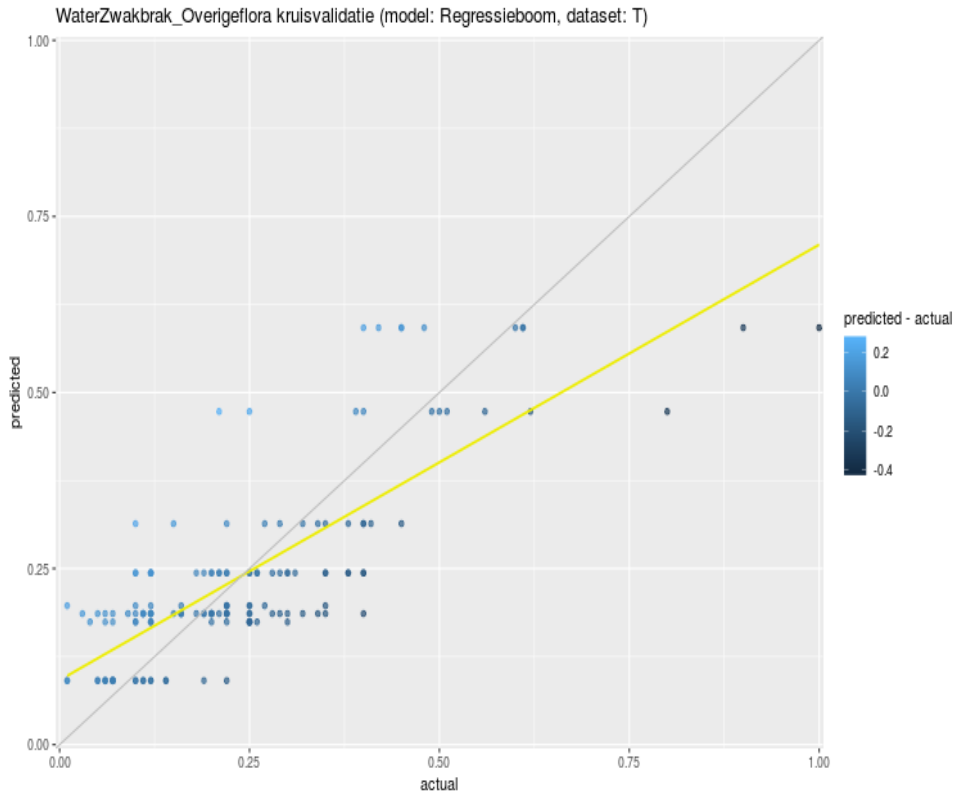


WaterZwakbrak_Overige flora

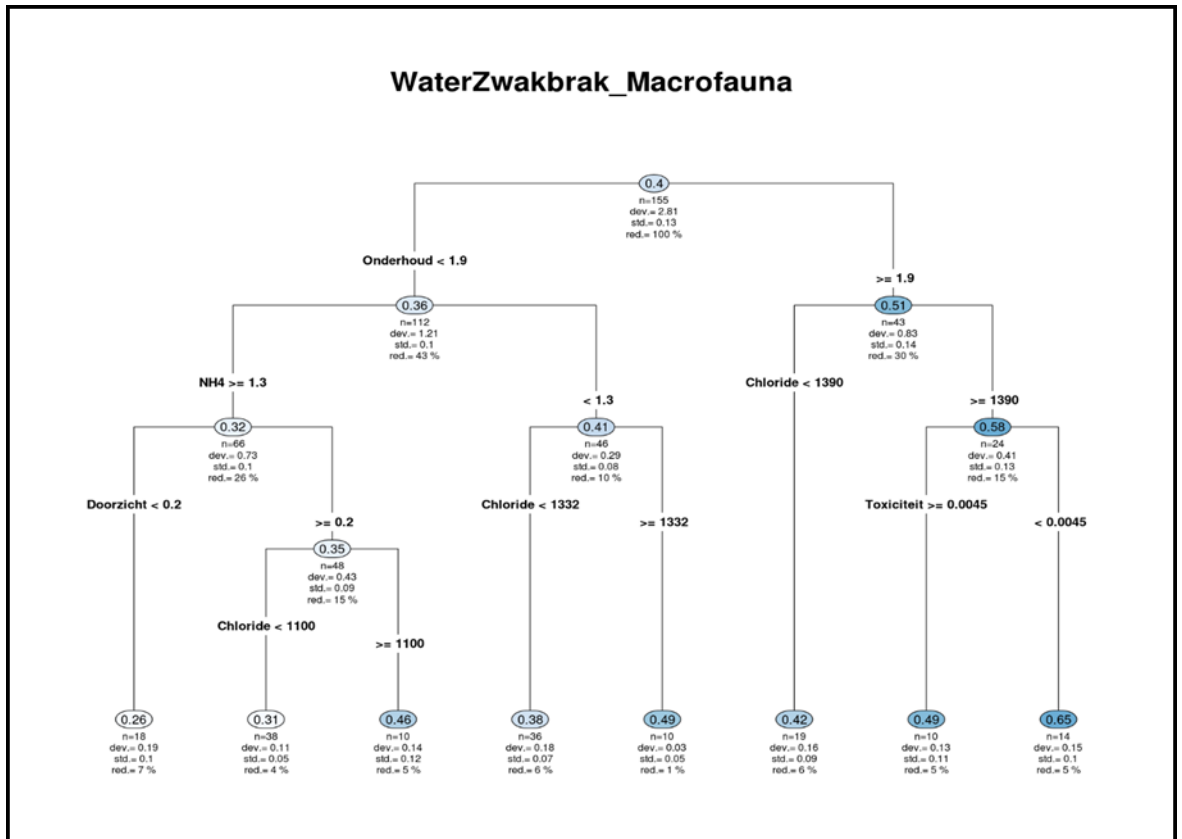


WaterZwakbrak_Overige flora kruisvalidatie (model: Regressieboom, dataset: Tot)

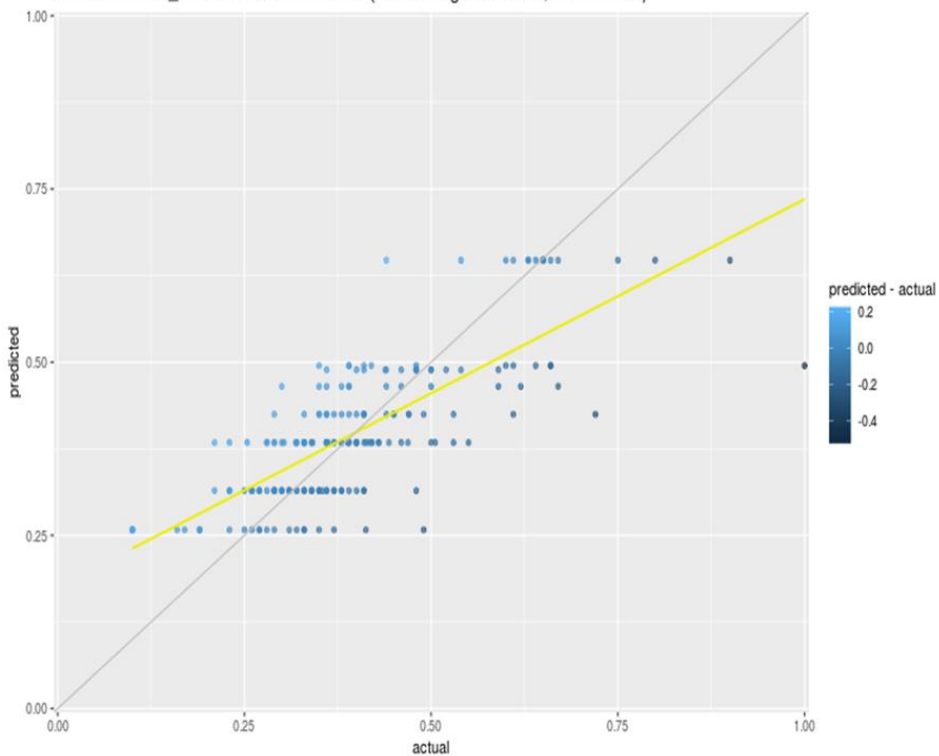


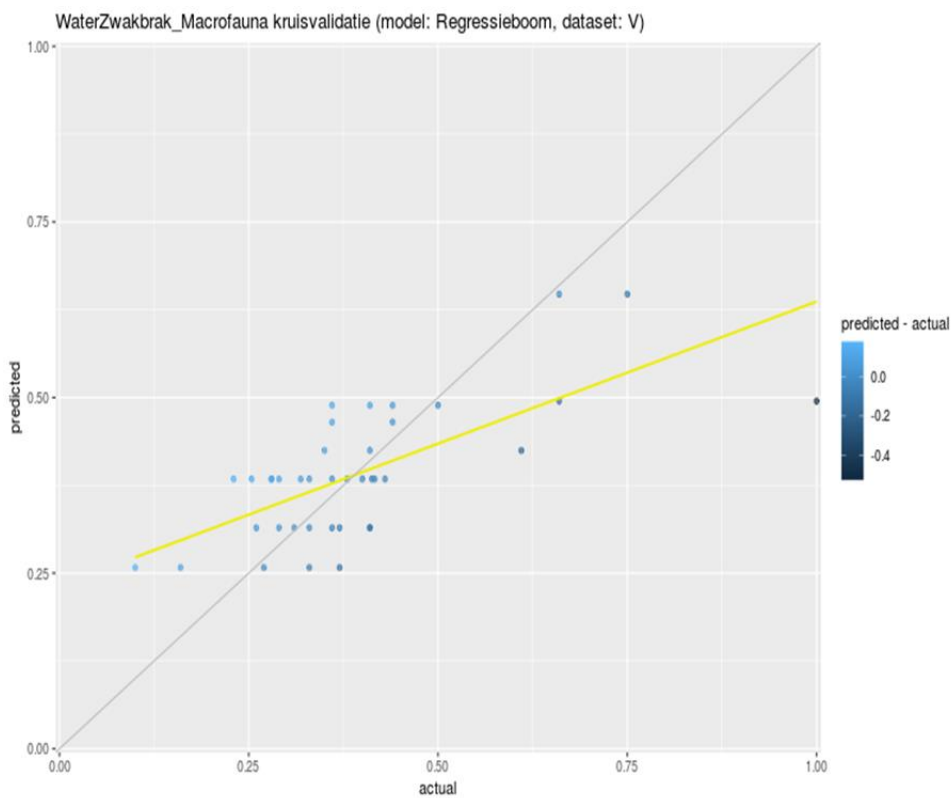
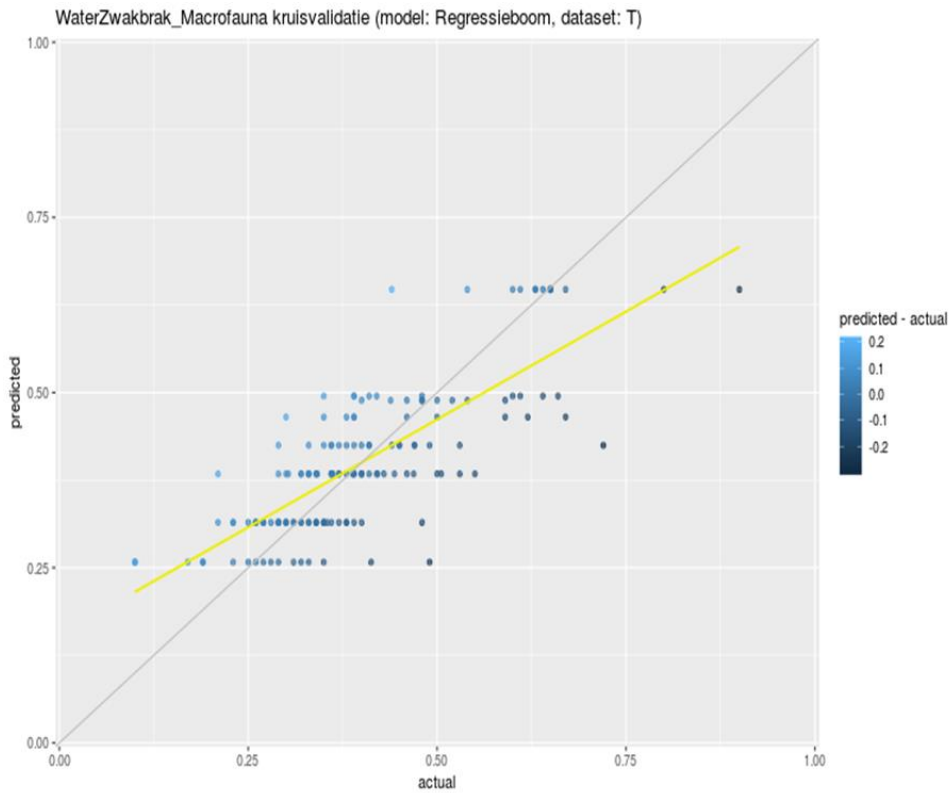


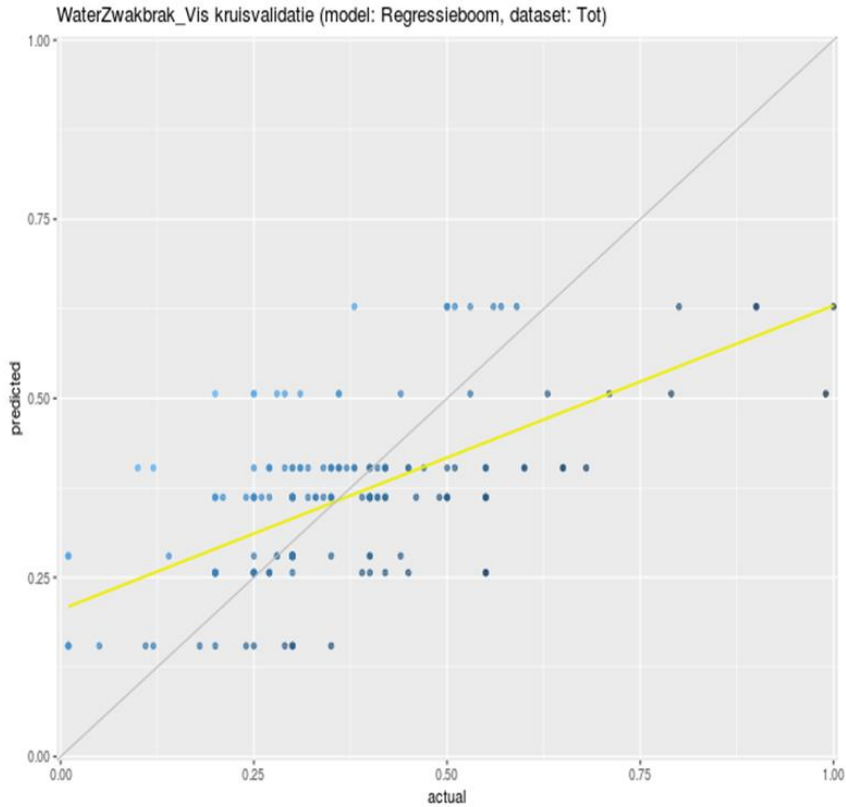
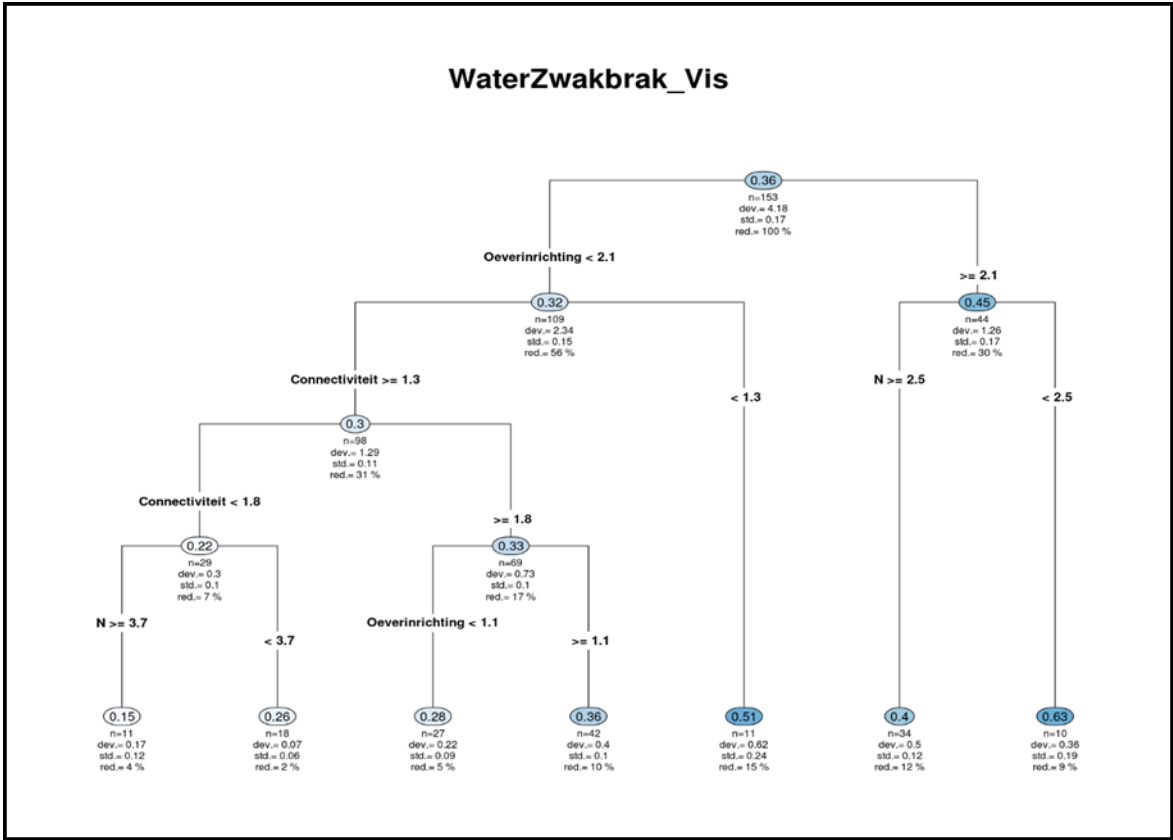
WaterZwakbrak_Macrofauna

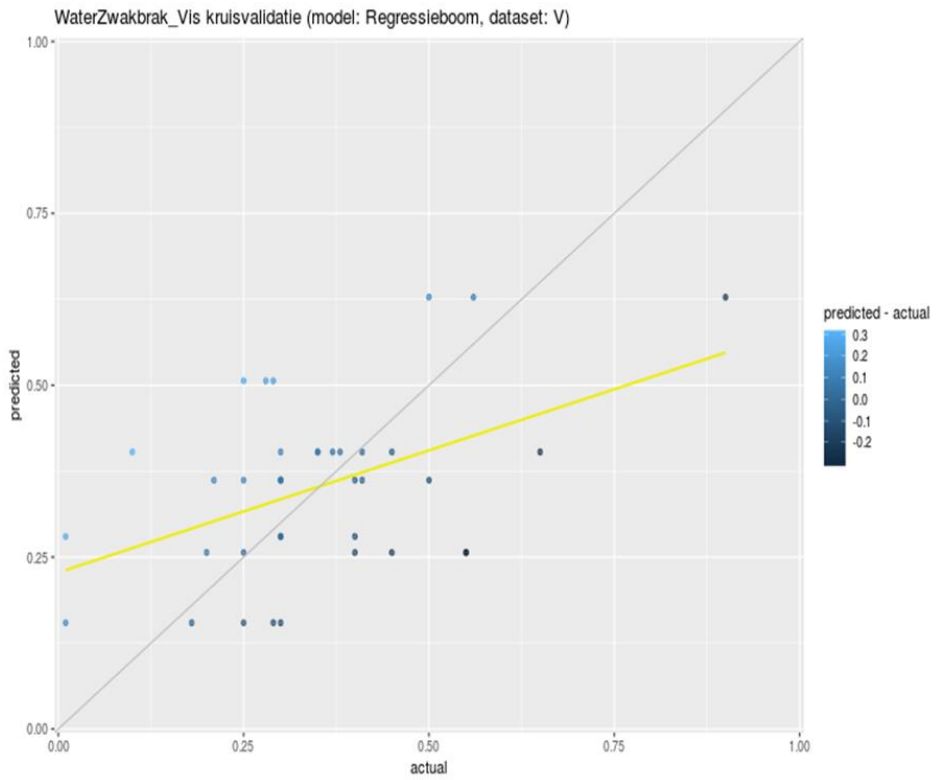
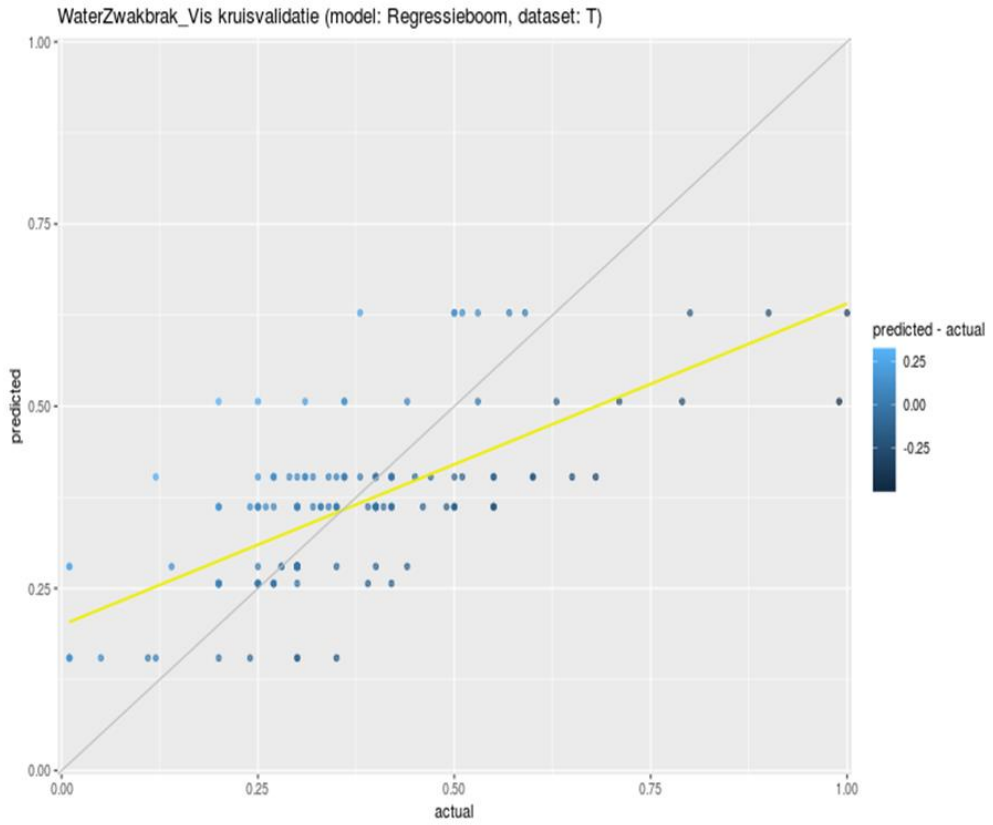


WaterZwakbrak_Macrofauna kruisvalidatie (model: Regressieboom, dataset: Tot)

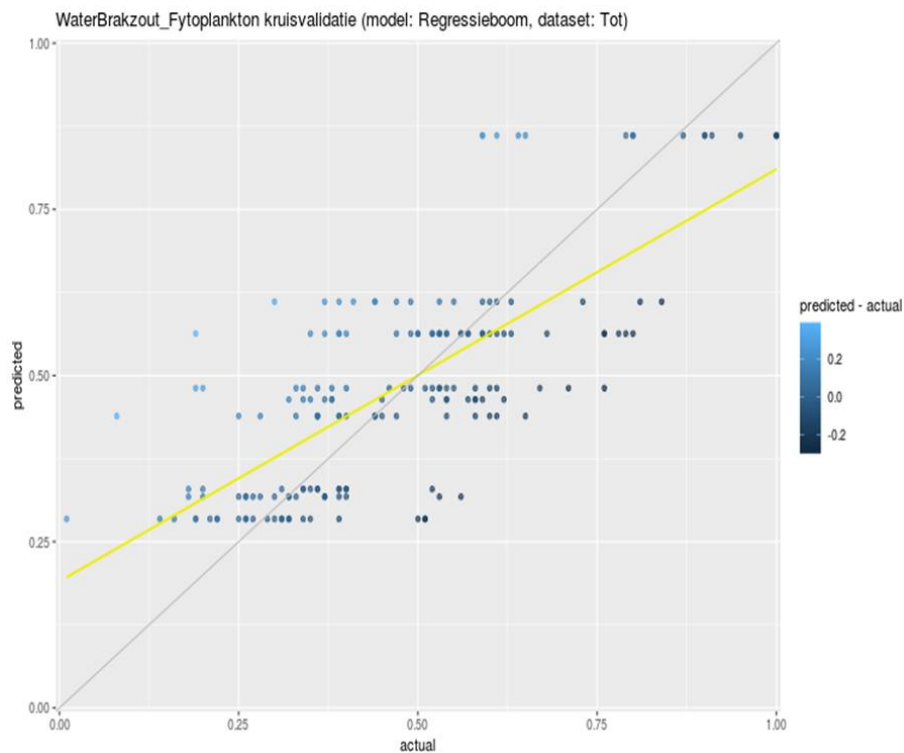
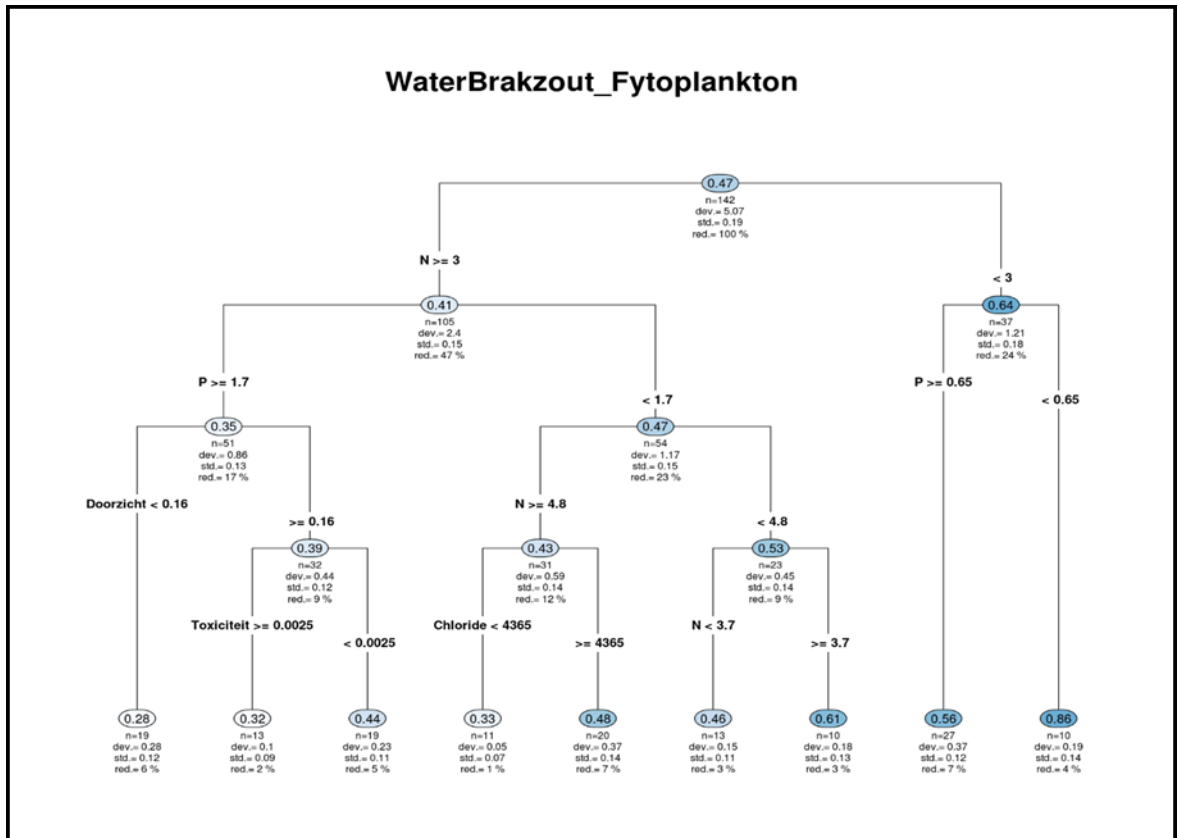


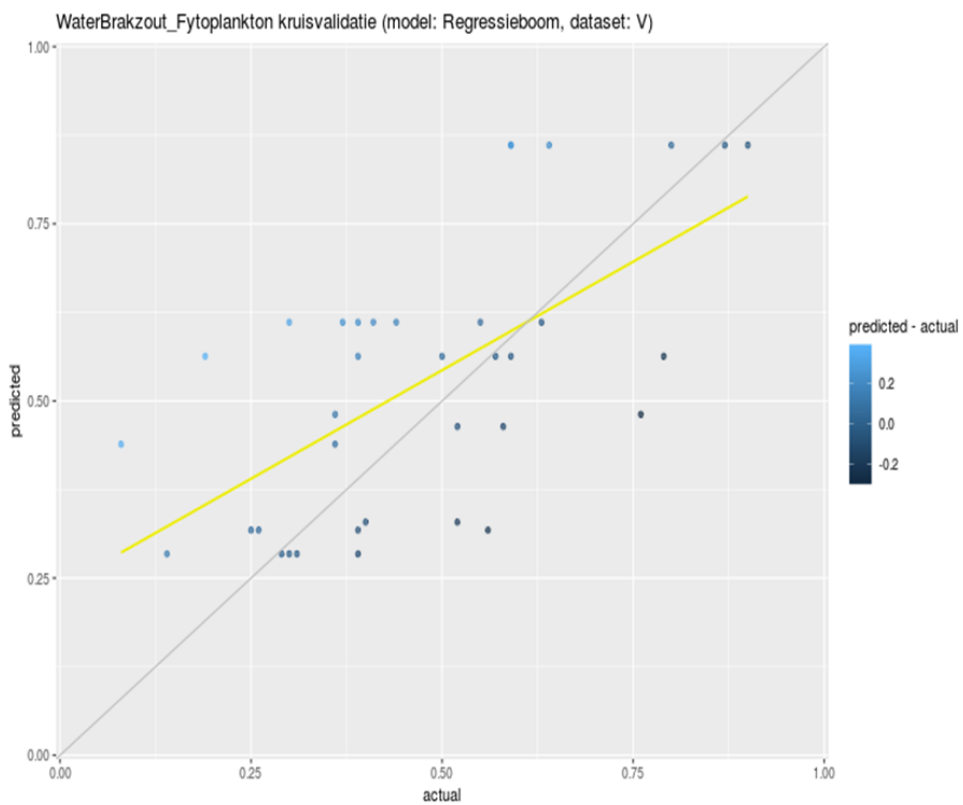
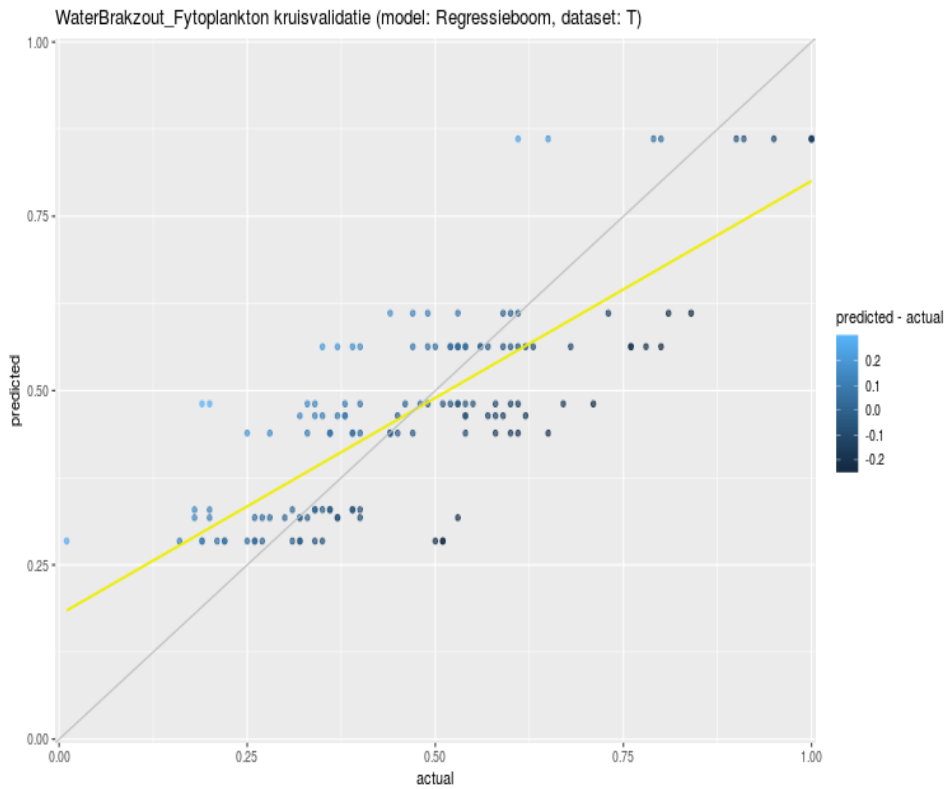




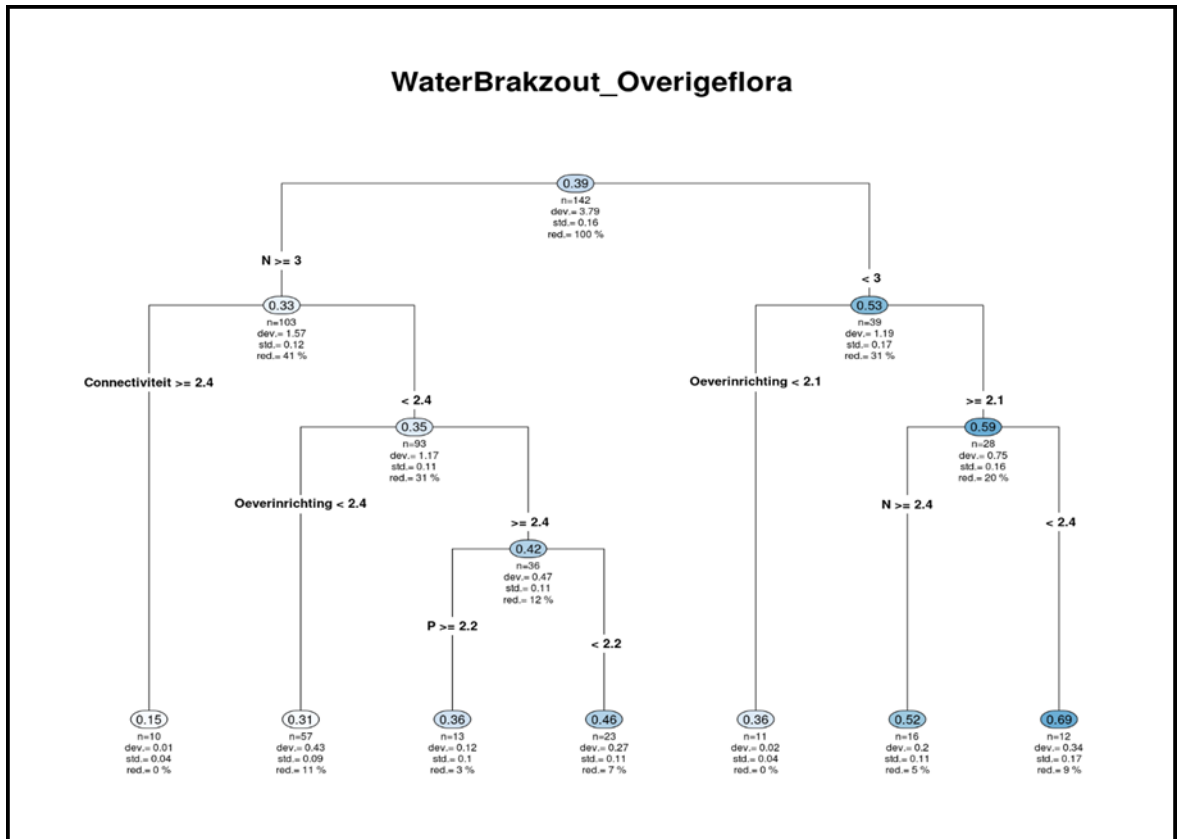


G.8 Brak tot zoute wateren

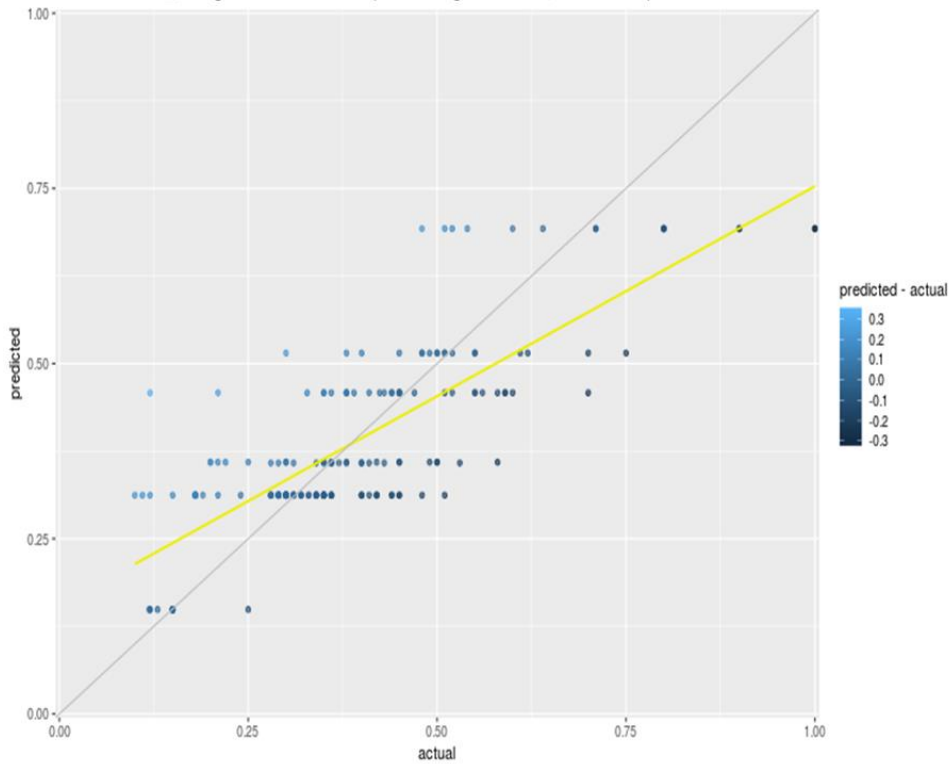


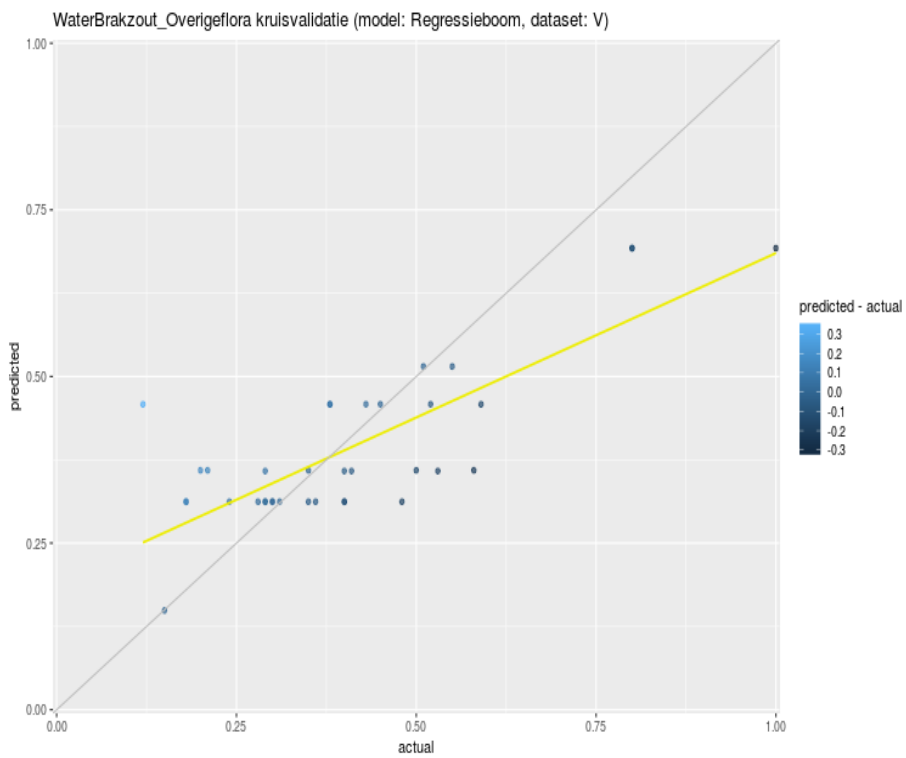
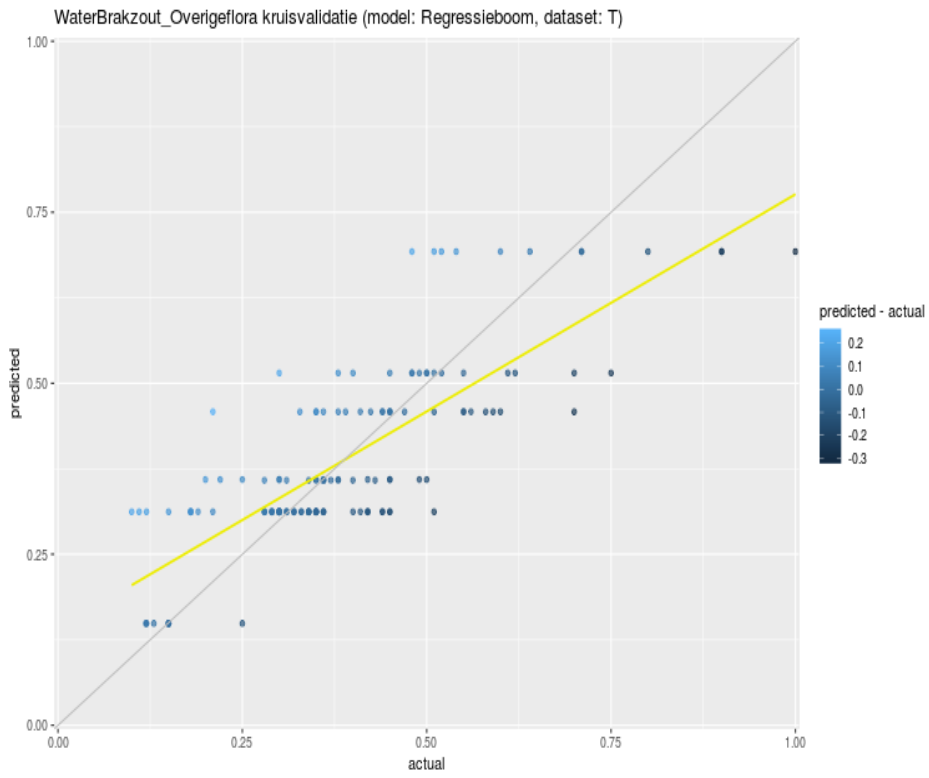


WaterBrakzout_Overige flora

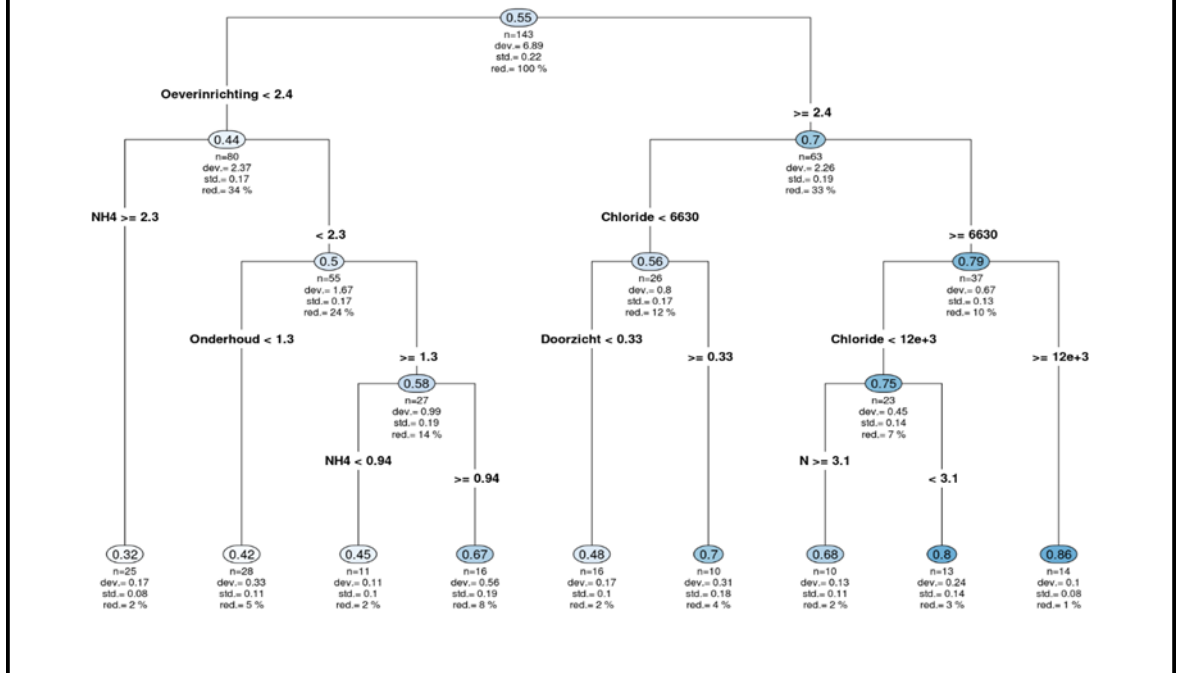


WaterBrakzout_Overige flora kruisvalidatie (model: Regressieboom, dataset: Tot)

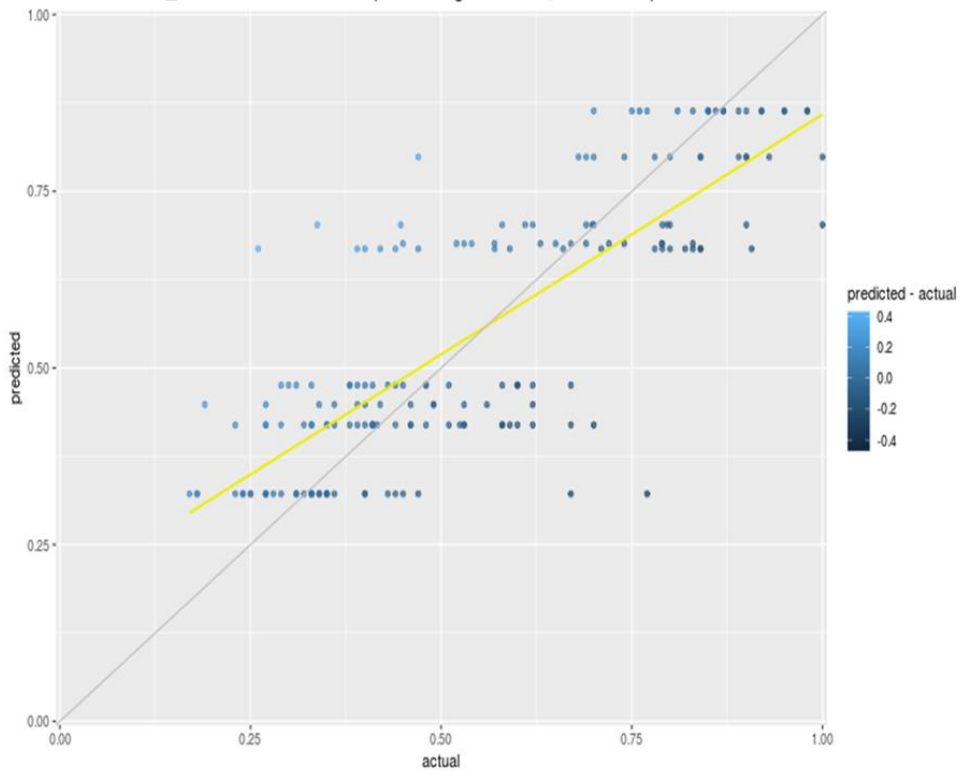


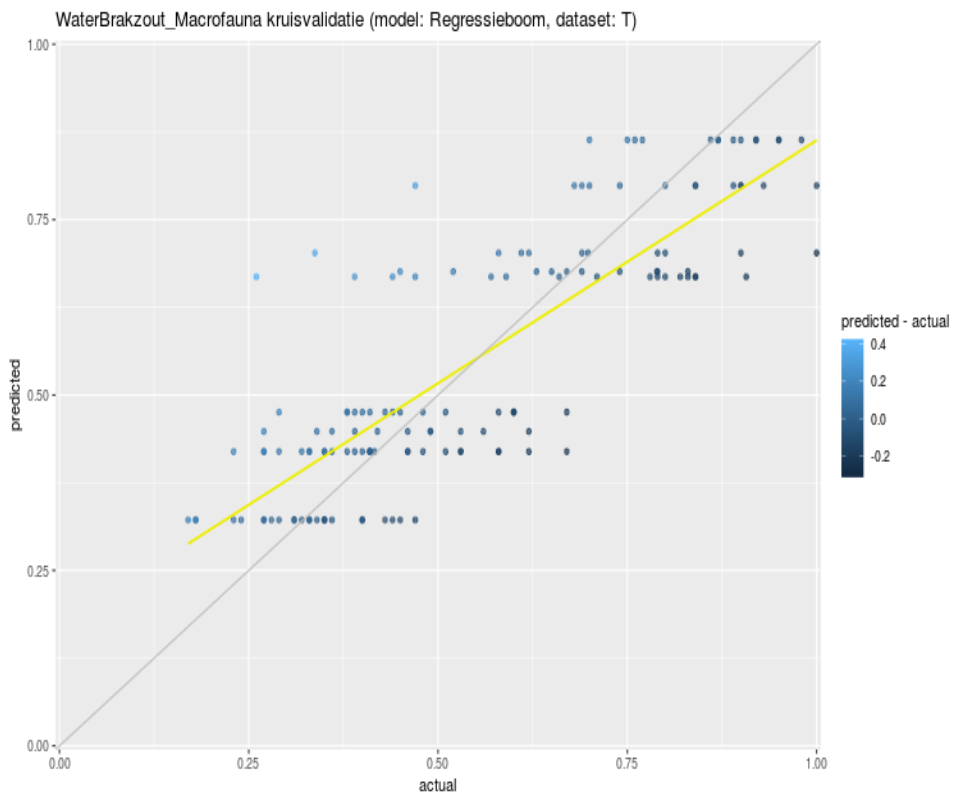
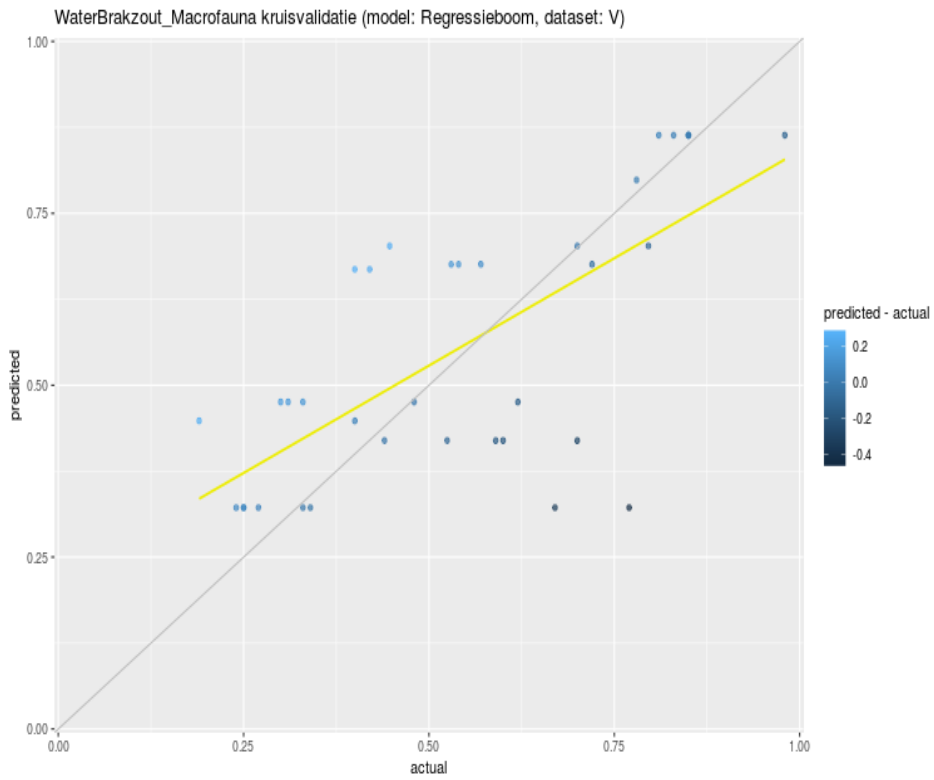


WaterBrakzout_Macrofauna

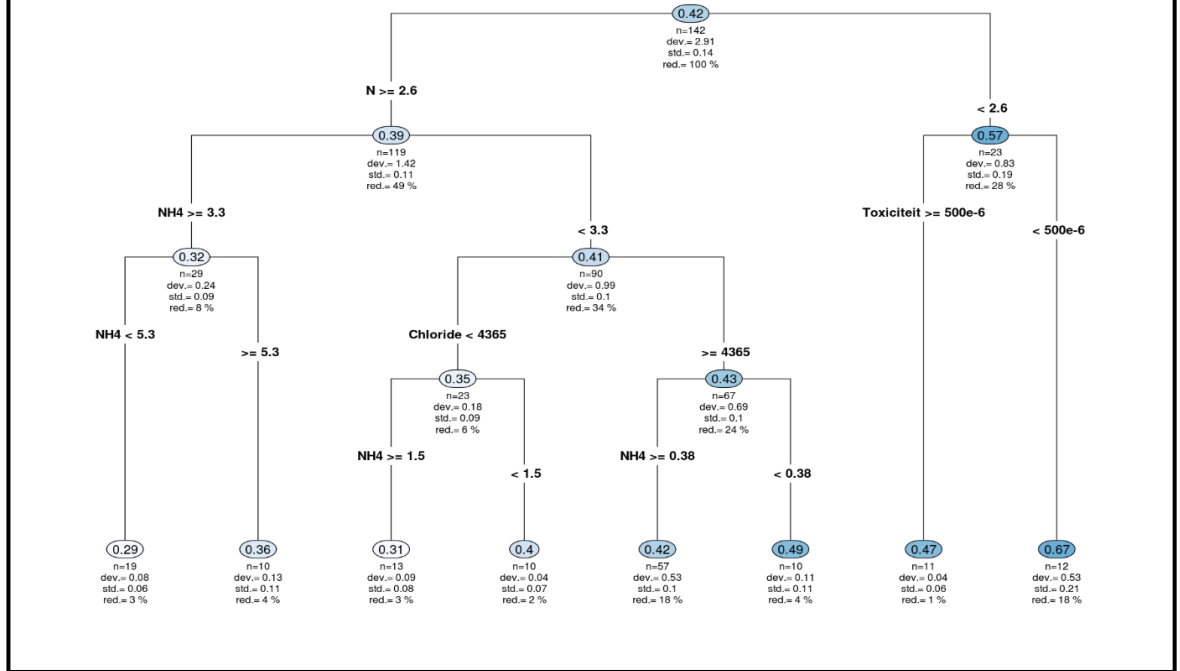


WaterBrakzout_Macrofauna kruisvalidatie (model: Regressieboom, dataset: Tot)

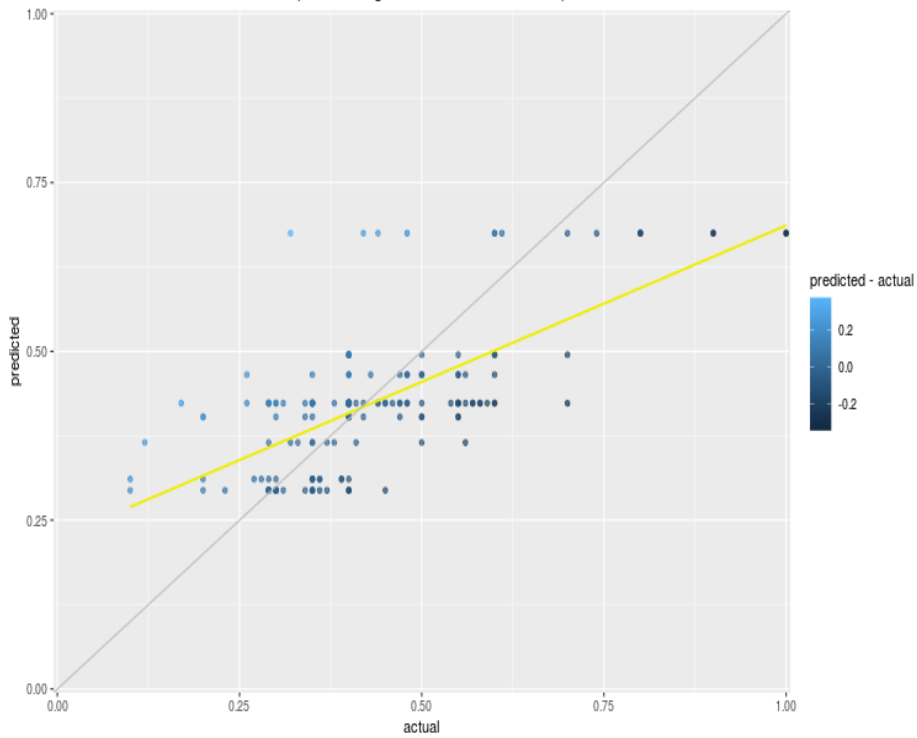


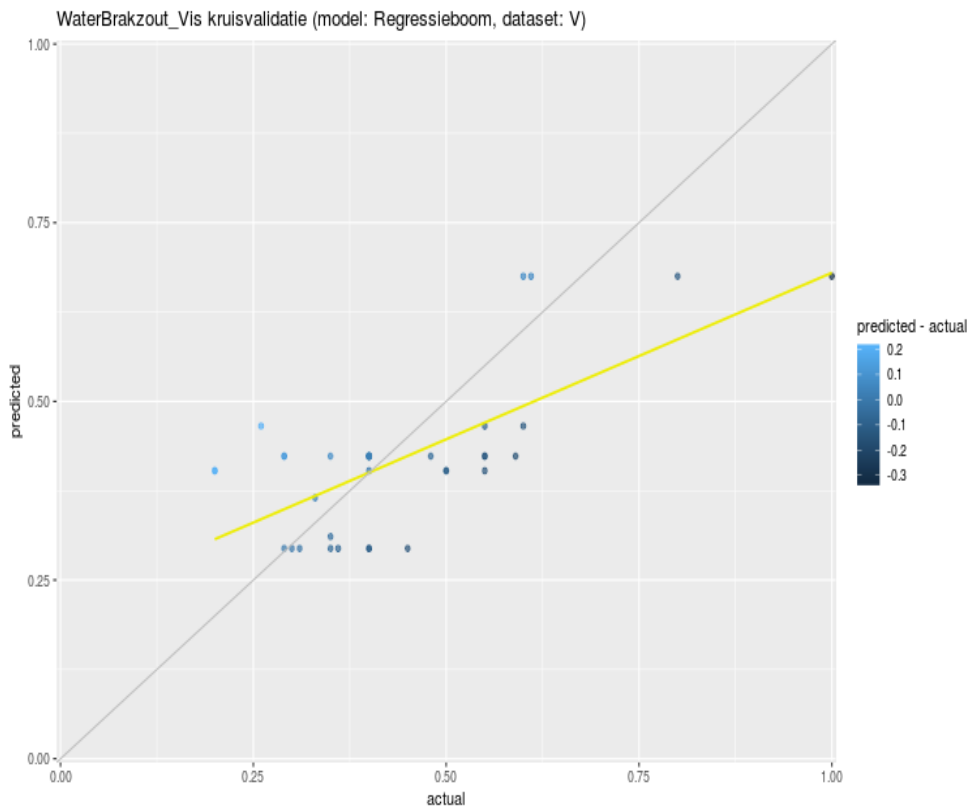
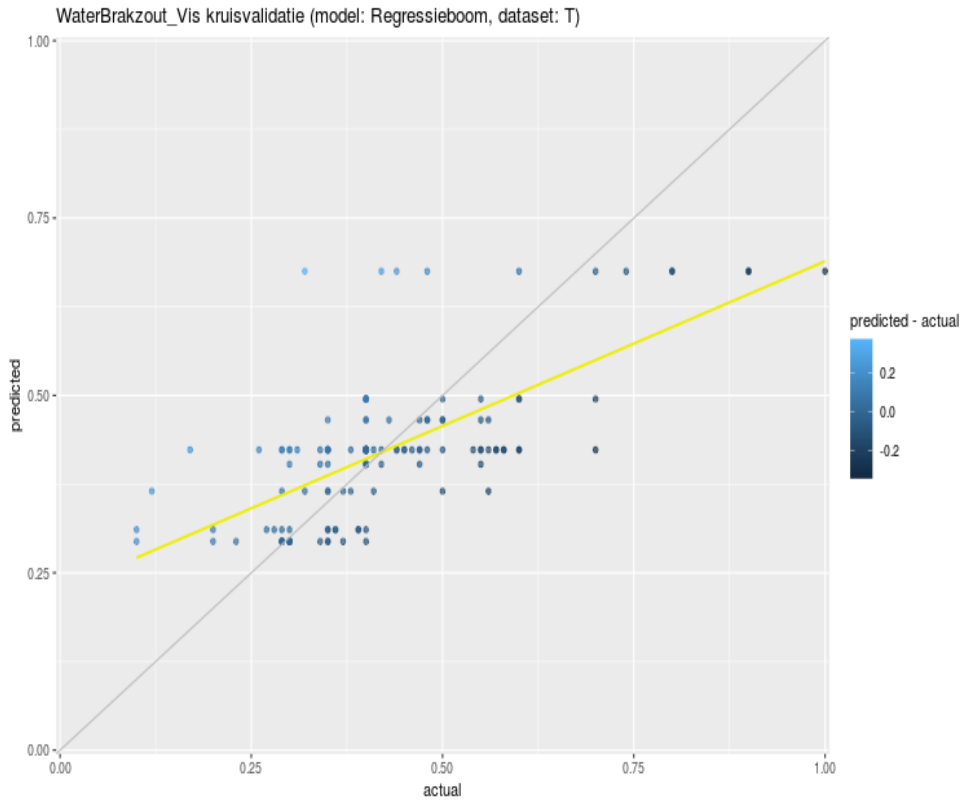


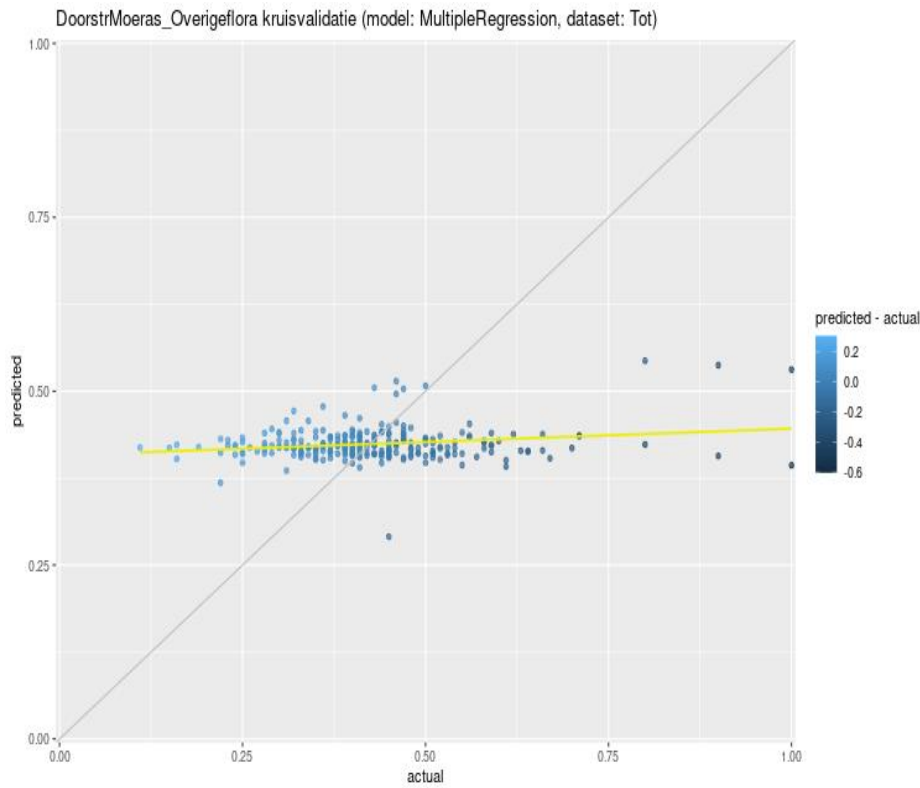
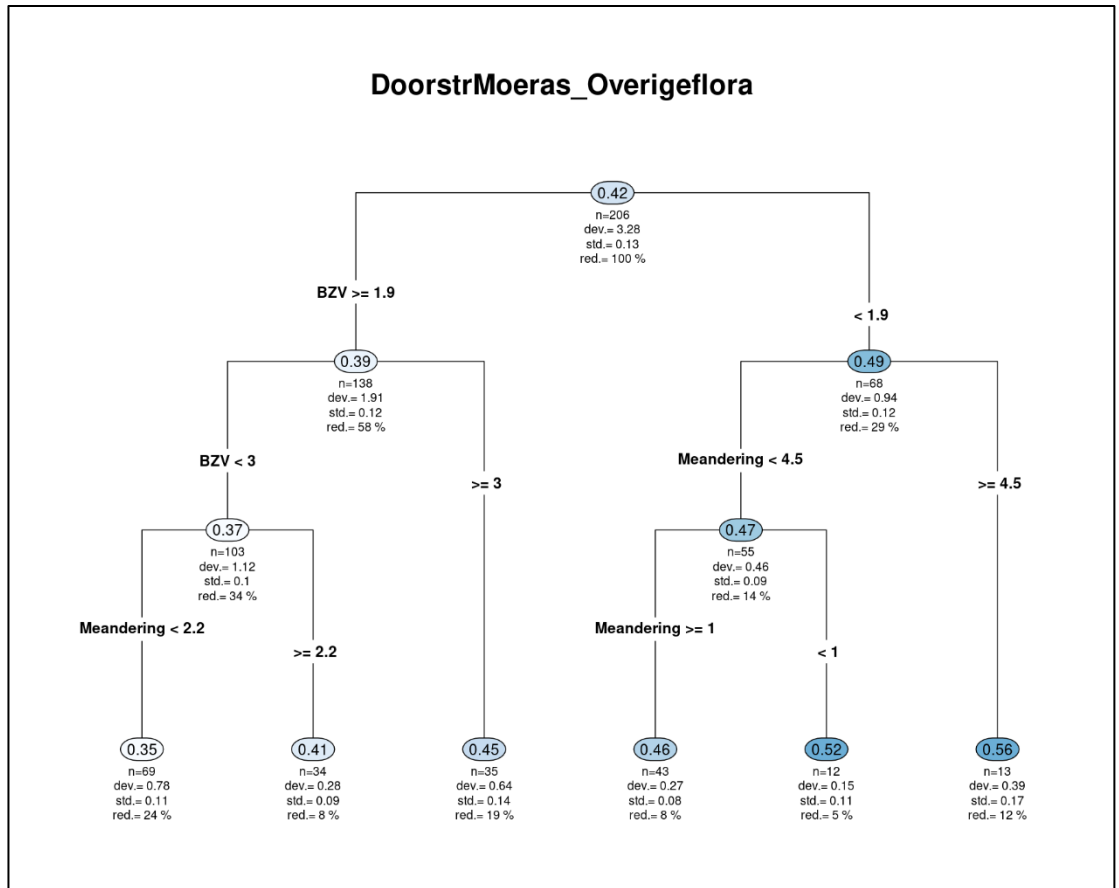
WaterBrakzout_Vis

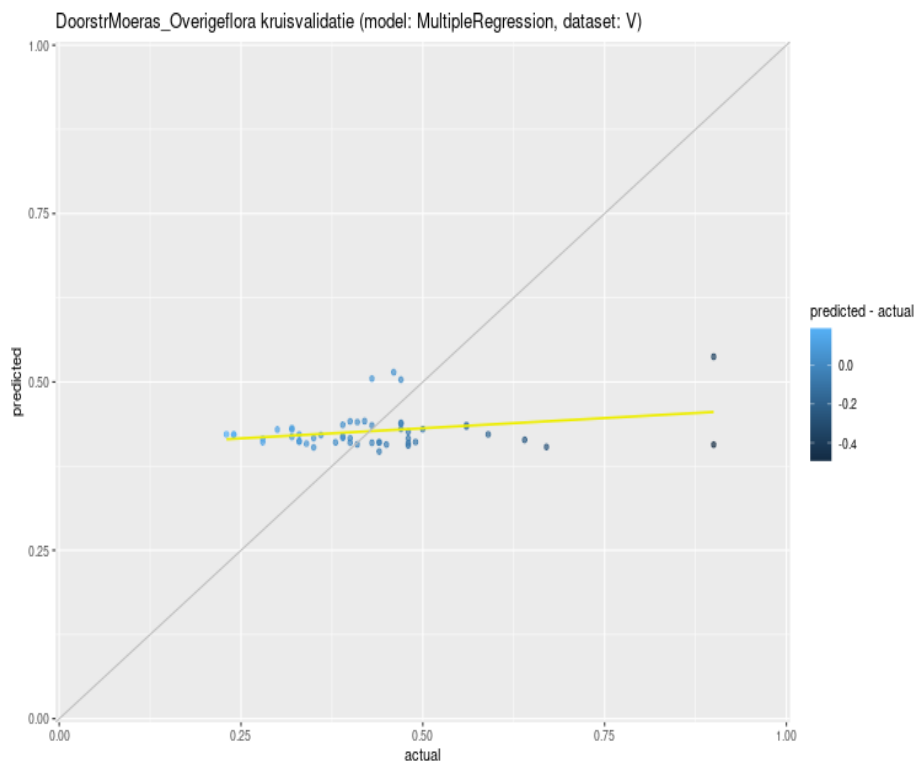
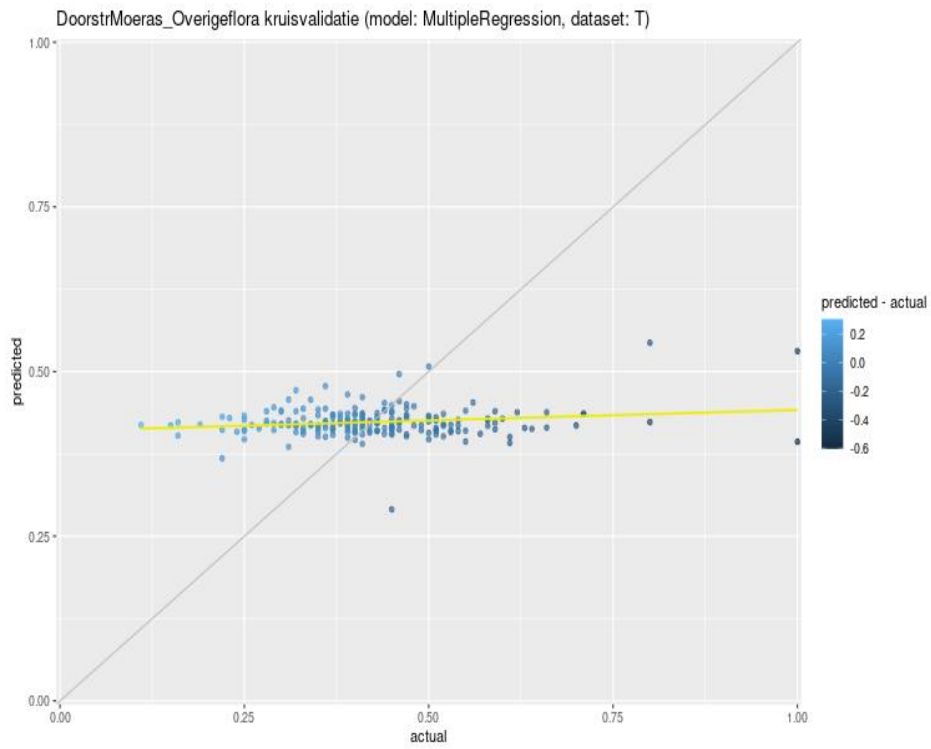


WaterBrakzout_Vis kruisvalidatie (model: Regressieboom, dataset: Tot)

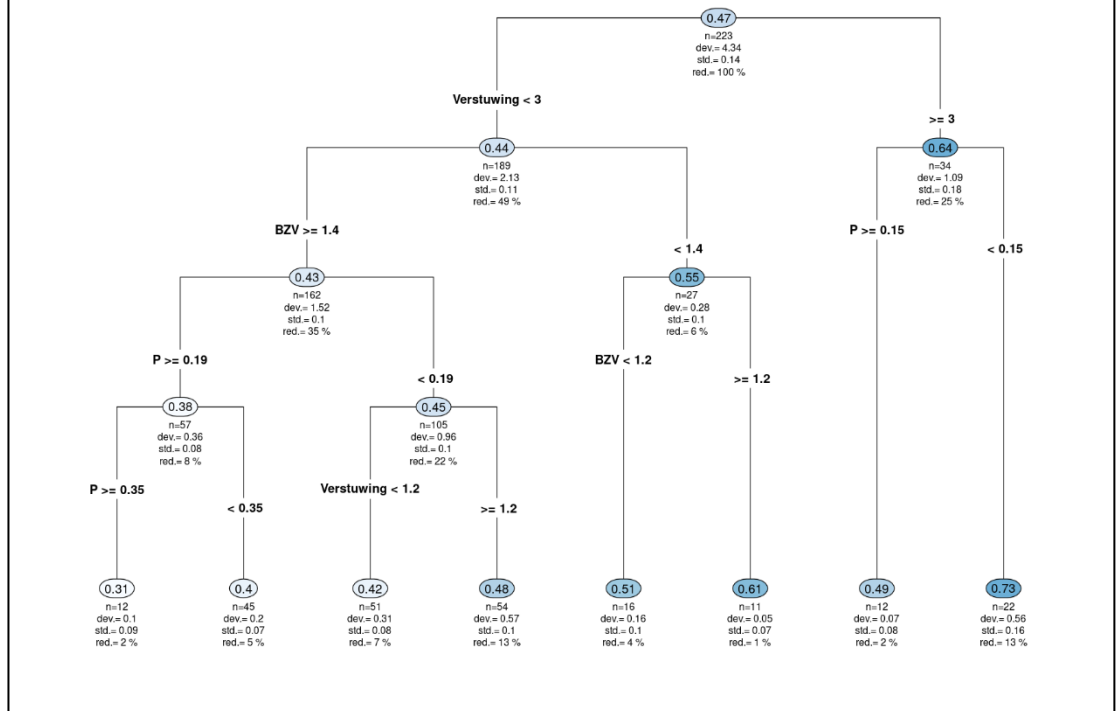




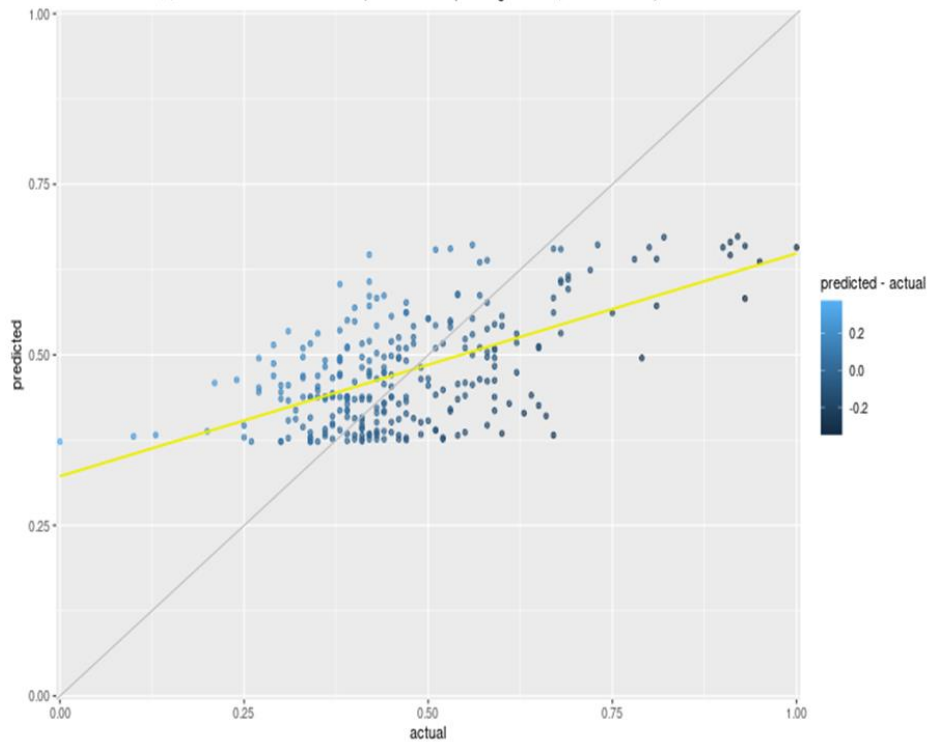


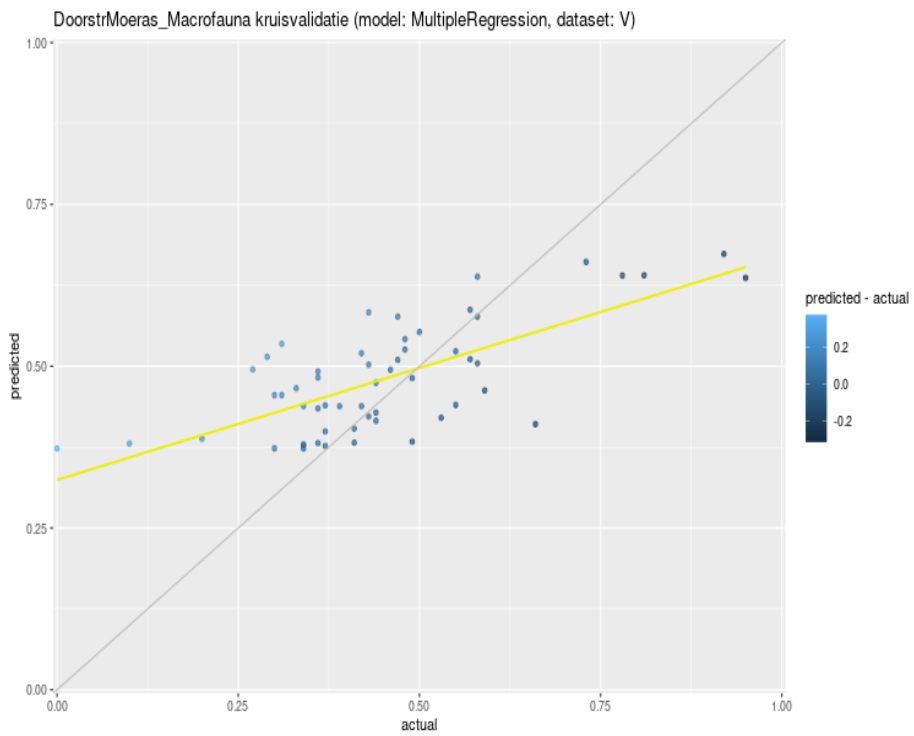
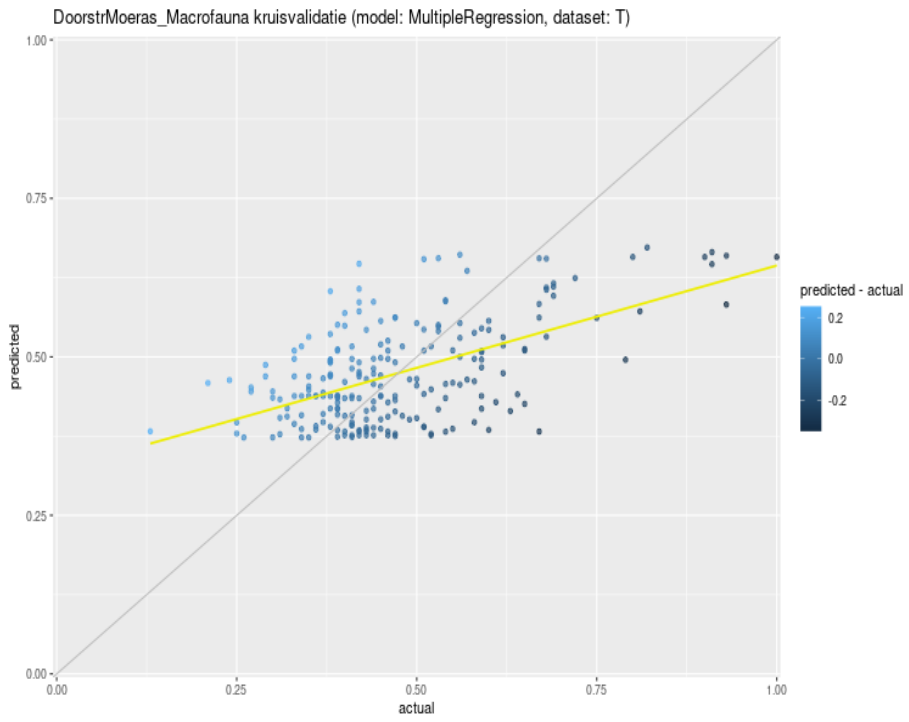


DoorstrMoeras_Macrofauna

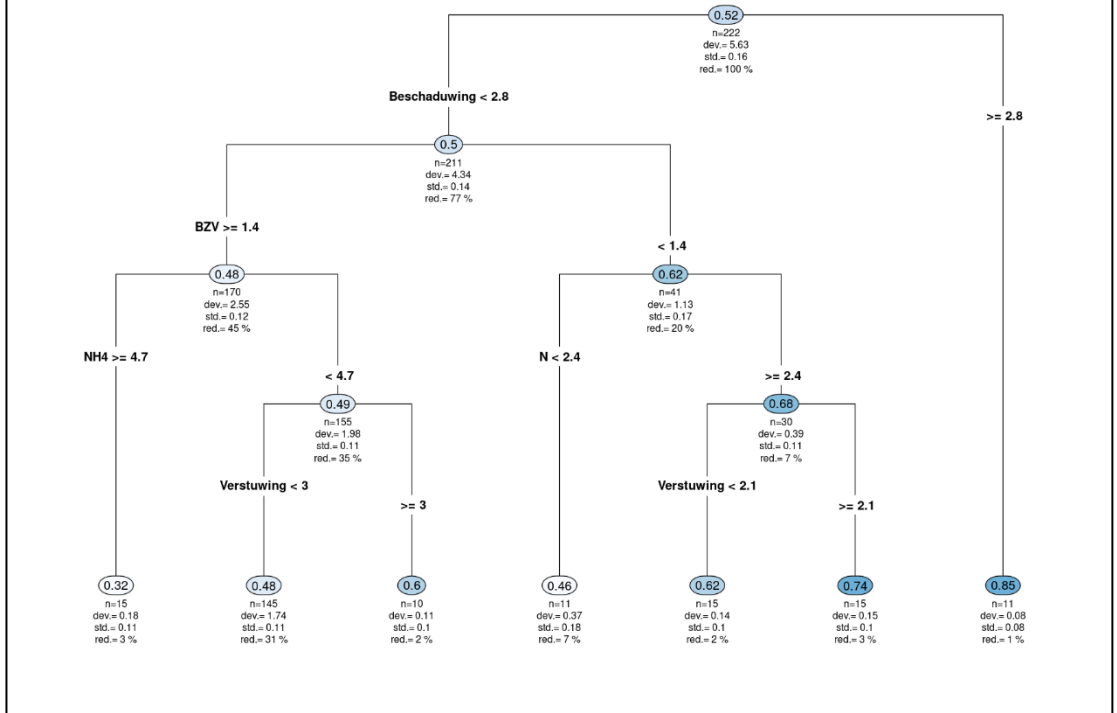


DoorstrMoeras_Macrofauna kruisvalidatie (model: MultipleRegression, dataset: Tot)

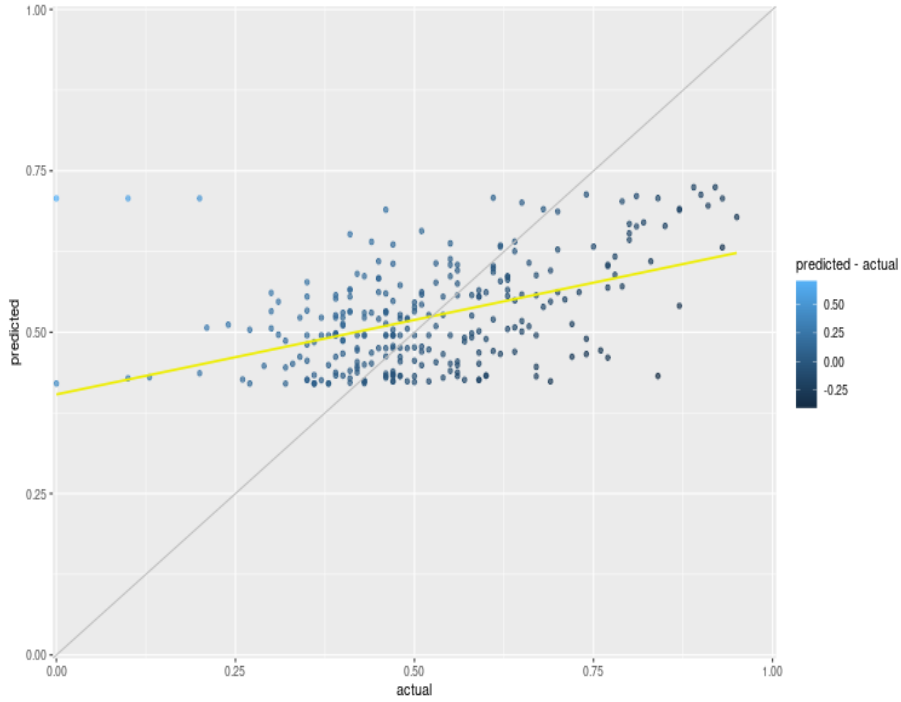


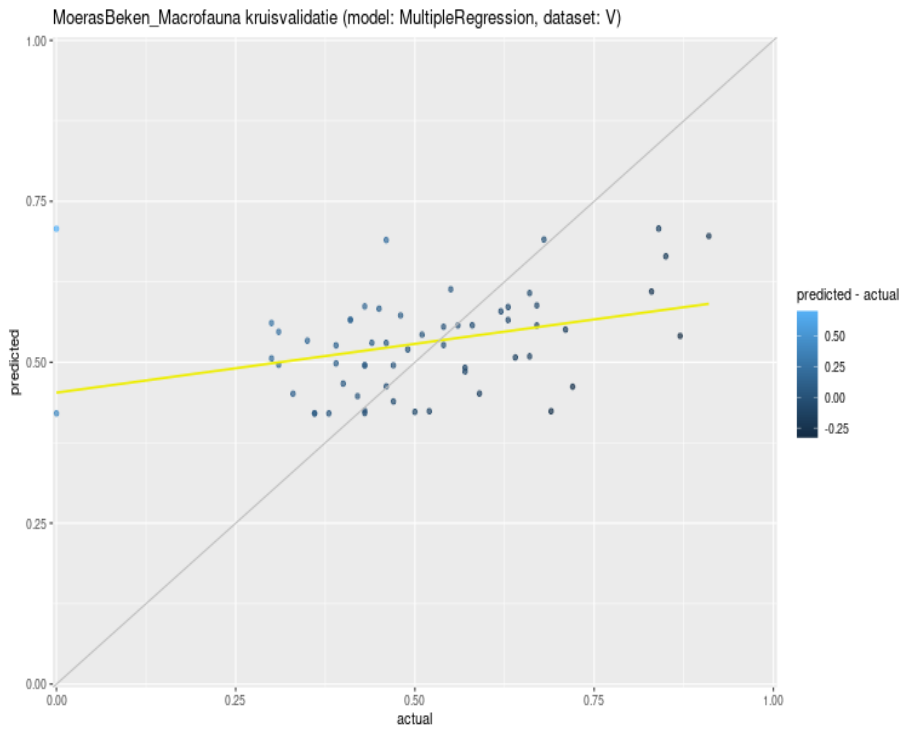
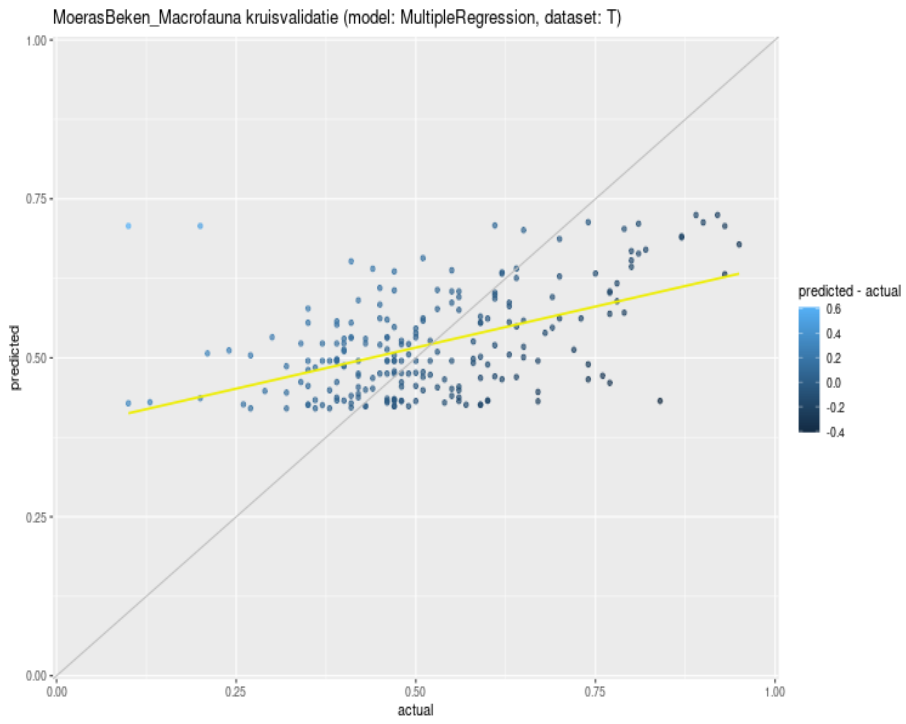


MoerasBeken_Macrofauna

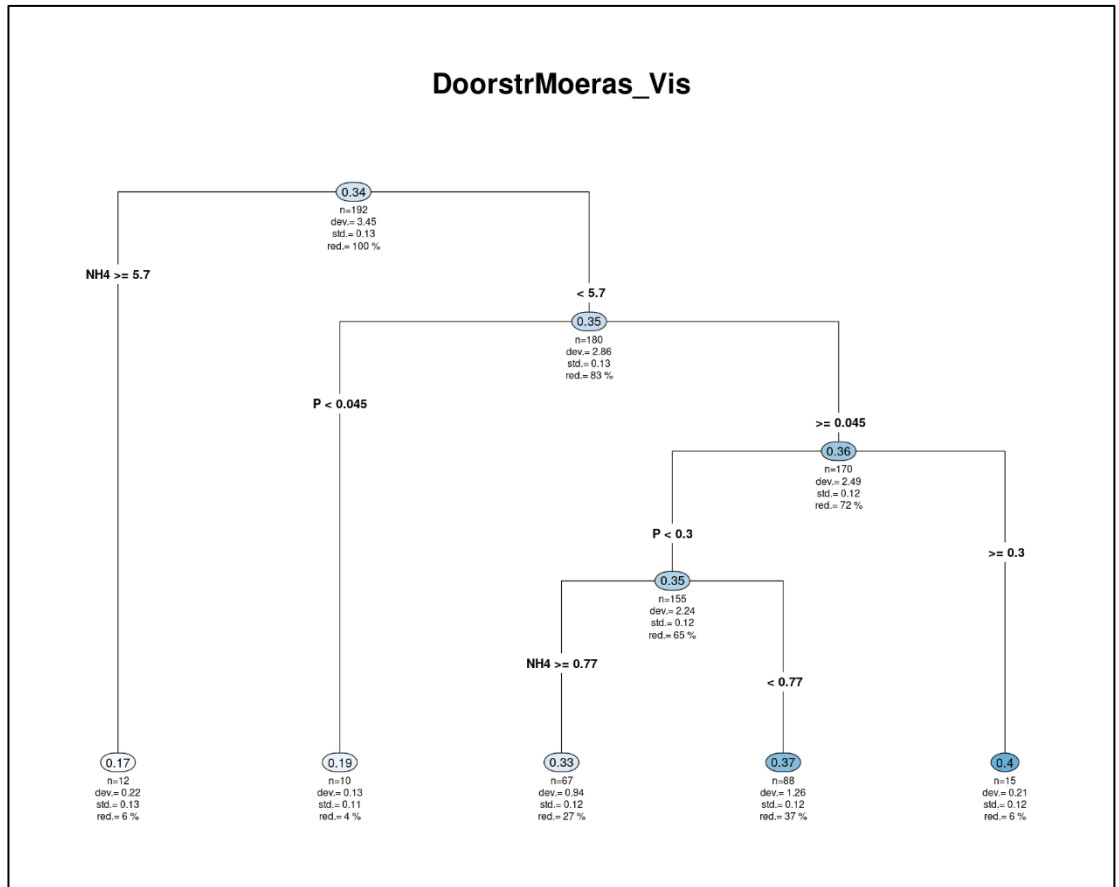


MoerasBeken_Macrofauna kruisvalidatie (model: MultipleRegression, dataset: Tot)

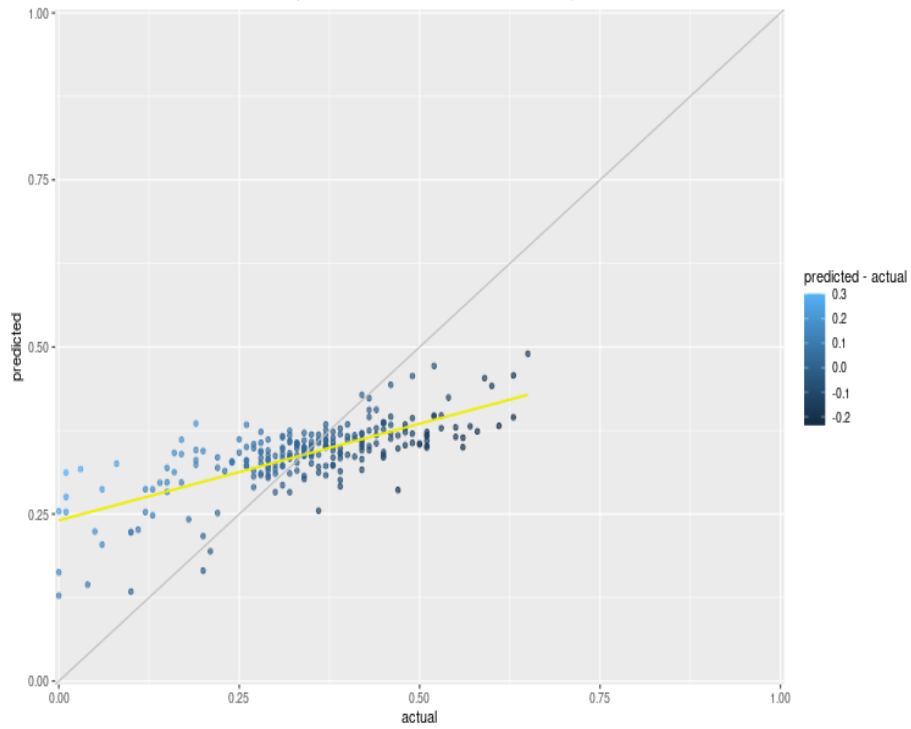


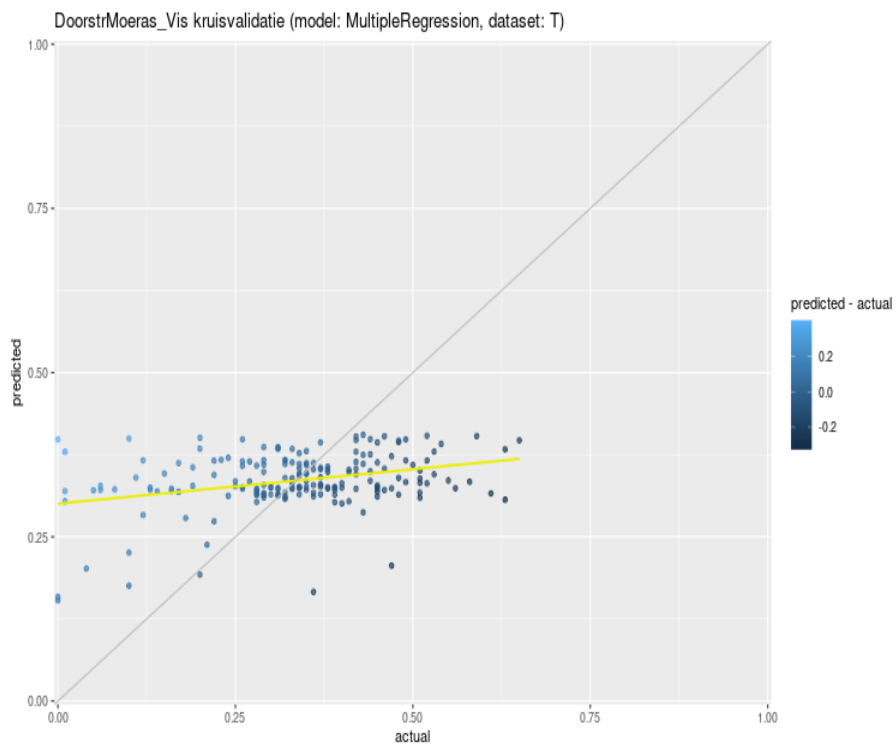
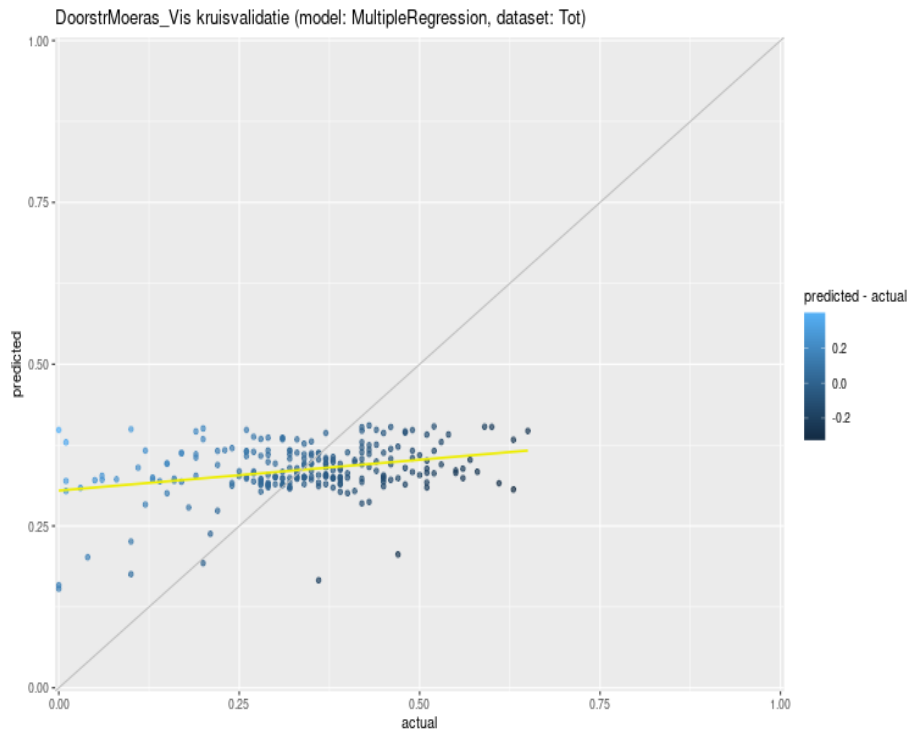


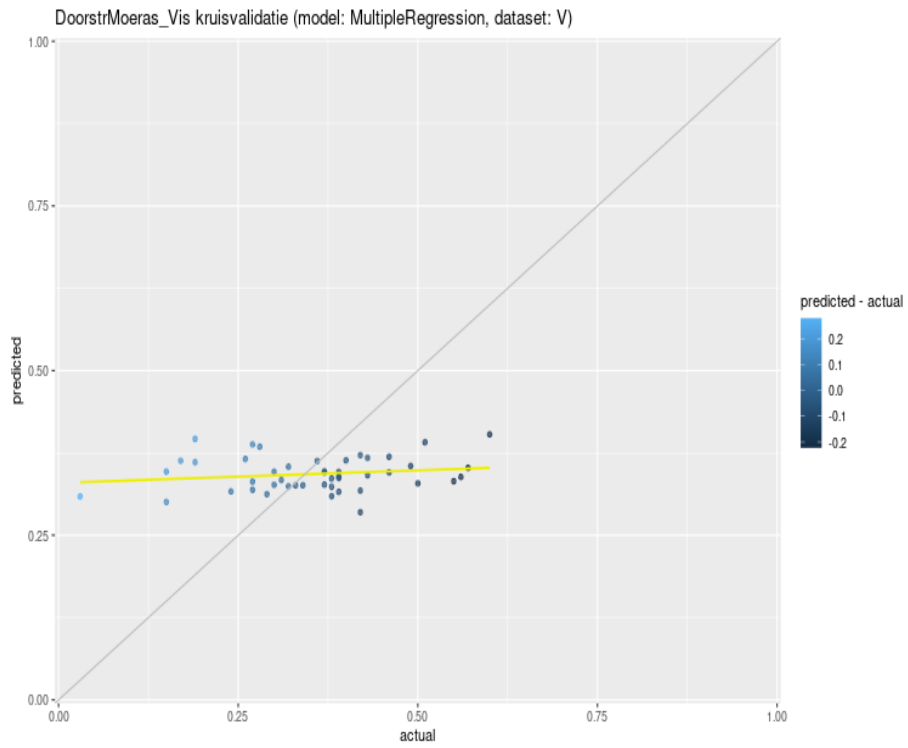
DoorstrMoeras_Vis



DoorstrMoeras_Vis kruisvalidatie (model: RandomForestR, dataset: Tot)







H Voorspellingen voor de validatieperiode in detail

De definities van de kengetallen R^2 , fractie binnen 0.10, RMSE en coef. of determ. (afgekort als CoD) zijn als volgt:

- 1 R^2 is de gebruikelijke correlatie-coëfficiënt, gekwadrateerd. Deze geeft aan hoe goed het lineaire verband is tussen X (bij ons de metingen) en Y (bij ons de voorspellingen, door gekozen model). Een waarde van 1.0 geeft aan dat het verband perfect lineair is, een waarde van nul dat er helemaal geen lineair verband is.
- 2 Fractie binnen 0.10 staat voor het percentage van alle N data waarvoor geldt dat de gemeten EKR minder dan 0.10 afwijkt van de voorspelde EKR. Merk op dat dit percentage ongevoelig is voor incidentele (zeer) slechte voorspellingen.
- 3 RMSE is de Root Mean Squared Error. Deze is als volgt gedefinieerd:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}$$

In de formule staat y_i voor de gemeten EKR in water i . Bij een perfecte voorspelling geldt dat de RMSE-waarde gelijk is aan nul. RMSE staat voor de gemiddelde voorspelfout. Merk op dat hele slechte voorspellingen door het kwadraat in de formule extra zwaar mee wegen, dit in tegenstelling tot de fractie onder punt 2.

- 4 'Coef. of determ' (CoD) staat voor de *coefficient of determination*. Deze kan eenvoudig uitgerekend worden vanuit de RMSE. De formule voor de CoD is

$$CoD = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} = 1 - \frac{RMSE^2}{\text{var}(y_i)} \cdot \frac{N}{N-1}$$

met 'var(y_i)' de variantie van de metingen in de gekozen dataset, ' \hat{y}_i ' de voorspellingen met PUNNs, random forest of regressiebomen, en ' \bar{y} ' het gemiddelde van de metingen. De CoD lijkt veel op R^2 onder punt 1 maar wijkt in de validatieperiode toch vaak af van R^2 . Dat komt omdat de CoD kijkt of voorspellingen en metingen precies liggen op de lijn van (0,0) en (1,1): de een-op-een-lijn.

Deltares is een onafhankelijk kennisinstituut voor toegepast onderzoek op het gebied van water en ondergrond. Wereldwijd werken we aan slimme oplossingen voor mens, milieu en maatschappij.

Deltares

www.deltares.nl