# "Every Model is wrong. . . "

(McCullagh and Nelder 1989)



# Untersuchungen zur Variabilität von Diatomeenvergesellschaftungen in Gewässern unterschiedlicher Trophielagen, sowie deren Auswirkung auf praktizierte Indikationsnutzung.

## Dissertation

Zur Erlangung des akademischen Grades Doktor der Naturwissenschaften (doctor rerum naturalium; Dr. rer. nat)

# Vorgelegt der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Rostock

# von Sven Adler geboren am 3.8.1974, Hamburg

# Rostock, 22. Dezember 2009

#### Gutachter:

Prof. Dr. Stefan Porembski Universität Rostock Allg. & Spezielle Botanik Wismarsche Str. 8 18057 Rostock Prof. Dr. Roland Schmidt Institut für Limnologie Herzog Odilostraße 101 A-5310 Mondsee

Tag der Verteidigung: 27.06.2010

# Inhalt

Summary Abkürzungsverzeichnis	II III
1 Einleitung	1
1.1 Grundlagen der Paläolimnologie 1.1.1 Formen der Datenauswertung 1.1.2 Relevanz der Forschung	11 15 16
1.2 Diatomeen als Bioindikatoren 1.2.1 Anatomie, Morphologie, Verbreitung und Bedeutung der Diatomeen 1.2.2 Autökologie von Diatomeen	18 18 19
1.3 Transferfunktionen in der Paläoökologie	22
1.4 Variabilität der Artenzusammensetzung von Diatomeen im Präsediment– Zielstellungen der Arbeit 1.4.1 Sample selection for training sets: The North German diatom training set (Studie I)	27 28
<i>implications for transfer functions (StudieII)</i> <i>1.4.3 Dynamic adjustment of training sets ('moving-window' reconstruction) by using</i>	29
transfer functions in paleolimnology—a new approach (Studie III ) 1.4.4 Seasonal diatom assemblage change in two North German lowland lakes –	30
implications for transfer functions (Studie IV) 1.4.5 Yet another transfer function: Are multinomial, class based transfer functions in paleolimnology an alternative to WA-PLS regression? (Studie V)	31
1.4.6 A comparison of relative abundance versus class data in diatom-based quantitative reconstructions (Studie VI)	34
1.4.7 The new statistical package paltran 1.3 for paleolimnological analyses: WA-, WA PLS Regression and the Moving Window Approach for R 2.9.2 (Studie VII)	35
2 Ergebnisse	36
2.1 Sample selection for training sets: The North German diatom training set (Studie I)	36
2.2 Spatial variability of diatom assemblages in surface lake sediments and its implications for transfer functions (Studie II)	37
2.3 Dynamic adjustment of training sets ('moving-window' reconstruction) by using transfer functions in paleolimnology—a new approach (Studie III)	38
2.4 Seasonal diatom assemblage change in two North German lowland lakes – i mplications for transfer functions (Studie IV)	39
2.5 Yet another transfer function: Are multinomial, class based transfer functions in paleolimnology an alternative to WA-PLS regression? (Studie V)	40
2.6 A comparison of relative abundance versus class data in diatom-based quantitative reconstructions (Studie VI)	41
2.7 The new statistical package paltran 1.3 for paleolimnological analyses: WA-, WA-PLS Regression and the Moving Window Approach for R 2.9.2 (Studie VII)	42

43

3.1 Sample selection for training sets: The North German diatom training set (Studie I,)	44
3.2 Spatial variability of diatom assemblages in surface lake sediments and its implications	40
3.3 Dynamic adjustment of training sets ('moving-window' reconstruction) by	48
using transfer functions in paleolimnology—a new approach (Studie III)	52
3.4 Seasonal diatom assemblage change in two North German lowland lakes – implications for transfer functions (Studie IV)	58
3.5 Yet another transfer function: Are multinomial, class based transfer functions in paleolimnology an alternative to WA-PLS regression? (Studie V)	60
3.6 A comparison of relative abundance versus class data in diatom-based quantitative reconstructions (Studie VI, accepted with minor revisions)	63
3.7 The new statistical package paltran 1.3 for paleolimnological analyses: WA-,	
WA-PLS Regression and the Moving Window Approach for R 2.9.2 (Studie VII accepted with minor revisions)	66
	60
4 Zusammenfassung	68
5 Literatur	70
Anhang	
Studie I (submitted)	85
Studie II (published)	109
Studie III (published)	127
Studie IV (submitted)	145
Studie V	171
Studie VI (accepted with minor revisions)	191
Studie VII (accepted with minor revisions)	215
Anteilserklärung	227
Lebenslauf	229
Liste der Veröffentlichungen	230
Danksagung	233
Selbstständigkeitserklärung	235

#### Summary

The aim of this thesis was to analyse the variability of diatom species compositions in surface sediment samples of lakes in North Germany. The thesis is divided into six chapters, each focussing on one aspect of the variability, trying to find a solution to deal with the problematic which arises from the high variability of diatom compositions for the suitability as bio-indicators.

The diatom training set introduced by Hübener et al. (2001) was enlarged by 50 to a new total of 87 lakes. In this North German diatom training set (MV), species compositions were very diverse and this variability could be explained only insufficiently by the measured environmental parameters. Accordingly, error statistics of transfer functions, which were developed based on this data set to infer total phosphorous levels (TP), were unsatistfying when cross validation methods were used.

Analysing surface sediment samples along transects within four lakes in North Germany, a high variance concerning the species composition was found also in adjoining samples. This high variance might be one reason for the unsatisfying error statistics of the MV training set. The transect samples were used as independent test set to evaluate the predictive power of different transfer functions, which were developed using different training sets and mathematical methods. It was found that the prediction error of the transfer function based on Maximum Likelihood regression (ML) and the local MV training set was significantly lower than that of the transfer function based on WA-PLS and the EDDI training set (Battarbee et al. 2000), even though it had the worse error statistics based on cross validation methods Thus, the negative impact, the high variability of adjacent sediment samples can have on the suitability of diatoms as bio-indicators, can be reduced significantly by the choice of an adequate mathematical method in combination with a well-suited training set.

Based on these results, i.e. that a local training set results in a significantly lower prediction error concerning TP than a regional training set, the idea of the Moving Window (MW) transfer function was developed. Here, for each sediment sample an optimal local training set is chosen. The number of samples enfolded in this optimal training set is not fixed. It was found that prediction errors of the MW method were significantly lower than those of the WA-PLS regression using both cross validation and independent test sets. Therefore, the MW method offers a solution for the problems resulting from the high species variance within and between the lakes.

In addition to this spatial variability within and between the lakes, also the seasonal variability of diatom species compositions within a lake was analysed. It was found that the

abundance of single species showed a better correlation to seasonal TP values than to the mean TP averaged over the whole season. Based on these results, a seasonal WA regression (WA<sub>seasonal</sub>) was developed, which considers the seasonal distribution of single diatom species.

As a large amount of variability of the MV training set could not be explained by single environmental variables, a transfer function based on multinomial regression (MTF) was performed. Instead of relative species abundance data, the MFT model used ordinal abundance classes. For several training sets, it could be demonstrated that the prediction error of the MTF method was not significantly higher than that based on classical data scales. Thus, it seems that the high accuracy of the relative abundance might not be essential when inferring TP levels by using diatoms.

As the MTF is very compute-intensive, it was tested whether the use of ordinal abundance class data had an influence on the accuracy of inferred TP levels using classical WA respectively WA-PLS regression. Using available training sets, samples of four different sediment cores, and samples counted using abundance class data, no significant differences were found between the inferred TP levels based on the different data scales. Therefore, small changes in relative abundance data have no influence on the resulting inferred TP values, irrespectively of the method used for calculating the transfer function.

For the MW method as well as for the MTF, a pakage called *paltran* was implemented for the free open source statistical platform R.

# Abkürzungsverzeichnis

Canonical Correspondence Analysis
The Central European training set
The Swiss training set
Detrended Correspondence Analysis
The Danish training set
Europäischen Diatomeen-Datenbank
Eichdatensatz
Generalized Additive Model
Generalized Linear Model
Modern Analogue Technique
Maximum Likelihood
Multinomial Transfer Funktion
Mecklenburg-Vorpommern
The North Ireland training set
near shore
open water
Principal Component Analysis
Proportional Odds Model
Self Organizing Map
The Surface Water Acidification Project
Total Phosphorous (Gesamtphosphat)
Weighted Averaging
Weighted Averaging – Partial Leas Squares
Wasserrahmenrichtlinie

### **1** Einleitung

Für die Erstellung von ökologischen Modellen zur Entwicklung von Ökosystemen und Planungen z. B. im Bereich eines ökologischen Umweltmanagements ist ein Verständnis der Wirkungsweise der zugrunde liegenden Einflussvariablen auf das System notwendig. Wie wirken sich z. B. Veränderungen im Klima (Änderung von Temperatur und Wasserhaushalt, Sonnenzyklen, El Niño, Warmzeiten, Kaltzeiten, u. a.) auf ein Ökosystem und dessen Produktivität aus? In welchem Umfang haben anthropogene Einflüsse (z. B. Einträge verschiedener Nähr- und Schadstoffe infolge landwirtschaftlicher und abwassertechnischer Nutzung der Gewässereinzugsgebiete, saurer Regen) ein Ökosystem verändert? Eine Forschungsrichtung, die sich mit diesen Fragen beschäftigt, ist die Ökologie.

Die Ökologie untersucht die Beziehungen der Organismen untereinander und mit ihrer Umwelt (Schaefer 2003). Nach Begon et al. (2005) hat die Ökologie die Beschreibung, Erklärung und Vorhersage von qualitativen und quantitativen Eigenschaften von Individuen, Populationen und Lebensgemeinschaften in Raum und Zeit zum Gegenstand. Grundlage für die Erfassung dieser Beziehungen und Eigenschaften sind Beobachtungen abiotischer und biotischer Variablen<sup>1</sup> im Freiland sowie Laborexperimente. Die Ergebnisse dieser Beobachtungen und Experimente werden anschließend deskriptiv und statistisch ausgewertet und führen zur Formulierung von ökologischen Modellen. Auf Grundlage dieser Modelle können Vorhersagen bzw. Planungen für ein System durchgeführt werden oder es entstehen neue Fragestellungen, die wiederum Beobachtungen im Feld oder Labor erfordern (Schema der (ökologischen) Modellbildung, z. B. Fortin & Dale 2005, Sachs & Hedderich 2006, Bolker 2008).

Freilandbeobachtungen sowie Laborexperimente können aktuelle (räumliche) Verteilungsmuster von Individuen einer Art, einer Population oder von Biocoenosen in Abhängigkeit zu den beobachteten abiotischen und biotischen Umweltvariablen als eine Momentaufnahme erfassen. Werden die Untersuchungen zu unterschiedlichen Zeitpunkten wiederholt, kommt es zu einer Aneinanderreihung solcher Momentaufnahmen. In der Regel

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> In der biologischen Literatur wird oft der Begriff ökologischer Parameter verwendet. Im mathematischen Sprachgebrauch steht der Begriff Parameter jedoch für feste Faktoren einer Gleichung, z.B. für den Anstieg einer Geraden. Im Zusammenhang mit mathematischen Modellen ist die Bezeichnung Umweltparameter oder –faktor ungünstig und wird in dieser Arbeit so weit wie möglich vermieden. Im englischsprachigen Raum wird in der Ökologie der Begriff predictor, explanatory variable oder level (Hastie et al. 2009, Zuur et al. 2009a) verwendet.

wird mit den wiederholten Momentaufnahmen die Variabilität eines Ökosystems erfasst (z. B. saisonale Effekte, wetterbedingte Schwankungen im Jahresvergleich, Populationsschwankungen, Migration). Ebenso lassen sich Effekte von invasiven Eingriffen in ein Ökosystem mittels solcher wiederholter Momentaufnahmen quantifizieren bzw. qualifizieren (z. B. BACI-Design, Green 1979, Smith 2002, Diederichs et al. 2008). Die Effekte von Umweltvariablen, die einer langfristigen Veränderung (mehrere Jahrzehnte bis Jahrhunderte) unterliegen (z. B. Klima) werden durch solche Momentaufnahmen nicht erfasst, da die Laufzeit der Messprogramme begrenzt ist (z. B. erste Temperaturmessung um 1856, Jones & Moberg 2003, Cowpertwait & Metcalfe 2009, http://www.massey.ac.nz/~pscowper/ts/global.dat).

Im Mittelpunkt dieser Arbeit steht die Erfassung der Wirkungsweise von Umweltvariablen auf das Ökosystem See, insbesondere die Erfassung anthropogen bedingter Veränderungen des ökologischen Zustands von Seen. Aktuelle Monitoringprogramme z. B. zur Umsetzung der EG-WRRL (seit 2000, EU 2000), zur Untersuchung der Entwicklung der bedeutendsten Seen Deutschlands (UBA Programm, Wöbbecke et al. 2003, Nixdorf et al. 2004), das BLMP-Messprogramm (BSH 2009), das ARGE Elbe Messprogramm (seit 1977, http://www.arge-elbe.de/wge/Allgem/Wuebuns.html), welche kontinuierlich oder regelmäßig in Binnen-, Übergangs- und Küstengewässern durchgeführt werden, spiegeln den Ist-Zustand dieser Biotope bzw. deren Entwicklung über einen kurzen (Jahresverlauf) und langen (bis hin zu mehreren Jahrzehnten) Zeitraum wieder (Renberg & Hultberg 1992, Fritz et al. 1994, Alefs et al. 1996, Bennion et al. 1995, Hall et al. 1997, Lotter et al. 1998, Teranes et al. 1999, Bradshaw & Anderson 2001, Battarbee et al. 2000). Die anthropogen bedingten Veränderungen von Seen haben jedoch zu einem deutlich früheren Zeitpunkt eingesetzt, als das sie durch Monitoringprogramme erfassbar wären (Anderson et al. 1993, Smol 1992, Smol 1995, Dreßler et al. 2006, Bennion & Battarbee 2007, Hübener et al. 2009a). Um für einen aktuellen Gewässerzustand den Grad des anthropogenen Einflusses auf das ehemals natürliche System abschätzen zu können, reichen Messprogramme somit nicht aus.

Seen fungieren als natürliche Fallen (Wetzel 2001) für biogene (aus Lebendigem entstandene) und abiogene (aus Unbelebtem entstandene) Materialien, welche von außen eingetragen (allochthon) bzw. in einem Gewässer produziert worden sind (autochthon). Diese Materialien unterliegen sowohl kurzfristigen, diurnalen und saisonalen als auch langfristigen Effekten (Wetzel 2001). Sie lagern sich am Grund eines Gewässers ab und bilden das Sediment. Im Falle fehlender Störungen, d. h. massiver Durchmischungen durch z. B. Bioturbation, Rutschungen oder anthropogene Nutzung, kann ein Seesediment als ein chronologisch geordnetes Archiv für die Entwicklung eines Sees und seines Einzugsgebietes interpretiert werden (Wright 1966, Birks & Birks 1980, Cohen 2003).

Diese Sedimente sind Untersuchungsgegenstand der Paläolimnologie, einer Teildisziplin der Paläoökologie, die die Analyse und Interpretation langfristiger Veränderungen von Gewässerökosystemen zum Ziel hat. Die Paläolimnologie versucht anhand von im Sediment enthaltenen Resten von Organismen und organischen Molekülen die Geschichte eines Gewässers zu rekonstruieren (Lampert & Sommer 1999). Das in Seesedimenten akkumulierte Material kann dabei einen Zeitraum von mehreren tausend Jahren (vgl. Dreßler et al. 2006) bis zu mehrere millionen Jahren (Fietz & Nicklisch 2004) umfassen. Somit erhält man durch die Paläolimnologie die Möglichkeit, Fragen, die in der Ökologie durch aktuelle Monitorinprogramme aufgrund des begrenzten abgedeckten Zeitraumes nicht beantwortet werden können, genauer zu betrachten.

Eine Reihe von Umweltvariablen wie z. B. Temperatur, pH-Wert eines Gewässers, Trophie, Nutzungsintensität des Menschen, lassen sich nicht direkt aus dem Sediment eines Gewässers bestimmen. Es werden Proxies (engl. Stellvertreter oder Zeiger) benötigt, mit deren Hilfe auf die zu bestimmende Umweltvariable geschlossen werden kann. Handelt es sich bei Vertretern einzelner Proxies um Bioindikatoren (Zeigerarten), d. h. um Arten, die aufgrund ihrer zumeist relativ geringen Toleranz bzw. charakteristischen ökologischen Ansprüche hinsichtlich einzelner Umweltvariablen als Anzeiger für bestimmte Werte von Umweltvariablen dienen (Wagenitz 2003), kann mittels dieser der Verlauf einzelner Umweltvariablen rekonstruiert werden (Birks & Birks 2006).

Eine häufig genutzte Indikatorgruppe zur Erfassung des Istzustands von Seen sind die Diatomeen (Bacillariophyceae) (Stoermer & Smol 1999, Smol et al. 2001, Cohen 2003, vgl. Kapitel 1.2). Diatomeen sind in Seen der gemäßigten Zone eine der dominierenden Algengruppen, sowohl bezüglich ihrer CO<sub>2</sub>-Assimilationsleistung als auch ihrer Diversität (Round et al. 1990). Diatomeen besitzen kieselsäurehaltigen Schalen, die über artspezifische Muster verfügen. Nach dem Absterben der Diatomeen werden deren Schalen in Sedimenten von Seen eingelagert. Dies ermöglicht in chronologisch geordneten Sedimentkernen, die Artenzusammensetzung der Diatomeen und damit die Abfolge der Istzustände eines Sees über den Verlauf von mehreren tausend Jahren zu rekonstruieren.

Um Diatomeen als Bioindikatoren sowohl für die aktuelle Indikation als auch für die Entwicklung von Umweltvariablen im Laufe der Genese eines Sees zu verwenden, müssen deren autökologische Ansprüche gegenüber den zu indizierenden bzw. zu rekonstruierenden Variablen bekannt sein. Ermittelt werden diese auf der Basis von rezenten Proben. Die Gesamtheit dieser rezenten Proben zur Ermittlung der ökologischen Ansprüche von Diatomeen wird als Eichdatensatz (EDS, Kalibrierdatensätze, engl. training set, calibration data set, reference set) bezeichnet. Zur Ermittlung der ökologischen Ansprüche solcher Bioindikatoren stehen eine Reihe von modernen, teilweise komplexen, mathematischen Verfahren zur Verfügung, welche unter dem Begriff "species distribution model" (SDM) (Guisan & Zimmermann 2000) zusammengefasst werden. Es gibt seit längerem Hinweise darauf, dass die Anwendung falscher oder veralteter mathematischer Modelle bzw. die Fixierung auf wenige Modelle in der Ökologie in einem großen Umfang zu falschen Interpretationen ökologischer Sachzusammenhänge führen kann (Oksanen & Minchin 2002, Austin 2002, Ladle et al. 2004, Elith et al. 2006, Pearson et al. 2006). So wird z. B. bei der Ermittlung einer Optimumkurve für eine Art oft von einer symmetrischen Verteilung bezüglich der betrachteten Umweltvariablen ausgegangen (Oksanen & Minchin 2002). In Abbildung 1 ist die (rechtsschiefe) Verteilung einer Art gegenüber einer Umweltvariablen exemplarisch dargestellt. Die Kurvenanpassung mittels eines quadratischen Polynoms (durchgezogene Linie), deren Grundlage die Annahme einer symmetrischen unimodalen (eingipflig, Kurve mit nur einem Maximum) Optimumskurve repräsentiert, überschätzt das Optimum der Art deutlich. Hingegen wird das Optimum der Art auf Grundlage der Kurvenanpassung mittels eines Additiven Modells (Hastie & Tibshirani 1990, Wood 2006, Fahrmeir et al. 2007, Keele 2008) gegenüber der Umweltvariablen gut erfasst.



environmental variable

Abbildung 1: Beispiel für die Verteilung einer Art in Abhängigkeit zu einer Umweltvariable: Das lineare, symmetrische (quadratische) Modell überschätzt das Optimum der Art (dünner Pfeil). Das Additive Modell erfasst das Optimum gut (dicker Pfeil).

Neben der Verwendung von Modellen, die die Verteilung von Arten nur ungenügend erfassen können, ist das Problem der inhomogenen Varianz und der nicht vorhandenen Unabhängigkeit einzelner Stichprobenelemente eine wesentliche Ursache für fehlerhafte Modelle in der Ökologie (Zuur et al. 2007, Zuur et al. 2009a). Eine weitere Fehlerquelle ist die Nichtbeachtung von Overdispersion (McCullagh & Nelder 1989, Hilbe 2008, Zuur et al. 2009a). Als Overdispersion (dt. Überdispersion, vgl. Fahrmeir et al. 2007) wird der Effekt bezeichnet, dass die Varianz einer Datengruppe deutlich größer ist als ihr Mittelwert. Overdispersion tritt dann auf, wenn wichtige Variablen aus einem Modell herausgelassen werden, Ausreißer (engl. Outlier) auftreten, Wechselwirkungen zwischen den Variablen ignoriert werden, falsche Skalierungen der Variablen vorliegen oder unter der Annahme linearer Zusammenhänge eine falsche Link-Funktion verwendet wurde (ausführliche Darstellung siehe Hilbe 2008, S. 51 ff.). Diese zumeist bei der statistischen Auswertung auftretenden Effekte, die teilweise zu beheben sind, stehen solchen Effekten gegenüber, die in den Daten selbst liegen, z. B. Datensätze, die einen sehr großen Anteil an Nullen (zero influenced data) enthalten, Diese sind durch spezielle mathematische Verfahren handhabbar zu bekommen, z. B. mittels Anwendung der Negativ Bionimal Verteilung (Lawless 1987, McCullagh & Nelder 1989, Oksanen et al. 1990, Hilbe 2008).

Ist das Optimum mehrerer Arten bezüglich einer Umweltvariablen bekannt, so kann von der Artenzusammensetzung in einer Sedimentprobe auf den Wert des betreffenden Umweltparameters geschlossen werden. So wird die Änderung von Gesamtphosphat (TP) im Verlauf der Genese Sees basierend auf wechselnden eines Diatomeen-Artenzusammensetzungen einer vertikalen Sedimentprobenserie rekonstruiert (Lotter et al. 1998, Bennion et al. 2001, Korhola et al. 2002). Der von den Diatomeen indizierte TP-Gehalt eines Gewässers lässt Rückschlüsse auf die Trophie desselben zu (Vollenweider 1968, Vollenweider & Kerekes 1982). Ein Anstieg von TP wird unter anderen mit einem Anstieg der Nutzungsintensität eines Sees oder/und dessen Einzugsgebietes interpretiert, so dass indirekt über die Diatomeen-basierten TP-Werte Rückschlüsse auf die Nutzungsintensität durch den Menschen gezogen werden kann (Dreßler et al. 2006, Watchorn et al. 2008).

Das Verfahren, das zunächst aus einem Eichdatensatz die ökologischen Optima von Diatomeen erfasst und diese dann auf die Artenzusammensetzungen in einem Sedimentkern zur Rekonstruktion von Umweltvariablen anwendet, wird als Transferfunktion bezeichnet (siehe Kapitel 1.3). Dabei werden in der Paläoökologie eine Reihe unterschiedlicher Ansätze angewendet, sowohl für die Ermittlung der ökologischen Optima der einzelnen Arten als auch für die Berechnung der indizierten Umweltparameter für den Sedimentkern. Ein Großteil der verwendeten Transferfunktionen basiert auf der Methode der Weighted-Average Regression (WA) (ter Braak & van Dam 1989) bzw. der Methode der Weighted-Average – Partial-Least-Square Regression (WA-PLS) (ter Braak & Juggins 1993) und der Modern Analogues (MAT) (ter Braak 1995) (siehe Abbildung 2).



Abbildung 2: Anzahl der Veröffentlichungen zum Thema Diatomeen & WA (Weighted Averaging), Diatomeen & WA-PLS (Weighted Averaging – Partial Least Squares), Diatomeen & MAT (Modern Analogue Technique) und Diatomeen & ML (Gausian Logit Regression/Maximum Likelihood) in Abhängigkeit zum Erscheinungsjahr: Diese wurden aus einer Literaturdatenbank vom Springer Verlag ermittelt (<u>http://www.authormapper.com/</u>). Dazu wurde wurde in 120 internationalen Journalen gesucht. Dopplungen sind hier möglich, z. B. enthält Adler & Hübener (2007) sowohl das Stichwort WA-PLS als auch ML. Daten wichtiger Zeitschriften, die nicht in der Datenbank enthalten sind (z.B. The Holocene), wurden anschließend mit hinzugefügt. Stand: März 2009.

Die Methode der WA basiert auf der Grundannahme, dass die einzelnen Arten einer symmetrischen Verteilung folgen (ter Barrk & van Dam 1989). Daraus resultiert das Problem, das bereits in Abbildung 1 skizziert wurde. Die Optima von schief verteilten Arten werden entweder überschätzt (rechtsschiefe Verteilung) oder unterschätzt (linksschiefe Verteilung) (ter Braak & Juggins 1993). Obwohl diese Nachteile der WA schon mehrfach in Abhandlungen über die Modellierung von Art-Habitat-Beziehungen und im Bereich der Transferfunktionen beschrieben wurden (Greig-Smith 1983, ter Braak & Looman 1986, Oksanen *et al.* 1988, Anderson *et al.*, 1993 Anderson & Rippey 1994, Bennion et al. 1995, Sayer 2001, Racca et al. 2004, Adler & Hübener 2007, Battarbee 2008, Hübener et al. 2008), ist diese Art der Transferfunktion nach wie vor die am häufigsten angewandte (Abbildung 2). Die WA-PLS, eine Verbindung der WA mit der Methode der Kleinsten Quadrate, welche

rekursiv das Optimum einer Art berechnet und in der Lage ist, auch schief verteilte Arten annähernd zu modellieren ("updated optima", ter Braak et al. 1993), wird im Vergleich zur WA selten angewandt (siehe Abbildung 2) ebenso wie die Gausian Logit Regression (ter Braak & van Dam 1989)<sup>2</sup>.



Abbildung 3: Rekonstruktion der TP-Werte des Dudinghausener Sees (Dreßler et al. 2006) für die letzten 5000 Jahre: A: WA-PLS basierend auf einer Kombination des MV- (Studie I) und EDDI- (Battarbee et al. 2000) Eichdatensatzes, B: WA basierend auf einer Kombination des MV- und EDDI- Eichdatensatzes, C: ML basierend auf dem MV-Eichdatensatz (Adler & Hübener 2007, Studie I dieser Arbeit). Rekonstruktion A = geringer Einfluss der Siedlungstätigkeit im Umfeld des Sees auf die Trophie, Rekonstruktion B = hoher Einfluss auf die Trophie des Sees.

Die Verwendung unterschiedlicher Transferfunktionen bzw. unterschiedlicher Eichdatensätze führt zu verschiedenen Rekonstruktionen des betreffenden Umweltparameters (im Fall des Dudinghausener Sees von der Gesamtphosphat-Konzentration (TP) (siehe Abbildung 3). Die Frage nach dem Einfluss der anthropogenen Siedlungstätigkeit auf die Trophie des Dudinghausener Sees im Zeitraum zwischen 3000 bis 2000 Jahre vor der Gegenwart wird von den verschiedenen Rekonstruktionen deutlich unterschiedlich beantwortet (Kasten in Abbildung 3). Während sich die Trends der rekonstruierten

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Auch die WA-PLS neigt dazu, extrem hohe Werte (im Bezug auf den verwendeten Eichdatensatz) zu unterschätzen und niedrige Werte zu überschätzen, siehe z.B. Battarbee et al 2008.

Umweltparameter auf Basis unterschiedlicher Methoden der Transferfunktion in der Regel annähernd gleichen (Abbildung 3A, 3B; Köster et al. 2004), unterscheiden sich die Werte der rekonstruierten Umweltvariablen zum Teil um den Faktor zwei bis drei (Hall et al. 1997, Köster et al. 2004, Studie II). Für Fragen im Rahmen des Umweltmanagements und hinsichtlich Definierung Umweltschutzes der von Referenzzuständen bzw. Renaturierungszielen sind diese Unterschiede bedeutend. Wird beispielsweise der Zustand eines heute eutrophen Sees<sup>3</sup> in der Vergangenheit (unter Referenzbedingungen) als mesotroph eingeschätzt, werden nur geringe Maßnahmen zum Schutz des Gewässers durchgeführt. Wird der Referenzzustand des Sees allerdings als oligotroph beschrieben wären nach der Forderung der EU-WRRL (EU 2000), bis 2015 einen guten ökologischen Zustand der Gewässer zu erreichen, umfangreiche Maßnahmen nötig, um zumindest den mesotrophen (= "guten") Zustand wieder herbeizuführen. Im Beispiel wäre dies mit einem erheblichen finanziellen Aufwand verbunden. Die Entscheidung, welche der Rekonstruktionen richtig bzw. mit einer größeren Wahrscheinlichkeit richtig ist, stellt demnach nicht nur einen rein wissenschaftlichen interessanten Aspekten dar, sondern hat auch reale Auswirkung auf umweltpolitische und finanzielle Entscheidungen.

Die Artenzusammensetzung der zumeist abgestorbenen und sedimentierten Diatomeen im Präsediment<sup>4</sup> eines Sees kann sich von den planktischen und benthischen Ausgangsgemeinschaften der Diatomeen in dem Gewässer unterscheiden (Round et al. 1990, Raubitschek et al. 1999, Rautio et al. 2000, Cohen 2003). So haben Rautio et al. (2000) die Kieselalge *Cyclotella comensis* im Freiwasser des Sees Saanajärvi mit einer Abundanz von 23.8% bestimmt, im Präsediment jedoch nur eine Abundanz von 14.1% gefunden. Marchetto & Musazzi (2001) konnten hingegen nur geringe Unterschiede zwischen den Artgemeinschaften des Planktons und den Artzusammensetzungen des Präsediments finden.

Die Prozesse, die dazu führen, dass die Artenzusammensetzung im Sediment nicht der einer reinen Mischprobe der Artengemeinschaft über das Jahr entspricht, sind vielfältig (Fraß durch Zooplankton, Nekton, Vermischung von planktischen, benthischen und litoralen Taxa

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Seentypenlehre nach Naumann (1919): Ein eutropher See zeichnet sich durch eine hohe Produktivität in Verbindung mit einer hohen Phosphat- und Nitratfracht aus. Das Konzept der Seentypen ist ausgehend von Thienemann (1925) und Naumann (1929) bis heute vielfach überarbeitet worden und umfasst, im Gegensatz zu den anfänglichen Arbeiten, mehrere Parameter (unter anderen Größe, Tiefe, Einzugsgebiet, Chla Gehalt des Sees,), auf deren Grundlage Seen klassifiziert werden (LAWA 1999, Lampert & Sommer 1999, Wetzel 2001, Mathes et al. 2002). Die qualitative Typenlehre ist im Zuge der OECD-Eutrophierungsstudie (Vollenweider & Kerekes 1982) durch eine quantitative Betrachtungsweise ersetzt worden, bei dem oligotrophe und eutrophe Abschnitte auf einem Trophiekontinuum dargestellt werden, dessen Grenzen unter anderen durch TP Werte definiert und voneinander abtrennbar sind (Lampert & Sommer 1999). In dieser Arbeit werden die Grenzen für die einzelnen Trophiestufen nach LAWA (1999) verwendet.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Präsediment ist die oberste Schicht des Sediments (engl. surface sediment, upper most), welche im günstigen Fall die sedimentierten Stoffe/Organismen von einem Jahr innerhalb eines Sees repräsentiert.

durch Wellenschlag, saisonale Schwankungen in der Bioproduktion, chemische Reaktionen, bei denen die einzelnen Schalen angelöst oder aufgelöst werden<sup>5</sup>) und sind Gegenstand der Taphonomie<sup>6</sup> (Cohen 2003). Die Artenzusammensetzungen, die in Seesedimenten gefunden werden, sind somit keine Momentaufnahme einzelner Artengemeinschaften aus einem See, sondern ein Konglomerat einzelner selektierter Arten bzw. Taxa aus verschiedenen Bereichen eines Sees, das zu unterschiedlichen Zeiten entstanden ist (Cohen 2003). Die unterschiedlichen Befunde der Studien von Rautio et al. (2000) und Marchetto & Musazzi (2001) deuten darauf hin, dass die Prozesse, die zur Einlagerung der Diatomeenschalen in das Seesediment führen, individuell von See zu See unterschiedlichen physikalisch-chemischen, hydromorphologischen und biologischen Variablen unterliegen (z. B. Morphometrie und Verweilzeit der Seen, Arteninventar sowohl des Phytoplanktons, des Zooplanktons als auch des Nektons, Strömungsverhältnisse, extreme, punktuell auftretende Wetterereignisse, pH-Wert der Gewässer, siehe auch Shemesh et al. 1989, Barker et al. 1990, Barker et al 1994). Dabei wirken einzelne Faktoren durchaus unterschiedlich auf einzelne Arten (Barker et al. 1994).

Der Prozess der Einlagerung von Diatomeenschalen erfolgt auf unterschiedlichen Zeitskalen. Einige Taxa sedimentieren schneller aus dem Plankton als andere. Benthische Taxa werden kontinuierlich durch Wellenschlag aus der Uferregion in das Plankton verfrachtet oder nur bei extremen Windereignissen ins Freiwasser transportiert. Die Artenzusammensetzung sowohl im Plankton als auch im Aufwuchs zeigt deutliche jahreszeitliche Schwankungen. In einer Präsedimentprobe sind alle diese Prozesse durchmischt und nicht mehr trennbar (time-averaging, Cohen 2003). Wie bereits erwähnt, ist eine Sedimentprobe eine integrierende Probe, die die räumliche und zeitliche Verteilung der einzelnen Taxa in einem See zusammenfasst (Battarbee et al. 2001), diese jedoch nicht in ihrer Vollständigkeit repräsentiert.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Battarbee (1981) und Haberyan (1990) haben festgestellt, dass in kleinen, flachen Seen die Korrelation zwischen den lebenden Artengemeinschaften von Diatomeen und den im Präsediment gefundenen Artenzusammensetzungen deutlich höher ist als in tiefen Seen. In tiefen Seen sind Diatomeen größeren Turbulenzen, längerer Verweilzeit in der Wassersäule durch die thermische Schichtung und damit längerer Lösungsprozesse ausgesetzt. Die Schalen werden in tieferen Seen durch den erhöhten Druck der Wassersäule verstärkt beschädigt und vermehrtem Fraß ausgesetzt. Cohen (2003) empfiehlt daher, Präsedimentproben sowie Sedimentkerne nicht im Seetiefsten zu gewinnen, sondern einen Kompromiss zwischen Wassertiefe und Entfernung zum Ufer zu finden.

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Taphonomie ist die Lehre der Prozesse, die zwischen dem Todeszeitpunkt eines Individuums und dessen Wiederauffindung durch Paläoontologen liegt. Im Falle der Diatomeen sind hier alle Prozesse gemeint, die zwischen dem Zeitpunkt der lebenden Individuen einzelner Taxa und deren Wiederfinden im Präsediment bzw. in Sedimentkernen liegen. Neben selektivem Fraß und Verdriftung spielen auch chemische Prozesse hier eine Rolle, in denen die Schalen der Diatomeen unterschiedlich stark gelöst werden können. Eine ausführliche systematische Darstellung findet sich in Cohen (2003).

Ausgehend von den rezenten Diatomeen-Artengemeinschaften eines Sees kann demnach nicht immer auf die adäquate Zusammensetzung der Arten im Präsediment geschlossen werden. Da für die Rekonstruktion von Umweltparametern Proben von Sedimentkernen verwendet werden, ist es nicht sinnvoll bei der Erstellung von Eichdatensätzen rezente Artgemeinschaften zu beproben, da diese in ihrer Zusammensetzung nur verändert ins Sediment eingetragen werden. Daher ist es in der Paläolimnologie üblich, Präsedimentproben bei der Erstellung von Eichdatensätzen zu verwenden (Cohen 2003). Die Gewinnung dieser Präsedimente ist relativ einfach. Die Zuordnung der für die Artenzusammensetzung der Präsedimentproben verantwortlichen Umweltvariablen ist hingegen deutlich schwieriger. Es ist aus der Literatur nicht klar erkennbar, wie oft und über welchen Zeitraum Umweltvariablen erhoben werden müssen, um eine ausreichende Erklärung für das Zustandekommen der Artenzusammensetzung im Präsediment zu erhalten (Cameron 1995, Rautio et al. 2000).

Für die Erstellung von Eichdatensätzen wird in der Regel eine Präsedimentprobe pro Eichgewässer gewonnen und diese mit einer Anzahl von Umweltvariablen korreliert, die mehrmals im Jahr erfasst werden (Le & Shackleton 1994, Weckström et al. 1997, Lotter et al. 1998, Philibert & Prairie 2002). Dabei werden die Proben im Allgemeinen im Seetiefsten erhoben (Ausnahmen z. B. Schönfelder et al. 2002). Nach den bisherige Ausführungen ist es jedoch fraglich, inwieweit die Artenzusammensetzung einer einzelnen Präsedimentprobe repräsentativ für einen See sein kann.

Es ist in der Literatur seit längerem bekannt, dass die Qualität der Rekonstruktion von Umweltvariablen wesentlich von der Qualität der verwendeten Eichdatensätze abhängt (Hausmann & Kienst 2006, Studie II, Battarbee et al. 2008, Holden et al. 2008). Gleichzeitig wird deutlich, dass die Zusammensetzung des Präsediments deutlich durch die Entfernung zum Ufer beeinflusst wird (Lotter & Bigler 2000, Kauppila 2002, Heiri 2004).

Neben der Ergänzung eines Diatomeen-Eichdatensatzes für Norddeutschland (Hübener et al. 2001) war es Ziel dieser Arbeit, diese Variabilität von Präsedimentproben hinsichtlich ihrer Diatomeen-Artenzusammensetzung genauer zu untersuchen. Dabei stellte sich die Frage, inwieweit die Variabilität der Artenzusammensetzungen im Präsediment einen Einfluss auf die Qualität von Transferfunktionen bzw. auf die Rekonstruktion von Umweltvariablen hat.

#### 1.1 Grundlagen der Paläolimnologie

Wie in Kapitel 1 beschrieben, untersucht die Paläolimnologie die Entwicklung von Seen auf der Grundlage der in den Seesedimenten enthaltenen Proxies. Die Bedeutung der Paläolimnologie liegt in der Erfassung von Veränderungen eines Gewässers und des angrenzenden Einzugsgebietes auf unterschiedlichen Zeitskalen. Der Einfluss externer Veränderungen wie Klimawandel, Vulkanausbrüche, historische Nutzung eines Sees (Siedlungsbau, Pfahlbauten, Fischerei, Mühlenstau) aber auch die Wirkung aktueller Maßnahmen zur Verbesserung des Zustandes der Biozönosen eines Sees lassen sich mit Hilfe der Paläoökologie beschreiben und bewerten (Schmidt & Wunsam 2001).

Mit den Arbeiten von Wright (1966), Birks & Birks (1980), Birks (1998), Last & Smol (2001a, b) Smol et al. (2001a, b), Lotter (2003) hat sich der Ansatz der "Multi-Proxy-Studien" durchgesetzt, bei denen nicht nur ein Proxy allein für eine Rekonstruktion verwendet wird. Nur auf Grundlage mehrere unterschiedlicher Organismengruppen in Verbindung mit chemischen Variablen und einem Tiefen-Zeit-Modell, z. B. basierend auf <sup>14</sup>C bzw. <sup>210</sup>Pb/<sup>137</sup>Cs Sedimentdatierungen kann die Ontogenese eines Sees adäquat rekonstruiert werden (Birks & Birks 2006). So ist es möglich, die Trophie eines Sees aufgrund der in einem Sedimentkern gefundenen Diatomeen-Artenzusammensetzung zu rekonstruieren. Doch lassen die Diatomeen keinen direkten Rückschluss auf die menschliche Nutzungsintensität des Einzugsgebietes zu. Mit der Analyse von Pollen und Makrophytenresten in einem Seesediment kann die Änderung der Nutzungsintensität im Umfeld eines Sees rekonstruiert werden, nicht jedoch die trophischen Auswirkungen auf den Sees.

Als Proxy eignen sich neben abiotischen Variablen, z. B. Sauerstoffisotope (Diefendorf 2006), Kohlenstoffisotope (Arens et al. 2000) eine Reihe von biologischen Organismen bzw. deren Reste (Smol et al. 2001a,b, Cohen 2003). Damit die einzelnen Proxies als Indikatoren zur Rekonstruktion von Umweltvariablen verwendet werden können, müssen eine Anzahl von Bedingungen erfüllt werden (verändert nach Roberts 1989):

*i.* Die Proxies müssen in einer direkten (signifikanten<sup>1</sup>) Abhängigkeit zu der zu rekonstruierenden Umweltvariablen stehen.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Von signifikant wird in dieser Arbeit dann gesprochen, wenn der Fehler erster Art kleiner gleich 0.05 ist. Sollte ein anderes Signifikanzniveau verwendet werden, so ist dieses im Text vermerkt.

Bei der Rekonstruktion der anthropogenen Einflussnahme auf die Genese eines Sees muss das verwendete Proxy geeignet sein, diese Einflussnahme anzuzeigen bzw. zu rekonstruieren. Wenn z. B. anthropogen verursachte Veränderungen auf einen See rekonstruiert werden sollen, muss sichergestellt werden, dass ein Zusammenhang zwischen anthropogener Nutzung und Auftreten des zu betrachteten Proxies besteht.

ii. Der ökologische Anspruch der Proxies bezüglich der betrachteten Umweltvariablen ist für die Gegenwart bekannt und hat sich über die betrachteten Zeiträume nicht oder nur kaum verändert.

Die einzige Datengrundlage, die der Paläolimnologie (allgemein auch die der Paläökologie) zur Verfügung steht, um diesen Zusammenhang nachzuweisen, sind aktuelle Datenerfassungen. Nur auf Grundlage aktueller Eichdatensätze lässt sich der Zusammenhang zwischen einzelnen Proxies und einzelnen Umweltvariablen qualifizieren und quantifizieren (Erstellung von Optimumkurven, Transferfunktionen).

Die Rekonstruktion einer Umweltvariablen auf der Basis der ermittelten Beziehungen der Proxies zu derselbigen ist nur dann sinnvoll, wenn sichergestellt ist, dass die ökologischen Ansprüche der Proxies sich nicht im Laufe des betrachteten Zeitraumes geändert haben. Die Beantwortung der Frage nach der ökologischen Konsistenz der Arten kann in Hinsicht auf die in der Paläoökologie betrachteten Zeiträume nicht direkt geklärt werden. Indirekt kann folgendes angenommen werden: Wenn eine oder mehrere Arten ihre ökologischen Ansprüche gegenüber einer oder mehrerer Umweltvariablen durch genetische Veränderung geändert hat, dann muss dieses Auswirkungen auf die gesamte Artengemeinschaft hinsichtlich Präsenz oder Abundanz der einzelnen Arten haben. Das heißt in alten Sedimentschichten müssten Artengemeinschaften auftreten, die so aus rezenten Proben nicht bekannt sind. Solange dieses nicht der Fall ist, wird davon ausgegangen, dass es keine genetischen Veränderungen der Arten hinsichtlich ihrer wesentlichen ökologischen Ansprüche gegeben hat (Cohen 2003).

*iii. Für die prähistorischen bzw. historischen Artenzusammensetzungen existieren moderne Äquivalente (engl. modern analogues).* 

Generell ist die ermittelte Optimumkurve einer Art abhängig von den physiologischen (genetisch determinierten) Eigenschaften der Individuen einer Art (fundamentale ökologische Nische) sowie der Konkurrenzsituation und den in einem bestimmten Habitat wirkenden Umweltfaktorengefüge (realisierte ökologische Nische).



Abbildung 4: Änderung der Dichtefunktion eines Taxons A bezüglich einer Umweltvariablen in Konkurrenz zu einem Taxon B (linkes Bild) und einer Art C (rechtes Bild).

Tritt eine Art A mit einer Art B in Konkurrenz, so ist grundlegend davon auszugehen, dass die resultierende (realisierte) Optimumkurve der Art A abweicht von der resultierenden (realisierten) Optimumkurve der Art A, die aus einer Konkurrenz mit einer Art C hervorgeht (vorausgesetzt B und C haben verschiedene Optimumbereiche bezüglich der betrachteten Variablen, (siehe Abbildung 4). Demzufolge muss bei der Rekonstruktion einer Umweltvariablen auf Basis der Artenzusammensetzung in einem Sedimentkern und deren anhand rezenter Proben entwickelten Optimumkurven sichergestellt werden, dass die Konkurrenzsituationen in der Gegenwart und der Vergangenheit vergleichbar sind. Dies geschieht über eine Analyse der Ähnlichkeiten der Artenzusammensetzungen von Sedimentproben eines Sees und der Proben eines Eichdatensatzes (iii) (engl. modern analogues) (Overpeck et al. 1985).

iv. Die Fossilien haben den betrachteten Zeitraum relativ unbeschadet überdauert. Es hat keinen selektiven Verlust von z. B. besonders kleinen oder zartschaligen Taxa gegeben, der die Artenzusammensetzung im Sediment wesentlich verändert hat. Des Weiteren muss davon ausgegangen werden, dass diejenigen Reste der Proxies, die in das Präsediment eines Sees gelangen, im weiteren Verlauf der Sedimentanreicherung nicht selektiv zerstört werden. Würde eine anschließende selektive Zerstörung einzelner Proxies geschehen (z. B. durch hohen Druck im Sediment, geänderten pH-Wert) dürfen die Optimumkurven, die aufgrund der Artenzusammensetzung des Präsediments erstellt worden sind, nicht auf die (reduzierte) Artenzusammensetzung älterer Sedimentschichten angewandt werden.

v. Die Fossilien können auf einem hohen taxonomischen Level bestimmt werden, das heißt die Reste bzw. Bruchstücke, die in Sedimenten gefunden werden, lassen sich eindeutig einer Art bzw. einem Taxon zuordnen.

Die Identifizierbarkeit der einzelnen Proxies ist Grundlage für eine erfolgreiche Rekonstruktion von Umweltvariablen. Haben zwei Taxa unterschiedliche ökologische Ansprüche, wobei sie über eine hohe morphologische Ähnlichkeit verfügen, die eine Unterscheidung nur schwer möglich macht, können Fehler bei der Rekonstruktion auftreten. Ist z. B. das Taxon A ein Zeiger, der auf mesotrophe Verhältnisse in einem Gewässer hinweist, und das Taxon B ein Zeiger, der auf eutrophe Verhältnisse schließen lässt, so bewirkt eine Verwechselung der beiden Zeiger eine falsche Klassifizierung eines Gewässers. Eine hohe Sorgfalt von Seiten der Bearbeiter ist hier unumgänglich (Stoermer 2001).

Die systematische Zuordnung einzelner Taxa unterliegt einem ständigen Entwicklungsprozess. Dies ist bei der Kombination von älteren mit neuen Eichdatensätzen zu berücksichtigen. Nicht selten führen diese Veränderungen bzw. unterschiedliche Auffassungen bezüglich Abgrenzung von Arten und Unterarten im Kreis der Anwender zu Verwirrung (Stoermer 2001, Scheffler & Morabito 2003).

Cohen (2003) formuliert zusätzlich weitere Forderungen in Bezug auf die Arbeiten von Sachs et al. (1977) und Charles & Smol (1994):

- *i.* Die Proben eines Eichdatensatzes müssen voneinander unabhängig sein.
- ii. Die Erfassung der Umweltvariablen für den Eichdatensatz müssen die timeaveraging Prozesse, die für das Zustandekommen der Proben verantwortlich sind, abdecken (siehe Kapitel 1).

- *iii.* Der Eichdatensatz deckt den Gradienten des zu betrachtenden Umweltparameters komplett ab (siehe Kapitel 1.2.2).
- *iv. Die Varianz der Umweltvariablen im Eichdatensatz folgt einer Normalverteilung.*
- v. Für eine erstellte Transferfunktion gilt, dass die Fehlerwerte keinen Trend aufweisen, dass heißt es gibt keine zufälligen Effekte in den Residuen.

#### 1.1.1 Formen der Datenauswertung

Die Datengrundlage jeder paläolimnologischer Untersuchung sind ein oder mehrere Sedimentkerne aus dem zu untersuchenden Gewässer. Hierbei werden Rohre in das Sediment von Seen getrieben, basierend auf modifizierten Rammkolbenloten der Typen Kullenberg (1947) und Livingstone (1955) oder Gefrier-Probengeräte (Schmidt et al. 1995)<sup>1</sup>. Sind die Sedimentkerne nicht durch Rutschungen, Verluste (Hiatus) oder Bioturbation beschädigt, so stellen sie eine geordnete, mehrere Jahrzehnte bis Jahrhunderte umfassende Zeitreihe über die Entwicklung eines Sees dar (Alefs et al. 1996).

Die Aufbereitung der Proben eines Sedimentkerns erfolgt in der Regel separat für die einzelnen Proxies, da jedes für sich unterschiedliche Methoden zur Isolation aus dem Sediment benötigt z. B. Diatomeen (Kalbe & Werner 1974, Battarbee & Kneen 1982) oder Pollen (Faegri & Iversen, 1975). Die anschließende Auswertung erfolgt zunächst deskriptiv, das heißt die Entwicklung einzelner Proxies wird im betrachteten Zeitabschnitt beschrieben. Anschließend folgt eine Einordnung der gefundenen Artenzusammensetzungen und deren breiteren Kontext B. geologische Änderung in einen wie z. Veränderungen (Vulkanausbrüche, Gletscherläufe), bekannte Siedlungsbrüche historisch (die Völkerwanderung in Mitteleuropa, Holzeinschlag zur Verhüttung, 30igjähriger Krieg u. a.) und auf konkrete Gewässer bezogene Phänomene (Seespiegelanstieg durch Bau eines Wehres). Dies wird als narrative Datenauswertung bezeichnet. Abschließend werden mittels Transferfunktionen auf Grundlage der im Sediment gefundenen Artenzusammensetzungen solche Umweltvariablen rekonstruiert, die nicht unmittelbar aus dem Sediment bestimmbar sind.

Eine Herangehensweise analytische (Testen von Hypothesen, statistische Datenauswertung) Entwicklung schneller ist erst seit der und zuverlässiger Computerprogramme für die Auswertung multivariater Datensätze z. B. CANOCO (ter Braak

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Eine Zusammenfassung und Diskussion der Methoden findet sich in Last & Smol (2001a).

& Śmilauer 2002), PRIMER (Clarke et al. 2006), PC-ORD (http://home.centurytel.net/~mjm/index.htm) Anfang der neunziger Jahre, mit der Entwicklung von schnellen Permutationstests, möglich geworden (Efron 1982, van der Voet 1994). Es hat sich allerdings auch gezeigt, dass häufig verwendete Verfahren wie die Kanonische Korrespondenzanalyse (CCA) als Übersichtsverfahren gute Ergebnisse erzielen, im Detail jedoch nicht die Verbreitung einzelner Arten präzise wiedergeben (Guisan et al. 1999).

Birks & Birks (2006) diskutieren den Effekt, dass bei der Interpretation der Ergebnisse von Daten aus einem Sedimentkern ungewollte Fehler auftreten. Die Informationen, die in einem Sedimentkern enthalten sind, decken sich möglicherweise nicht immer unbedingt mit den bekannten Theorien, und die Gefahr, dieses eher als natürliches Rauschen der Daten zu interpretieren und abzutun, als dass die gängigen Theorien selbst überdacht werden, ist groß (Reinforcement Syndrome, Watkins 1971, Thompson & Berglund 1976, Bennett 2002). Dabei gestaltet sich die Verifikation bzw. Falsifikation von Theorien in der Paläoökologie als besonders schwierig, da es nur wenige geeignete Monitoringprogramme gibt, auf deren Grundlage die Ergebnisse überprüft werden können<sup>1</sup>.

#### 1.1.2 Relevanz der Forschung

Die mögliche Länge des Zeitraums der durch die Paläolimnologie rekonstruiert werden kann, richtet sich nach der Zugänglichkeit von Sedimentablagerungen und der Nutzbarkeit von Proxies in diesen Sedimenten. So umfassen die ca. sieben Kilometer langen Sedimente im Baikalsee einen Zeitraum von ca. 20 Millionen Jahren (Fietz & Nicklisch 2004), der Wostok Eiskern aus der Antarktis ca. 740.000 Jahre (EPICA 2004). Langfristige Veränderungen von Biotopen können somit erkannt und beschrieben werden.

Modelle zum besseren Verständnis der Art-Habitat-Beziehungen können erstellt bzw. auf ihre Anwendbarkeit auf historische Zeiträume hin überprüft und validiert werden. Im Falle des Baikalsees können Fragen nach der Evolution einzelner Organismengruppen im Zusammenhang mit der lokalen Entwicklung von Umweltparametern untersucht werden. Die Seen in Mittel- und Nordeuropa sind zum großen Teil glazialen Ursprungs. Ausnahmen sind z. B. die Maare in der Eifel (Schmidt & Wunsam 2001), so dass hier ein Zeitfenster von ca.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Birks & Birks (2006) weisen explizit darauf hin, dass die Evaluierung einer neuen Methode oder Theorie auf der Basis von Kreuzvalidierungsmethoden nicht ausreichend die Qualität eines Modells beurteilen lässt. Nötig ist immer die Verendung von unabhängigen Testdatensätzen. Damit befasst sich die Diskussion in der Studie II und die dort zitierte Literatur ausführlich.

12.000 Jahren erfasst und beschrieben werden kann. Im Mittelpunkt der Forschung steht der klimatische Einfluss im Spätglazial bzw. dem frühen Holozän, ab dem mittleren Holozän dann hauptsächlich der Einfluss des Menschen auf seine Umwelt.

Die Verfügbarkeit von sauberem Trinkwasser ist in vielen Regionen von existenzieller bzw. großer wirtschaftlicher Bedeutung für die Menschen. Bei der Entwicklung von Sanierungskonzepten z. B. für durch Nährstoffe, Mineralien oder extreme pH-Werte hoch belastete Seen, stellt sich die Frage, inwieweit die Belastungen anthropogenen Ursprungs sind. Dieses lässt sich nur mit der Kenntnis der historischen Entwicklung eines Gewässers klären, wobei die Paläoökologie wertvolle Informationen liefern kann (Dixit & Smol 1994).

In Europa hat die Paläoökologie im Rahmen der Umsetzung der europäischen Wasserrahmenrichtlinie (EG-WRRL 2000, EU 2000), nach der alle Seen >50ha bis 2015 (Verlängerung bis 2027) einen guten ökologischen Zustand aufweisen sollen, eine besondere Bedeutung erhalten (Bennion & Battarbee 2007). Um den guten ökologischen Zustand eines Sees definieren zu können, muss zunächst eine Erfassung des Istzustandes der Gewässer durchgeführt werden. Die anschließende Bewertung der Gewässer ist ein Vergleich des Istzustandes mit dem Referenzzustand. Der Referenzzustand ist definiert als anthropogen nur minimal beeinflusster Zustand eines Gewässers und ist dem sehr guten ökologischen Zustand gleichgesetzt (EU 2000). Für die Mehrheit der europäischen Seen bzw. Seetypen (Mathes et al. 2002) lassen sich aus aktuellen Daten wegen der weit verbreiteten Degradation der Seen durch Eutrophierungsprozesse keine gesicherten Referenzbedingungen definieren (Bennion et al. 2004, Bennion & Battarbee 2007). Die EU-WRRL (EU 2000, REFCOND 2003) empfiehlt aus diesem Grund, die Paläolimnologie als eine wichtige Methode zur Ermittlung der Referenzbedingungen zu nutzen, die zum einen Grundlage für eine aktuelle Bewertung und zum anderen Grundlage für gegebenenfalls notwendige Sanierungsmaßnahmen darstellt (Bradshaw et al. 2006, Hübener et al. 2009a).

In den letzten Jahren ist neben der Frage der Übersäuerung der Gewässer infolge des Sauren Regens (Davis & Anderson 1985, Charles et al. 1991, Birks et al. 1990, Dixit et al. 2002) und der anthropogen bedingten trophischen Veränderung von Gewässern (Anderson 1990, Hall & Smol 1999, Hübener et al. 2009a) die Frage nach der Erfassung des Klimawandels in den Fokus der paläoökologischen Forschung getreten. Im Moment steht die Suche nach geeigneten Proxies für die Rekonstruktion von Klimaänderungen im Vordergrund (Smol et al. 1995, Pienitz et al. 1995, Smol & Cumming 2000, Bigler & Hall 2001, Hausmann & Pienitz 2007). Wobei eine Trennung der Einflussgrößen unterschiedlicher Variablen gerade in Mitteleuropa (steigende Trophie, steigende Versauerung, schwankende Temperatur und schwankende Grundwasserstände unter anderen verursacht durch schwankende Nutzungsintensitäten des Menschen ) erschwert ist.

#### 1.2 Diatomeen als Bioindikatoren

Bacillariophyceae, auch als Diatomeen bezeichnet (dt. Kieselalgen), sind einzellige, diplonte photoautotrophe<sup>1</sup> Algen, welche einzeln oder in Kolonien in allen aquatischen<sup>2</sup> Systemen vorkommen. Sie verfügen über ein charakteristisches Cytoskelett, welches bis über 70% aus amorpher Kieselsäure mit unterschiedlichem Hydratisierungsgrad besteht. Diatomeen sind circumpolar verbreitet und kommen in nahezu allen feuchten Biotopen mit über 20000 Arten vor (Round et al. 1990). Gleichzeitig ist bekannt, dass eine Vielzahl von Arten mit den unterschiedlichsten auf aquatische Systeme einwirkenden Umweltvariablen korreliert sind und sich als Bioindikatoren eignen (Dixit & Dickmann 1986, Dixit et al. 1992, Stoermer & Smol 1999, Cohen 2003). Die kieselsäurehaltigen Schalen der Diatomeen lagern sich im Laufe der Genese eines Sees, Moores oder Meeres in deren Sedimenten ab. Dieses macht die Diatomeen zusätzlich zur rezenten Bioindikation interessant für die Paläoökologie.

#### 1.2.1 Anatomie, Morphologie, Verbreitung und Bedeutung der Diatomeen

Neben der Kieselsäure sind Polysaccharide (Pectine), Proteine und fettartige Stoffe weitere Bestandteile des Cytoskeletts. Cellulose kommt nicht vor. Das Cytoskelett ist in zwei Hälften geteilt und ineinander verschachtelt, ähnlich Deckel und Boden einer Petrischale. Die beiden Schalenhälften (Valven, Frusteln) verfügen über artspezifische "Muster" -Durchbrüche in der Schalenwand, die einen Stoffaustausch mit der Umwelt ermöglichen (siehe Abbildung 5) und die Grundlage für eine systematische Ordnung und Artendiagnose darstellen (Hustedt 1939, Round et al. 1990, Stoermer 2001). Sie verfügen über Chlorophyll a, c<sub>1</sub> und c<sub>2</sub>, β-Carotinoide und Xanthophylle (Diadinoxanthin, Diathoxanthin und Fucoxanthin). Vor allem

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Auch heterotrophe, aus der Gattung Nitzschia und Hantzschia, (z. B. Li & Volcani 1987), sowie symbiotische Lebensweisen sind beschrieben.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Ausgenommen sind sehr heiße Thermalquellen und hypersaline Gewässer (Round et al. 1990).

das Fucoxanthin ist für die Braunfärbung der meisten Diatomeen verantwortlich. Chrysolaminarin dient als wichtigster Speicherstoff. Eine Besonderheit der Ordnung der Centrales (runde, überwiegend planktische Formen) ist das Vorhandensein von Stützfortsätzen (Fultoprtulae), durch die nadelförmige, den Zellkörper oft mehrfach überragende Schwebefortsätze aus der Zelle hervortreten. Diese bestehen aus kristallinem (Herth & Zungenmeier 1977) beta-Chitin und kompensieren den für die Schwebeeigenschaften nachteiligen Effekt des relativ schweren Silizium-Skeletts. Sie ermöglichen einen längeren Aufenthalt in der euphotischen Zone eines Gewässers.

Diatomeen tragen nach Werner (1977) erheblich (ca. 25%) zur weltweiten Primärproduktion bei. Dabei zeigen einige Arten eine große Abhängigkeit gegenüber bestimmten Habitaten. Ein Großteil der Arten hingegen, scheint eine kosmopolitische, generalistische Verbreitung zu besitzen (Krammer & Lange-Bertalot 1986, Round et al. 1990).

Neben der wichtigen Funktion als global und lokal bedeutsame Primärproduzenten werden Diatomeen auf vielfältige Weise vom Menschen genutzt. Mächtige Ablagerungen von Kieselalgenschalen aus tertiären interglazialen warmen Flachmeeren (Kieselgur) werden industriell abgebaut und dienen unter anderem als Träger von Düngemitteln, Pestiziden und Insektiziden, als Bestandteile von Filteranlagen, Anstrichmitteln, Kunststoffen, Tabletten und Dynamit (75% Nitroglyzerin und 24.5% Kieselgur). Aber auch im Bereich der Kosmetik finden die Schalen dieser Algengruppe Verwendung (Spiegel 44/2007: Algen auf den Lippen, http://wissen.spiegel.de/wissen/dokument/dokument.html?id=53440385&top=SPIEGEL).

#### 1.2.2 Autökologie von Diatomeen

Maßgeblich für die Verbreitung der Diatomeen ist zunächst der Gehalt an verfügbarem Silikat für den Aufbau der Schalen. Dabei können Diatomeen den Silikatgehalt in Seen bis unterhalb der Nachweisgrenze reduzieren (Round et al. 1990). Ist ausreichend Silikat vorhanden, so spielen andere Parameter eine wesentliche Rolle.

Bereits Kolbe (1927) und Hustedt (1939) stellten fest, dass Diatomeen sehr deutlich auf Schwankungen des pH-Wertes reagieren. In der Literatur werden zum Teil sehr eng gefasste pH-Wert-Abstufungen bezüglich der Verbreitung der Arten gezogen (Cholnoky 1968). Modelle, die einen Zusammenhang zwischen der Verbreitung einzelner Arten und dem pH-Wert modellieren, verfügen über zum Teil sehr gute Modelldiagnostiken (Charles & Witehead 1986, Smol et al. 1986, Batterbee & Renberg 1990, Batterbee et al. 1999). Dabei sind indirekte Effekte eines reduzierten pH-Wertes (z. B. verringerte Verfügbarkeit von gelöstem anorganischen Karbonat und erhöhte Löslichkeit von anorganischem Nitrat und Metallen wie Aluminium und Cadmium) wohl eher ausschlaggebend für die Verbreitung einzelner Arten als der pH-Wert an sich (Planas 1996). Die Frage, ob Diatomeen eher durch eine stenöke oder euryöke Beziehung zum pH-Wert gekennzeichnet sind, wird von einigen Autoren kontrovers diskutiert (Pither & Aarssen 2005, Telford et al. 2006).

Die Salinität und Alkalinität spielen für die Verbreitung der einzelnen Arten eine ebenso große Rolle (Gasse et al. 1987, Fritz 1990, Cumming & Smol 1993, Fritz et al 1999). Ein Vergleich entsprechender Modelle mit real gemessenen Daten zeigt gute Übereinstimmungen (Cohen 2003). Weitere Nährstoffe wie Phosphat oder Nitrat sind generell für alle planktisch/benthisch lebenden Algen als wesentliche Grundlage für den (Energie-) Stoffwechsel von großer Bedeutung. Es lassen sich bezüglich der Ansprüche an die unterschiedlichen Nährstoffe bzw. deren Verhältnis zueinander deutliche Artpräferenzen feststellen (Krammer & Lange-Bertalot 1986, Round 1990, van Dam et al. 1994, Smol & Hall 1999, Miettinen 2003). Temperatur (Lotter & Bigler 2000, Chipman et al. 2009), Eisbedeckung (Padisák et al. 2004) und Gewässertiefe (Duthie et al. 1996, Wolin & Duthie 1999) sind weitere Faktoren, die einen deutlichen Einfluss auf die Artenzusammensetzung haben können.

Einfluss Generell ist der der Umweltparameter auf planktische Diatomeengesellschaften wesentlich besser bekannt und untersucht als der auf benthische (Krammer & Lange-Bertalot 1986, Round et al. 1990, Choen 2003). Zum einen ist die Diversität benthischer Arten viel größer, zum anderen ist die Wechselwirkung zwischen den Faktoren Nährstoffe, Gewässertiefe, Substratverfügbarkeit und Art des Substrates sowie der Turbulenzen im Uferbereich auch wesentlich komplexer. Eine Zuordnung in rein planktische bzw. rein benthische Arten ist oft nicht möglich (Lund 1954, Round et al. 1990, Barker et al. 1994). Schönfelder et al. (2002) schreibt allen Taxa eine benthische Lebensweise zu, von denen einige auch im Plankton längerfristig lebensfähig sind. Im Aufwuchs von Schilf oder Steinen lassen sich neben typisch benthischen Arten auch immer solche finden, denen von unterschiedlichen Autoren eine rein planktische Lebensweise zugeordnet wird. Als tychopelagisch lebende Taxa werden solche Arten bezeichnet, die als Kolonien im Bewuchs wachsen, bei ausreichender Turbulenz jedoch auch ins Pelagial verdriftet werden können und dort aufgrund filigraner Kolonieformen (Bänder: Fragilaria<sup>3</sup> sp., Zick-Zack-Strukturen:

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Die Benennung der einzelnen Taxa in dieser Arbeit ist nicht vollständig auf dem neuesten Stand der Taxonomischen Forschung. Diese liegt darin begründet, das ein Großteil der in dieser Arbeit verwendeten Datensätze (siehe Anhang Tabelle 2, Anhang 6 Tabelle 1) nicht auf dem aktuellen Stand sind. Ein Abgleich der

*Diatoma* sp., *Tabellaria* sp.) auch längerfristig schwebefähig bleiben. Auch die Komplexität des Zusammenlebens der Individuen einzelner Arten ist nur ungenau bekannt. Viele Arten können sich zu Ketten oder Kolonien unterschiedlichster Formen vereinigen. Passy (2002) beschreibt einen positiven Zusammenhang zwischen der Komplexität benthischer Kolonien und deren Toleranz gegenüber Umweltschwankungen in Fließgewässern.



Abbildung 5: Schalen von Diatomeen unterschiedlicher Taxa. Die Formen und Schalendurchbrüche sind artspezifisch und lassen in der Regel eine eindeutige Zuordnung der Schalenhälften zu einem Taxon zu. Unten links ist die typische "Zählsituation zu sehen".

einzelnen Taxa untereinander war für einige Teilaspekte dieser Arbeit (z. B. siehe Anhang 3, 5, 6) nötig. Eine Veröffentlichung des MV- Eichdatensatzes (siehe Anhang 1) auf der Basis der aktuellen Literatur hätte einen solchen Abgleich nicht möglich gemacht. Die entsprechenden Autoren der hier verwendeten taxonomischen Bezeichnungen sind zusammen mit dem MV- Eichdatensatz unter www.biologie.uni-rostock.de/abt/botanik/AG-Phykologie/index-engl.htm zum Herunterladen freigegeben.

#### 1.3 Transferfunktionen in der Paläoökologie

Wie in Kapitel 1 beschrieben, wird mit Hilfe sogenannter Transferfunktionen, ausgehend von rezenten Artenzusammensetzungen, versucht, auf Basis fossiler Artenzusammensetzungen verschiedene Umweltvariablen im Laufe der Ontogenese eines Sees zu rekonstruieren.

Die mathematischen Verfahren, die zur Verfügung stehen, diese Beziehungen zu formulieren, sind äußerst vielfältig und nur teilweise in einzelnen Veröffentlichungen zusammenfassend diskutiert (Birks 1995, Birks 1998). Neben multiplen Regressionsanalysen (basierend auf dem linearen Modell oder dem verallgemeinerten linearen Modell), Hauptkomponentenanalysen und Kanonischen Korrespondenzanalysen sind verschiedenste andere multivariate Verfahren (Multi Dimensional Scaling, Self Organizing Maps, Artificial Neural Networks), Regressionsbäume und Verfahren der Bayesschen Statistik in der Literatur zu finden (Imbrie & Kipp 1971, Webb & Bryson 1972, ter Braak & Prentice 1988, ter Braak & van Dam 1989, ter Braak & Juggins 1993, Pan et al. 1999, Vasko et al. 2000, Racca et al. 2004, Holden et al. 2008, Weilhoefer et al. 2008). Eine umfassende Darstellung und Diskussion dieser Methoden würde den Rahmen dieser Arbeit überfordern. Aufgrund der mathematischen Komplexität einer Vielzahl dieser Verfahren und der noch immer aufwendigen Umsetzung in Computeralgorithmen, sind diese Verfahren kaum in der Literatur zu finden.

Von all den zur Verfügung stehenden Modellen zur Erstellung einer Transferfunktion haben sich solche etabliert, die auf der Idee einer unimodalen Artenverteilung beruhen (Cohen 2003) (siehe Kapitel 3.5). Die Weighted Averaging (WA) Regression (ter Braak and Looman 1986, ter Braak & van Dam 1989) bzw. Weighted Averaging – Partial Least Square Regression (WA-PLS) (ter Braak & Juggins 1993) sind die beiden Methoden, welche in der Paläoökologie die häufigste Anwendung finden (Birks 1998, Racca 2004) (siehe Abbildung 2). Die WA ist ein erwartungstreuer Schätzer (Parameterschätzung siehe z. B. Fahrmeir et al. 2007) für das Optimum der Gausschen Normalverteilungskurve (z. B. ter Braak & van Dam 1989, Jongman et al. 1995). Somit ist die Verwendung der WA- bzw. der WA-PLS-Regression vor allem bei kurzen Gradienten fragwürdig (vgl. Greig-Smith 1983, ter Braak & Looman 1986, Oksanen & Minchin 2002, McCune 2002, Racca et al. 2004). In mehreren Studien wurde belegt, dass die Anzahl unimodal verteilter Arten in einem Eichdatensatz sehr gering ist (z. B. Racca et al. 2004, Studie I und V). Somit ist die Verwendung dieser Methoden durchaus kritisch zu sehen. Neben den Transferfunktionen existieren eine Reihe von Diatomeen-Indizes (Hofmann 1994, Kelly & Whitton 1995). Jedoch basieren diese ebenfalls auf der Methode der WA. Der Unterschied ist, dass keine klassischen Optima berechnet sondern die "Optima" auf einen gewissen Bereich (0-5 oder 0-10) skaliert werden. Alle diese Indizes haben als Grundannahme in ihrer Berechnung, dass die Arten unimodal und symmetrisch verteilt sind (Verwendung von Mittelwerten). Eine Ausnahme stellt der Saprobien-Index von Zelinka und Marvan (1961) dar, die die Auftrittswahrscheinlichkeit bestimmter Organismen in fünf Kategorien einteilen.

Grundsätzlich ist das Zusammenspiel mehrerer Umweltparameter und deren Auftreten einer Art<sup>1</sup>. Die univariate Wechselwirkung ausschlaggebend für das Betrachtungsweise der WA bzw. WA-PLS basiert auf der Annahme, dass es einen wesentlichen Umweltgradienten gibt, der einen Großteil der Varianz der Arten im betrachteten System steuert<sup>2</sup>. Dieser Parameter wird im Bereich der Paläoökologie durch das Verfahren der CCA bestimmt. Problematisch ist hierbei, dass die CCA wiederum auf der WA basiert, somit also ein unimodales Modell als Grundlage besitzt. Racca et al. (2004) schlägt vor, alle Arten, die keiner unimodalen Verteilung folgen, aus der Berechung der Transferfunktion herauszulassen. Nach Köster et al. (2004) sind Arten mit einer großen Toleranz bezüglich eines Parameters auszuschließen. Aus beiden Arbeiten geht nicht hervor, inwieweit die relativen prozentualen Anteile der übrigen Taxa nach dem Ausschluss der nicht unimodal verteilten Taxa neu berechnet werden. Auf jeden Fall wird ein Teil der Information (Biodiversität) aus den Proben herausgelassen. Da es sich bei der Analyse der Sedimente, aber auch der rezenten Proben, jeweils um Analysen von Artgemeinschaften handelt, erscheint dieses Vorgehen des selektiven Ausschlusses einiger Arten fragwürdig. Grundsätzlich aber fehlt der Nachweis, welcher Parameter für die einzelnen Arten tatsächlich ausschlaggebend ist. Die CCA ist ein grobes Übersichtsverfahren, welches im Detail die Artenpräferenzen nur schlecht wiedergeben kann (Guisan et al. 1999). Dabei zeigen einzelne

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die ökologische Nische einer Art wird als ein mulidimensionales Beziehungsgefüge verstanden (ndimensionaler [Hyper-] Raum) (Hutchinson 1957), wobei jede Dimension einer Umweltvariable entspricht (Kratochwil & Schwabe 2001). Es wird unterschieden zwischen einer fundamentalen und einer realisierten ökologischen Nische. Die fundamentale ökologische Nische ist die Summe aller abiotischen Umwelteinflüsse, bei denen ein Lebewesen theoretisch unter Konkurrenzausschluss überleben könnte (Hutchinson 1957) Dies wird auch als autophytische Dimension bezeichnet (Günther 1950). Die realisierte Nische beschreibt hingegen den Teilraum der fundamentalen Nische, den eine Art unter der Einbeziehung inter- und intraspezifischer Konkurrenz sowie Räuber-Beute-Beziehungen für sich nutzen kann. Bereits Ellenberg (1953) hat bemerkt, dass sich das physiologische Präferendum (d.h. ohne interspezifische Konkurrenz = fundamentale Nische) von dem ökologischen Präferendum (in Konkurrenz mit anderen Arten in einem Biotop = realisierte Nische) unterscheiden.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Gesetz des Minimums: Ressourcen sind nicht austauschbar und diejenige Ressource, die am geringsten in einem Biotop vorhanden ist, kontrolliert die Entwicklung der Biomasse (z. B. Lampert & Sommer 1999).

Arten bezüglich der Frage, welcher Umweltparameter für deren Abundanz maßgeblich steuernd ist, unterschiedliche Verhaltensweisen (Weilhoefer & Pan 2008).

Die WA errechnet in einem ersten Schritt für alle Arten des Eichdatensatzes basierend auf den ermittelten relativen Artabundanzen und der zugehörigen Umweltvariable ein Optimum (WA-PLS: "updated optimum", ter Braak & Juggins, 1993) bezüglich der betrachteten Umweltvariablen. Inwieweit es dabei mit dieser Methode möglich ist, das tatsächliche Optimum einer Art in einer bestimmten Region zu erfassen, hängt zum einen von der Verteilung der betrachteten Arten bezüglich der Umweltvariablen ab (siehe Abbildung 1) und zum anderen davon, inwieweit der verwendete Eichdatensatz das tatsächliche Optimum der Art überdeckt (siehe Kapitel 1, Kapitel 3.3, Abbildung 5). Deckt der Eichdatensatz die Verbreitung der enthaltenen Arten gut ab, so ist die WA eine geeignete Methode zur Rekonstruktion von Umweltvariablen (ter Braak & van Dam 1989). Die Qualität der Ergebnisse der WA hängt somit von der Verteilung der Arten, aber auch wesentlich von dem verwendeten Eichdatensatz ab. Battarbee et al. (2008) und Holden et al. (2008) kommen anhand eines Vergleiches zwischen Messdaten und durch Transferfunktionen indizierten Daten ebenfalls zu dem Schluss, dass die Qualität des Eichdatensatzes grundsätzlich die Qualität der Rekonstruktion einer Umweltvariable beeinflusst, unabhängig von der verwendeten Methode zur Erstellung eines Eichdatensatzes. Inwieweit die schlechten Ergebnisse der WA auf der Tatsache beruhen, dass die Verteilung der Arten nicht unimodal ist bzw. dass der Eichdatensatz die Verteilung der Arten nicht ausreichend abdeckt, ist nicht eindeutig zu klären. Wenn in einem Eichdatensatz viele Arten nicht unimodal verteilt sind, kann das auf Grund der Tatsache beruhen, dass der Eichdatensatz unvollständig ist. Da in der Regel nur eine begrenzte Zahl von Stichproben in einem Eichdatensatz zur Verfügung stehen, und die vorhandenen Eichdatensätze selten durch weitere Stichproben aus einer Region ergänzt werden, ist nicht zu klären, wo die Ursachen liegen. Demzufolge werden Methoden benötigt, die auch aufgrund von unzureichenden Eichdatensätzen und/oder schief verteilten Arten deren Optima schätzen können.

Die Problematik der Art-Habitat-Modellierung ist in vielen Bereichen der Pflanzenund Tierökologie mit unterschiedlichen Modellen untersucht worden. Smooth-Funktionen (Austin 1987), Weighted Averaging Regression (WA) (ter Braak & van Dam 1989) bzw. Weighted Averaging – Partial Least Square Regression (WA-PLS) (ter Braak et al. 1993), Generalized Linear Models (GLM) (Austin et al. 1990), Beta-Funktion (Austin et al. 1994), Maximum Likelihood auf der Basis des Gausschen Modells (Oksanen et al. 1988), Generalized Additive Models (Oksanen et al. 2002, Heegaard 2002, Ponader & Potapova 2006, Zarauz et al. 2008), Regressionsbäume (Weilhoefer et al. 2008) und logistische Regression (Huisman et al. 1993) sind nur einige Beispiele für den Versuch, die Reaktion einer Art auf die Änderung eines oder mehrerer Umweltparameter zu beschreiben. Methoden der Bayesschen Statistik finden dabei eine immer größere Verbreitung (Vasko et al. 2000, Korhola et al. 2002, Holden et al. 2008). Wobei sich bisher die Analyse der Modelle auf die Vorhersagefehler beschränken und keine deutlichen Verbesserungen im Vergleich zu herkömmlichen Modellen erzielt werden konnten (Holden et al. 2008).

Soll die Antwort mehrerer Arten auf unterschiedliche Umweltvariablen simultan analysiert werden (multivariate Analysen), so gibt es auch hier eine Reihe von unterschiedlichen Ansätzen, wie z. B. CCA, DCCA, RDA, NMDS, TWINSPAN, Clusteranalysen (Zusammenfassende Darstellung bei Jongman et al. 1995) und Artificial Neural Networks (ANN, Hastie et al. 2009). Die zur Zeit noch wenig angewandten Methoden VGLM bzw. VGAM (Yee & Mackenzie 2002, Yee & Stephenson 2007) und MASR (Hastie et al. 2009) versprechen einen guten Ansatz, der die Idee der multivariaten Verfahren mit denen der Bayesschen Mathematik verbindet bzw. die Idee der Regressionsbäume mit denen der Neuralen Netze. Aufgrund der mathematischen Komplexität der Analysen und aufwendigen Umsetzung in Computeralgorithmen sind diese Verfahren kaum in der Literatur zu finden. Im Bereich der marinen Säugetier- und Vogelökologie setzten sich vermehrt stochastische Verfahren, wie z. B. GLM und GAM in Verbindung mit Markow Chain Monte Carlo Prozessen (MCMC) durch (z. B. Fahrmeir & Lang 2001, Aarts et al. 2008, Schwemmert et al. 2009, Sonntag et al. 2009).

Es ist denkbar und recht einfach durchführbar, eine Transferfunktion auf Grundlage eines GAM's bzw. als multivariate Variante als Artificial Neural Networks (ANN) zu konstruieren, was im Falle des ANN bereits in der Literatur umgesetzt wurde (Racca et al. 2001, Köster et al. 2004, Racca et al. 2004). Allerdings haben beide Verfahren den Nachteil, dass sie für das Verständnis der Beziehung zwischen Art und Umweltparameter keinen genauen Aufschluss geben. Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit auf die Verwendung von ANN's als Transferfunktion bzw. auf Self Organizing Map (SOM) (z. B. Tison et al. 2005, Grenier et al. 2006, Park et al. 2006) zur Ermittlung der Art-Habitat-Beziehungen verzichtet. Die Verwendung nichtparametrischer Verfahren (MDS, NMDS, ANOSIM), welche in der amerikanischen Literatur des öfteren auftreten (Naymik et al. 2005, Soininen 2005, Weilhoefer & Pan 2006), ist aus mehreren Gründen ausgeschlossen worden. Zum einen basieren diese Verfahren ausschließlich auf Distanzmatrizen, deren Berechnung vom Anwender bereits die erste subjektive Entscheidung des Distanzmaßes fordert, und zu einem erheblichen Informationsverlust führen. Zum anderen ist das Verhalten des Qualitätskriteriums der MDS (NMDS), die so genannte Stress-Funktion, nicht eindeutig verstanden (Gower 1984). Die Interpretation der Ergebnisse ist äußerst schwierig, da die Fragestellung oft nicht mit dem mathematischen Verfahren übereinstimmen, und die Algorithmen gelten als umständlich und veraltet (Gower 1984). Die Methoden der MDS (NMDS) sind numerisch instabil, das heißt jede neue Analyse liefert ein unterschiedliches Ergebnis bzw. das Ergebnis hängt vom jeweilig verwendeten Algorithmus ab. Eine gute Gegenüberstellung dieser Verfahren liefert Doledec & Chessel (1994).

Weitere Verfahren wie z. B. Co Inertia (Doledec & Chessel (1994), Modern Analogues (ter Braak 1995) und TWINSPAN (z. B. Jongman et al. 1995) wurden hier nicht weiter in die Untersuchung einbezogen. Es handelt sich dabei um Verfahren, die mit der CCA bzw. der linearen Version der CCA, der Principal Correspondence Analysis (PCA), verwandt sind (TWINSPAN = Rekursive PCA) und somit stellvertretend durch diese hier repräsentiert werden.

Die Erstellung von Transferfunktionen geht ebenfalls einher mit der Verfügbarkeit von Softwarepaketen und entsprechenden Rechenkapazitäten von Computern. Während die WA-Regression mit relativ einfachen Mitteln in dem Tabellenkalkulationsprogramm EXCEL durchgeführt werden kann, setzen die übrigen Verfahren bereits eine höhere Programmierfertigkeit der Anwender voraus bzw. die Nutzung von Programmpaketen wie WCALIP, C2 oder den Umgang mit der Open Source Statistikplattform R und den dort vorhandenen Paketen, wie z. B. analogue (Simpson & Oksanen 2009), rioja (Juggins 2009) und paltran (Adler 2009). die speziell für die Anwendung in der Paläolimnologie entwickelt wurden.

Einzelne Programmpakete, die jeweils nur einen Typ von Transferfunktion berechnen können, z. B. PaleoNet (Racca et al. 2007) sind aufwendig in der Installation, dem Datenimport (-Export) und im Vergleich mit den Ergebnissen von anderen Programmpaketen.

## 1.4 Variabilität der Artenzusammensetzung von Diatomeen im Präsediment– Zielstellungen der Arbeit

Die Prozesse, die bei der Einlagerung von Diatomeenschalen in das Sediment eines Sees die dortige Artenzusammensetzung steuern, sind vielfältig und nur schwer qualitativ und quantitativ zu beschreiben (siehe Kapitel 1, Cohen 2003). Die Artenzusammensetzung von Diatomeen im Präsediment kann aufgrund dieser Prozesse nicht als eine Mischprobe aller Diatomeen-Artengemeinschaften eines Sees angesehen werden. Andererseits werden die Präsedimentproben als Stichproben bei der Erstellung von Eichdatensätzen genutzt, um die Verbreitungsoptima der einzelnen Arten hinsichtlich bestimmter Umweltvariablen, die in der Regel mehrfach im Jahresverlauf im Freiwasser gewonnen werden, zu ermitteln. Dabei haben die gemessenen Umweltvariablen zwar einen direkten Zusammenhang mit den zeitgleich im See vorgefundenen Artengemeinschaften, jedoch nur einen indirekten Zusammenhang mit den Artenzusammensetzungen des Präsediments. Aus dieser Problematik heraus folgen unmittelbar drei Fragestellungen.

- i. Wie gut ist der Zusammenhang zwischen den Diatomen-Artenzusammensetzungen des Präsediments von Seen und den im Freiwasser gemessenen Umweltvariablen?
- ii. Wie repräsentativ ist eine Präsedimentprobe für (i) die Diatomeen-Artengemeinschaften innerhalb eines Sees und (ii) für die Gesamtheit der im Präsediment eines Sees eingetragenen Artenzusammensetzungen von Diatomeen?

Die Fragen (i) und (ii) beziehen sich direkt auf die Erstellung von Eichdatensätzen. Wie gut ist die Qualität von Eichdatensätzen, und wie müssen die Proben (Präsedimentproben und Proben zur Bestimmung der Umweltvariablen) für die Erstellung eines Eichdatensatzes gewonnen werden? Die Frage (iii) hingegen stellt die Frage nach der Qualität der Vorhersagekraft einer auf einem Eichdatensatz beruhenden Transferfunktion. Diese drei Fragestellungen können auch unter dem Aspekt der Variabilität von Diatomeen-Artenzusammensetzungen betrachtet werden.

Zwischen den einzelnen Gewässern eines Eichdatensatzes existiert eine Variabilität der Artenzusammensetzung in Abhängigkeit von einer Vielzahl von Umweltvariablen (Fragestellung i). Dieser Aspekt der Variabilität wird in der Studie I dieser Arbeit genauer untersucht.

Es ist aus der Literatur bekannt, dass sich die taxonomische Zusammensetzung der Diatomeenzönose im Präsediment in Abhängigkeit zur Entfernung von Ufer verändern (Lotter & Bigler 2000, Kauppila 2002, Heiri 2004). Es gibt somit eine räumliche Variabilität der Artenzusammensetzung im Präsediment innerhalb eines Sees, das heißt eine einzelne Präsedimentprobe ist nicht repräsentativ für die Artenzusammensetzung der Diatomeen bezogen auf das gesamte Untersuchungsgewässer. Diesen zweiten Aspekt der Variabilität untersucht die Studie II dieser Arbeit.

Neben der räumlichen Variabilität spielt in einem See die saisonale Variabilität eine Rolle. So setzt sich die Diatomeenbiozönose im Benthos und im Pelagial eines Gewässers saisonal aus unterschiedlichen Arten zusammen (Horn & Horn 1993, Köster & Pienitz 2006, Kirilova et al. 2008). Inwieweit lassen sich diese saisonalen Effekte in den Artenzusammensetzungen im Präsediment wieder finden? In der Studie III wird versucht, mit Hilfe von Sedimentationsfallen sich dieser Frage zu nähern.

Welchen Einfluss hat die Variabilität der Präsedimentproben (sowohl innerhalb eines Sees, als auch zwischen den Seen) auf die Nutzung unterschiedlicher Methoden zur Erstellung einer Transferfunktion (Fragestellung 3)? Diesen Aspekt untersuchen die Studien II, III, V und VI.

#### 1.4.1 Sample selection for training sets: The North German diatom training set (Studie I)

Die Nutzung von Diatomeen als Indikatoren setzt voraus, dass die Ansprüche der Arten bezüglich der relevanten Umweltparameter bekannt sind (siehe Kapitel 1.1, Roberts 1989). Die Ansprüche der einzelnen Arten werden auf der Basis der Eichdatensätze gewonnen. Für Norddeutschland existierte bereits ein kleiner 35 Seen umfassender Eichdatensatz (Hübener et al. 2001), der in dieser Arbeit ergänzt worden ist, um die autökologischen Ansprüche der einzelnen Arten möglichst umfangreich charakterisieren zu können. Um den Vorhersagefehler der resultierenden Transferfunktion möglichst gering zu halten (besonders hinsichtlich des Einflusses weiterer Umweltvariablen (Hausmann & Kienast 2006), wurde nach Verfahren gesucht, die eine Optimierung der Vorhersagekraft der Transferfunktion ermöglichen.

#### Zielstellungen und spezielle Fragen:

- Es soll ein Eichdatensatz für MV erstellt, bzw. der vorhandene ergänzt werden.
- Welche Umweltvariablen bestimmen die Verbreitung der Diatomeenarten?
- Können aus dem Eichdatensatz homogene Teildatensätze für eine bessere Qualität der Bioindikation bestimmt werden?

# 1.4.2 Spatial variability of diatom assemblages in surface lake sediments and its implications for transfer functions (Studie II)

Innerhalb eines Sees existieren für benthische Diatomeen eine Reihe unterschiedlicher Habitate. Diese sind durch unterschiedliche biogene und abiogene Substrate (Makrophyten, Schilf, Steine, Holz, Schlick, Sand), unterschiedliche Lichtverhältnisse (Wassertiefe, Schattenverlauf) und Strömungsintensitäten (Windexposition des Ufers, Durchströmung des Sees von einem Fließgewässer) gekennzeichnet. Auch das Plankton unterliegt ständigen Durchmischungsverhältnissen, unterschiedlichen Lichtbedingungen und hoch variablen Nährstoffverhältnissen. Die Annahme der Paläoökologen, dass eine Präsedimentprobe repräsentativ die Artenzusammensetzung eines gesamten Sees wiederspiegelt (siehe Kapitel 1 und 1.3), erscheint daher für Seen des norddeutschen Tieflandes zweifelhaft. Anhand von Transektstudien in vier Seen Mecklenburg-Vorpommerns sollte daher die Variabilität der Artenzusammensetzung einen Einfluss auf die Ergebnisse von verschiedenen Methoden der Transferfunktionen hat.

#### Zielstellungen und spezielle Fragen:

- Es soll die Verteilung von Diatomeen im Präsediment von vier Seen im norddeutschen Tiefland beschrieben werden.
- Hat die Verteilung der Diatomeen im Präsediment einen Einfluss auf die Vorhersagegüte von Transferfunktionen?
- Welcher Eichdatensatz eignet sich am besten zur Indikation der messtechnisch erhobenen TP-Werte für die betrachteten Seen?
• Welche Methode zur Erstellung einer Transferfunktion eignet sich am besten zur Indikation der messtechnisch erhobenen TP-Werte für die betrachteten Seen?

### 1.4.3 Dynamic adjustment of training sets ('moving-window' reconstruction) by using transfer functions in paleolimnology—a new approach (Studie III)

Eine Bedingung für die Anwendung einer Transferfunktion ist, dass im genutzten EDS für jede fossile Probe mindestens eine rezente Eichprobe mit einem möglichst hohen Grad an Übereinstimmung (Arten, Abundanzen) existiert (siehe Kapitel 1.1, Roberts 1989,). Aufgrund dieser Forderung wurde die Methode der Modern Analogues (MAT) (ter Braak 1995) in der Paläoökologie entwickelt. Hierbei werden aus einem EDS für jede fossile Sedimentprobe n ähnliche moderne Äquivalente herausgesucht und deren TP-Werte (bzw. diejenigen Umweltvariablen, die von Interesse sind) gemittelt. Dieser Mittelwert wird anschließend der fossilen Probe zugeordnet (siehe Kapitel 1.3). Eine Berechnung von Artoptima findet hierbei nicht statt.

Der MV-EDS besteht wie erwähnt aus Daten zumeist eutropher Seen. Die starke Belastung der Seen Mecklenburg-Vorpommerns resultiert hauptsächlich aus anorganischen und organischen Nährstoffeinträgen infolge intensiver landwirtschaftlicher Nutzung seit Anfang bzw. Mitte des letzten Jahrhunderts sowie aus dem bis in die achtziger Jahre verstärkten Eintrag von Nährstoffen aus Abwässern kommunaler Kläranlagen. Demzufolge gibt es im MV-EDS kaum Äquivalente für mesotrophe oder oligotrophe Trophiezustände. Diese werden jedoch in den Kernen aus norddeutschen Seen durchaus gefunden (z. B. Dreßler et al. 2006, Hübener & Dörfler 2004, Hübener et al. 2009a). Für die Rekonstruktion der Trophie müssen deshalb andere Eichgewässer mit hinzugezogen werden, um den gesamten Trophiegradienten abdecken zu können.

Bei einer reinen Zusammenlegung von verschiedenen EDS kann es zu einer Reihe von Problemen kommen. Die EDS müssen taxonomisch vereinheitlicht werden. Die geomorpologischen und geochemischen Bedingungen der EDS sind nicht direkt vergleichbar, so dass die Artenoptima hinsichtlich einer bestimmten Umweltvariable für einzelne Arten unterschiedlich sein können (siehe Abbildung 4). Eine einfache Zusammenlegung von EDS (Dreßler et al. 2006) erscheint aus diesem Zusammenhang schwierig. Der Vorschlag von Hübener und Dörfler (2004), die Proben des Sedimentkernes aufzuteilen und mit zwei unterschiedlichen EDS den TP dieser zwei Zeitabschnitte zu berechnen, sollte der Problematik der veränderten Artenzusammensetzung im Sedimentkern gerecht werden. Dieser Ansatz wurde in der vorliegenden Studie optimiert und die Idee der Methode der MAT mit der WA- bzw. WA-PLS- und ML- Methode verknüpft, wobei im Gegensatz zur MAT die Anzahl der n Modern Analogues variabel gehalten werden. Für die Ermittlung der Modern Analogues für jede einzelne Sedimentprobe in den EDS wurde neben der reinen Distanzberechnung über die Ähnlichkeiten der Artenzusammensetzungen (Chord Distance) der Weg über eine Detrended Correspondence Analysis (DCA) (Hill & Gauch 1980) gewählt, wobei die Sedimentproben als passive Proben (Gewicht = 0.0001 in CANOCO, Funktion predict.decorana in Paket vegan (Oksanen et al. 2009) in R (R Development Core Team 2009) in das Ergebnis der Analyse eingehen.

#### Zielstellungen und spezielle Fragen:

 Der Ansatz der MAT-Methode soll basierend auf der WA-PLS- (ML-) Methode bei einer dynamischer Anpassung der Modern Analogues weiter entwickelt werden: The Moving Window Approach (MW).

### 1.4.4 Seasonal diatom assemblage change in two North German lowland lakes – implications for transfer functions (Studie IV)

Diatomeengesellschaften unterliegen, wie alle anderen Algengruppen auch, in Gewässern der gemäßigten Zone starken saisonalen Schwankungen (z. B. Round et al. 1990, Horn & Horn 1993, Uhlman & Horn 2001, Wetzel 2001). Eine Reihe von Studien hat sich bereits mit der Frage der saisonalen Entwicklung von Diatomeengesellschaften beschäftigt (Raubitschek et al. 1999, Horn & Horn 1993, Rautio et al. 2000, Köster & Pienitz 2004, Hausmann & Pienitz 2007, Kirilova et al. 2008). Für die Paläoökologie ist dabei von Interesse, wie die Artenzusammensetzung des Präsedimentes mit den zugehörigen Umweltparametern korreliert ist. Hausmann und Pienitz (2007) haben für kanadische Seen nachweisen können, dass der Zeitpunkt der Eisschmelze die Artenzusammensetzung signifikant beeinflusst. Darauf aufbauend wurde eine Transferfunktion für den Zeitpunkt des Eisaufbruches konstruiert.

Die zeitliche Verteilung des Phytoplanktons bzw. dessen Produktivität ist im Jahresverlauf innerhalb eines Gewässer abhängig von der Nährstoffsituation, dem Temperaturverlauf, der Lichtintensität (Mächtigkeit der euphotischen Zone), der Ausbildung thermischer Schichtungen sowie dem Grazing des Zooplanktons (Wetzel 2001, Schönborn 2003, Schwoerbel & Brendelberger 2005).

In dimiktischen oligo- bis mesotrophen Seen ist das Wachstum des Phytoplanktons durch drei wesentliche Phasen gekennzeichnet. Im Frühjahr kommt es bei einer Wassertemperatur von ca. vier bis acht Grad Celsius zu einer Vollzirkulation im See, das heißt Nährstoffe gelangen aus dem Sediment (abgestorbene Biomasse) in das Freiwasser und stehen somit dem Phytoplankton zur Verfügung. Mit ansteigender Temperatur kommt es in tiefen Seen zu einer thermischen Schichtung, die meist über die Sommermonate hinweg andauert (Sommerstagnation). Es entsteht ein Bereich hoher Temperaturen an der Wasseroberfläche (Epilimnion), eine stabile Grenzschicht (Metalimnion) und darunter ein Bereich mit relativ konstanter Temperatur um vier bis sechs Grad Celsius (Hypolimnion). In solch geschichteten Wasserkörpern findet ein Stofftransport nur durch Sedimentation statt. Nährstoffe, die an Biomasse gebunden aus dem Epilimnion in das Hypolimnion sedimentieren, stehen dem übrigen Phytoplankton nicht mehr zur Verfügung. Es kommt zu einer Nährstoffzehrung, das heißt das Wachstum ist im Vergleich zum Frühjahr durch einen Mangel an Nährstoffen deutlich reduziert. Die Nährstoffsituation im Frühjahr bestimmt somit den Verlauf der Biomasseproduktion im weiteren Jahresverlauf. Im Herbst, bei sinkenden Lufttemperaturen, kühlt sich das Epilimnion ab. Das Wasser wird schwerer und sinkt ab. Es kommt zu einer erneuten Vollzirkulation des Wasserkörpers, bei der die Nährstoffe wieder in die euphotische Zone des Gewässers gelangen (Reynolds 1984, Wetzel 2001, Uhlmann & Horn 2001, Schönborn 2003). In anthropogen unbelasteten, geschichteten Gewässern kommt Phosphat nur in sehr geringen Konzentrationen vor. Dabei kommen als Phosphatquelle atmosphärische partikuläre Einträge (Psenner 1984) und phosphathaltiges Gestein (z. B. Apatit) im Einflussgebiet der Gewässer in Frage. In natürlichen unbehandelten Böden ist Phosphat fest gebunden und stellt keine Nährstoffquelle für die Seen dar.

In stark landwirtschaftlich genutzten Regionen mit einem hohen Einsatz von Düngemitteln kommt es in geschichteten eutrophen Seen nur im geringen Umfang zu einer Nährstoffzehrung (Reynolds 1984, Wetzel 2001). Der Frühjahrs TP-Wert gibt keinen direkten Aufschluss mehr über den für die Algen verfügbaren TP, da dieser im Verlauf der gesamten Wachstumsperiode von außen mehr oder weniger nachgeliefert wird. Zumeist wird in der Literatur vorgeschlagen, den Mittelwert (aus minimal vier bis fünf Messungen der Umweltvariablen über das Jahr zu verwenden (Bennion 1995, Hall & Smol 1999, Cohen 2003). Tritt eine Art jedoch nur während eines konkreten Zeitabschnittes auf, so ist es fragwürdig, ihr Optimum bezüglich des TP auf Grundlage des Mittelwertes über die gesamte Wachstumsperiode zu berechnen.

In dieser Studie wurde mit Hilfe von Sedimentfallen die Sukzession der Arten innerhalb eines Jahres in zwei norddeutschen Seen untersucht. Des Weiteren wurde der Norddeutsche Eichdatensatz ("MV-EDS") (siehe Kapitel 1.4.1) erneut hinsichtlich saisonaler Effekte analysiert.

#### Zielstellungen und spezielle Fragen:

- Es soll die saisonale Entwicklung der Diatomeengesellschaften in zwei ausgewählten Seen Mecklenburg-Vorpommerns beschrieben werden.
- Lassen sich im MV-Datensatz saisonale Effekte einzelner Umweltparameter feststellen?
- Kann die Methode der WA hinsichtlich saisonaler Effekte optimiert werden?

### 1.4.5 Yet another transfer function: Are multinomial, class based transfer functions in paleolimnology an alternative to WA-PLS regression? (Studie V)

Das Problem des geringen Anteils symmetrisch verteilter Arten bezüglich TP im norddeutschen Eichdatensatz führt zu zwei unterschiedlichen Lösungsansätzen. Zum einen könnte der Eichdatensatz noch um mehrere Seen ergänzt werden, in der Hoffnung, den TP-Gradienten mit den Stichproben so weit wie möglich abzudecken, um so für möglichst viele Arten deren Verteilungen vollständig zu erfassen. Zum anderen kann man nach Transferfunktionen suchen, die sowohl schiefsymmetrische, lineare und symmetrische Verteilungen beschreiben können. Ersteres ist zum einen kostenintensiv und es gibt zum anderen keine Garantie, dass innerhalb des erweiterten Eichdatensatzes mehr Arten einer symmetrischen Verteilung folgen als im originalen Eichdatensatz.

Die Methode der Multinominalen Regression erfüllt diese Bedingungen, hat jedoch den Nachteil, dass dieser Typ Regressionsmodell nur mit ordinal skalierten Daten arbeitet. Die relativen Art-Abundanzdaten der Eichdatensätze müssen somit zunächst in Art-Abundanzklassen abgebildet werden. Die Vorhersagekraft der resultierenden Transferfunktionen werden anschließend verglichen.

#### Zielstellungen und spezielle Fragen:

- Kann auf der Grundlage von Art-Abundanzklassen unter Verwendung der Methode der Multinominalen Regression die Verbreitung von Diatomeen dargestellt werden?
- Eignet sich die Multinominale Regression als Methode zur Erstellung einer Transfer Funktion?

### 1.4.6 A comparison of relative abundance versus class data in diatom-based quantitative reconstructions (Studie VI)

Aus den Abschnitten 2.5 und 3.5 geht hervor, dass mit der Methode der Multinominalen Transferfunktion die Verbreitung von Diatomeen adäquat wiedergegeben werden kann, ohne dass ein signifikanter Verlust an Genauigkeit nachgewiesen wurde. Wenn nun für die Modellierung von Artenoptima das Skalenniveau der Klasse ausreicht, können dann Diatomeenproben auf der Basis von Klassen ausgezählt werden? Anstatt 500 Diatomeenschalen einzeln zählen zu müssen, müsste ein Bearbeiter bei der Durchsicht eines Präparates die Häufigkeiten der einzelnen Taxa nur schätzen. Für geübte Diatomologen wäre hier ein signifikanter Zeitvorteil zu erwarten. In Standardfragen, wie zum Beispiel der Ermittlung eines Referenzzustandes eines Gewässers, könnten die Bearbeitungszeit und somit die Kosten deutlich gesenkt werden bzw. bei gleichem Zeitaufwand mehr Proben bearbeitet werden.

#### Zielstellungen und spezielle Fragen:

- Erstellung und Validierung eines Konzeptes zur Auswertung von Diatomeengesellschaften auf Grundlage von geschätzten Abundanzklassen.
- Unterscheiden sich die mittels WA bestimmten Artenoptima hinsichtlich des verwendeten Skalenniveaus?
- Gibt es Unterschiede bei der Rekonstruktion der Trophie-Entwicklung eines Sees in Abhängigkeit vom verwendeten Skalenniveau?

1.4.7 The new statistical package paltran 1.3 for paleolimnological analyses: WA-, WA PLS Regression and the Moving Window Approach for R 2.9.2 (Studie VII)

Für die Umsetzung der in 1.4.1, 1.4.3, und 1.4.5 erarbeiteten Modellvarianten der klassischen WA- bzw. WA-PLS- und MAT- Methoden (siehe Ergebnisse) reichen die herkömmlichen kommerziellen Programme - C2 (Juggins 2005) und WCALIP (Line et al. 1994) - deren Quellcodes nicht allgemein verfügbar sind - nicht aus bzw. sind die Ansätze nur mit sehr hoher Zeit- und Personalkapazität zu realisieren. Eine breite Anwendung dieser neuen Methoden und damit eine Überprüfung durch andere Fachkollegen wäre somit nicht gegeben. Um dies möglich zu machen, wurde das Programmpaket *paltran* entwickelt. Ziel bei der Erstellung des Paketes *paltran* 1.3 für R (R Development core Team 2009) war die Implementierung sowohl klassischer als auch der hier neu entwickelten Methoden (MFT und MW) für eine breite Anwendung und Überprüfung durch die paleoökologische Community.

#### Zielstellungen und spezielle Fragen:

- Programmierung der klassischen WA und WA-PLS für R
- Programmierung der Moving-Window Methode (MW)
- Programmierung der Methode der MTF als Transferfunktion
- Programmierung des Randomisierungstests (van der Voet 1994) und dessen Anpassung auf den Vergleich zweier Modelle mit unterschiedlichem Stichprobenumfang.

#### 2 Ergebnisse

Die hier beschriebenen Ergebnisse stellen ein Resümee der wichtigsten Resultate der im Anhang befindlichen Studien dar. Im Wesentlichen geben sie die Zusammenfassung (Abstracts) der Veröffentlichungen und Manuskripte hinsichtlich der in Kapitel 1.4 formulierten Zielstellungen wieder. Eine Diskussion der Ergebnisse findet in Kapitel 3 statt. Die Methoden, die hier angewandt wurden, sind ausführlich in den zugehörigen Manuskripten (Studien) beschrieben.

#### 2.1 Sample selection for training sets: The North German diatom training set (Studie I)

Ein neuer Diatomeen-Eichdatensatz bestehend aus 87 zumeist dimiktischen Seen wurde für Mecklenburg-Vorpommern erstellt. In der Mitte der Seen wurden Präsedimentproben entnommen und deren Diatomeen - Artenzusammensetzung ermittelt. Zusätzlich wurden 19 verschiedene Umweltparameter erfasst. Der Eichdatensatz enthält Informationen über die Verbreitung von 389 Taxa. Insgesamt verfügen die Proben über einen geringen Hill's N2 Index (Minimum = 1.42, Maximum = 17.06, Median = 5.146), das durch die hohen Dominanzen einiger weniger planktischer Arten begründet ist. Zu den häufigsten Arten gehören *Stephanodiscus minutulus, Cyclosthephanos dubius, Cyclotella radiosa, Fragilaria construens* und *Stephanodiscus alpinus*. Unter Verwendung multivariater Verfahren wurde nachgewiesen, dass von den erfassten Umweltvariablen Gesamtphosphat (TP) die wichtigste, das System steuernde Variable ist. Dabei verläuft der erfasste TP-Gradient von 16 bis 954  $\mu$ gl<sup>-1</sup>. Bei der Erstellung einer Transferfunktion basierend auf der Methode der Weighted Averaging – Partial Least Square Regression (WA-PLS) ist ein geringes R<sup>2</sup><sub>boot</sub> (0.209) bzw. ein hoher RMSEP<sub>boot</sub> (0.357  $\mu$ g l<sup>-1</sup>) sowie ein eindeutiger Trend in den Residuen auffällig.

Um die Vorhersagequalität des Eichdatensatzes zu erhöhen, wurden zufällige Teildatensätze generiert und diese hinsichtlich ihrer Vorhersagefehler (basierend auf Kreuzvalidierung, hier Bootstrap ( $_{boot}$ ) verwendet) untersucht. Während der RMSEP $_{boot}$  sowie das R<sup>2</sup><sub>boot</sub> deutlich bessere Werte für einzelne Teildatensätze ergab, so war der Vorhersagefehler hinsichtlich unabhängiger Testdatensätze höher als bei der Verwendung des vollständigen Eichdatensatzes. Ein größerer Eichdatensatz für die Region, der zwar einen deutlich schlechteren Vorhersagefehler hat und über eine höhere Streuung an Daten verfügt, eignet sich dennoch besser für die Vorhersage von Gesamtphosphat basierend auf Diatomeen – Artenzusammensetzungen als hinsichtlich ihrer Vorhersagfehler optimierte Teildatensätze.

Werden solche Taxa aus der Analyse ausgeschlossen, die über keinen signifikanten Zusammenhang mit Gesamtphosphat verfügen, kann allerdings ein optimaler Teildatensatz gefunden werden, der bezogen auf unabhängige Testdatensätze eine bessere Vorhersage treffen kann als der vollständige Eichdatensatz.

# 2.2 Spatial variability of diatom assemblages in surface lake sediments and its implications for transfer functions (Studie II)

Entlang Transekten wurde die räumliche Variabilität Diatomeenvon von Artenzusammensetzungen am Beispiel von vier norddeutschen Seen untersucht. Am Ufer beginnend wurden entlang der Hauptwindrichtung im Abstand von ca. 50 Metern Präsedimentproben aus drei dimiktischen Seen (Dudinghausener See, Tiefer See, Campser See) und einem Flachsee (Groß Peetscher See) gewonnen. Dabei wurden große Unterschiede hinsichtlich der Artenzusammensetzung benachbarter Proben im Freiwasser der Seen gefunden. Zum Beispiel variierte die relative Häufigkeit von Stephanodiscus alpinus in den Präsedimentproben des Freiwassers im Dudinghausener Sees zwischen 4 und 43%. Mittels Transferfunktionen basierend auf den Methoden der WA-PLS-, der WA- und der ML-Regression, dem kombiniertem europäischen Gesamtphosphat-Eichdatensatz der Europäischen Diatomeen-Datenbank EDDI und dem norddeutschen Eichdatensatz (MV-EDS) wurden für alle Präsedimentproben der Transekte TP-Werte berechnet und mit den im Freiwasser gemessenen Werten verglichen. Die berechneten TP-Werte unterlagen deutlichen Schwankungen innerhalb der einzelnen Seen. So wurden aufgrund der Präsedimentproben mittels WA-PLS und dem EDDI- Datensatz für den Tiefen See (gemessener mittlerer TP-Wert des Freiwassers: 30 µg/l) Werte zwischen 45 und 110 µg/l und Werte zwischen 16 und 100 µg/l, basierend auf dem norddeutschen Eichdatensatz, berechnet. Wurde anstelle der WA-PLS jedoch die ML-Regression als Methode zur Erstellung der Transferfunktion angewandt, so wurden für den Tiefen See TP-Werte zwischen 16 und 45 µg/l unter Verwendung des norddeutschen Eichdatensatzes vorhergesagt.

Die hohe räumliche Variabilität der Präsedimentproben hat demnach einen größeren Einfluss auf die Ergebnisse der WA-PLS- als auf die der ML-Regression. Es konnte allgemein nachgewiesen werden, dass unter Verwendung der ML-Regression in Kombination mit dem lokalen (norddeutschen) Eichdatensatz der Fehler der berechneten TP-Werte für die Transektproben im Vergleich zu den gemessenen Werten signifikant geringer war, als wenn die Methode der WA-PLS oder der EDDI-Eichdatensatz angewendet wurde. Bei der Auswahl der verwendeten Modelle zur Erstellung der Transfer-Funktion hat sich gezeigt, dass die Verwendung des Root Mean Squared Error of Prediction (RMSEP) kein ausreichendes Kriterium zur Bestimmung der besten Methode darstellt.

### **2.3** Dynamic adjustment of training sets ('moving-window' reconstruction) by using transfer functions in paleolimnology—a new approach (Studie III)

In dieser Studie wurde eine neue Methode (Moving Window, "MW") zur Berechnung von TP-Werten auf der Basis von gegebenen Artenzusammensetzungen vorgestellt. Die MW-Methode sucht für jede Probe, für die ein TP-Wert indiziert werden soll, zunächst einen optimalen Teil-Eichdatensatz aus einem großen überregionalen Eichdatensatz heraus (hier die Kombination aus dem EDDI- und norddeutschen (MV)-Eichdatensatz, n = 429), wobei die Größe dieses optimalen Teildatensatzes variabel gehalten wird. Die optimale Größe der Teil-Eichdatensätze (window-size) wird durch die Fehler-Parameter der zugehörigen Transfer-Funktionen (WA-PLS oder ML-Regression) ermittelt.

Evaluiert wurde die Methode im Vergleich mit der herkömmlichen WA-PLS ebenfalls an dem kombinierten EDDI- MV-Eichdatensatz. Bei den Proben, für die der Vorhersagefehler der WA-PLS kleiner als 15  $\mu$ g/l war, konnte mit der MW-Methode keine signifikant bessere Vorhersage der TP-Konzentration erzielt werden. Für diejenigen Proben, für die der Fehler der WA-PLS deutlich über 15  $\mu$ g/l lag (n = 221), war der Fehler der MW-Methode signifikant geringer als der der WA-PLS - Regression.

Neben der Evaluierung an rezenten Artenzusammensetzungen mit bekannten TP -Werten wurde die MW-Methode auf Diatomeenproben von vier norddeutschen Seen angewandt, um den epilimnischen TP-Gehalt in der Geschichte der Seen zu rekonstruieren. Dabei wurde der durch die MW-Methode ermittelte Verlauf der TP-Rekonstruktion mit den Werten aus bereits für diese Seen publizierten Werten verglichen. Generell unterschied sich der Verlauf der unterschiedlichen Rekonstruktionen nicht, allerdings lagen die Werte basierend auf der MW-Methode deutlich niedriger, als die der herkömmlichen Techniken zur TP-Rekonstruktion im Zeitraum zwischen 5.000 und 12.000 Jahren. Im Bezug auf die Erkenntnisse aus Pollendiagrammen über die Nutzung der Seen in diesem Zeitraum, erscheinen die Rekonstruktionen basierend auf der MW-Methode realistischer, als die der einfachen WA-PLS. Dieses Ergebnis ist unter anderen wichtig hinsichtlich der Erfassung von Referenzbedingungen für Seen in Bezug auf die EU-Wasserrahmenrichtlinie.

Es konnte des weiteren gezeigt werden, dass Rekonstruktionen basierend auf dem lokalen Eichdatensatz (MV-EDS) ähnlich gute Ergebnisse erzielten wie die der MW-Methode, vorausgesetzt der lokale Eichdatensatz repräsentiert die geologischen Gegebenheiten des Sees, für den die TP-Rekonstruktion durchgeführt wird.

# 2.4 Seasonal diatom assemblage change in two North German lowland lakes – implications for transfer functions (Studie IV)

In zwei norddeutschen Seen wurde über einen Zeitraum von einem Jahr mittels Sedimentfallen die zeitliche Veränderung des Phytoplanktons, speziell der Diatomeen -Artenzusammensetzung untersucht. Monatlich wurde die in den Sedimentfallen gesammelte organische Trockenmasse, das Biovolumen und die Artenzusammensetzung der planktischen Diatomeen ermittelt. Die Trockenmasse war im Frühjahr am höchsten, wohingegen das Biovolumen der Diatomeen im Mai, Juli, August und November am höchsten war. Es wurden Unterschiede in der Artenzusammensetzung und im Biovolumen hinsichtlich der räumlichen Verteilung innerhalb der beiden Seen gefunden. Die Artenzusammensetzung der Diatomeen in den Sedimentfallen wurde mit der Zusammensetzung der Diatomeenarten des Präsediments verglichen.

Eine Reihe von Diatomeentaxa wie z. B. Asterionella formosa oder Fragilaria crotonensis zeigten eine hohe saisonale Variabilität. Aufgrund dieser Ergebnisse wurde der norddeutsche Eichdatensatz (MV-EDS) erneut analysiert. Es wurde festgestellt, dass 63 Taxa des Eichdatensatzes am besten mit den Frühjahrs – TP-Werten, 93 Taxa am besten mit den Sommer – TP-Werten und 99 Taxa am besten mit den Herbst – TP-Werten des Eichdatensatzes korreliert sind. Hieraus wurde eine neue Form der klassischen Weighted-Averaging Regression (WA) entwickelt, die den Zusammenhang der einzelnen Taxa zu den

saisonalen TP-Werten mit einbezieht, eine saisonale Weighted-Averaging Regression (WA<sub>seasonal</sub>). Im Vergleich zeigte die Fehleranalyse der WA<sub>seasonal</sub> für den Eichdatensatz MV leicht bessere Werte als die der klassischen WA.

## 2.5 Yet another transfer function: Are multinomial, class based transfer functions in paleolimnology an alternative to WA-PLS regression? (Studie V)

Basierend auf der Idee der multinominalen Regressionsanalyse wurde ein neues Modell zur Konstruktion von Transferfunktionen erstellt (multinominal transfer function, "MTF"). Die Ergebnisse der MTF-Methode wurde mit denen der klassischen WA-PLS-Methode verglichen. In einem ersten Schritt werden die Abundanzdaten der Diatomeen zunächst in Klassendaten transformiert. Anschließend wird für jede Klasse auf der Basis eines GLM's (Generalized Linear Model) ein Optimummodell erstellt. Die hieraus resultierenden Verteilungskurven wurden anschließend dazu verwendet, TP-Werte für die einzelnen Diatomeen-Artenzusammensetzungen der Proben betrachteter Eichdatensätze bzw. von unabhängigen Transektproben zu berechnen (Leave-One-Out Kreuzvalidierung, LOO). Insgesamt wurden fünf verschiedene Eichdatensätze verwendet, um die MTF-Regression mit der WA-PLS zu vergleichen. Dabei wurde festgestellt, dass innerhalb der Eichdatensätze nur 30% der Taxa eine signifikante Relation zum TP aufweisen. Nur 10% der Taxa waren bezüglich TP unimodal verteilt. Für die MTF- Regression wurde festgestellt, dass der RMES grundsätzlich niedriger und das R<sup>2</sup> immer höher war als unter Verwendung der WA-PLS. Die Residuals der MTF hatten einen geringeren Trend als die der WA-PLS. Unter der Verwendung einer Kreuzvalidierung (LOO) war der RMSEPLOO für drei der Eichdatensätze höher unter Verwendung der MTF als der WA-PLS. Unter Verwendung eines Randomisierungstests wurde kein signifikanter Unterschied zwischen den Residuen der Ansätze ermittelt. Bei der Anwendung beider Ansätze auf unabhängige Testdatensätze, wies die MTF- Methode einen geringeren mittleren Fehler auf.

Da der MTF-Ansatz auf Klassendaten basiert, die deutlich geringere Information über die Verbreitung der einzelne Taxa im Eichdatensatz enthalten als die Abundanzdaten der WA-PLS und beide Ansätze in dieser Studie keine signifikanten Unterschiede hinsichtlich ihrer Residuen gezeigt haben, scheint die hohe Genauigkeit der Abundanzdaten für eine gute TP-Rekonstruktion nicht zwingend nötig zu sein.

# 2.6 A comparison of relative abundance versus class data in diatom-based quantitative reconstructions (Studie VI)

In paläolimnologischen Studien werden bei der Anwendung von Diatomeen als Indikatoren meistens relative Abundanzdaten verwendet. Die terrestrische Pflanzensoziologie nutzt hingegen ordinal skalierte Daten (Klassendaten), die bei der Erstellung von Vegetationskartierungen geschätzt werden. Diese Studie vergleicht die Qualität von Modellen basierend auf ordinalen Diatomeen Klassendaten (Klasse 1: selten [<0-1%] bis Klasse 7: dominant [>60%]) mit solchen, die auf relativen Abundanzdaten basieren. Zunächst wurden vorhandene relative Abundanzdaten aus verschiedenen Eichdatensätzen und Sedimentkern-Proben in Klassendaten transformiert. Die Abhängigkeit der einzelnen Taxa gegenüber Gesamtphosphat (TP) wurde für beide Datentypen modelliert. Anschließend wurde der TP-Verlauf für Proben von fünf Sedimentkernen aus Norddeutschland, Dänemark und der Schweiz basierend auf beiden Datentypen rekonstruiert. Zuletzt wurden 20 Präsedimentproben, deren Diatomeen- Artenzusammensetzung und zugehöriger TP-Gehalt des Freiwassers bekannt waren, neu auf Grundlage der ordinalen Klasseneinteilung ausgewertet, um einen unabhängigen Test-Datensatz zu erzeugen.

Es wurden keine signifikanten Unterschiede gefunden hinsichtlich der erklärten Varianz der Arten bezüglich TP, den rekonstruierten TP-Werten der fünf Sedimentkerne und in Bezug auf die berechneten TP-Werte, basierend auf den relativen Abundanzdaten der 20 Präsedimentproben gegenüber den berechneten TP-Werten, basierend auf den ordinalen Klassendaten. Die Verwendung von ordinalen Klassendaten eröffnet somit die Möglichkeit, schneller bzw. mehr Daten für die Analyse von Gewässern zu erhalten, ohne dabei einen signifikanten Informationsverlust bezüglich TP in Kauf nehmen zu müssen. Des Weiteren lässt sich aus diesen Ergebnissen schließen, dass nicht jede einzelne Diatomeen-Schalenhälfte bestimmt werden muss, um TP-Werte hinreichend gut zu schätzen. Dieses Ergebnis sollte die automatische, digitale Bildanalyse von Diatomeen-Artenzusammensetzungen deutlich erleichtern. Die Studie wurde an zumeist planktisch dominierten Diatomeengesellschaften durchgeführt. Überprüfung dominierten Eine der Methode an benthisch Diatomeengesellschaften steht noch aus.

#### 2.7 The new statistical package paltran 1.3 for paleolimnological analyses: WA-, WA-PLS Regression and the Moving Window Approach for R 2.9.2 (Studie VII)

Für die Open Source Statistikplattform R wurde das Programmpaket paltran entwickelt, das Funktionen für die Weighted Averaging Regression (WA), Weighted Averaging -Partial Least Square Regression (WA-PLS) und den Moving Window Approach (MW) sowie einen Randomisierungstest für den Vergleich einfachen von Modellen enthält. Als Kreuzvalidierungsverfahren sind Jackknife, Bootstrap und n-fold Cross Validation implementiert. Die Anzahl der Komponenten der WA-PLS und die Fenstergröße beim MW-Ansatz sind frei wählbar, so dass mit diesen Funktionen die lokale WA ebenfalls in paltran ausführbar ist. Die Erfassung der optimalen Fenstergröße im MW-Ansatz kann neben einer Analyse der Vorhersagefehler auch mittels des erweiterten Randomisierungstests durchgeführt werden. In Verbindung mit den Paketen analogue und rioja sind nun wesentliche in der Paläoökologie angewandte statistische Methoden für R verfügbar.

#### **3** Diskussion

Ökosysteme lassen sich über ihre Funktion und Leistung beschreiben (de Groot 1992). Zu den Leistungen eines Ökosystems gehören unter anderem dessen Produktion (Produktion von Biomasse), dessen Fähigkeit zur Regulation (Selbstreinigung des Wassers, Akkumulation von Stoffen - CO<sub>2</sub>-Speicher), dessen Fläche (Anbaufläche), Information (Biodiversität, kulturhistorische Geschichte) und kulturelle Leistungen (z.B. Erholungsraum), (de Groot 1992, Wallace 2007).

Eine anthropogene Übernutzung vieler Okosysteme führte zu deren Degradierung und somit zu einer eingeschränkten Leistungsfähigkeit dieser Systeme (Zerbe et al. 2009). Das Ziel einer Ökosystemrenaturierung ist die Wiederherstellung bestimmter Ökosystemleistungen unter ökologischen, sozioökonomischen und naturschutzfachlichen Rahmenbedingungen (Zerbe et al. 2009). Grundlage für eine erfolgreiche Renaturierung von Okosystemen ist zum einen ein grundlegendes Verständnis der Einflussfaktoren auf das System und zum anderen eine genaue Einschätzung bzw. Definition von Referenzzuständen. Referenzzustände (auch als Leitbild oder Entwicklungsziele definiert, Uhlmann & Horn 2001) dienen als Grundlage für die Formulierung von Renaturierungszielen sowie für die Evaluierung von Renaturierungsmaßnahmen (vgl. Smol 2008). Ursachen für den Misserfolg von Renaturierungsmaßnahmen liegen zum einen in den verwendeten Methoden, zum anderen in einem ungenau definierten Referenzzustand für das betrachtete System (Grüneberg et al. 2009). Somit ist bei der Bestimmung eines Referenzzustandes für ein Ökosystem sowie bei der Erfassung der Ursachen der Veränderungen eines Ökosystems ein hohes Maß an Sorgfalt und Genauigkeit einzuhalten.

Im Mittelpunkt dieser Arbeit stand die Verwendung von Diatomeen als Bioindikatoren zur Rekonstruktion der Ontogenese von Seen hinsichtlich ihrer Trophie-Entwicklung. In Kombination mit anderen Proxies wie z. B. Pollen, die über die Siedlungsgeschichte des Menschen an einem See Auskunft geben (Birks et al. 1988), können mit Hilfe der Diatomeen Rückschlüsse auf die Ursachen einer veränderten oder auch gleichbleibenden Trophie gezogen werden (siehe Kapitel 1, Multi-Proxy-Studien). Entsprechend der Definition des Referenzzustandes wird einerseits die Referenztrophie während fehlender oder nur minimaler menschlicher Nutzungen im Gewässereinzugsgebiet und andererseits auch die zugehörige heißt ökologische Referenzsituation, die für diese Situation typische das

Referenzdiatomeengemeinschaft, ermittelt (EU 2000, Bennion & Battarbee 2007, Bjerring et al. 2008, Hübener et al. 2009a). Die Qualität eines mittels Diatomeen rekonstruierten Trophieverlaufes bzw. eines ermittelten Referenzzustandes hat unmittelbar einen Einfluss auf Entscheidungen eines nachhaltigen Umweltmanagements und damit auf die Nutzung eines Sees und seines Einzugsgebietes.

Die Genauigkeit einer Trophie-Rekonstruktion bzw. die Bestimmung eines trophischen Referenzzustandes unter Verwendung von Diatomeen hängt von der Qualität des verwendeten Eichdatensatzes sowie von der angewandten Technik der Transferfunktion (Birks & Birks 2006, Battarbee et al. 2008) und von der Qualität der untersuchten Sedimentkerne ab. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die ersten beiden Teilaspekte, die Erstellung eines Eichdatensatzes und die Nutzung unterschiedlicher Transferfunktionen, genauer betrachtet. Im Mittelpunkt stand dabei die Frage, inwieweit die Variabilität von Diatomeen-Artenzusammensetzungen im Präsediment von Seen einen Einfluss auf die zur Zeit verwendeten Methoden der Paläolimnologie bzw. auf deren Ergebnisse haben.

Im Folgenden werden die Ergebnisse der im Anhang zu findenden Veröffentlichungen und Manuskripte diskutiert. Dabei wird nur auf die zentralen Ergebnisse eingegangen, die im Gesamtkontext dieser Arbeit stehen, und in einen Zusammenhang gesetzt. Sonstige Teilergebnisse der einzelnen Publikationen werden hier zu Gunsten der Übersichtlichkeit nicht diskutiert.

# **3.1** Sample selection for training sets: The North German diatom training set (Studie I, submitted)

Die Notwendigkeit der Entwicklung eines eigenen regionalen Eichdatensatzes begründet sich in der im norddeutschen Tiefland vorherrschenden Artenzusammensetzung von Diatomeen. Die intensivierte landwirtschaftliche Nutzung innerhalb der Einzugsgebiete der Seen hat zu einer hohen Dominanz planktischer Taxa, vor allem der Art *Stephanodiscus minutulus* (Kützing) Cleve & Müller 1878<sup>15</sup>, geführt (Dreßler 2006, Hübener et al. 2008, Hübener et al. 2009a, b). Bereits vorhandene Eichdatensätze aus angrenzenden Gebieten, z. B. Brandenburg (Schönfelder et al. 2002), Dänemark (Anderson & Odgaard 1994), Nordirland (Anderson &

<sup>&</sup>lt;sup>15</sup> Eine vollständige Liste der gefundenne Taxa (inkl Autoren) steht unter <u>www.biologie.uni-rostock.de/abt/botanik/AG-Phykologie/index-engl.htm</u> zum freien Download zur Verfügung.

Rippey 1994) oder Zentraleuropas (Wunsam & Schmidt 1995) verfügen über eine deutlich andere Artenzusammensetzung (siehe Hübener et al. 2008, Studie III, Abbildung 2). Um aufgrund der im Sediment gefundenen Artenzusammensetzung die Entwicklung der Trophie rekonstruieren zu können, müssen diese Artenzusammensetzungen auch im Eichdatensatz annähernd repräsentiert sein (Overpeck et al. 1985, Roberts 1989, siehe Kapitel 1.1 und 3.2, Studie II). Der bereits vorhandene Datensatz von Hübener et al. (2001) umfasste sehr heterogene Seen, die zum einen den Trophiegradienten nur ungenügend abdeckten, zum anderen dimiktische Seen mit einer Größe von mehr als 50 ha nur ungenügend repräsentierten. Gerade letzterer Punkt ist hinsichtlich der EU-Wasserrahmenrichtlinie (EU 2000), die eine Einschätzung der Referenzsituation von Seen > 50 ha vorschreibt, ausschlaggebend für die Erweiterung des vorhandenen Eichdatensatzes gewesen. Die bereits jetzt vorhandene breite Anwendung dieses Eichdatensatzes (Hübener & Dörfler 2004, Dreßler et al. 2006, Hübener et al. 2006, Hübener et al. 2008, Lorenz et al. 2008, Hübener et al. 2009a, Kirilova et al. 2008) zeigt, wie wichtig und nutzbringend die Etablierung desselben war.

Auffällig bei diesem Eichdatensatz ist neben einem relativ hohen RMSEP<sub>boot</sub> (Root Mean Squared Error of Prediction - Vorhersagefehler basierend auf Kreuzvalidierung, Bootstrap, Efron 1982) ein sehr geringes R<sup>2</sup><sub>boot</sub> zwischen vorhergesagten TP-Werten für den Eichdatensatz, basierend auf der Kreuzvalidierung, und den gemessenen Werten. Zwei mögliche Ursachen können hier eine Rolle spielen. Die betrachtete Umweltvariable ist nur mäßig mit der Verbreitung der Arten korreliert oder der Eichdatensatz ist zu heterogen, um eine adäquate Modellierung durchzuführen. Die Analyse des Eichdatensatzes mittels Kanonischer Korrespondenz Analyse (CCA) belegt jedoch, dass der TP einen signifikanten Einfluss auf die Artenverteilung hat und auch die Variable ist, die im Verhältnis zu den übrigen Variablen die meiste Varianz erklärt<sup>16</sup>. Auch Studien angrenzender Datensätze (Anderson & Odgaard 1994, Anderson & Rippey 1994, Schönfelder et al. 2002, siehe Studie III, Tabelle 2) belegen, dass TP eine limitierende Variable bezüglich des Wachstums von Diatomeen ist. Jedoch ist die Korrelation von TP zur zweiten CCA- Achse höher als zur ersten Achse, was zeigt, dass in diesem Fall pH-Wert und Leitfähigkeit das System erheblich mitsteuern. Der in den Residuen zu erkennen Trend (siehe Studie I, Abbildung 3) weist

<sup>&</sup>lt;sup>16</sup> In der ursprünglichen Fassung dieses Manuskripts war ein Teil über die Modellierung der einzelnen Arten unter Verwendung eines Generalized Linear Models (McCullagh & Nelder 1989) eingefügt. Im Ergebnis (siehe Tabelle im Anhang VIII) wurde festgestellt, dass TP zwar für eine Reihe von Arten die einflussreichste Variable ist, dass aber auch ebenso viele Arten von pH-Wert, Wassertiefe und Leitfähigkeit maßgeblich gesteuert werden. Dies bestätigt die Ergebnisse von Guisan & Zimmerman (2000), wonach die CCA nur ein grobes Übersichtsverfahren ist. Auf Drängen der Reviewer wurde dieser Teil des Manuskripts herausgenommen.

ebenfalls darauf hin, dass in diesem Eichdatensatz neben TP eine andere Umweltvariable die Artenverteilung maßgeblich steuert.

Als Lösung für ein solches Problem wird von Hausmann & Kienast (2006) bzw. Racca et al. (2004) eine Form der "Backward Selection"<sup>17</sup> vorgeschlagen: Es werden aus der Gesamtheit aller verfügbaren Eichdatensatzproben schrittweise die Proben herausgenommen, die aufgrund ihrer Artenzusammensetzung bzw. ihrer zugeordneten Werte für die betrachteten Umweltvariablen herausfallen (Outlier bzw. Leverage Points<sup>18</sup>). Die Identifizierung dieser Outlier geschieht auf der Basis von Ordinierungstechniken (CCA) bzw. der Verwendung Künstlicher Neuraler Netzwerke (Racca et al. 2001). Wird eine Probe A aus dem Datensatz herausgenommen und anschließend eine Probe B, so ist es denkbar, dass nun durch wieder Hinzufügen der Probe A die Modellcharakteristik besser ist, als wenn beide Proben herausgenommen werden. Demzufolge ist dieser Weg der Datensatzoptimierung durchaus problematisch zu sehen (Crawley 2002, Faraway 2006, Zuur et al. 2006, Hastie et al. 2009).

Die hier eingeführte Methode kann als eine Form der Best-Subset Selection<sup>19</sup> verstanden werden. Es wurden zufällig Teildatensätze mit k = 50, 51, ..., 86 Eichdatensatzproben gebildet, wobei für jedes k jeweils 1000 zufällige Kombinationen gewählt worden sind<sup>20</sup>. Für jeden dieser 36000 Teildatensätze wurde eine WA-PLS ,inklusive Bootstrap (n=1000) als Kreuzvalidierung, gerechnet und diese jeweils auf einen unabhängigen Testdatensatz angewandt (Transektproben, siehe Studie II). Für die resultierenden Transferfunktionen der für die einzelnen k optimierten Teildatensätze hat sich gezeigt, dass mit steigendem k der RMSEP<sub>boot</sub> (und maximale Vorhersagefehler) ebenfalls

<sup>&</sup>lt;sup>17</sup> Der Begriff Backward Selection bezieht sich auf ein Verfahren zur Bestimmung eines endgültigen (signifikanten) mathematischen Modells, bei dem zunächst alle vorhandenen unabhängigen Variablen (predictors, levels) einbezogen werden, um diese dann schrittweise bezüglich ihrer Signifikanz (unter anderen unter Einbeziehung des Akaike Information Criterion oder Bayesian Information Criterion) aus dem Modell herauszunehmen (detailliertes Vorgehen) (z. B. Hastie et al. 2009). Der Weg, der bei Hausmann & Kienast (2006) beschrieben wird, folgt dieser Methode hinsichtlich der Auswahl eines optimalen Eichdatensatzes. Von dem Gesamtdatensatz werden einzelne Proben herausgenommen, um anschließend den Effekt des Herausnehmens zu bestimmen. Da es sich hier jedoch nicht um eine Auswahl von Parametern handelt sondern um Stichprobenelemente, ist die Anwendung des Begriffes nicht ganz konsequent.

<sup>&</sup>lt;sup>18</sup> Outlier (Ausreißer) sind Stichprobenelemente, die im Vergleich zu den übrigen Stichprobenelementen deutlich andere Merkmale tragen. Leverage Points sind solche Stichprobenelemente, die den Verlauf einer Modellierung wesentlich beeinflussen. Ist ein Outlier gleichzeitig ein Leverage Point, so wird dieser als "bad leverage point" bezeichnet (Huber 1981, Sheather 2009). Grundsätzlich geben Outlier sowie Leverage Points wichtige Informationen über ein System und sollten bei der Datenanalyse nicht einfach ausgeschlossen werden (Quinn & Keough 2002, Sheather 2009, Zuur et al. 2006, 2009a).

<sup>&</sup>lt;sup>19</sup> Auch dieser Begriff entstammt der Theorie der Modelselection und bezieht sich auf die Bestimmung eines optimierten Subsets von unabhängigen Variablen in einem Modell (z. B. Hastie et al. 2009).

<sup>&</sup>lt;sup>20</sup> Die 1000 Kombinationen sind hier zufällig generiert worden, wobei die Zahl 1000 ein Kompromiss zwischen Genauigkeit und Schnelligkeit des Algorithmus war. Für große k=86 ist die Anzahl deutlich zu hoch, da es hier nicht so viele Teildatensätze gibt (für k = 84 ist die Anzahl möglicher Teildatensätze bereits deutlich höher als 1000). Aus den jeweils 1000 berechneten Transferfunktionen wurde jeweils diejenige ausgesucht, die den kleinsten RMSEP hat.

ansteigt, bzw. das R<sup>2</sup><sub>boot</sub> sinkt (siehe Studie I, Abbildung 4). Das ist insoweit nicht erstaunlich, da unter Einbeziehung von einer größeren Anzahl von Proben die Variabilität innerhalb der Teildatensätze größer wird und damit auch die Qualität der Vorhersage (bezüglich der Kreuzvalidierung) nachlässt.

Bei der Verwendung vom RMSEP und R<sup>2</sup> als Auswahlkriterium für einen Eichdatensatz zur Erstellung einer Transferfunktion eignen sich für eine Anwendung auf Sedimentkerne demnach kleine Datensätze besser als große. Bei der Anwendung der auf den k Teildatensätzen basierenden Transferfunktionen auf die unabhängigen Testdaten (siehe Studie II) ist ein gegenläufiger Trend erkennbar. Mit steigendem k sinkt der mittlere Fehler bezüglich des gemessenen Freiwasser-TP-Wertes (siehe Studie I, Abbildung 4 und 5). Mit steigender Variabilität im Eichdatensatz sinkt also der Vorhersagefehler bezogen auf die vier unabhängigen Testdatensätze. Die Chance, dass für jede Probe der Transektanalysen eine ausreichende Anzahl von Modern Analogues im Eichdatensatz enthalten ist, steigt mit k. Für die Gesamtheit der Transektproben ist daher der Vorhersagefehler bei einem größtmöglichen Eichdatensatz am geringsten. Demzufolge ist nach diesen Ergebnissen der RMSEP und das R<sup>2</sup> kein ausreichendes Instrument, um die Qualität der Transferfunktion zu beurteilen.

Dieser Befund heißt nicht, dass für jede einzelne Probe der einzelnen Transekte nicht ein passender Teil-Eichdatensatz gefunden werden kann, der bei einem dann kleineren RMSEP und höherem R<sup>2</sup> ein kleineres k aufweist und gleichzeitig einen geringeren Vorhersagefehler für die einzelnen Transektproben hat (siehe Studie III und VII, Abbildung 2).

Interessant ist, dass der Schwarze See (pH 6.52) und der Vielbecker See (TP 1000  $\mu$ g/l), die in Bezug auf die übrigen Seen deutliche Outlier hinsichtlich ihrer Wasserchemie und Artenzusammensetzung sind, in allen Teildatensätzen der Best Subset Selection enthalten sind. Beide Seen wirken stabilisierend auf die Qualität der Vorhersage der Transferfunktion und sind somit positive Leverage Points, auch wenn beide den RMSEP negativ beeinflussen (siehe Studie I, Abbildung 3). Bei der Verwendung der Methode von Hausmann & Kienast (2006) wäre zumindest der Schwarze See ausselektiert worden, da dieser deutlich mit dem pH- Gradienten korreliert ist. Dies steht im Widerspruch zu den hier gefundenen Ergebnissen, nach den beide Seen die Qualität der Transferfunktion stabilisieren.

Der Ausschluss von solchen Arten, die zu TP keine signifikante Korrelation zeigen (hier 70 % der Arten, siehe Studie I, Abbildung 2) führt zu einer Reduzierung des RMSEP<sub>boot</sub> und des maximalen Vorhersagefehlers (k<75) (siehe Studie I, Abbildung 4), wohingegen das  $R^{2}_{boot}$  deutlich geringer ist. Der Vorhersagefehler für den Teildatensatz mit k=67 (siehe Studie

I, Tabelle 3) ist deutlich reduziert. Das Herausnehmen von nicht signifikanten Arten bzw. nicht normal verteilten Arten bezüglich der betrachteten Umweltvariablen wird immer wieder in der Literatur diskutiert (Köster et al. 2004, Racca et al. 2004), jedoch nur selten angewandt. Grundsätzlich führt das Herausnehmen von 70 % der Arten zu einem hohen Verlust an Information, der dazu führen kann, dass für einzelne Proben aus einem Sedimentkern keine Modern Analogues zu finden sind. Bei der Überprüfung der Verteilung der Arten muss des weiteren beachtet werden, dass einzelne nicht signifikante Vorkommen durchaus eine ökologische Information enthalten können, die nur aus einem Mangel an ausreichender Beprobung nicht bestätigt werden konnte bzw. weil ein ungenügendes Verfahren zur Überprüfung der signifikanten Artenantwort auf eine Variable verwendet wurde.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der Eichdatensatz MV über eine sehr große mit einer geringen Vorhersagefähigkeit bezüglich der verwendeten Heterogenität Kreuzvalidierung verfügt. Auf der anderen Seite ist die Vorhersage für unabhängige Testdatensätze basierend auf dem kompletten Datensatz weniger fehlerbehaftet, als die Vorhersage basierend auf einzelnen Teildatensätzen. Aufgrund der hohen Heterogenität im Eichdatensatz scheint die hohe Variabilität der Artenzusammensetzung der Präsedimentproben der Transekte besser abgefangen zu werden. Die Methode von Hausmann & Kienast (2006) erscheint in diesem Fall nicht anwendbar. Ein Herausnehmen nicht signifikanter Arten ist im Fall der Transektstudien sinnvoll, kann aber nicht abschließend empfohlen werden.

# **3.2** Spatial variability of diatom assemblages in surface lake sediments and its implications for transfer functions (Studie II, published)

Birks & Birks (2006) formulieren acht Punkte, die bei einer Multi-Proxy–Analyse eines Sedimentkernes beachtet werden müssen. Ein Punkt ist die sorgfältige Auswahl der verwendeten numerischen Methoden zu Erstellung der Transfer-Funktion. Das Problem ist hierbei die Grundlage, auf der die Modelle ausgewählt werden können. In der Regel stehen keine unabhängigen Testdatensätze zur Einschätzung der Qualität einer Transferfunktion zur Verfügung, so dass auf das Verfahren der Kreuzvalidierung (Cross Validation) (Efron 1982) zurückgegriffen werden muss. Bei diesem Verfahren wird ein mittlerer Vorhersagefehler auf der Basis des Jacknifing, des Bootstraping oder der n-fold Cross Validation ermittelt. Der resultierende Root Mean Squared Error of Prediction (RMSEP) gilt allgemein als ein wesentliches Werkzeug zur Einschätzung der Vorhersagequalität von Transferfunktionen (Birks 1995). Die Transferfunktion mit dem geringsten RMSEP<sup>21</sup> wird in der Regel gewählt, um den Verlauf einer Umweltvariablen in einem Sedimentkern zu rekonstruieren.

Die in den Präsedimentproben der vier in dieser Studie untersuchten Seen gefundene hohe Variabilität der Artenzusammensetzung der Diatomeen entlang der Transekte (siehe Studie II, Abbildung 4) steht im Widerspruch zu der Annahme, dass eine Präsedimentprobe repräsentativ für die Artengemeinschaft innerhalb eines Sees ist (z.B. Bennion 1995, Dixit & Smol 1994, Marchetto & Musazzi 2001, Bigler & Hall 2001). Die Tatsache, dass die Entfernung zum Ufer die Artenzusammensetzung beeinflusst, ist bereits aus der Literatur bekannt (Lotter & Bigler 2000, Rautio et al. 2000, Kauppila 2002, Heiri 2004, Moos et al. 2005). Jedoch wurden die hier gefundenen großen Unterschiede bezüglich der relativen Abundanzen einzelner Taxa in benachbarten Proben der Freiwasserzone in den bisher untersuchten Gewässern (in der Regel alpine oder subarktische Gewässer) so detailliert nicht beschrieben bzw. wiesen keine so großen Unterschiede benachbarter Präsedimentproben auf.

Bei den vorliegenden Transektanalysen handelt es sich um Proben aus Seen, die sich hinsichtlich ihrer Morphologie und Trophie unterscheiden. Das Phänomen der hohen Variabilität zwischen benachbarten Proben ist bei allen vier Seen gefunden worden, demzufolge kann weder die Morphologie noch die Trophie die gefundene hohe Varianz benachbarter Präsedimentproben ausreichend erklären. Da die Seen nicht von kleinen Flüssen durchströmt werden und es keine Inseln gibt, in deren Windschatten sich unterschiedliche Strömungsverhältnisse ausbilden können, ist es schwierig, die Ursachen für diese große Heterogenität der Präsedimentproben zu finden. Es ist zu vermuten, dass ein wesentlicher Teil dieser Variabilität zufallsbedingt ist und sich somit nicht durch einzelne Umweltvariablen erklären lässt<sup>22</sup>. Das bedeutet für die Erstellung von Eichdatensätzen in dieser Region, dass

<sup>&</sup>lt;sup>21</sup> Die drei häufigsten Methoden zur Kreuzvalidierung, das Jacknife (Leave-one-out), das Bootstrap und die n-fold Cross Validation werden unterschiedlich in der Paläolimnologie eingesetzt. Welche der drei Methoden zu bevorzugen ist, geht nicht eindeutig aus der Literatur hervor, wobei die Präferenzen eher auf den beiden letztgenannten Verfahren liegen (Hastie et al. 2009). Widersprüchliche Ergebnisse zweier unterschiedlicher Verfahren sind in der paläolimnologischen Literatur nicht beschrieben, wurden im Verlauf dieser Arbeit jedoch in mehreren Analysen gefunden. In 3.1 (siehe Studie I) wurde das Bootstrap als Kreuzvalidierung verwendet, in 3.2 hingegen die 10-fold Cross Validation. Im Ergebnis ist der Vorhersagefehler der resultierenden Transferfunktion in Studie I geringer als in Studie II (vergl. Abbildung 4, Studie I, Abbildung 5, Studie II). Bei vor allem rechenaufwendigen Verfahren (siehe Studie V) (Vasko et al. 2000, Holden et al. 2008) ist nach wie vor das LOO weit verbreitet, da es den Rechenaufwand um einen Faktor der Größenordnung 100 bis 1000 reduziert.
<sup>22</sup> Die in Studie I gefundene Varianz der Artenzusammensetzungen zwischen ufernahen Proben und Proben aus dem Seetiefsten konnte weder der Variable Wassertiefe noch der Variable Entfernung zum Ufer zugeordnet

ein Teil der beobachteten Varianz auf dieser räumlichen Variabilität der Artenzusammensetzung des Präsediments beruhen kann<sup>23</sup> (siehe Kapitel 2.1 und 3.1). Andererseits sollte ein Eichdatensatz diese räumliche Variabilität möglichst mit abdecken. Dies kann die Ergebnisse der Studie I erklären, wonach der größere Eichdatensatz mit dem schlechteren RMSEP den geringeren Vorhersagefehler bezüglich der unabhängigen Testdatensätze aufweist (siehe Studie I, Tabelle 3, Abbildung 5).

Angenommen die (horizontal verteilten) Präsedimentproben entlang der Transekte entstammen einem (vertikalen) Sedimentkern, so sollte eine qualitativ gute Transferfunktion für alle Präsedimentproben den annähernd gleichen Wert (ähnlich dem im Freiwasser über das Jahr gemessenen) indizieren, da jede dieser Artenzusammensetzungen unter gleichen Bedingungen (chemische und physikalische Umweltvariablen) im Freiwasser entstanden sind<sup>24</sup>. Im Fall der WA-PLS- Regression (siehe Studie II, Abbildung 6) wurden deutlich höhere TP-Werte als die im Mittel gemessenen für die einzelnen Präsedimentproben indiziert, wobei die Werte großen Schwankungen unterlagen. Im Fall des tiefen Sees würde dies hinsichtlich der Ermittlung eines Referenzzustandes für den See bedeuten, dass ein tendenziell mesotropher Zustand durch Anwendung der WA-PLS als potenziell eutroph eingeschätzt werden würde, wobei einzelne Proben durchaus die richtigen mesotrophen Ergebnisse indizieren (siehe Studie II, Abbildung 6, rechte Spalte: P08 und P13). Dieses Ergebnis ist äußerst unbefriedigend, da die Definition falscher Referenzzustände zum einen sehr hohe Mehrkosten verursachen kann und zum nderen aufgrund falscher Annahmen auch zu einem Misslingen von Restaurierungsmaßnahmen führen kann (Grünberg et al. 2009).

Die ML-Regression erzielte hier zufriedenstellende Ergebnisse mit einem signifikant geringen Fehler (siehe Studie II, Tabelle 7, Abbildung 6). Nimmt man wiederum an, die Proben entstammen einem Sedimentkern, so wäre unter Verwendung der ML-Methode ein exakter Nachweis der Referenzbedingungen gegeben. Die ML-Methode hat den Vorteil, dass Optima, die außerhalb des Gradienten liegen, besser geschätzt werden können (siehe Abbildung 5). Das Ergebnis, dass die durch die ML-Regression indizierten TP-Werte deutlich

werden und ist ein Hinweis darauf, dass die in den vier Transekten gefundene Varianz der Artenzusammensetzung typisch für die Seen des Norddeutschen Tieflandes ist (siehe auch die Überlegungen zur Taphonomie in Kapitel 1) (Cohen 2003).

<sup>&</sup>lt;sup>23</sup> In zwei Seen mit gleichen Umweltbedingungen und TP-Werten können demnach durch Zufall zwei Präsedimentproben gewonnen werden, die sich stark in ihrer Artenzusammensetzung unterscheiden, wie z. B. Probe sechs und sieben im Dudinghausener See (siehe Studie II, Abbildung 4). Andersherum ist die Chance, in zwei unterschiedlichen Gewässern bei gleichen Umwelt- und Trophie-Bedingungen zwei annähernd gleiche Artenzusammensetzungen zu finden (was bei der Bioindikation zu erwarten wäre) nach diesen Ergebnissen gering.

gering. <sup>24</sup> Sedimentbohrungen werden in der Regel an der tiefsten Stelle eines Gewässers durchgeführt (Ausnahmen siehe z. B. Hübener et al. 2009a). Die Proben 9,10,11 des Dudinghausener Sees stammen aus diesem Bereich des Sees (siehe Studie II, Abbildung 1) und weisen deutliche Differenzen auf (siehe Studie II, Abbildung 4).

unter denen der WA-PLS liegen, ist bereits in anderen Studien beschrieben worden (Köster et al. 2004). Jedoch ist der Nachweis, dass die Ergebnisse der ML-Regression im Vergleich zur Verwendung der WA-PLS zu einer signifikanten Reduzierung des Vorhersagefehlers führt, bisher noch nicht an einem unabhängigen Testdatensatz durchgeführt worden.

Im Fall der Transekte steht der ermittelte RMSEP<sub>10-cross</sub> für die verschiedenen Transferfunktionen (siehe Studie II, Tabelle 5) im Widerspruch zu den Ergebnissen der indizierten TP-Werte, bei denen die ML-Regression den geringsten Fehler aufweist. Bereits Hastie & Tibshirani (1990), ter Braak (1995), Birks (2001), Vasko (2004) und Yuan (2005) weisen darauf hin, dass der RMSEP den realen Fehler überschätzt. Im Kapitel 3.1 wurde bereits festgestellt, dass der RMSEP kein hinreichendes Werkzeug für die Einschätzung des zu erwartenden Fehlers einer Transferfunktion ist (siehe Studie I, Abbildung 4). Vielmehr scheint hier das R<sup>2</sup><sub>boot</sub> geeignet zu sein, die Transferfunktion mit dem geringsten Fehler zu identifizieren (siehe Studie II, Tabelle 5). Im Hinblick auf die Ergebnisse im Kapitel 3.1 muss jedoch festgestellt werden, dass auch das R<sup>2</sup><sub>cross vall</sub> sich nicht als ein geeigneter Parameter zur Auswahl eines Teildatensatzes geeignet hat (siehe Studie I, Abbildung 4), so dass es fragwürdig ist, inwieweit dieser Parameter wirklich zum Abschätzen der Vorhersagefähigkeit einer Transferfunktion genutzt werden kann. Auch Birks & Birks (2006) stellen fest, das die beste Kontrolle der Transferfunktionen nur anhand von gemessenen Daten durchführbar ist.

Obwohl die einzelnen Präsedimentproben eine gute Übereinstimmung mit den Proben aus der Europäischen Diatomeen-Datenbank (Battarbee et al. 2000) aufweisen (siehe Studie II, Abbildung 2) ist der Fehler der indizierten TP-Werte unter Verwendung des lokalen Eichdatensatzes (siehe Kapitel 3.1) signifikant geringer als der, basierend auf den EDDI-Daten (siehe Studie II, Tabelle 7). Hiermit ist die Notwendigkeit eines lokalen Eichdatensatzes erstmals mittels eines Signifikanztests nachgewiesen worden. Grundsätzlich ergibt sich hieraus die Schlussfolgerung, dass das Vorhandensein von Modern Analogues so wie in Studie II, Abbildung 2 beschrieben und nach Overpeck et al. (1985) überprüft wurde, allein nicht für eine gute TP-Indikation ausreicht. Für eine gute Indikation muss ein optimal passender, lokaler Eichdatensatz gefunden werden, der so ähnlich wie möglich der Artenzusammensetzung der Sedimentprobe, auf deren Grundalge die Indikation stattfinden soll, ist (siehe Birks 1998, Battarbee et al. 2008, Studie III).

Mit dieser Studie gelang ein wesentlicher Schritt zur Beantwortung der in der Einleitung dieser Arbeit erhobene Frage, welche der drei auf der Basis eines Sedimentkernes des Dudinghausener Sees erfolgten TP-Rekonstruktionen (siehe Kapitel 1, Abbildung 3) die mit größerer Sicherheit richtige ist. Die Rekonstruktionen basierend auf der WA-PLS- bzw. WA-Regression weniger vertrauenswürdig sind als die, die auf der ML-Regression basierend. Allein von den Ergebnissen dieser Studie darauf zu schließen, dass die rechte Rekonstruktion in Abbildung 5 zu bevorzugen ist, wäre jedoch vorschnell, da ein Großteil der Proben aus dem Sedimentkern des Dudinghausener Sees keine Modern Analogues im Eichdatensatz MV haben (siehe Studie III, Abbildung 2), welches eine Grundvoraussetzung der Paläolimnologie ist (siehe Kapitel 1.1).

# **3.3** Dynamic adjustment of training sets ('moving-window' reconstruction) by using transfer functions in paleolimnology—a new approach (Studie III, published)

Das in Kapitel 3.2 diskutierte Ergebnis, wonach für die Rekonstruktion von Umweltvariablen basierend auf Diatomeen als Bioindikatoren, lokale bzw. ausreichend gute Modern Analogues vorhanden sein müssen, ist die Schlussfolgerung verschiedener Studien, unter anderen von Holden et al. (2008) und Battarbee et al. (2008). Andereseits haben die Ergebnisse aus Kapitel 3.2 gezeigt, dass die Verwendung von zu großen, vereinigten Eichdatensätzen zu relativ unzuverlässigen Ergebnissen führen können. Aus den Ergebnissen in 3.1 geht hervor, dass der geschätzte TP-Wert nicht nur von den Modern Analogues abhängt sondern auch von deren Anzahl. Ist die Anzahl n von Proben im Eichdatensatz zu klein, so ist die Vorhersage ungenau. Ab einem bestimmten n ist keine deutliche Verbesserung der induzierten Werte mehr zu erwarten. Für eine Rekonstruktion von Umweltvariablen basierend auf Diatomeen-Artenzusammensetzungen eines Sedimentkerns ergeben sich hieraus zwei Forderungen.

- i. Für die TP-Indikation basierend auf den Diatomeen-Artenzusammensetzungen eines Kernes müssen jeweils "lokale" Modern Analogues verwendet werden.
- ii. Die Anzahl n der "lokalen" Modern Analogues sollte variabel sein mit einer Unterund Obergrenze.

Wie bereits in Kapitel 1 erwähnt, sind die meisten Seen Mitteleuropas stark anthropogen degradiert (Bennion et al. 2004, Bennion & Battarbee 2007). Soll nun der vorindustrielle TP-Gehalt eines Gewässers basierend auf Diatomeen-Artenzusammensetzungen rekonstruiert

werden, so gibt es wegen der erfolgten Veränderungen der Diatomeengemeinschaften im lokalen bzw. regionalen Umfeld desselben in der Regel keine bzw. nicht ausreichende Modern Analogues für diese Artenzusammensetzung, eben aufgrund des hohen Grades an anthropogenen Veränderungen des Seeökosystems (vergl. Dreßler et al. 2006, Hübener et al. 2009a). So haben die Proben des Dudinghausener Sees, des Tiefen Sees und des Rugensees nur für die Sedimentproben der oberen Kernabschnitte Modern Analogues im norddeutschen (MV) Eichdatensatz (siehe Studie III, Abbildung 2). Um dennoch einen TP-Wert zu rekonstruieren ist der Paläoökologe gezwungen, Eichdatensätze aus Regionen mit geringerer bis aktuell fehlender anthropogener Nutzung hinzuzuziehen. Diese Eichdatensätze haben dann in der Regel keinen lokalen oder regionalen Bezug zum Untersuchungsgewässer. Hier sollten solche Eichdatensätze gewählt werden, die hinsichtlich ihrer Geomorphologie, Geochemie und Hydrologie eine möglichst hohe Übereinstimmung mit den Untersuchungsgewässern aufweisen.

In der Moving Window Methode (siehe Studie III, Hübner et al. 2008) ist versucht worden, die beiden genannten Forderungen bei der Rekonstruktion von TP-Werten zu berücksichtigen. Für jede einzelne Probe eines Sedimentkernes wird ein "individueller" Eichdatensatz bestimmt (i), dessen Größe variable ist (ii). Die Entscheidung, welche Größe diese individuellen Eichdatensätze für die einzelne Probe jeweils haben, wird durch eine kombinierte Betrachtung unterschiedlicher Parameter über die Vorhersagequalität der gewählten Methode zur Erstellung der Transferfunktion getroffen. Die Entscheidung, die Auswahl der Größe des Eichdatensatzes nicht an einem einzelnen Parameter, z. B. RMSEP oder R<sup>2</sup><sub>cross val</sub> zu koppeln, hängt mit den Ergebnissen aus den Studien I und II zusammen, nach denen der RMSEP nur eine ungenügende Aussage über eine optimale Transferfunktion getroffen hat (siehe Holden et al. 2008: Der RMSEP für die WA-PLS und dem SWAP Eichdatensatz ist geringer als der RMSEP des Bayesschen Ansatzes, der einen geringeren Vorhersagefehler in Bezug auf real gemessene Werte aufweist).

Die Kombination der vier Fehlerparameter (mittlerer Fehler<sub>cross val</sub>, maximaler Fehler<sub>cross val</sub>, R<sup>2</sup><sub>cross val</sub> und RMSEP) in der Studie III stellt somit eine Notlösung aus Ermangelung eines geeigneten Verfahrens für einen Vergleich von unterschiedlichen Modellen dar. In der Studie VII, dem Paket paltran (Adler 2009) für R (R Development Core Team 2009) ist alternativ der Randomisierungstest (van der Voet 1994) an das hier vorliegende Problem angepasst worden (siehe Studie VII, Abbildung 2, Kapitel 3.7).

Im Ergebnis ist der Vorhersagefehler der MW-Methode signifikant geringer als der der WA-PLS für solche Proben, bei dem der Vorhersagefehler (Residuen) der WA-PLS >15µg/l beträgt. Diese deutliche Reduktion des Vorhersagefehlers gegenüber der WA-PLS lässt sich ebenfalls hinsichtlich der Transektproben der Studie II finden (siehe Studie VII, Abbildung 2). Demzufolge ist die MW-Methode eine deutliche Verbesserung der Indikation von TP-Werten auf der Basis von Diatomeen-Artenzusammensetzungen gegenüber der einfachen WA-PLS.

In der Studie III wurde am Beispiel von vier Seen der TP-Verlauf basierend auf der MW-Methode mit den bereits veröffentlichten TP-Rekonstruktionen basierend auf der WA-PLS verglichen. Die von der MW-Methode indizierten TP-Werte sind oft deutlich geringer als die durch die WA-PLS indizierten Werte, wobei der grundsätzliche Verlauf der Rekonstruktionen ähnlich ist. Das Dilemma bei einem solchen Vergleich ist, dass nur indirekt eingeschätzt werden kann, welche der rekonstruierten Kurven diejenige ist, welche den real existierenden historischen TP-Werten am ähnlichsten sein könnte. Um dieses einzuschätzen, müssen weitere Proxies mit hinzugezogen werden. In diesem Fall wurden die Ergebnisse der Pollenanalysen genutzt, um den Einfluss anthropogener Aktivitäten im Einzugsgebiet der untersuchten Gewässer abschätzen zu können. Die Autoren der Studien III kommen zu dem Schluss, dass die von der MW-Methode indizierten TP-Werte weit realistischer sind als die der einfachen WA-PLS Methode. Dieses Ergebnis allein ist noch kein Beleg dafür, dass die MW-Methode für sich bessere Ergebnisse liefert als die anderen Methoden zur Erstellung einer Transferfunktion. Nur in Verbindung mit der Überprüfung der Vorhersagefehler bezüglich der verwendeten Eichdatensätze und hinsichtlich der Transektanalysen (siehe Studie VII) lässt sich die Schlussfolgerung ziehen, dass es sich hier tatsächlich um einen Indikation handelt. der die auf der Grundlage Ansatz von Diatomeen Artenzusammensetzungen deutlich verbessert<sup>25</sup>.

Die "lokalen" Modern Analogues für eine Probe aus einem Eichdatensatz wurden in der Studie III grundlegend auf der Detrended Correspondence Analysis (DCA, Hill & Gauch 1980) bzw. auf der Chord–Distance (z. B. Jongman et al. 1995) ermittelt. Beide Verfahren führten zu keinen unterschiedlichen Rekonstruktionen. In dem Paket *paltran* (Adler 2009, siehe Studie VII) kann der Anwender neben diesen beiden Methoden weitere Ansätze zur Ermittlung der lokalen Modern Analogues wählen, z. B. Correspondence Analysis, euklidean distance, manhatten distance, canberra distance (siehe Hilfedatei zur Funktion *vegdist*, Oksanen 2009) bzw. seltene Arten unter Verwendung der Funktion downweight (Oksanen 2009) herabgewichten (siehe Jongman et al. 1995). Für den Fall, dass kein "horse shoe"

<sup>&</sup>lt;sup>25</sup> Austin (2007) weist darauf hin, dass jede Form der Vorhersage zur Qualitätsprüfung eines Modells unbefriedigend ist. Die beste Methode zur Überprüfung ist nach Austin die Nutzung künstlicher Datensätze, mit denen ein Modell auf seine Belastbarkeit überprüft werden kann.

Effekt (= arch effect) (Hill & Gauch 1980) auftritt, ist die Verwendung einer einfachen CA der DCA vorzuziehen (Lepś & Śmilauer 2003 Oksanen 2009). Die Verwendung der CA in Kombination mit dem Randomisierungstest als Auswahlverfahren für die optimale Anzahl der Modern Analogues führt im Vergleich mit der Verwendung der DCA und der parameterbasierten Auswahl der optimalen Anzahl der Modern Analogues zu einer nochmaligen deutlichen Reduzierung des Vorhersagefehlers (siehe Studie VII, Abbildung 2). Die verwendete Methode zur Ermittlung der Modern Analogues scheint im Gegensatz zu den Ergebnissen der Studie III dennoch einen Einfluss auf die Ergebnisse zu haben. Hier sind weitere Untersuchungen bzw. Weiterentwicklungen und Verbesserungen des Verfahrens nötig und möglich.

Das Ergebnis, dass die Rekonstruktion der MW-Methode basierend auf einer WA-PLS dem der Rekonstruktion stützend auf die ML-Methode entspricht (siehe Studie III, Abbildung 5), steht zunächst im Widerspruch zu den Ergebnissen der Studie II, nach der die ML-Methode einen signifikant geringeren Fehler aufweist als die der WA-PLS. Bei einem optimal angepassten Eichdatensatz sollte die Probe, für die ein TP-Wert indiziert werden soll, gut repräsentiert sein, dass heißt hier sollte die Artenzusammensetzung der Einzelprobe im Eichdatensatz annähernd wiedergespiegelt werden. Ist es der Fall, dass keine Vorhersagen von TP-Werten in den Randregionen des durch den Eichdatensatz abgedeckten TP-Gradienten durchgeführt werden müssen, so ist es mathematisch zwingend, das die Ergebnisse der WA, der WA-PLS und der ML gleich sind, dass heißt das beobachtete Ergebnis ist zu erwarten (siehe Abbildung 6). Unterschiede sind nur dann möglich, wenn die ermittelten lokalen Modern für eine bestimmte Probe Analogues deren Artenzusammensetzung nur ungenügend repräsentieren. Die verwendete Methode zur Bestimmung der optimalen Modern Analogues sowie die verfügbaren Eichdatensätze haben hiernach einen wesentlichen Einfluss auf das Ergebnis.

Für zwei Sedimentkerne in der Studie III konnte gezeigt werden, dass die TP-Rekonstruktionen begründet auf der MW-Methode denen basierend auf dem lokalen Eichdatensatz MV und der ML-Methode sehr ähnlich ist (siehe Studie III, Abbildung 6), obwohl ein Großteil der Sedimentkernproben keine Modern Analogues im Eichdatensatz MV besitzen (siehe Studie III Abbildung 2). Dieses Resultat wird durch das Ergebnis der Studie II gestützt, wonach ein lokaler bzw. regionaler Eichdatensatz besser TP-Werte indiziert als ein überregionaler. Ob dieses auch auf Sedimentproben zutrifft, die keine Modern Analogues im verwendeten Eichdatensatz haben, auch wenn Eichdatensatz und Sedimentkern aus der gleichen geomorphologischen Region stammen, ist noch nicht nachgewiesen worden. Bisher galt die Annahme, dass ohne ausreichend Modern Analogues eine Rekonstruktion von TP-Werten problematisch ist (Roberts 1989, siehe Kapitel 1.1). Unter Verwendung der ML-Methode in Kombination mit einem Eichdatensatz aus dem direkten, lokalen Umfeld eines Sedimentkernes mit gleichen geomorphologischen Bedingungen scheint es demnach möglich zu sein, mit dem Eichdatensatz auch für solche Proben TP-Werte zu indizieren, die nicht oder nur ungenügend im Eichdatensatz repräsentiert sind. Dieses Ergebnis steht im Widerspruch zu der allgemeinen Lehrmeinung (Birks 1998, Birks & Birks 2006). Dabei ist hervorzuheben, dass dieses Ergebnis sich nur auf die ML-Methode bezieht, die ebenso wie die WA-PLS auch schief verteilte Artenoptima erfassen kann, aber auch Optima außerhalb des betrachteten Gradienten berechnet (siehe Abbildung 6).

Im Vergleich zur Methode von Hausmann & Kienast (2006) werden hier keine Proben des Eichdatensatzes ausselektiert. Sollte sich im Laufe der durch einen Sedimentkern abgedeckten See-Ontogenese nicht nur die Trophie sondern z. B. auch der pH-Wert verändern, kann diese mit dem MW-Ansatz soweit "abgefedert" werden, dass diese Methode dann die entsprechenden Modern Analogues finden kann. Wären zunächst, wie von Hausmann & Kienast (2006) vorgeschlagen, alle die Proben des zusammengesetzten Eichdatensatzes herausgenommen worden, die sich durch abweichende pH-Werte ausweisen, so wäre eine sich durch gleichbleibende Trophie aber ändernden pH-Wert beeinflusste Diatomeen-Artenzusammensetzung nicht mehr im Eichdatensatz repräsentiert und die resultierende Rekonstruktion der Trophie deutlich unzuverlässiger. Ein Vergleich beider Ansätze steht noch aus.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass mit der MW-Methode zur Ermittlung eines optimalen Eichdatensatzes für einzelne Sedimentproben eine Methode entwickelt wurde, deren Vorhersagefehler hinsichtlich indizierter TP-Werte signifikant geringer sind als die der WA-PLS. Die Wahrscheinlichkeit für eine Fehleinschätzung eines Referenzzustandes eines Sees konnte somit deutlich reduziert werden.

Die Fragestellung in der Einleitung (siehe Abbildung 3) konnte mit den Ergebnissen dieser Studie in Kombination mit der Studie II beantwortet werden. Die Rekonstruktion basierend auf dem lokalen Eichdatensatz unter Verwendung der ML-Regression als Methode zur Erstellung einer Transferfunktion (siehe Abbildung 3, rechts) ist diejenige, die im Vergleich zu den übrigen mit größerer Sicherheit richtig ist.



Abbildung 6: Vergleich der durch WA-, WA-PLS- und ML- Regression ermittelten Artoptima (Pfeil, Wa-PLS: "updated optimum", ter Braak & Juggins 1993) bezüglich einer hypothetischen Verbreitung von drei Taxa gegenüber TP (mittels Zufallsgenerator unter Verwendung der Poisson-Verteilung in R (R Development Core Team 2009) erstellt). Kreise = erfasste relative Art-Abundanz, gepunktete Linie = zugrunde liegende Verteilung. A: Das Taxon zeigt eine relativ symmetrische Verteilung innerhalb des durch den Eichdatensatz abgedeckten Gradienten. Die ermittelten Optima der WA-, WA-PLS- und ML-Regression sind annähernd gleich. B: Die Art ist ebenfalls relativ symmetrisch verteilt, jedoch deckt der Gradient nur die Hälfte der Verteilung der Art ab. ML und WA-PLS schätzen beide das Optimum der Art außerhalb des durch den Eichdatensatz abgedeckten TP-Gradienten. Die WA und die WA-PLS überschätzen beide das Optimum, während die ML-Regression dieses erfassen kann. Die ML-Regression ist in der Lage, Optima, die nicht durch den Eichdatensatz abgedeckt werden, annähernd zu erfassen, während WA und WA-PLS nur den Grenzen des abgedeckten Gradienten Optima bestimmen können.

## 3.4 Seasonal diatom assemblage change in two North German lowland lakes – implications for transfer functions (Studie IV, submitted)

Die Tatsache, dass Diatomeengemeinschaften innerhalb eines Sees deutlichen saisonalen Schwankungen ausgesetzt sind, ist ein in der Literatur seit langem beschriebenes Phänomen (Hutchinson 1961, Trimbee & Harris 1984, Cameron 1995, Raubitschek et al. 1999, Padisak et al. 2003, Köster & Pienitz 2006, Kirilova et al. 2008). Unterschiedliche Parameter wie z. B. Temperatur oder Nährstoffkonzentration, deren Werte saisonal bedingt schwanken, sind Ursachen für die Veränderungen in den Artengemeinschaften. Relativ wenige Untersuchungen gibt es darüber, wie die im Sediment gefundenen Artenzusammensetzungen saisonal beeinflusst sind. Vorausgesetzt es handelt sich nicht um geschichtete Sedimente (Cohen 2003), dann ist eine Präsedimentprobe ein Gemisch der durch Prozesse der Kapitel eingetragenen Artenzusammensetzungen Taphonomie (siehe 1) aus den unterschiedlichen Wachstumsperioden im Verlaufe eines Jahres (Cohen 2003, Battarbee et al. 2001).

Dieses scheint durch den Vergleich zwischen den Diatomeen-Artenzusammensetzungen der Jahresfalle und den saisonalen Artenzusammensetzungen bestätigt zu sein (siehe Studie IV, Abbildung 5). Dass die Präsedimentproben nicht einer mittleren Probe aus den Jahreszeiten entsprechen, kann darin begründet sein, dass die Ausbringung der Fallen im März bereits zu spät war, um die Artengemeinschaften zu erfassen, die im Winter ins Sediment eingetragen worden sind (vergl. Studie IV, Abbildung 4). Eine andere Ursache kann darin bestehen, dass die Präsedimentproben mehr (oder weniger) als einen Jahresgang der Diatomeen erfasst haben. Hierzu sind weitere Untersuchungen nötig bzw. hätten die Präsedimentproben nicht im Herbst erhoben werden sollen sondern bei der Bergung der Winterfallen. Nach den Ergebnissen von Cameron (1995) wäre ein direkter Zusammenhang von den Ergebnissen der Sedimentfallen und des Präsedimentes aufgrund des Time-Averagings (siehe Kapitel 1) im Sediment nicht zu erwarten.

Eine räumliche Komponente in der Verteilung der Taxa, deren Ursache nicht eindeutig zu klären war, konnte hier in dieser Studie durch den Vergleich der Fallen im Randbereich und im Freiwasser sowie der Artenzusammensetzungen zwischen den einzelnen Zylindern einer Falle bestätigt werden (siehe Studie I und II).

Die hier gefundene saisonale Abfolge von Diatomeentaxa (siehe Studie IV, Abbildung 4 und 5) ist wie bereits eingangs erwähnt, oft (für unterschiedlichen Taxa) beschrieben

worden. Somit stellt die Studie bis hierhin nur eine Bestätigung und Ergänzung des bereits vorhandenen Wissens hinsichtlich der saisonalen Entwicklung von Diatomeen-Artenzusammensetzungen im norddeutschen Tiefland dar. Bei einer erneuten Analyse des norddeutschen Diatomeen-Eichdatensatzes (MV-EDS, Studie I) wurde jedes Taxon nacheinander mit den Gesamtphosphatwerten (TP) aus dem Frühjahr, dem Sommer und dem Herbst korreliert. Für einige Taxa decken sich die Ergebnisse dieser Korrelation und deren saisonalen Vorkommen sehr gut. So ist das Vorkommen von Asterionella formosa im MV-Eichdatensatz am besten mit dem Sommer-TP korreliert (siehe Studie IV, Tabelle 4) und ist in dieser Studie auch in den Sommermonaten mit der höchsten relativen Abundanz gefunden worden (siehe Studie IV, Abbildung 4). Stephanodiscus minutulus hingegen zeigt eine sehr unspezifische Verteilung im Jahresgang (mit einer leichten Präferenz im Frühjahr) und kann mit keinem saisonalen TP-Wert signifikant korreliert werden (siehe Studie I, V Abbildung 2, Tabelle 3: Nach dem Herausnehmen der Art verbessert sich die Qualität der betrachteten Transfer-Funktionen deutlich). Fragilaria crotonensis hat zwar im Dudinghausener See die höchste Abundanz im Juli, weist jedoch die beste Korrelation zu TP im Herbst auf. Neben F. crotonensis zeigen weitere Taxa widersprüchliche Ergebnisse, die hier jedoch nicht abschließend interpretiert werden können. Für den Eichdatensatz MV stehen nur Messdaten von drei Terminen (Frühjahr: Ende April, Sommer: Mitte Juli und Herbst: Mitte Oktober) zur Verfügung. Es wäre z. B. anzunehmen, dass Stephanodiscus alpinus im Eichdatensatz MV eine gute Korrelation mit dem Winter-TP aufweisen würde (siehe Studie IV, Abbildung 4). Dieses kann jedoch nicht bestätigt werden, da zu diesem Zeitpunkt keine TP-Werte für die Seen des Eichdatensatzes bestimmt wurden. Das Ergebnis weist deutlich darauf hin, dass für den Eichdatensatz MV nur ungenügend genaue TP-Werte vorliegen<sup>26</sup>. Jedoch sind die Ergebnisse bezüglich der indizierten TP-Werte für die Transektstudien (siehe Studie II, Abbildung 6, Studie VII, Abbildung 3) auch ein Beleg dafür, dass die Qualität hinreichend gut ist.

Die in dieser Studie entwickelte WA<sub>seasonal</sub> weist von ihrer Fehlerstatistik bezüglich des Eichdatensatzes MV bessere Werte auf als die basierend auf den TP-Mittelwerten. Diese Unterschiede sind unter Verwendung des in paltran (Adler 2009) implementierten Randomisierungstests (van der Voet 1994) jedoch nur schwach signifikant. Bei der Analyse der Residuen beider Transfer-Funktionen (siehe Studie IV, Abbildung 7) fällt zunächst kein

<sup>&</sup>lt;sup>26</sup> Das Gleiche gilt für das Ergebnis der CCA, dass der Sommer- und Herbst-TP-Gehalt der Gewässer nach der Gewässertiefe und dem NO<sub>2</sub>-Gehalt des Frühjahres hier die höchsten F-Werte aufweisen (siehe Studie IV, Tabelle 3). Mit einer besseren Auflösung der Daten (höhere Messfrequenz) wären die Ergebnisse belastbarer und den einzelnen Jahreszeiten und Arten zuzuschreiben.

großer Unterschied auf. An dem unteren Rand des TP-Gradienten ist der Fehler der WA<sub>seasonal</sub> dennoch geringer, ebenso am oberen Rand des Gradienten, woraus das höhere R<sup>2</sup> der WA<sub>seasonal</sub> gegenüber der klassischen WA<sub>av</sub> (siehe Studie IV, Tabelle 5) resultiert. Obwohl sich die Erfassung der TP-Werte im Eichdatensatz MV als ungenügend herausgestellt hat, ist es hier möglich gewesen, unter Einbeziehung saisonaler TP-Werte die Qualität der Transferfunktion zu erhöhen. Bei ausreichender Datengrundlage im Eichdatensatz ist es mit dieser Methode möglich, die saisonalen Entwicklungen von Umweltvariablen zu berücksichtigen. Eine weitere Verbesserung der Vorhersagefähigkeit der WA<sub>seasonal</sub> ist zu erwarten.

Im Mittelpunkt aktueller Forschungen steht neben der TP-Rekonstruktion die Rekonstruktion von Klimaveränderungen (Hausmann & Pienitz 2007, Chipman et al. 2009, Hausmann & Pienitz 2009). Der Ansatz der WA<sub>seasonal</sub> sollte analog zur saisonalen Änderung des TP-Wertes ebenso die Änderung der Temperatur besser nachzeichnen können als der Ansatz der klassischen WA bzw. als wenn nur jeweils die Artenzusammensetzung des Präsediments mit den Werten der Umweltvariablen aus einer Saison verrechnet wird (siehe Studie IV, Tabelle 5).

## **3.5** Yet another transfer function: Are multinomial, class based transfer functions in paleolimnology an alternative to WA-PLS regression? (Studie V, submitted)

Die in dieser Studie für die Paläolimnologie entwickelte Transferfunktion basierend auf der Methode der Multinominalen Regression ("MTF", Dobson 2001, Gelman & Hill 2007) sollte zwei Aspekte der in den Studien I und II beschriebenen Phänomene genauer in die Modellierung einbeziehen. Zum einen war eine große Anzahl von Taxa identifiziert worden, die keine unimodale Verteilung bezüglich des TP im norddeutschen Eichdatensatz aufgewiesen hat (siehe Studie VI). Zum anderen ist eine sehr große Variabilität der einzelnen Taxa gegenüber TP beobachtet worden (siehe Studie I, Abbildung 2, siehe Kapitel 2.1 und 3.1). Eine schiefsymmetrische Verteilung von einem so großen Teil der Arten schließt die Anwendung der WA aus mathematischen Gründen aus<sup>27</sup> (siehe Abbildungen 1 und 5). Mit

<sup>&</sup>lt;sup>27</sup> Die Verwendung der WA in der Studie IV ist demzufolge auch nur bedingt zulässig. Eine Entwicklung einer WA-PLS<sub>seasonal</sub> wäre die logische Konsequenz aus den Ergebnissen der Studie I und IV. Die Umsetzung in einem Algorithmus gestaltet sich jedoch komplizierter als bei der einfachen WA, da die Ermittlung der "updated"

dem Ansatz der Multinominalen Regression ist es möglich, schiefsymmetrische Verteilungen näherungsweise nachzubilden und Vorhersagen über den Rand des beobachteten Gradienten hinaus zu treffen. Um eine Multinominale Regression durchführen zu können, müssen die vorhandenen relativen Abundanzen Abundanzklassen zugeordnet werden, d.h. ein wesentlicher Teil der Varianz, die in den Daten enthalten ist, wird herausgenommen. Diese Reduktion der in den Daten enthaltenden Genauigkeit (von einer metrischen Skala 0, 1, ..., 100 auf eine nominale Skala 0, 1, ..., 6) bewirkt, dass zwei ähnliche relative Art-Abundanzen auf die gleichen Werte der nominalen Skala transformiert werden. Dem System geht dadurch Varianz verloren bzw. wird die Information hinsichtlich der Verbreitung der Arten reduziert<sup>28</sup>.

Haben zwei Modelle die gleichen Ergebnisse hinsichtlich ihrer Vorhersagefehler, Bestimmtheitsmaße und Verteilung der Residuen, so ist es ein wissenschaftliches Prinzip, das jeweils einfachere Modell zu verwenden (principle of parsimony<sup>29</sup>, Crawley 2007, Bolker 2008). Dieses Prinzip bezieht sich ebenso auf Modelle zur Erstellung einer Transferfunktion (Birks & Birks 2006). Die WA-PLS wurde entwickelt, um die Nachteile der WA (siehe Kapitel 1) auszugleichen. Auch wenn die Vorhersagefehler der zweiten oder dritten Komponente der WA-PLS oft kleiner sind als die der ersten Komponente (= einfache WA), so sind diese Unterschiede selten signifikant<sup>30</sup>. Dennoch ist die WA-PLS, gerade weil sie die einfachere WA einschließt und deren Ergebnisse rekursiv optimiert, wohl das Modell, das als Standardmodell für die Erstellung einer Transferfunktion in der Paläolimnologie gelten

Optima rekursiv geschieht. Erst bei einer ausreichenden Datengrundlage (höhere Auflösung der TP-Werte, oder Temperatur-Werte) wäre die zeitliche Investition in die Programmierung einer WA\_PLS<sub>seasonal</sub> voraussichtlich lohnenswert.

<sup>&</sup>lt;sup>28</sup> Mit der Reduktion der Information (Informationsverlust) ist hier ein Verlust an Genauigkeit der Aussage gemeint und nicht ein Verlust an Biodiversität. Bei der Verwendung von Abundanzklassen, wie es in der Studie V und VI praktiziert wird, steigt die Biodiversität im Vergleich mit den relativen Art-Abundanzen (Shannon Index), da die Heterogenität der Daten verringert wird.

<sup>&</sup>lt;sup>29</sup> Auch als Occam's Razor (Ockham's Razor) bezeichnet: Williman Occam, ein englischer Philosoph des 14. Jahrhunderts, formulierte folgendes Prinzip. Wenn mehrere gute Erklärungen für ein Phänomen existieren, dann ist die beste Erklärung die einfachste. Für die statistische Modellierung folgt daraus, dass (i) ein Modell so wenig Parameter wie möglich enthalten sollte, (ii) lineare Modelle zu bevorzugen sind, (iii) Experimente auf wenigen Voraussetzungen beruhen sollten, (iv) Modelle so weit reduziert werden sollen, dass sie ein Minimum an Komplexität aufweisen und (v) die einfachste Erklärung einer komplizierten vorzuziehen ist (Crawley 2007).

<sup>&</sup>lt;sup>30</sup> Veröffentlichte Studien sind dazu bis zum Abgabezeitpunkt dieser Arbeit nicht erschienen. Für alle Eichdatensätze des Combined TP Training Sets aus EDDI (Battarbee et al. 2000) konnte dieses jedoch unter Verwendung des Randomisierungstests (van der Voet 1995) in den zur Verfügung stehenden Softwarepaketen C2 (Juggins 2005), rioja (Juggins 2009) und paltran (Adler 2009) nachgewiesen werden (Daten sind hier nicht dargestellt), siehe Beispiele in den Hilfedatei für die Funktionen rand.test() und rand.t.test() in den Paketen paltran und rioja. Im Grunde ist die weite Verbreitung der WA somit wieder gerechtfertigt (siehe Kapitel 1, Abbildung 2), trotz aller beschriebener Nachteile (siehe Kapitel 1). Generell ist bemerkenswert, wie selten Ergebnisse in der Paläolimnologie auf der Basis von Signifikanztests überprüft werden. Der sehr einfache Test von van der Voet (1995) hat so gut wie keinen Eingang in die Fachjournals gehalten. Ebenso werden Signifikanztests aus dem Bereich der (multivariablen) Zeitreihenanalyse bei der Analyse von Sedimentkernen nur selten verwendet (Ausnahme: Permutationstest).

kann<sup>31</sup>. Demzufolge müssen alle neu entwickelten Modelle mit den Ergebnissen der einfachen WA-PLS verglichen werden (z. B. Racca 2001, Holden 2008, siehe Studie III). Führt ein neu entwickeltes Modell zur Erstellung einer Transferfunktion zu einer signifikanten Reduzierung des Vorhersagefehlers, so ist dieses der WA-PLS vorzuziehen (siehe Kapitel 3.3). Ist der Fehler des neuen Modells höher, so ist es abzulehnen. Unterscheiden sich beide Modelle hinsichtlich ihrer Residuen nicht signifikant, so ist das Modell zu wählen, welches die geringere mathematische Komplexität aufweist.

Die in der Studie V entwickelte MTF zeigt in drei von fünf Fällen leicht bessere Fehlerwerte als die der WA-PLS (siehe Studie V, Tabelle 3). Die Anwendung des Randomisierungstests (van der Voet 1994) hat jedoch gezeigt, dass alle Unterschiede hinsichtlich der Anwendung der MTF im Vergleich mit der WA-PLS (siehe Studie V, Tabelle 3) nicht signifikant sind. Da die Anzahl der Rechenoperationen für die Implementierung der MTF deutlich höher ist (entsprechend langsamer ist die Funktion MTF im Paket paltran (Adler 2009, siehe Studie VII)) fällt die Entscheidung, welches der beiden Modelle zu verwenden ist, zugunsten der WA-PLS aus. Eine Veröffentlichung der Ergebnisse ist somit schwer zu rechtfertigen, die Kernaussage wäre, es ist eine Methode entwickelt worden, die nicht besser ist als die der WA-PLS. Wozu also diese Studie?

Die MTF ist auch nicht schlechter als die WA-PLS bzw. die Tatsache, dass sich die Residuen nicht signifikant unterscheiden heißt, dass die Qualität beider Transferfunktionen vergleichbar ist. Dieses ist insofern bemerkenswert, als dass die MTF nicht über die gleiche Datengrundlage verfügt wie die WA-PLS. Die MTF rechnet mit nominal skalierten Werten von 7 Stufen. Das reicht aus, um Ergebnisse von gleicher Qualität wie die WA-PLS zu produzieren. Demzufolge scheint ein Großteil der Information (Genauigkeit), die in den relativen Art-Abundanzen der Eichdatensätze enthalten ist, nicht für die Rekonstruktion von TP-Werten benötigt zu werden. Es ist egal, ob eine Art mit einer Abundanz von 60% oder mit 80% bzw. mit 6% oder 10% auftritt. Dieses rechtfertigt die Veröffentlichung der Ergebnisse. Mögliche kausale Ursachen hierfür werden ausführlich im Kapitel 3.6 diskutiert.

Die Vorhersagequalität der MTF und der WA-PLS wurden ebenfalls für die Transektproben aus der Studie II überprüft (siehe Studie V, Tabelle 3 und 4). Für die Transektproben der beiden dimiktischen Seen Dudinghausener See und Tiefer See konnte der

<sup>&</sup>lt;sup>31</sup> Ein Review über alle in der Paläolimnologie verfügbaren Methoden zur Erstellung einer Transferfunktion und deren Vergleich gibt es zur Zeit nicht (siehe Kapitel 1). Einige Arbeiten (z. B. Birks 1995, Birks 1998, Birks 2003, Vasko 2000) bieten zwar einen guten Überblick, sind jedoch nicht vollständig. Für Ende 2009 ist ein solches Buch in der Springer Serie *Tracking Environmental Change Using Lake Sediments* angekündigt. Birks, H.J.B., Juggins, S., Lotter, A.F. & Smol, J.P *Tracking Environmental Change Using Lake Sediments: Data Handling and Statistical Techniques*. Zum Zeitpunkt der Abgabe dieser Arbeit lag dieses Buch noch nicht vor.

Vorhersagefehler der WA-PLS mit der MTF-Methode reduziert werden. Dieses und die Tatsache, dass das R<sup>2</sup> der MTF immer höher ist als das der WA-PLS (siehe Studie V, Tabelle 3) kann ein Hinweis darauf sein, dass die Vorhersagekraft der MTF an den Rändern des Gradienten stabiler ist als die der WA-PLS (ähnlich der ML-Methode, siehe Kapitel 3.3, Abbildung 5). Da die MTF intern mit Generalized Linear Models basierend auf der Maximum Likelihood Methode arbeitet, ist es durchaus denkbar, dass die Optima solcher Taxa, die eine deutliche Links- bzw. Rechtsschiefe aufweisen, von der MTF besser erfasst werden als durch die WA-PLS (siehe Diskussion in der Studie II). Dieses steht jedoch noch zur Prüfung aus.

Die Tatsache, dass die auf nominal basierten Daten MTF die gleichen Ergebnisse erzielen wie die WA-PLS, wirft die Frage auf, inwieweit bei der Datenerhebung relative Art-Abundanzen erhoben werden müssen. Da in dieser Studie die nominalen Daten durch eine reine Transformation der relativen Art-Abundanzdaten gewonnen wurden, steht ein Test mit einem unabhängigen Testdatensatz noch aus.

# **3.6** A comparison of relative abundance versus class data in diatom-based quantitative reconstructions (Studie VI, accepted with minor revisions)

Der Multinominal Transfer Function (MTF) - Ansatz in Kapitel 3.5 hat gezeigt, dass die Qualität von berechneten TP-Werten auf der Grundlage der WA-PLS und relativen Art-Abundanzdaten nicht besser ist, als die Verwendung von nominalen Abundanzklassen-Daten zur Berechnung von TP-Werten. Ein Großteil der in den Daten vorhandenen Streuung ist demnach nicht mit Schwankungen in der Trophie zu begründen, sondern hat Ursachen in der Veränderung anderer Umweltvariablen. Dabei dürften die unterschiedlichen Mechanismen der Taphonomie und des Time-averaging hier ebenfalls eine zentrale Rolle spielen (siehe Kapitel 1). Auch die in Anhang I, II und IV beschriebene räumliche Variabilität der Artenzusammensetzungen im Präsediment, deren Ursachen bisher nicht eindeutig zu klären sind, spielen hier sicherlich mit hinein.

Das von Hutchinson (1961) beschriebene "paradox of the phytoplankton" kann für das hier vorliegende Ergebnis durchaus die Erklärung geben. Nur selten lassen sich im Plankton einzelne dominante Arten finden, meistens koexistieren mehrere dominante Arten nebeneinander, welches einen Widerspruch zur allgemeingültigen Nischentheorie darstellt,

wonach, resultierend aus konkreten Konkurrenzbeziehungen, die Anzahl der dominierenden Arten der Anzahl dominant steuernder Umweltparameter entsprechen sollte. Als eine Ursache für dieses Phänomen der hohen Artenzahlen und wechselnden Abundanzen wird die wechselnde Hierarchie der Umweltvariablen in Bezug auf einzelne Arten bzw. Artengemeinschaften innerhalb des Lebensraumes Wasser angesehen, wodurch sich keine stabilen Konkurrenzvorteile einzelner Arten ausbilden können (Wilson 1990, Wetzel 2001). Ein Taxon hat in einem See mit unterschiedlichen saisonalen Kombinationen von Umweltvariablen unter Umständen nicht die Zeit, eine stabile, konkurrenzfähige Population aufzubauen. Ist der TP-Gehalt eines Gewässers zu Beginn der Frühjahrs-Vollzirkulation optimal für ein Taxon A, so hängt es von dessen Vermehrungsrate, dem Konkurrenzdruck durch andere Arten und der Zeitdauer der Aufzehrung des im Freiwasser verfügbaren TP-Gehaltes ab, ob dieses Taxon A eine stabile Population aufbauen kann. Die Dauer der Frühjahrs-Vollzirkulation hängt neben den allgemeinen Wetterbedingungen (Eisbedeckung, Lufttemperatur) stark von der Morphologie und der Windexponiertheit eines Gewässers ab (Schwoerbel & Brendelberger 2005). Bei gleichem TP-Gehalt des Freiwassers und gleicher Artenkombination kann das Taxon A in einem See eventuell seine optimale Ausbreitung erreichen. Während in einem zweiten See, dessen Durchmischungsphase eine Woche kürzer ist, dieses nicht erreicht wird. Im Präsediment ließen sich dann in den beiden Gewässern unterschiedliche relative Häufigkeiten für das Taxon A bestimmen, obwohl der TP-Gehalt der beiden Gewässer gleich war.

Ein Großteil der Variablen, die für die saisonale Entwicklung der einzelnen Taxa verantwortlich sind, ist nicht oder nur mit erheblichen Aufwand messbar (Kelly et al. 2009) und führen dazu, dass in den Eichdatensätzen ein großer Teil der Varianz der Daten nicht erklärbar ist, dass heißt es tritt in einem hohen Maße Überdispersion auf.

Das Eintreten von Überdispersion (siehe Kapitel 1) ist in dieser Arbeit nur am Rande untersucht worden und hat keinen Eingang in die im Anhang befindlichen Manuskripte gefunden<sup>32</sup>. Dennoch lässt sich aus den Abbildungen der einzelnen Arbeiten (siehe Studie I, Abbildung 2, Studie II, Abbildung 3) deutlich erkennen, dass eine hohe Varianz in den Daten vorhanden ist, die sich nicht durch eine Variable (hier TP) erklären lässt.

Es ist insofern fraglich, ob der Aufwand für die Erhebung von relativen Abundanzdaten in der Anwendung von Diatomeen zur Definition von Referenzzuständen von

<sup>&</sup>lt;sup>32</sup> Ein Kapitel zum Thema Überdispersion war zunächst in der Studie V mit angefügt. Diese wurde auf Anraten von Gutachtern des eingereichten Manuskriptes zugunsten der Länge der Studie herausgenommen und hat nun keinen Eingang mehr in diese Arbeit gefunden. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass lediglich 5 % der Arten aus den EDDI-MV Eichdatensätzen keine oder nur geringe Überdispersion aufweisen. Dies ist ein deutlicher Hinweis darauf, dass systemsteuernde Umweltvariablen nur ungenügend erfasst sind (siehe Kapitel 1).

Gewässern gerechtfertigt ist. Der in Kapitel 2.5 (3.5) vorgestellte Ansatz der MTF hat deutlich gezeigt, dass mit nominalen Klassendaten eine Indizierung von TP-Werten in gleicher Qualität produziert werden kann, als wenn anstelle dessen relative Art-Abundanzen verwendet werden. Die MTF ist im Vergleich zur WA oder WA-PLS Regression jedoch wesentlich rechenintensiver und Arten mit nur sehr geringem Vorkommen (n<5) werden bei der Berechnung ausgeschlossen (siehe Studie V). Des Weiteren wurden die Klassendaten ausschließlich aus bereits existierenden Datensätzen generiert, so dass hier keine unabhängigen Vergleiche durchgeführt werden konnten.

Ziel der Studie VI war es daher, zu überprüfen, inwieweit die Verwendung von ordinalen Klassen auch unter Nutzung der einfachen WA bzw. WA-PLS die rekonstruierten TP-Werte beeinflusst. Das heißt, es sollte eine Anzahl von Diatomeen-Präsedimentproben auf der Ebene der Abundanzklasse ausgewertet werden, um so einen realen Testdatensatz für die Anwendung der Idee der Abundanzklassen zu gewinnen.

Die Ergebnisse fallen überraschen deutlich aus. Die erklärte Varianz der Daten bezüglich den relativen Art-Abundanzen ist nicht signifikant besser als die basierend auf den Klassendaten (siehe Studie VI, Abbildung 3). Im Gegensatz zur Studie V wurden die Klassen hier nicht einzeln modelliert und die Ergebnisse zu einem Gesamtmodell zusammengefügt, sondern es wurden jeweils die gleichen mathematischen Methoden zur Berechnung der Varianz und zur Erstellung der Transferfunktion angewandt. Die ermittelten Artenoptima basierend auf der WA unterscheiden sich nicht signifikant (siehe Studie VI, Tabelle 3). Demzufolge scheint es für die TP-Rekonstruktion unter der Verwendung der WA bzw. WA-PLS tatsächlich unerheblich zu sein, ob ein Taxon mit einer relativen Abundanz von 2% oder 5%, 20% oder 29% bzw. 60% oder 90% in einer Probe vorkommt. Und tatsächlich unterscheiden sich die rekonstruierten TP-Werte für die in dieser Studie herangezogenen Sedimentkerne (siehe Studie VI, Tabelle 2) nicht signifikant voneinander (siehe Studie VI, Abbildung 4).

Das gleiche Ergebnis konnte auch mittels des realen Testdatensatzes ermittelt werden. Es wurden 20 Proben des Eichdatensatzes MV erneut ausgezählt, diesmal unter Verwendung der nominalen Art-Abundanzklassen. Die indizierten TP-Werte auf Grundlage dieser nominalen Art-Abundanzklassen unterschieden sich nicht signifikant von denen, die auf den relativen Art-Abundanzen basieren<sup>33</sup> (siehe Studie VI, Tabelle 4).

<sup>&</sup>lt;sup>33</sup> Die 20 Proben wurden zufällig ausgesucht unter Verwendung eines Zufallsgenerators in R (R Development Core Team 2009). Der große Fehler zwischen gemessenen und indizierten TP Werten spiegelt sich im hohen RMSEP des MV Eichdatensatzes der Studie I wieder.
Für einen Diatomologen bedeutet dieses Ergebnis, dass bei der Durchsicht von Präparaten keine einzelnen Schalen mehr gezählt werden müssen. Es ist ausreichend, Art-Abundanzklassen zu schätzen (siehe Studie VI, Abbildung 2). Dieses Vorgehen spart Zeit, und es können mehr Proben innerhalb eines bestimmten Zeitraumes bearbeitet werden im Vergleich zur herkömmlichen Zählweise. Bei gleichem finanziellen und zeitlichen Aufwand kann somit mehr Information aus einem Sedimentkern gewonnen werden, als wenn die Daten auf herkömmliche Weise erhoben werden.

Ein in der Praxis bisher selten eingesetztes Instrument bei der Analyse von Diatomeen-Präparaten ist die automatische Bilderkennung einzelner Arten (du Buf & Bayer 2002). Eine Vielzahl von Valven liegen in der schwer bestimmbaren Gürtelbandansicht oder ist nur bruchstückhaft in den Proben vorhanden, so dass ein automatischer Bildabgleich bei einer größeren Anzahl von Valven schwierig ist. Nach den Ergebnissen dieser Studie ist es nicht nötig, jede einzelne Diatomeenschale zu identifizieren, da nur die groben Relationen der Taxa zueinander und nicht die Kenntnis der exakten relativen Art-Abundanzen für eine TP-Indikation nötig sind.

# 3.7 The new statistical package paltran 1.3 for paleolimnological analyses: WA-, WA-PLS Regression and the Moving Window Approach for R 2.9.2 (Studie VII, accepted with minor revisions)

Es existiert eine große Zahl von Modellen zur Erstellung von Transfer-Funktionen (siehe Kapitel 1), die über einen sehr unterschiedlichen Grad an mathematischer Komplexität verfügen. Während das Prinzip der WA den meisten Anwendern plausibel und nachvollziehbar erscheint, benötigt der Anwender fundierte mathematische Kenntnisse, um die Ansätze von Vasko (2000) oder Holden et al. (2008) zu durchdringen. Wie bereits eingangs gezeigt (siehe Abbildung 3), hat die angewendete Methode zur Erstellung einer Transferfunktion einen erheblichen Einfluss auf die Ergebnisse einer Rekonstruktion. Um neue Verfahren umfassend hinsichtlich Plausibilität der Ergebnisse und Validierung mittels realer Testdatensätze in der Praxis zu testen, ist es zwingend notwendig, diese Modelle den Anwendern zur Verfügung zu stellen. So ist z. B. der MW-Ansatz bisher nur an solchen Eichdatensätzen und Sedimentkernen überprüft worden, die stark durch planktische Diatomeentaxa dominiert werden (siehe Studie VI).

Die Entwicklung eines Paketes für die freie Statistikplattform R (R Development Core Team 2009) ist somit aus der Notwendigkeit abgeleitet, eine praktikable und nutzerfreundliche Computerlösung für den Moving Windows Approach (siehe Studie III) anzubieten. Ohne eine solche Lösung ist die MW-Transfer-Funktion nicht in realistischen Zeiträumen anwendbar, da bei der Verwendung der MW-Methode eine Vielzahl von einzelnen Berechnungen mit unterschiedlichen Datensätzen durchzuführen ist. Grundsätzlich bietet die Statistikplattform R gegenüber kommerziellen Programmen den Vorteil, dass sie nicht nur frei nutzbar ist, sondern dass eine Vielzahl von statistischen Auswertungsmethoden frei kombinierbar sind und eine umfangreiche graphische Oberfläche zur Verfügung steht (z. B. Crawley 2007, Dalgaard 2008, Ligges 2008, Jones et al. 2009, Zuur et al.2009a, Zuur et al. 2009b). Der (zunächst) offensichtliche Nachteil für viele Nutzer, dass es sich bei diesem Programm um eine reine Konsolenversion handelt und der damit verbundene zeitliche Aufwand der Einarbeitung hoch ist, wird durch die hohe Flexibilität ausgeglichen (Chambers 2008, Zuur et al.2009b).

Wie in 3.3 angedeutet, sind in der Funktion *mw*() des Paketes *paltran* für die Umsetzung des MW-Ansatzes neben den Methoden, die in Studie III beschrieben wurden, weitere Verfahren zur Ermittlung der Modern Analogues implementiert. Zusätzlich wurde der Randomisierungstest von Van der Voet (1994), der ebenfalls in der aktuellen Version von C2 1.6.1 (http://www.staff.ncl.ac.uk/staff/stephen.juggins/software/C2Home.htm) und dem Paket *rioja* (Juggins 2009) implementiert ist, auf den Vergleich von Modellen mit unterschiedlicher Anzahl von Stichprobenelementen angepasst (siehe Studie VII, Hilfedatei für die Funktion *mw*). Im Fall der Transektproben des Dudinghausener Sees führt diese nicht zu einer signifikanten Verbesserung des Vorhersagefehlers gegenüber dem in Studie III beschriebenen Ansatz zur Bestimmung der Größe der einzelnen "lokalen" Eichdatensätze (nicht dargestellt). Bezüglich der Präsedimentproben des Tiefen Sees wurde der Fehler signifikant reduziert. Das zeigt, dass es durchaus Alternativen zur klassischen Verwendung des RMSEP (Birks 1989) in der Paläolimnologie gibt, die eine bessere Einschätzung der Transferfunktionen und Eichdatensätze zulassen.

Zum Beginn der Arbeiten für das Paket *paltran* (Mai 2008, erste Veröffentlichung von paltran 1.0 auf CRAN July 2008) waren weder die WA noch die übrigen, häufig genutzten Methoden der Paläolimnologie (WA-PLS, ML) in R verfügbar. Lediglich die Methode MAT (Modern Analogue Technique, ter Braak 1996) war in dem Paket *analogue* (Simpson & Oksanen 2009) verfügbar, so dass es nötig war, die WA und WA-PLS zusätzlich in *paltran* zu implementieren. Zur Zeit ist die WA ebenfalls in dem Packet *analogue* und *rioja* (Juggins

2009) sowie die WA-PLS, ML und MAT in *rioja* implementiert. Wünschenswert für die Zukunft wäre eine Vereinigung der Pakete, um die Anwendung der unterschiedlichen Funktionen für die Nutzung der Fachkollegen einfacher und übersichtlicher zu gestalten.

### 4 Zusammenfassung

Im Mittelpunkt dieser Arbeit stand die Erfassung der Variabilität von Diatomeen-Artenzusammensetzungen im Präsediment norddeutscher Seen. Die Arbeit unterteilt sich in sechs einzelne Studien, die jeweils Teilaspekte dieser Variabilität betrachten und in denen Lösungsansätze erarbeitet wurden, wie mit diesem Problem umgegangen werden kann.

Der von Hübener et al. (2001) erstellte Diatomeen-Eichdatensatz wurde im Rahmen dieser Arbeit um 50 auf insgesamt 87 Seen erweitert. Die Artenzusammensetzung der Diatomeen in diesem norddeutschen Eichdatensatz (MV) weist eine sehr hohe Variabilität auf, die sich durch die erfassten Umweltvariablen nur ungenügend beschreiben lässt. Entsprechend ungünstig ist die auf Kreuzvalidierung basierende Fehlerstatistik der auf diesem Datensatz aufbauenden Transferfunktionen.

Bei der Analyse von Präsedimentproben entlang von Transekten in vier Seen Norddeutschlands wurde eine sehr hohe Variabilität der Diatomeen-Artenzusammensetzung benachbarter Proben gefunden. Die hohe Variabilität kann die Ursache für die ungenügende Vorhersagequalität des norddeutschen Eichdatensatzes sein. Die Transekt-Präsedimentproben wurden als unabhängiger Testdatensatz für die Evaluierung der Vorhersagequalität von unterschiedlichen Modellen für die Erstellung von Transferfunktionen, die auf unterschiedlichen Eichdatensätzen basieren, verwendet. Es konnte nachgewiesen werden, dass der Fehler der auf der ML-Regression und dem lokalen norddeutschen Eichdatensatz basierenden Transferfunktion signifikant geringer ist, als der auf der WA-PLS und dem kombinierten TP-Eichdatensatz der EDDI-Datenbank (Battarbee et al. 2000) zugrunde liegende, obwohl die auf Kreuzvalidierung basierende Fehlerstatistik der ML-Regression und des norddeutschen Eichdatensatzes deutlich schlechter war. Der Einfluss der hohen Variabilität benachbarter Präsedimentproben auf die Bioindikation anhand der Diatomeen

kann demnach durch die Wahl eines geeigneten Eichdatensatzes und einer geeigneten Methode zur Erstellung einer Transferfunktion signifikant gemindert werden.

Stützend auf dem Ergebnis, dass die Bioindikation basierend auf einem lokalen Eichdatensatz einen signifikant geringeren Fehler aufweist als auf einem globalen, wurde die Idee der Moving Window Methode (MW) entwickelt. Die MW-Methode ermittelt für jede Probe eines Sedimentkernes einen optimalen "lokalen" Eichdatensatz, wobei die Größe dieses Eichdatensatzes variabel ist. Sowohl hinsichtlich der Kreuzvalidierung als auch in der Anwendung auf unabhängige Testdatensätze ist der Vorhersagefehler der MW-Methode signifikant geringer, als der für die WA-PLS. Somit stellt die MW-Methode eine Lösung im Umgang mit der gefundenen hohen Variabilität von Diatomeen-Artenzusammensetzungen innerhalb und zwischen den Seen dar.

Neben der räumlichen Variabilität innerhalb eines Sees und zwischen den Seen wurde die saisonale Variabilität von Diatomeen-Artenzusammensetzungen innerhalb eines Sees untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass einzelne Arten im Präsediment ihrem Vorkommen entsprechend im Jahreslauf besser mit den saisonalen Werten für Gesamtphosphat (TP) zu korrelieren sind als mit dem TP-Jahresmittelwert. Aufbauend auf diesen Ergebnissen wurde eine WA<sub>seasonal</sub> entwickelt, die die saisonalen Präferenzen einzelner Arten berücksichtigt.

Da sich ein Großteil der beobachteten Variabilität des norddeutschen Eichdatensatzes nicht durch einzelne Umweltvariablen erklären lässt, wurde mit dem Modell der multinominalen Regressionsanalyse ein Modell für Transferfunktionen (MTF) erstellt, das anstelle der metrischen relativen Art-Abundanzen nominale Abundanzklassen als Grundlage zur Modellierung der Verbreitung einzelner Taxa nutzt. Es konnte für mehrere Eichdatensätze nachgewiesen werden, dass sich die TP-Indikation, die auf den Art-Abundanzklassen basiert, hinsichtlich des Vorhersagefehlers nicht signifikant von der TP-Indikation unterscheidet, die auf metrischen Art-Abundanzen beruht. Die hohe Genauigkeit durch Erfassung relativer Art-Abundanzen scheint im Vergleich mit der geringeren Genauigkeit der Art-Abundanzklassen für die TP-Indikation nicht notwendig zu sein.

Die MTF-Methode ist sehr rechenaufwendig, so dass überprüft wurde, inwieweit die Verwendung von Abundanzklassen bei der Indikation, die auf einer WA- bzw. WA-PLS-Regression basiert, zu einer Änderung in der Qualität der TP-Indikation führt. Anhand vorhandener Eichdatensätze und Proben von vier unterschiedlichen Sedimentkernen sowie für direkt auf der Ebene der Abundanzklassen ausgewertete Proben konnte nachgewiesen werden, dass die Indikationsergebnisse bezüglich der unterschiedlichen Datenskalen keine signifikanten Unterschiede aufweisen. Demzufolge haben kleine Änderungen in der relativen Art-Abundanz keinen Einfluss auf die Ergebnisse der Bioindikation.

Für die MW-Methode sowie für die MTF wurde ein Programmpaket *paltran* für die freie Statistikplattform R (R Development Core Team 2009) implementiert.

Diese Arbeit Variabilität hat zum einen aufgezeigt, dass die der Diatomeenzusammensetzungen im Sediment einen erheblichen Einfluss auf die Ergebnisse der TP Indizierung hat, zum anderen konnten Lösungsansätze für dieses Problem erarbeitet werden. Die Analyse der saisonalen Entwicklung der Artenzusammensetzungen verspricht bei einer höheren Datendichte die Qualität von Transferfunktionen noch erheblich zu verbessern. Gerade in Hinsicht auf die Diskussion um anthropogen veränderte Umweltvariablen, welche in der Zukunft die Biotope nachhaltig verändern werden, ist hier noch ein hoher Forschungsbedarf gegeben.

## 5. Literatur

- Aarts G, MacKenzie M, McConnell B, Fedak M, Matthiopoulos J (2008) Estimating space-use and habitat preference from wildlife telemetry data. Ecography 31:140–160.
- Adler S (2009) paltran: WA, WA-PLS, MW and POM for paleolimnology. R package version 1.3-0. http://CRAN.R-project.org/package=paltran.
- Adler S, Hübener T (2007) Spatial variability of diatom associations in surface lake sediments and its implications for transfer function. Journal of Paleolimnology 37: 573-590.
- Alefs J, Müller J, Wunsam S (1996) Die Rekonstruktionder epilimnischen Phosporkonzentrationen im Ammersee seit 1958. Wasser Abwasser 137:443–447.
- Anderson N J, Rippey B, Gibson CE (1993) A comparison of sedimentary and diatom-inferred phosphorus profiles: implications for defining pre-disturbance nutrient conditions. Hydrobiologia 253: 357-366.
- Anderson NJ (1990) Inferring Diatom Palaeoproduction and Lake Trophic Status from Fossil Diatom Assemblages. 11th Diatom Symosium pp. 539-547.
- Anderson NJ, Odgaard BV (1994) Recent palaeolimnology of three shallow Danish lakes. Hydrobiologia 275: 411-22.
- Anderson NJ, Rippey B (1994) Monitoring lake recovery from point-source eutrophication: the use of diatominferred epilimnetic total phosphorus and sediment chemistry. Freshw. Biol. 32: 625-39.
- Arens NC, Jahren AH, Amundson R (2000) Can C3 plants faithfully record the carbon isotopic composition of atmospheric carbon dioxide? Paleobiologie 26: 137-164.

Austin MP (1987) Models for the analysis of species response to environmental gradients. Vegetatio 69:35-45.

- Austin MP (2002) Spatial prediction of species distribution: an interface between ecological theory and statistical modelling. Ecological Modelling 157: 101-118.
- Austin MP, Nicholls AO, Doherty MD, Meyers JA (1994). Determining species response functions to an environmental gradient by means of a beta-function. Journal of Vegetation Science 5:215-228.
- Austin MP, Nicholls AO, Margules CR (1990). Measurement of the realized qualitative niche: environmental niches of five *Eucalyptus* species. Ecological Monographs 60:161-177.
- Barker P, Fontes JC, Gasse F, Druart JC (1994) Experimental dissolution of diatoms silica in concentrated salt solutions and implications for palaeoenvironmental reconstruction. Limnol. Oceanogr. 39: 99-110.
- Barker P, Gasse F, Roberts N, Taieb M (1990) Taphonomy and diagenesis in diatom assemblages; a later Pleistocene palaeoecological study from lake Magadi. Hydrobiologia 214: 267-272.
- Barker PA, Roberts N, Lamb HF, van der Kaars S, and Benkaddour A (1994) Interpretation of Holocene lake level change from diatom assemblages in Lake Sidi Ali, Middle Atlas Marocco. Journal of Paleolimnology 12: 223-234.
- Battarbee RW (1981) Changes in the diatom microflora of a eutrophic lake since 1900 from a comparison of old algal samples and the sedimentary record. Holarc. Ecol. 4: 73-81.
- Battarbee RW, Grytnes JA, Thompson R, Appleby PG, Catalan J, Korhola A, Birks HJB, Heegaard E., Lami A (2004) Comparing palaeolimnological and instrumental evidence of climate change for remote mountain lakes over the last 200 years. Journal of Paleolimnology 28: 161-179.
- Battarbee RW, Jones VJ, Flower RJ, Cameron NG, Bennion H, Carvalho L, Juggins S (2001). Diatoms. In Smol JP, Birks HJB, Last WM (eds), Tracking environmental change using lake sediments. Volume 3: Terrestrial, Algal and Siliceous Indicators. Kluwer, Dordrecht: 155–202.
- Battarbee RW, Juggins S, Gasse F, Anderson NJ, Bennion H, Cameron NG (2000). European Diatom Database (EDDI). An information system for paleoenvironmental reconstruction. European Climate Science Conference, European Commission, Vienna, Austria 1998: 1–10.
- Battarbee RW, Monteith DT, Juggins S, Simpson GL, Shilland EW, Flower RJ, Kreiser AM (2008) Assessing the accuracy of diatom-based transfer functions in defining reference pH conditions for acidified lakes in the United Kingdom, The Holocene 18: 57-67.
- Battarbee RW, Renberg I (1990) The Surface Water Acidification Project (SWAP) Palaeolimnology Programme. Phil. Trans. R. Soc. London, Ser. B 327: 227-232.
- Battarbee, RW, Kneen MJ (1982). The use of electronically counted microspheres in absolute diatom analysis. Limnology and Oceanography 27: 184–188.
- Batterbee RW, Charles DF, Dixit SS and Renberg I (1999) Diatoms as indicators of surface water acidity. In: Stoermer EF and Smol JP (eds.) The Diatoms: Applications for the Environmental and Earth Sciences. University Press, Cambridge, 482 pp.
- Begon M, Townsend M, Harper JL (2005) Ecology From individuals to ecosystems. 4<sup>th</sup> ed. Blackwell Science, Oxford, 752 pp.
- Bennett KD (2002) Comment: the Greenland 8200 cal yr bp event detected in loss-on-ignition profiles in Norwegian lacustrine sediment sequences. J Quat Sci 17:97–99.
- Bennion H (1995) Surface-sediment diatom assemblages in shallow, artificial, enriched ponds, and implications for reconstructing trophic status. Diatom Res 10:1–19.
- Bennion H, Appleby PG, Phillips GL (2001) Reconstructing nutrient histories in the Norfolk Broads, UK: implications for the role of diatom-total phosphorus transfer fuctions in shallow lake management. Journal of Paleolimnologie 26: 181-204.

- Bennion H, Battarbee R (2007) The European Union Water Framework Directive: opportunities for palaeolimnology. Journal of Paleolimnology 38: 285–295.
- Bennion H, Fluin J, Simpson GL (2004). Assessing eutrophication and reference conditions for Scottish freshwater lochs using subfossil diatoms. Journal of applied Ecology 41: 124–138.
- Bennion H, Wunsam S, Schmidt R (1995) The validation of diatom-phosphorus transfer functions: an example from Mondsee, Austria. Freshwater Biology 34: 271-283.
- Bigler C, Hall R (2001) Diatoms as indicators of climatic and limnological change in Swedish Lapland: A 100lake calibration set and its validation for paleoecological reconstructions. Journal of Paleolimnology 27:1-19.
- Birks HH, Birks HJB (2006) Multi-proxy studies in palaeolimnology. Veget Hist Archaeobot 15: 235–251.
- Birks HJB (1995) Quantitative Palaeoenvironmental reconstructions. In: Maddy D, Brew JS (eds) Statistical modelling of quaternary science data. Cambridge,pp 161–255.
- Birks HJB (1998) Numerical tools in palaeolimnology–progress, potentialities, and problems. J Paleolimnol 20:307–332.
- Birks HJB (2001) Maximum likelihood environmental calibration and the computer program WACALIB a correction. J Paleolimnol 25: 111–115.
- Birks HJB, Birks HH (1980) Quaternary palaeoecology. Edward Arnold, London, 289 pp.
- Birks HJB, Line JM, Juggins S, Stevenson AC (1990) Diatoms and pH reconstruction. Phil.Trans.R.Soc.Lond.B 327: 263-278.
- Birks, HH, Birks HJB, Kaland PE, Moe D (1988). The Cultural Landscape—Past, Present and Future. Cambridge University Press, Cambridge, 544 pp.
- Bjerring R, Bradshaw EG, Amsinck SL, Johansson LS, Odgaard BV, Nielsen AB, Jeppsen E (2008) Inferring recent changes in the ecological state of 21 Danish candidate reference lakes (EU Water Framework Directive) using palaeolimnology. Journal of Applied Ecology 45: 1566–1575.
- Bolker B.J. (2008) Ecological Models and Data in R. Princeton University Press, Princeton, 396 pp.
- Bradshaw EG, Anderson NJ (2001) Validation of a diatomphosphorus calibration set for Sweden. Freshwater Biol 46: 1035–1048.
- Bradshaw EG, Nielsen AB, Anderson NJ (2006) Using diatoms to assess the impacts of prehistoric, preindustrial and modern land-use on Danish lakes. Reg Environ Change 6: 17–24.
- Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie (BSH) (2009) Bund/Länder-Messprogramm für die Meeresumwelt von Nord- und Ostsee (BLMP), <u>http://www.bsh.de/de/Meeresdaten/Beobachtungen/BLMP-Messprogramm/index.jsp</u>.
- Cameron NG (1995) The representation of diatom communities by fossil assemblages in a smal acid lake. Journal of Paleolimnology 14: 185-223.
- Chambers JM (2008) Software for Data analysis, Springer Verlag, New York, 495 pp.
- Charles DF, Dixit, SS, Cumming, BF, Smol JP (1991) Variability in diatom and chrysophyte assemblages and inferred pH: paleolimnological studies of Big Moose Lake, New York, USA. Journal of Paleolimnology 5: 267-284.
- Charles DF, Smol JP (1994) Long-term chemical changes in lakes: quantitative inferences using biotic remains in the sediment record. In Barker L (eds) Environmental Chemistry of lakes and Reservoirs. Amer. Chem. Soc., Adv. Chem. Ser. 237: 3-31.

- Charles DF, Whitehead DR (1986) The PIRLA Project: Palaeoecological Investigation of Recent Lake Acidification. Abstract for the IVth International Symposium on Palaeolimnology, Ossiach, Austria.
- Chipman ML, Clarke GH, Clegg FB, Gregory-Eaves I, Hu FS (2009) A 2000 year record of climatic change at Ongoke Lake, southwest Alaska. J Paleolimnol 41: 57–75.

Cholnoky, B. J., 1968. Die Ökologie der Diatomeen in Binnengewassern, J. Cramer, Braunschweig, 699 pp.

Clarke KR, Gorley RN (2006). PRIMER v6: User Manual/Tutorial. PRIMER-E, Plymouth.

Cohen AS (2003) Paleolimnology – The History and Evolution of Lake Systems. Oxford University Press, Oxford, 500 pp.

Cowpertwait PSP, Metcalfe AV (2009) Introductionary Time Series with R. Springer Verlag, New York, 254 pp.

Crawley MJ (2002) Statistical Computing. Wiley & Sons, Chichester, 761 pp.

Crawley MJ (2007) The R book. Wiley & Sons, Chichester, 942 pp.

- Cumming BF, Smol JP 1993. Development of diatom-based salinity models for paleoclimate research from lakes in British Columbia, Canada. Hydrobiologia 269/270: 179-196.
- Dalgaard P (2008) Introductory Statistics with R. Second Edition, Springer Verlag, New York, 363 pp.
- Davis RB, Anderson DS (1985) Methods of pH calibration of sedimentary diatom remains for reconstructing history of pH in lakes. Hydrobiologia 120: 69-87.
- De Groot RS (1992) Functions of Nature –Evaluation of nature in environmental planning, management and decision making. Wolters-Noordhoff, Amsterdam, 315 pp.
- Diederichs A, Nehls G, Dähne M, Adler S, Koschinski S, Verfuß U (2008) Methodologies for measuring and assessing potential changes in marine mammal behaviour, abundance or distribution arising from the construction, operation and decommissioning of offshore windfarms. COWRIE Ltd. ISBN: 978-0-9557501-2-0.
- Diefendorf AF, Patterson WP, Mullins HT, Tibert N, martini A (2006) Evidence for high-frequency late Glacial to mid-Holocene (16.800 to 5500 cal yr B.P.)climate variability from oxygen isotope values of Lough Inchiquin, Ireland. Quaternary Research 65: 78-86.
- Dixit SS, Dixit AS, Smol JP (2002) Diatom and chrysophyte transfer functions and inferences of post-industrial acidification and recent recovery trends Killarney lakes (Ontario, Canada). Journal of Paleolimnology 27: 79-96
- Dixit SS, Smol JP (1994) Diatoms as indicators in the environmental monitoring and assessment programsurface waters (EMAP-SW). Environmental Monitoring and Assessment 31: 275-306.
- Dixit SS, Smol JP, Kingston JC, Charles DF (1992) Diatoms : Powerful indicators of environmental change. Environ. Sci. Techno . 26 : 22-32.
- Dixit, SS, Dickmann M (1986) Correlation of surface sediment diatoms with the present lake water pH in 28 Algoma lakes, Ontario, Canada. Hydrobiologia 131: 133-143.
- Dobson A (2001) An Introduction to Generalized Linear Models, Second Edition, Chapman & Hall/CRC, London, 240 pp.
- Doledec S, Chessel D (1994) Co-inertia analysis: an alternative method for studying species-environment relationships: Freshwater Biology 31, p. 277-294.
- Dreßler M, Selig U, Dörfler W, Adler S, Schubert H, Hübener T (2006) Environmental changes and the migration period in Europe by the example of Lake Dudinghausen (northern Germany). Quaternary Research 66: 25-37.

- du Buf H, Bayer M. (eds) (2002) Automatic Diatom Identification (Series in Machine Perception & Artifical Intelligence), World Scientific Pub Co, Singapore, 315 pp.
- Duthie HC, Yang JR, Edwards TWD, Wolfe BB, and Warner BG (1996) Hamilton Harbour, Ontario: 8300 years of environmental changes inferred from microfossils and isotopic analysis. Journal of Paleolimnology 15, 367-385.
- Efron B. (1982) The jackknife, the bootstrap and other resampling plans. SIAM, Philadelphia, 92 pp.
- Elith J, Graham CH, Anderson RP, Dudík M, Ferrier S, Guisan A, Hijmans RJ, Huettmann F, Leathwick JR, Lehmann A, Li J, Lohmann LG, Loiselle BA, Manion G, Moritz C, Nakamura M, Nakazawa Y, Overton JM, Peterson AT, Phillips SJ, Richardson K, Scachetti-Pereira R, Schapire RE, Soberon J, Williams S, Wisz MS, Zimmermann NE (2006) Novel methods improve prediction of species' distributions from occurrence data. Ecography 29: 129–151.
- Ellenberg H (1953) Physiologisches und ökologisches Verhalten derselben Pflanzenart. Ber. dtsch. bot. Ges 65: 351-362.
- EPICA comunity members (2004) Eight glacial cycles from an Antarctic ice core. Nature 429: 623-628.
- European Union (2000) Direktive 2000/60/EC of the European Parlament and the Council of 23.10.2000 establishing a framework for Community action in the field of water policy. Official Journal of the EC L327: 1-72.
- Fægri, K., & J. Iversen, 1975. Textbook of pollen analysis. Munksgaard. Kopenhagen: 101–117.
- Fahrmeir L, Kneib T, Lang S (2007) Regression Modelle, Methoden und Anwendungen. Springer Verlag, Berlin, 501 pp.
- Fahrmeir L, Künstler R, Pigeot I, Tutz G, (2007) Statistik. 6. Auflage, Springer Verlag, Berlin, 610 pp.
- Fahrmeir L, Lang S (2001) Bayesian Inference for Generalized Additive Mixed Models Based on Markov Random Field Priors. Applied Statistics 50 (2): 201-220.
- Faraway JJ (2006) Extending the Linear Model with R: Generalized Linear, Mixed Effects and Nonparametric Regression Models (Texts in Statistical Science). Chapman & Hall/CRC, London 312 pp.
- Fietz S, Nicklisch A (2004) Das Phytoplankton des Baikals: Eine Analyse der rezenten und fossilen photosynthetischen Pigmente. Deutsche Gesellschaft für Limnologie Tagungsbericht 2003.
- Fortin MJ, Dale MRT (2005) Spatial Analysis: A Guide for Ecologists, Cambridge University Press, Cambridge, 380 pp.
- Fritz SC 1990. Twentieth century salinity and water level fluctuation in Devils lake, North Dakota: tst of a diatom transfer function. Limnol. Oceanogr. (35), 1771-1781.
- Fritz SC, Cumming BF, Gasse F, Laird KR (1999) Diatoms as indicators of hydrologic and climate change in saline lakes. In: Stoermer EF and Smol JP (eds.) The Diatoms: Applications for the Environmental and Earth Sciences. University Press, Cambridge, 482 pp.
- Fritz SC, Engstrom DR, Haskell BJ (1994) "Little Ice Age" aridity in the North American Great Plains: a high resolution reconstruction of salinity fluctuations from Devils Lake, North Dakota, USA. The Holocene 4: 69–73.
- Gasse F, Fontes JC, Plaziat JC, Carbonel P, Kaczmarska I, De Deckker P, Soulie-Marsche I, Callot Y, Dupeuble PA 1987. Biological remains, geochemistry and stable isotopes for the reconstruction of environmental and hydrological changes in the Holocene lakes in north Sahara. Palaeogeog., Palaeoclim, Palaeoecol. 60: 1-46.
- Gelmann A, Hill J (2007) Data Analysis using Regression and Multilevel/Hierarchical Models, Cambridge University Press, Cambridge, 625 pp.

- Gower JC (1984) Multivariate analysis: Ordination multidimensional scaling and allied topics. In: Lloyd EH (eds) Handbook of Applicable Mathematics. Wiley & Sons, Chichester: 721-781.
- Green RH (1979) Sampling Design and Statistical Methods for Environmental Biologists, Wiley-Interscience Thesis, New York.
- Greig-Smith P (1983) Quantitative Plant Ecology. 3rd edittion, Blackwell Scientific, Oxford, 359 pp.
- Grenier M, Campeau S, Lavoie I, Park YS, Lek S (2006) Diatom reference communities in Québec (Canada) streams based on Kohonen self-organizing maps and multivariate analyses. Can. J. Fish. Aquat. Sci. 63(9): 2087–2106.
- Grüneberg B, Ostendorp W, Leßmann D, Wauer G, Nixdorf B (2009) Gestaurierung von Seen und Renaturierung von Seeufern. In: Zerbe S, Wiegleb G (eds) Renaturierung von Ökosystemen in Mitteleuropa, Spektrum Verlag, Heidelberg, 498 pp.
- Guisan A, Zimmermann NE (2000) Predictive habitat distribution models in ecology. Ecological Modelling 135: 147-186.
- Guisan, A, Weiss SB, Weiss AD (1999) GLM versus CCA spatial modelling of plant species distribution. Plant Ecology 143: 107-122.
- Günther K (1950) Ökologische und Funktionelle Anmerkungen zur Frage des Nahrungserwerbs bei Tiefseefischen mit einem Exkurs über die ökologischen Zonen und Nischen. In: Grünenberg H, Ulrich W (eds) Moderne Biologie. Festschirft zum 60. Geburtstag von Hans Nachtsheim, Berlin: 55-93.
- Haberyan KA (1990) The misrepresentation of the planktonic diatom assemblages in traps and sediments: southern Lake Malawi, Africa. Journal of Paleolimnology 3: 35-44.
- Hall R, Leavitt PR, Smol JP, Zirnhelt N (1997) Comparison of diatoms, fossil pigments and historical records as measures of lake eutrophication. Freshwater Biology 38: 401-417.
- Hall RI, Smol JP (1999) Diatoms as indicators of lake eutrophication. In: Stoermer EF and Smol JP (eds.) The Diatoms: Applications for the Environmental and Earth Sciences. University Press, Cambridge, 482 pp.
- Hastie T, Tibshirani R (1990) Generalized additive models. Chapman and Hall, London, 335 pp.
- Hastie T, Tibshirani R, Friedman J (2009) The Elements of Statistical Learning. Springer Verlag, New York, 745 pp.
- Hausmann S, Kienast F (2006) A diatom-inference model for nutrients screened to reduce the influence of background variables: Application to varved sediments of Greifensee and evaluation with measured data. Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology 233: 96-112.
- Hausmann S, Pienitz R (2007) Seasonal climate inferences from high-resolution modern diatom data along a climate gradient: a case study. Journal of Paleolimnology 38: 73-96.
- Hausmann S, Pienitz R (2009) Seasonal water chemistry and diatom changes in six boreal lakes of the Laurentian Mountains (Québec, Canada): impacts of climate and timber harvesting. Hydrobiologia 635: 1-14.
- Heegaard E (2002) The outer border and central border for species-environmental relationships estimated by non-parametric generalized additive models. Ecological Modelling 157:131-139.
- Heiri O (2004) Within-lake variability of subfossil chironomid assemblages in shallow Norwegian lakes. Journal of Paleolimnology 32: 67-84.
- Herth W, Zungenmaier P (1977). Ultrastructure of the chitin fibrils of the centric diatom Cyclotella cryptica. J. Ultrastructure. Res. 61: 230-239.
- Hilbe JM (2008) Negative Binomial Regression. Cambridge University Press, Cambridge, 251 pp.

- Hill MO, Gauch HG (1980) Detrended correspondence analysis, an improved ordination technique. Vegetatio 42: 47-58.
- Hofmann G (1994) Aufwuchs-Diatomeen in Seen und ihre Eignung als Indikatoren der Trophie. Bibliotheca Diatomologica 30. J. Cramer in Gebrüder Borntraeger Verlagsbuchhandlung Berlin, Stuttgart.
- Holden PB, Mackay AW, Simpson GL (2008) A Bayesian palaeoenvironmental transfer function model for acidified lakes. Journal of Paleolimnology 39: 551-566.
- Holden PB , Mackay AW , Simpson GL (2008) A Bayesian palaeoenvironmental transfer function model for acidified lakes. Journal of Paleolimnology 39: 551-566.
- Horn H, Horn W (1993) Sedimantary Losses in the Reservoir Saidenbach: Flux and Sinking Velocities of Dominant Phytoplankton Species. Int Rev.Ges.Hydrobiol. 78: 39-57
- Hübener T, Adler S, Schult M Michaelis D, Meyer H, Grootes PM, Huels M, Erlenkeuser H (2009b) Paläolimnologische Untersuchungen zur Rekonstruktion von typenspezifischen Referenzzuständen in schleswig-holsteinischen Seen (Seentypen 11, 14). Landesamt für Natur- und Umwelt des Landes SH, Kiel-Flintbeck.
- Hübener T, Adler S, Selig U. (2001) Nutzung einer Diatomeen Gesamtphosphat Korrelation zur Trophieindikation. Erste Ergebnisse aus mecklenburgischen Seen. RMB 9: 37-45.
- Hübener T, Adler S, Werner P, Schuldt M, Erlenkeuser H, Meyer H, Bahnwart M (2009a) A multi-proxy paleolimnological reconstruction of trophic state reference conditions for stratified carbonate-rich lakes in northern Germany. Hydrobiologia (2009) 631: 303–327.
- Hübener T, Dörfler W (2004) Reconstruction of the trophic development of the Lake Krakower Obersee (Mecklenburg, Germany) by means of sediment-diatom- and pollen-analysis. Studia Quaternaria 21: 101–108.
- Hübener T, Dreßler M, Schwarz A, Langner K, Adler S (2008) Dynamic adjustment of training sets ('movingwindow' reconstruction) by using transfer functions in paleolimnology - a new approach. Journal of Paleolimnology 40: 79-95.
- Hübener T, Werner P, Adler S, Schult M, Meyer H, Erlenkeuser H, Gootes PM, Huels M (2006) Paläolimnologische Untersuchungen zur Rekonstruktion von typenspezifischen Referenzzuständen in schleswig-holsteinischen Seen. Landesamt für Natur- und Umwelt des Landes SH, Kiel-Flintbeck.
- Huber P (1981) Robust statistics, Wiley, New York, 354 pp.
- Huisman J, Olff H, Fresco LFM (1993) A hierarchical set of models for species response analysis. Journal of Vegetation Science 4, 37-46.
- Hustedt F (1939) Systematische und ökologische Untersuchungen über die Diatomeen-Flora von Java, Bali, Sumatra. Arch. Hydrobiol. Suppl. 16: 274-394.

Hutchinson GE (1957) Concluding remarks. Cold Spring Harbor Symposia on Quantitative Biology 22:415-427.

- Hutchinson GE (1961) The paradox of the plankton. Am. Nat. 95: 137-146.
- Imbrie J, Kipp NG (1971) A new micropaleontological method for quantitative paleoclimatology: application to a late Pleistocene Caribbean core. The late Cenozoic Glacial Ages (ed. K.K. Truekain) 71-181. Yale University Press, New Haven.
- Jones P & Moberg A (2003) Hemispheric and large-scale surface air temperature variations: An extensive revision and an update to 2001. Jouranl of Climate 16: 206-223.
- Jongman RHG, ter Braak CJF van Tongeren OFR (1995) Data analysis in community and landscape ecology. Cambridge University Press. Cambridge. 299 pp.

- Juggins S (2005) C2 Software for ecological and palaeoecological data analysis and visualisation User guide Version 1.5, School of Geography, Politics & Sociology Newcastle University. (http://www.staff.ncl.ac.uk/staff/stephen.juggins/software.htm)
- Juggins, S., (2009). rioja: An R Package for the Analysis of Quaternary Science Data, Version 0.5-3. (http://cran.r-project.org/package=rioja).
- Kalbe, L. & H. Werner, 1974. Das Sediment des Kummerower Sees. Untersuchungen des Chemismus und der Diatomeenflora. Internationale Revue der Gesamten Hydrobiologie 596: 755–782.
- Kauppila T (2002) Variability of surface sediment diatom assemblages in Lake Salkolanjaervi, Finnland. Proceedings of the 15<sup>th</sup> international diatom symposium, Perth, 1998, 263–274.
- Keele L (2008) Semiparametric Regression for the Social Sciences. John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 213 pp.
- Kelly M, Bennion H, Burgess A, Ellis J, Juggins S, Guthrie R, Jamieson J, Adriaenssens V, Yallop M (2009) Uncertainty in ecological status assessments of lakes and rivers using diatoms. Hydrobiologia 633: 5– 15.
- Kelly MG, Whitton BA (1995). The Trophic Diatom Index: a new index for monitoring eutrophication in rivers. Journal of Applied Phycology 7: 433–444.
- Kirilova EP, Bluszcz P, Heiri O, Cremer H, Ohlendorf C, Lotter AF, Zolitschka B (2008) Seasonal and interannual dynamics of diatom assemblages in Sacrower See (NE Germany): a sediment trap study. Hydrobiologia 614:159–170.
- Kolbe RW (1927) Zur Ökologie, Morphologie und Systematik der Brackwasser-Diatomeen. Pflanzenforschung 7: 1-146.
- Korhola A, Vasko K, Toivonen HTT, Olander H (2002) Holocene temperature changes in northern Fennoscandia reconstructed from chironomids using Bayesian modelling. Quaternary Science Reviews 21: 1841-1860.
- Köster D, Pienitz R (2006) Seasonal diatom variability and paleolimnological inferences a case study. Journal of Paleolimnology 35: 395–416.
- Köster D, Racca, JMJ, Pienitz R (2004) Diatom-based inference models and reconstructions revisited: methods and transformations. Journal of Paleolimnology 32: 233-246.
- Krammer K, Lange-Bertalot H (1986). Süßwasserflora von Mitteleuropa, Bacillariophyceae 2/1. In Ettl, H., J. Gerloff, H. Heinig & D. Mollenhauer (eds), Süsswasserflora von Mitteleuropa, Vol. 2, no. 1. Gustav Fisher Verlag, Stuttgart.
- Kratochwil A, Schwabe A (2001) Ökologie der Lebensgemeinschaften. Ulmer Verlag, Stuttgart, 756 pp.
- Kullenberb B (1947) The piston core sampler. Svenska Hydrogr.-Biol. Komm. Skrift, 3 Hydrogr. 1,46 pp.
- Ladle RJ, Jepson P, Araujo MB, Whittaker, TJ (2004) Dangers of crying wolf over risk of extinctions. Nature 428: 799.
- Lampert W, Sommer U (1999) Limnoökologie. Thieme Verlag, Stuttagart, 489 pp.
- Last WM, Smol JP (eds) (2001a) Tracking environmental change using lake sediments. Basin analysis, coring, and chronological techniques, vol 1. Kluwer, Dordrecht, 576 pp.
- Last WM, Smol JP (eds) (2001b) Tracking environmental change using lake sediments. Physical and geochemical methods, vol 2. Kluwer, Dordrecht, 528 pp.
- LAWA, 1999. Gewässerbewertung stehende Gewässer. Länderarbeitsgemeinschaft Wasser, Kulturbuchverlag, Berlin.

- Lawless JF (1987) Negative binomial and mixed Poisson regression. Canadian Journal of Statistics 15(3): 209-225.
- Le J, Shackleton NJ (1994) Reconstructing paleoenvironment by transfer function: model evaluation with simulated data. Marine Micropaleontology 24: 187-199.
- Lepś J, Śmilauer P (2003) Multivariate Analysis of Ecological Data Using CANOCO. Cambridge University Press, Cambridge, 269 pp.
- Li CW, Volcani BE (1987) Four new apochlorotic diatoms. Br. Phycol. J. 124: 147-156.
- Ligges U (2008) Programmieren mit R. 3. Auflage, Springer Verlag, Berlin, 251 pp.
- Line JM, ter Braak CJF, Birks HJB (1994) WACALIB version 3.3 a computer program to reconstruct environmental variables from fossil assemblages by weighted averaging and to derive sample specific errors of prediction. Journal of Paleolimnology 10: 147-152.

Livingstone DA (1955) A lightweight piston sampler for lake deposits. Ecol. 36: 137-139.

- Lorenz S, Lampe R, Jahnke W, Meyer H, Küster M, Hübener T (2008):Beckenentwicklung, Sedimentationsgeschichte und Paläohydrologie der Müritz in den letzten 14.000 Jahren. Neubrandenbg. Geolog. Beiträge 8: 42-49.
- Lotter AF (2003) Multi-proxy climatic reconstructions. In: Mackay A, Battarbee RW, Birks HJB, Oldfield F (eds) Global change in the Holocene. Hodder Arnold, London: 373–383.
- Lotter AF, Bigler C (2000) Do diatoms in the Swiss Alps reflect the length of ice-cover? Aquatic Science 62: 125-141.
- Lotter AF, Birks HJB, Hofmann W (1998) Modern diatom, cladocera, chironomid, and chrysophyte cyst assemblages as quantitative indicators for the reconstruction of past environmental conditions in the Alps. II. Nutrients. J.Paleolim. 19: 443-463.
- Lund JWG (1954) The seasonal cycle of the plankton diatom Melisira italica (Ehr.) Kütz. Subsp. Subarctica O. Müller. J. Ecol. 42:141-179.
- Marchetto A, Musazzi S (2001) Comparison between sedimentary and living diatoms in Lago Maggiore (N. Italy): implications of using transfer function. J.Limnology 60: 19-26.
- Mathes J, Plambeck G, Schaumburg J (2002) Das Typisierungssystem für stehende Gewässer in Deutschland mit Wasserflächen ab 0.5 km<sup>2</sup> zur Umsetzung der Wasserrahmenrichtlinie. Aktuelle Reihe Brandenburgische Technische Universität Cottbus 5: 15–23.
- McCullagh P, Nelder JA (1989) Generalized Linear Models. Chapman and Hall, London pp. 511.
- McCune B (2004). Nonparametric Multiplicative Regression for Habitat Modeling. <a href="http://www.pcord.com/NPMRintro.pdf">http://www.pcord.com/NPMRintro.pdf</a>>.
- Miettinen JO (2003) A Diatom-total phosphorous transfer unction for freshwater lakes in southeastern Finland, including cross-validation with independent test lakes. Boreal Environment Research 8: 215-228.
- Moos MT, Laird KR, Cumming BF (2005) Diatom assemblages and water depth in Lake 239 (Experimental Lakes Area, Ontario): implications for paleoclimatic studies. J Paleolimnol 34: 217–227.
- Naumann E (1919) Några synpunkter angående limnoplanktons ökologi med särskild hänsyn till fytoplankton. Svensk Bot. Tid-skr. 13: 129-163.
- Naumann E (1929) The scope and chief problems of regional limnology. Int. Rev.ges. Hydrobiol. 22: 423-444.
- Naymik J, Pan Y, Ford J (2005) Diatom assemblages as indicators of timber harvest effects in coastal Oregon streams. Journal of the North American Benthological Society 24(3):569-584.

- Nixdorf B, Hemm M, Hoffmann A, Richter R (2004) Dokumentation von Zustand und Entwicklung der wichtigsten Seen Deutschlands. Umweltforschungsplan des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit Forschungsbericht 299 24 274 UBA-FB 000511
- Oksanen J, Läära E, Huttunen P, Meriläinen J (1988). Estimation of pH optima and tolerances of diatoms in lake sediments by the methods of weighted averaging, least squares and maximum likelihood, and their use for the prediction of lake acidity. Journal of Paleolimnology 1:39-49.
- Oksanen J, Kindt R, Legendre P, O'Hara B, Simpson GL, Solymos P, Stevens MHH and Wagner H (2009) vegan: Community Ecology Package. R package version 1.15-2. http://CRAN.R-project.org/package=vegan.
- Oksanen J, Laara E, Huttunen P, Merilainen J (1990) Maximum Likelihood Prediction of Lake Acidity Based on Sedimented Diatoms. Journal of Vegetation Science 1: 49-56.
- Oksanen J, Minchin PR (2002) Continuum theory revisited: what shape are species responses along ecological gradients? Ecological Modelling 157: 119-129.
- Oksanen J. and Minchin P.R. 2002, Continuum theory revisited: what shape are species responses along ecological gradients?: Ecological Modelling 157: 119-129.
- Overpeck JT, Webb T, Prentice IC (1985) Quantitative interpretation of fossil pollen spectra: dissimilarity coefficients and the method of Modern Analogs. Quat Res 23: 87–108.
- Padisak J, Scheffler W, Kasprzak P, Koschel R, Krienitz L (2003). Interannual variability in the pytoplankton composition of lake Stechlin (1994-2000). Arch. Hydrobiol. Spec. Issues Advanc. Limnol. 58: 101-133.
- Pan Y, Stevenson RJ, Hill BH, Kaufmann PR, Herlihy AT (1999) Spatial patterns and ecological determinations of benthic algal assemblages in Mid-Atlantic streams, USA. J. Phycol. 35: 460-468.
- Park YS, Tison J, Lek S, Giraudel JL, Coste M, Delmas F (2006) Application of a self organizing map to select representative species in multivariate analysis: A case study determining diatom distribution patterns across France. Ecological Informatics 1 (3): 247-257.
- Passy SI (2002) Environmental randomness underlies morphological complexity of colonial diatoms. Functional Ecology 16: 690–695.
- Pearson RG, Thuiller W, Araujo MB, Martinez-Meyer E, Brotons L, McClean C, Miles L, Segurado P, Dawson TP, Lees DC (2006) Model-based uncertainty in species range prediction. Journal of Biogeography 33: 1704–1711.
- Philibert A, Prairie YT (2002) Diatom-based transfer functions for western Quebec lakes (Abitibi and Haute Mauricie): the possible role of epilimnetic CO2 concentration in influencing diatom assemblages. Journal of Paleolimnology 27: 465-480.
- Pienitz R, Smol JP, Birks HJB (1995) Assessment of freshwater diatoms as Quantitative indicators of past climatic change in the Yukon and Northwest Territories, Canada. Journal of Paleolimnology 13: 21-49.
- Pither J, Aarssen, LW (2005). Environmental specialists: their prevalence and their influence on communitysimilarity analyses. Ecology Letters 8: 261–271.
- Planas D (1996) Acidification effects. In Stevenson RJ, Bothwell ML, Lowe R.L. (eds) Algae ecology: freshwater benthic ecosystems. Academic Press, New York, 479-530.
- Ponader KC, Potapova MG (2006) Diatoms from the genus Achnanthidium in flowing waters of the Appalachian Mountains (North America): Ecology, distribution and taxonomic notes. Limnologica 37: 227–241.
- Psenner R (1984) The portion of Empneuston and total atmospheric input of carbon, nitrogen and phosphorous in the nutrient budged of a small mesotrophic lake (Piburger See, Austria). Int Rev. ges. Hydrobiol. 69: 23-39.

- Quinn GP, Keough MJ (2002) Experimental Design and Data Analysis for Biologists. Cambridge Universite Press, Cambridge, 537 pp.
- R Development Core Team (2009). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0, URL <u>http://www.R-project.org</u>.
- Racca JMJ, Racca R, Prairie YT, Pienitz R, Yves T (2007) PaleoNet: new software for building, evaluating and applying neural network based transfer functions in paleoecology Journal of Paleolimnology 38: 467– 472.
- Racca JMJ, Gregory-Eaves I, Pienitz R, Prairie YT (2004) Tailoring palaeolimnological diatom-based transfer functions. Can.J.Fish.Aquat.Sci. 61: 2440-2454.
- Racca JMJ, Philibert A, Racca R, Prairie YT (2001) A comparison between diatom-based pH inference models using Artificial Neural Networks (ANN), Weighted Averaging (WA) and Weighted Averaging Partial Least Squares (WA-PLS) regressions. Journal of Paleolimnology 26: 411-422.
- Raubitschek S, Lücke E, Schleser GH (1999) Sedimentation patterns of diatoms in Lake Holzmaar, Germany -(on the transfer of climate signals to biogenic silica oxygen isotope proxies). Journal of Paleolimnology 21: 437-448.
- Rautio M, Sorvari S, Korhola A (2000) Diatom and crustacean zooplankton communities, their seasonal variability and representation in the sediments of subarctic Lake Saanajärvi. J.Limnol. 59: 81-96.
- REFCOND (2003) Final guidance on establishing reference conditions and ecological status class boundaries from inland surface waters. Common Implementation Strategy (CIS) Working Group 2.3, Version 7.0, 5.3.2003.
- Renberg I, Hultberg H (1992) A palaeolimnological assessment of acidification and liming effects on diatom assemblages in a Swedish lake. Can J Fisheries and Aquatic Sci 49: 65–72.
- Reynolds CS (1984) The Ecology of Freshwater Phytoplankton. Cambridge University Press, Cambridge, 384 pp.
- Roberts N. (1989). The Holocene. An environmental history. Basil Blackwell, Cambridge, 227 pp.
- Round FE, Crawford RM, Mann DG (1990) The Diatoms Biology & Morphology of the Genera, Cambridge University Press, Cambridge, 747 pp.
- Sachs HM, WebbT, Clark DR (1977) Paleoecological transfer functions. Ann. Rev. Earth Planet. Sci. 5: 151-163.
- Sachs L, Hedderich J (2006) Angewandte Statistik Methodensammlung mit R. 12 Auflage, Springer Verlag, Berlin, 702 pp.
- Sayer CD (2001) Problems with the application of diatom-total phosphorus transfer functions: examples from a shallow English lake. Freshwater Biology 46: 743-757.
- Schaefer M (2003) Wörterbuch der Ökologie. 4. Auflage, Spektrum Akademischer Verlag, Berlin, 452 pp.
- Scheffler W, Morabito G (2003) Topical observations on centric diatoms (Bacillariophyceae, Centrales) of Lake Como (N. Italy). J. Limnol., 62(1): 47-60.
- Schmidt R, Wunsam S (2001) Entwicklungsgeschichte von Seen. In: Dokulil M, Hamm A, Kohl JG (eds) (2001) Ökologie und Schutz von Seen. UTB, Stuttgart, 499 pp.
- Schmidt RH,Höllerer H, Wallner G (1995) A vacuum sampler for subsampling freez-dried laminated sediments with the application to in situ frozen varves of Mondsee, Austria. Journal of Paleolimnology 14: 93-96.

Schönborn W (2003) Lehrbuch der Limnologie. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart, 588 pp.

- Schönfelder I, Gelbrecht J, Schönfelder J, Steinberg CEW (2002) Relationship between littoral diatoms and their chemical environment in northeastern German lakes and rivers. J.Phycology 38: 66-82.
- Schwemmert P, Adler S, Guse N, Markones N, Garthe S (2009). Influence of water flow velocity, water depth and colony distance on distribution and foraging patterns of terns in the Wadden Sea. Fisheries Oceanography 18: 161–172.
- Schwoerbel J, Brendelberger H (2005) Einführung in die Limnologie (9. Auflage). Spektrum Verlag, München, 340 pp.
- Sheather SJ (2009) A Modern Approach to Regression with R. Springer Verlag, New York, 392 pp.
- Shemesh A, Burkle LH, Froelich PN (1989) Dissolution and preservation of Antarctic diatoms and the effect of sediment thanatocoenoses. Quat. Res. 31: 288-308.
- Simpson GL, Oksanen J (2009) analogue: Analogue matching and Modern Analogue Technique transfer function models. (R package version 0.6-8). (http://cran.r-project.org/package=analogue).
- Smith EP (2002) BCI design. In Encyclopedia of Environmetrics (Edited by El-Shaarawi AH and Piegorsch WW) Volume 1, Wiley & Sons, Chichester: 141–148.
- Smol JP (1992) Paleolimnology: An important tool for effective ecosystem management. *Journal of Aquatic Ecosystem Health* 1:49–58.
- Smol JP (1995) Paleolimnological approaches to the evaluation and monitoring of ecosystem health: Providing a history for environmental damage and recovery. *Evaluating and Monitoring the Health of Large-Scale Ecosystems* (eds D. J. Rapport, C. L. Gaudet and P. Calow), Springer-Verlag, Heidelberg, pp. 301–318.
- Smol JP, 2008. Pollution of Lakes and Rivers—A Paleoenvironmental Perspective. Blackwell Publishing, Oxford, 383 pp.
- Smol JP, Wolfe AP, Birks HJB, Douglas MSV, Jones VJ, Korhola A, Pienitz R, Rühland K, Sorvari S, Antoniades D, Brooks SJ, Fallu MA, Hughes M, Keatley BE, Laing T, Michelutti N, Nazarova L, Nyman M, Paterson AM, Perren B, Quinlan R, Rautio M, Saulnier-Talbot É, Siitonen S, Solovieva N, Weckström J (2005) Climate-driven regime shifts in the biological communities of arctic lakes. Proceedings of the National Academy of Sciences 102: 4397-4402.
- Smol JP, Battarbee RW, Davis RB, Meriläinen, J. (Eds.) (1986) Diatoms and Lake Acidity: reconstructing pH from siliceous algal remains in lake sediments', W. Junk, The Hague, The Netherlands, 307 pp.
- Smol JP, Birks HJB, Last WM (2001) Tracking Environmental Change Using Lake Sediments: Terrestrial, Algal, and Siliceous Indicators. Kluwer Academic Publishers, Boston, 371 pp.
- Smol JP, Birks HJB, Last WM (eds) (2001b) Tracking environmental change using lake sediments. Zoological indicators, vol 4. Kluwer, Dordrecht, 240 pp.
- Smol JP, Birks HJB, LastWM(eds) (2001a) Tracking environmental change using lake sediments. Terrestrial, algal, and siliceous indicators, vol 3. Kluwer, Dordrecht, 400 pp.
- Smol JP, Cumming BF (2000) Tracking long-term changes in climate using algal indicators in lake sediments. J.Phycol. 36: 986-1011.
- Smol JP, Cumming BF, Douglas MSV, Pienitz R (1995) Inferring past climatic changes in Canada using paleolimnological techniques. Geoscience Canada 21: 113-118.
- Soininen J (2005) Assessing the current related heterogeneity and diversity patterns of benthic diatom communities in a turbid and a clear water river. <u>Aquatic Ecology</u> 38(4): 495-501.
- Sonntag N, Garthe S, Adler S (2009) A freshwater species wintering in a brackish environment: habitat selection and diet of Slavonian grebes in the southern Baltic Sea Estuarine, Coastal and Shelf Science Volume 84 (2): 186-194.

- Stoermer E F, Smol JP (eds.) (1999) The Diatoms: Applications for the Environmental and Earth Sciences. Cambridge University Press, Cambridge, 482 pp.
- Stoermer EF (2001) Diatom taxonomy for paleolimnologists. Journal of Paleolimnology 25: 393-398.
- Stoermer EF, Smol JP (1999) The Diatoms: Applications for the Environmental and Earth Sciences, Cambridge University Press., Cambridge, 482 pp.
- Telford RJ, Vandvik V, Birks HJB (2006) How many freshwater diatoms are pH specialists? A response to Pither & Aarssen (2005), Ecology Letters 9: E1 E5.
- ter Braak CJF, Juggins S (1993) Weighted averaging partial least squares regression (WA-PLS): an improved method for reconstructing environmental variables from species assemblages. Hydrobiolgia 269/270: 485-502.
- ter Braak CJF, Juggins S, Birks HJB, van der Voet H (1993) Weighted averaging partial least squares regression (WA-PLS): definition and comparison with other methods for species-environment calibration. In *Multivariate Environmental Statistics* (Eds. G.P. Patil & C.R. Rao): 529-560. North Holland, Amsterdam.
- ter Braak CJF, Looman CWN (1986). Weighted averaging, logistic regression and the Gaussian response model. Vegetatio 65, 3–11.
- ter Braak CJF, Prentice IC (1988) A theory of gradient analysis. Adv. Ecol. Res. 18: 271-317.
- ter Braak CJF, Śmilauer P 2002. CANOCO Reference Manual and CanoDraw for Windows User's Guide. Software for Canonical Community Ordination (version 4.5). Microcomputer Power, Ithaca.
- ter Braak CJF, van Dam H (1989) Inferring pH from diatoms: a comparison of old and new calibration methods. Hydrobiologia 178: 209-223.
- ter Braak CJF. (1995) Non-linear methods for multivariate statistical calibration and their use in palaeoecology: a comparison of inverse (k-nearest neighbours, partial least squares and weighted averaging partial least squares) and classical approaches. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 28:165-180.
- Teranes JL, McKenzie JA, Lotter AF, Sturm M (1999) Stable isotope response to lake eutrophication: calibration of a high resolution lacustrine sequence from Baldeggersee, Switzerland. Limnol Oceanography 44: 320–333.
- Thienemann A. (1925) Die Binnengewässer Mitteleuropas. Eine limnologische Einführung. Die Binnengewässer, 1, 255 pp.
- Thompson R, Berglund BE (1976) Late Weichselian geomagnetic 'reversal' as a possible example of the reinforcement syndrome. Nature 263:490–491.
- Tison J, Park YS, Coste M, Wasson JG, Ector L, Rimet R, Delmas F (2005) Typology of diatom communities and the influence of hydro-ecoregions: A study on the French hydrosystem scale, Water Research: 39 3177–3188.
- Trimbee AM, Harris GP (1984) Phytoplankton population dynamics of a small reservoir: use of sedimentation traps to quantify the loss of diatoms and recruitment of summer bloom-forming blue-green algae, Journal of Plankton Research 6 (5): 897 918.
- Uhlmann D, Horn W (2001) Hydrobiologie der Binnengewässer. Ulmer Verlag, Stuttgart, 528 pp.
- van Dam H, Mertens A, Sinkeldam J (1994) A coded checklist and ecological indicator values of freshwater diatoms from The Netherlands. Netherlands Journal of Aquatic Ecology 28 (1): 117-133.
- van der Voet H (1994) Comparing the predictive accuracy of models using a simple randomization test. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 25: 313-323.

- Vasko K (2004) Computational methods and models for paleoecology. Department of Computer Science, Series of Publications A Report A-2004-3, Helsinki: 182 pp.
- Vasko K, Toivonen, HTT, Korhola A (2000) A Bayesian multinomial Gaussian response model for organismbased environmental reconstruction. Journal of Paleolimnology 24: 243-250.
- Vollenweider RA (1968) Scientific Fundamentals of the Eutrophication of Lakes and Flowing Waters, with particular References to Nitrogen and Phosphorous as Factors of Eutrophication. Paris, Rep. Organisation for Economic Cooperation and Development. DAS/CSI/68.27. 192 pp.
- Vollenweider RA, Kerekes J (1982) Eutrophication of Waters, Monitoring, assessment and Control. OECD, Paris.
- Wagenitz G, (2003) Wörterbuch der Botanik. 2. Auflage, Nikol Verlag, Hamburg, 552 pp.
- Wallace KJ (2007) Classification of ecosystem services: Problems and solutions. Biological Conservation 139: 235-246.
- Watchorn MA, Hamilton PB, Anderson TW, Roe HM, Patterson RT (2008) Diatoms and pollen as indicators of water quality and land-use change: a case study from the Oak Ridges Moraine, Southern Ontario, Canada. Journal of Paleolimnology 39:491–509.
- Watkins ND (1971) Geomagnetic polarity events and the problem of "the reinforcement syndrome". Comments on Earth Sciences: Geophysics 2: 36–43.
- Webb T, Bryson RA (1972) Later and postglacial climate change in northern Midwest, USA: quantitative estimates derived from fossil pollen spectra by multivariate spectral analysis. Quat. Res. 2: 70-115.
- Weckstroem J, Korhola A, Blom T (1997) Diatoms asquantitative indicators of pH and water temperature in subarctic Fennoscandian lakes. Hydrobiologia 347:171-184.
- Weilhoefer CL, Pan Y (2006) Diatom assemblages and their associations with environmental variables in Oregon Coast Range streams, USA. Hydrobiologia 561: 207-219.
- Weilhoefer CL, Pan Y, Eppard S (2008) The effects of river floodwaters on floodplain wetland water quality and diatom assemblages. Wetlands 28 (2): 473-486.
- Werner D (1977). The Biology of Diatoms. Oxford Blackwell Scientific Publications. 498 pp.
- Wetzel RG (2001) Limnology Lake and River Ecosystems. Third Edition. Academic Press, New York, 1006 pp.
- Wilson JB (1990) Mechanisms of species coexistence: Twelve explanations for Hutchinson's 'Paradox of the Plankton': Evidence from New Zealand plant communities. New Zealand Journal of Ecology 13: 17-42.
- Wöbbecke K, Klett G, Rechenberg B (2003) Wasserbeschaffenheit der wichtigsten Seen in der Bundesrepublik Deutschland -Datensammlung 1981-2000. Umweltbundesamt, Texte Nr. 36/2003
- Wolin JA, Duthie HC (1999) Diatoms as indicators of water level change in freshwater lakes. In Stoermer E.F. and Smol J.P. 1999. The Diatoms: Application for the Environmental and Earth Sciences. Cambridge University Press. 469 pp.
- Wood S (2006) Generalized Additive Models An Introduction with R, Chapman & Hall/CRC, London, 391 pp.
- Wright HE (1966) Stratigraphy of lake sediments and the precision of the palaeoclimatic record. In: Sawyer JJ (ed) World climate from 8000 to 0 b.c. Royal Meteorological Society, London, pp 157–173.
- Wunsam S, Schmidt R (1995) A diatom-phosphorus transfer function for Alpine and pre-alpine lakes. Memorie dell Istituto Italiano di Idrobiologia 53: 85-99.
- Yee TW, Mackenzie M (2002). Vector generalized additive models in plant ecology. Ecol. Model. 157 (2–3), 141–156.

- Yee TW, Stephenson AG (2007). Vector generalized linear and additive extreme value models. Extremes 10 (2): 1–19.
- Yuan LL (2005) Sources of bias in weighted averaging inferences of environmental conditions. J Paleolimnol 34: 245–255.
- Zarauz L, Irigoien X, Fernandes JA (2008) Modelling the influence of abiotic and biotic factors on plankton distribution in the Bay of Biscay, during three consecutive years (2004–06) Journal of Plankton Research 30(8): 857-872.
- Zelinka M, Marvan P (1961) Zur Präzisierung der biologischen Klassifikation der Reinheit fließender Gewässer. Archiv für Hydrobiologie 57: 389–407.
- Zerbe S, Wiegleb G, Rosenthal G (2009) Einführung in die Renaturierungsökologie. In: Zerbe S, Wiegleb G (eds) Renaturierung von Ökosystemen in Mitteleuropa, Spektrum Verlag, Heidelberg, 498 pp.
- Zuur AF, Ieno EN, Meesters EHWG (2009b) A Beginner's Guide to R. Springer Verlag, New York, 218 pp.
- Zuur AF, Ieno EN, Smith GM (2007) Analysing Ecological Data. Springer Verlag, New York, 672 pp.
- Zuur AF, Ieno EN, Walker NJ, Saveliev AA, Smith GM (2009a) Mixed Effects Models and Extensions in Ecology with R. Springer Verlag, New York, 574 pp.

# Sample selection for training sets: The North German diatom training set

S. Adler and T. Hübener

Department of Biodiversity University of Rostock Wismarsche Str. 8 18057 Rostock Germany e-mall: <u>sven.adler2@uni-rostock.de;</u> thomas.huebener@uni-rostock.de

#### Abstract

A new diatom training set of 84 mostly dimictic lakes from Northern Germany (Mecklenburg-Western Pomerania, Mecklenburg-Vorpommern, MV) was established. Surface diatom samples of the central part of each lake were analysed and related to 19 additional environmental variables. The data set consists of 389 diatom taxa, however, Hill's N2 is low in most samples (minimum = 1.42, maximum = 17.06, median = 5.146). The samples were highly dominated by a few planktonic taxa like Stephanodiscus minutulus, Cyclosthephanos dubius, Cyclotella radiosa, Fragilaria construens and Stephanodiscus alpinus. Using Canonical Correspondence analysis Total Phosphorous (TP) was found to be the most important environmental parameter determining diatom assemblages. TP concentration ranges from 16 to 954 µg l<sup>-1</sup>. Performing a WA-PLS transfer function to reconstruct past TP levels using bootstrap as cross validation method, the first component (equals a simple WA) was found to have the best error statistics. The R<sup>2</sup><sub>boot</sub> was very low (0.209) and the RMSEP<sub>boot</sub> was high with a value of 0.357, which equates to 20% of the covered  $\log_{10}(\text{TP})$  gradient. The residuals of the transfer functions showed a significant trend. In order to improve that low R<sup>2</sup><sub>boot</sub> and high RPMSE<sub>boot</sub>, subsets of the North German data set were created and analysed for their error statistics, which were found to be significantly better concerning RMSEP<sub>boot</sub>- as well as R<sup>2</sup><sub>boot</sub>-values. However, when these subsets were used to predict TP levels for independent test sets, prediction errors were higher than when using the complete data set. Thus, including more natural variability within the North German data set apparently increased the accuracy of inferred TP levels in these independent test sets. The RMSEP<sub>boot</sub> was negatively correlated to the prediction error of the test set samples. When only taxa that have a significant response to TP were used, a subset of 67 lakes had the lowest prediction error. The RMSEP<sub>boot</sub> was in this study no good tool to find the best subset. A combination of high number of lakes and a high R<sup>2</sup><sub>boot</sub> was more adapted.

#### Introduction

The reference condition of a lake is a major aspect in the goal formulation process in lake management (e.g., Smol 2008). To define this reference condition of a lake or lake type, as demanded by the water framework directive (EU 2000), analyses of sediment cores are used (Battarbee et al. 2008, Bradshaw et al. 2006, Bjerring et al. 2008 Hübener et al. 2009). Of the several proxies available in sediment cores, diatom frustules were found to be a useful tool to infer the lake's history of Total Phosphorous (TP) (Hall and Smol 1999, Smol et al. 2001, Smol 2008).

Knowing the ecological requirements of the diatom taxa of fossil diatom assemblages, it is possible to infer past lake TP levels (Birks 1998), the parameter which is most related to the trophic state of a lake (Vollenweiler and Kerekes 1982). In combination with the use of other proxies (e.g., pollen, Birks et al. 1988) the reference condition of a lake can be defined (e.g., Hübener et al. 2009) according to the WFD (EU 2000).

In the past several modern training sets were developed to assess the ecological requirements of diatoms regarding different environmental variables, like TP (e.g., Bennion et al. 2004), pH (e.g., Battarbee et al 2008) and ice cover (e.g., Hausmann and Pienitz 2007). With the technique of transfer functions (e.g., Weighted Averaging (WA) (ter Braak and van Dam 1989), Weighted Averaging-Partil Least Squares (WA-PLS) (ter Braak et al. 1993) or Modern analogue Techniques (MAT) (ter Braak 1995)) these modern diatom training sets are used to infer the environmental variable of interest for the sediment cores based on the fossil diatom assemblages.

	Min	Max	Average	Median	
Max Water Depth [m]	0.60	58.25	12.07	8.65	
Area [ha]	0.80	557.00	114.69	70.30	
Secci-Depth [m]	0.17	3.50	1.09	0.90	
Conductivity [µS*cm]	77.83	660.94	397.85	385.00	
O2%	77.17	155.93	102.91	100.17	
REDOX [mV]	66.13	537.00	256.35	222.50	
pH	6.52	9.60	8.49	8.42	
ΤΡ [μg/l]	16.17	954.47	119.81	83.37	
PO4[µg/l]	1.18	882.07	37.10	19.27	
TN [mg/l]	0.51	3.76	1.71	1.69	
NH4_N [µg/l]	4.34	224.56	48.96	36.12	
NO2_N [µg/l]	1.03	39.47	10.66	7.03	
NO3_N [µg/l]	0.76	950.04	127.85	30.64	
Ca [mg/l]	9.47	98.92	62.85	62.70	
MG [mg/l]	2.33	16.30	9.03	9.17	
Fe [mg/l]	0.03	0.50	0.13	0.15	
Chlorid [mg/l]	14.31	66.44	34.09	33.67	
DOC [mg/l]	5.92	32.25	13.93	11.88	
TOC [mg/l]	6.52	51.21	18.22	15.19	

Table 1: Characterising environmental variables for the 84 lakes respectively lake basins of the MV data set.

(all values are averages over one year, taken in spring sommer and autumn)

To reconstruct trophic state developments of lakes and to define reference conditions several sediment cores were taken from lakes in Northern Germany during the last decade (Hübener and Dörfler 2004, Dreßler et al. 2006, Schwarz 2005, Lorenz et al. 2008, Hübener et al. 2008, Hübener et al. 2009). Due to eutrophication, few planktonic taxa (e.g., Stephanodiscus minutulus, Stephanodisus hantzschii, Cyclostephanos dubius, Cyclotella radiosa) dominate those core sections representing the recent past. For this species composition, only an insufficient number of modern analogues was found in existing training sets developed in comparable geomorphologic ecoregions (e.g., EDDI-combined TP data set (European Diatom Database Initiative) (Battarbee et al., 2000, current data at http://craticula.nc.ac.uk/eddi/jsp/), North East German training set, Schoenfelder et al. 2002). But the existence of modern analogues of the sediment samples in a training set is a basic requirement to allow inferring environmental variables of the past (Overpeck et al. 1985, Roberts 1989, Battarbee et al. 2008). Using data sets from different regions might be difficult as species optima may vary (e.g., Cameron et al. 1999). To be able to infer TP for those sediment cores from Northern Germany, a small training set was established by Hübener et al. (2001) comprising 36 lake (two very shallow were removed in the further analysis). This data set enfolded very heterogeneous lakes and covered the TP gradient not satisfactorily. Here, we present an expansion up to 84 lakes. As this data set contains several different lake types (concerning morphology, depth-area relation, catchment area, chemical variables) the error statistic of the established TP transfer functions are unsatisfying (e.g., Adler and Hübener 2007). Therefore, a technique is introduced to determine the best subset out of these 84 lakes to use it for TP reconstruction. We present here a compute-intensive solution to optimise the training set and to identify those samples which are correlated best with TP. As classical error statistics based on resampling methods like bootstrap, 10 fold cross validation or Leave-On-Out (Efron 1982) might overestimate the real bias (Hastie and Tibshirani 1990; ter Braak 1995, Adler and Hübener 2007), here, samples of already published transect studies (Adler and Hübener 2007) were used as independent test sets to evaluate the transfer functions based on the different subsets. Racca et al. (2004) and others (e.g., Huisman et al. 1993) discussed the removal of all taxa that are not correlated significantly with the environmental parameter of interested. This approach was additionally tested to improve model error statistics, using again the independent transect samples as test set.

Table 2a: Sampling sides of the North German diatom data set. Values for TP, pH and secci depth are averages over the whole year. Bold letters: lakes in the subset of size 67.

lake	year	code	area [ha]	max depth [m]	TP [µg/l]	рН	secci depth [m]
Bariner See	2002	MV001	254.80	7.50	387.55	8.93	0.4
Bibower See	2002	MV002	80.70	8.30	201.91	8.72	0.5
Breiter Luzin	2003	MV003	347.0	58.25	21.27	8.35	1.5
Bossower See	2002	MV004	54.60	8.81	145.09	8.66	0.7
Carvitzer See	2003	MV005	557.0	42.15	26.33	8.19	2.8
Damerower See	2002	MV006	285.40	6.97	222.37	8.67	0.3
Dolgener See	2002	MV007	78.20	10.80	128.66	9.15	1.2
Drewensee	2003	MV008	248.0	12.90	65.15	8.07	1.6
Dudinghausener See	2002	MV009	20	16	80.22	8.75	0.6
Garder See	2002	MV010	104.70	15.51	130.67	8.74	0.9
Großer Fürstenseer See	2003	MV011	204.0	25.00	16.42	8.15	3.5
Großer Kressiner See	2002	MV012	66.50	17.90	82.00	8.77	1.3
Groß Labenzer See	2003	MV013	160.40	34.90	35.31	8.41	1.5
Groß Labenzer See	2003	MV014	60.00	15	20.34	8.28	1.6
Großer Labusse	2003	MV015	330.0	11.90	38.72	8.10	0.8
Haussee Feldberg	2003	MV016	130.0	12.50	45.64	8.25	1.0
Haussee Feldberg	2003	MV017	130.0	12.50	45.64	8.25	1.0
Holzendorfer See	2003	MV018	71.0	7.20	95.92	8.07	1.3
Hohensprenzer See	2002	MV019	225.50	17.30	285.25	9.19	0.7
Inselsee	2002	MV020	457.80	14.80	76.34	8.71	1.2
Jabeler See	2003	MV021	238.0	22.60	44.29	8.18	1.1
Jabeler See	2003	MV022	238.0	22.60	44.29	8.18	1.1
Kabelicksee	2003	MV023	262.0	12.60	36.55	8.11	1.5
Keezer See	2002	MV024	122.50	17.90	253.87	8.98	0.6
Keezer See	2002	MV025	122.50	17.90	253.87	8.88	0.6
Kogler See	2002	MV026	39.50	14.70	343.47	9.60	0.5
Klein Pritzer See	2002	MV027	242.30	22.25	108.26	8.80	0.6
Kritzower See	2003	MV028	64.0	12.69	45.43	8.09	1.2
Langhagensee	2002	MV029	71.90	8.80	224.23	8.96	0.3
Linstow See	2002	MV030	55.10	5.20	189.37	8.64	0.7
Loppiner See	2003	MV031	86.0	18.00	32.73	8.14	1.5
Die Nebel	2002	MV032	161.90	17.90	139.54	8.84	0.8
Neukloster See	2002	MV033	299.20	10.20	224.19	8.83	0.6
Orth- o. Hohen Wangelsee	2003	MV034	51.5	5.40	173.66	8.21	0.6
Passower See	2002	MV035	36.60	6.89	138.82	8.50	1.1
Pripertsee	2003	MV036	130.0	26.70	49.76	8.29	0.9
Rothener See	2003	MV037	59.0	5.30	56.89	8.41	0.5
Schmaler Luzin	2003	MV038	143.0	33.50	18.58	8.24	3.3
Tempziner See	2002	MV039	159.70	15.10	184.13	8.70	0.6
Tiefer See	2002	MV040	80	32	24.88	8.87	1.0
Torgelower See	2003	MV041	353.0	6.90	122.97	8.15	1.0
Tiefer Ziest	2003	MV042	44.00	9.40	116.14	9.04	0.8
Useriner See	2003	MV043	378.0	10.20	34.17	8.24	0.9

Table 2b: Sampling sides of the North German diatom data set. Values for TP, pH and secci depth are averages over the whole year. Bold letters: lakes in the subset of size 67.

lake	year	code	area [ha]	max depth [m]	TP [μg/l]	рΗ	secci depth [m]
Kleiner Varchentiner See	2003	MV044	38.5	7.80	123.48	9.26	0.2
Wangnitzsee	2003	MV045	172.0	8.50	49.76	8.39	0.5
Woblitzsee	2003	MV046	497.0	7.90	43.67	8.12	1.0
Woseriner See 1	2002	MV047	126	20	76.87	8.49	2.3
Woseriner See 2	2002	MV048	90	37.50	76.87	8.43	2.3
Zahrener See	2002	MV049	70.30	7.94	280.50	8.97	0.4
Groß Peetscher See	2002	MV050	63.3	2	207.03	8.50	0.5
Bergsee	1998	MV052	55	5	105.00	8.43	NA
Bützower See	1999	MV055	6.5	2	119.07	8.38	0.8
Derliener See	1999	MV056	25	4.4	23.60	8.22	1.0
Drewitzer See	1998	MV057	5	31	33.33	8.27	NA
Dudinghausener See	1998	MV058	18.5	13.3	18.67	8.66	NA
Flacher Ziest	1998	MV059	31.5	2.5	44.98	8.27	0.8
Flacher See bei Klocksin	1998	MV060	0.8	6	127.33	8.27	NA
Grimmsee	1999	MV061	7	3.8	104.33	8.33	NA
Hofsee bei Gremelin	1998	MV062	9.4	7.5	107.33	8.16	NA
Hofsee b. Gubkow	1999	MV063	25.5	5.7	294.10	8.78	NA
Kleiner Rühner See	1999	MV064	13	3.9	19.87	8.50	1.5
Krebssee bei Langenhagen	1999	MV065	9.5	1.4	172.77	8.82	0.4
Krebssee bei Gülzow	1998	MV066	14	10.2	58.43	8.35	NA
Krummer See	1999	MV067	16	3.3	24.67	8.31	1.3
Langsee b. Neu Sammit	1999	MV068	6	10	35.90	8.28	0.9
Libowsee	1999	MV069	7.5	0.6	216.17	8.66	NA
Lankhagensee	1998	MV070	8.5	5.7	21.33	8.37	NA
Lohmer See	1999	MV071	54.5	5.7	155.00	8.72	NA
Parumer See	1999	MV072	205	2.5	249.93	9.47	2.5
Reimershäger See	1999	MV073	24	2.9	132.67	8.58	NA
Pristersee	1999	MV074	6	3.2	74.33	8.44	NA
Langer See bei Rosenow	1999	MV075	6	3.3	52.80	8.21	NA
Ruehner See	1999	MV076	100	3.2	118.13	8.57	0.6
Schillersee	1999	MV077	26.5	3.8	56.83	8.34	1.2
Schloßsee Schlieffenberg	1999	MV078	37.5	7.3	86.67	8.29	0.8
Sumpfsee	1999	MV079	127	2	111.57	8.85	0.2
Swinegelsee	1999	MV080	6	5.8	22.87	8.27	1.1
Schwarzer See	1999	MV081	17	3.3	45.37	6.52	0.9
Groß Tessiner See	1999	MV082	125	10	66.27	8.35	NA
Trechower See	1999	MV083	27.5	5.9	83.37	8.72	NA
Torfsee 2	1998	MV084	9.4	0.8	16.17	8.60	2.5
Tiefer See	1998	MV085	80	32	116.67	8.19	NA
Vielbecker See	1999	MV086	9	3	954.47	8.27	NA
Warinsee	1999	MV087	118	3.2	133.37	8.46	NA

#### **Study site and Methods**

The North German data set consists of 84 lakes respectively lake basins located in the NE German lowlands (Mecklenburg-Western Pomerania – Mecklenburg Vorpommern, MV) (Figure 1) ( $10^{\circ}35'45 \text{ E} - 14^{\circ}24'27'' \text{ E}$ ,  $53^{\circ}07'113'' \text{ N} - 54^{\circ}41'11'' \text{ N}$ ). These hardwater lakes, which are typically of the kettle-type, formed in glacial till of Weichselian origin, are

well-buffered and carbonate-rich. Intensification of agriculture in the lake catchment area during recent decades has resulted in more or less eutrophic conditions in most of the lakes. All lakes, with the exception of nine shallow lakes (mean depth: 0.8 - 3 m, area: 8 - 205 ha), are dimictic and have surface areas >50 ha. Littoral deposits are mostly muddy (stones occur only rarely) and the shores are mainly fringed with *Phragmites australis*. For each lake, water samples were collected three times a year (spring, summer and autumn) at a water depth of 0.5 m and analysed for 19 environmental parameters (Table 1) using standard methods. Physical parameters (temperature, O<sub>2</sub>-saturation, conductivity, REDOX, pH) were measured with the measuring probe TORPHIL 406, version 3.0 (COMTEX).

Surface sediment samples were collected from the deepest part of the lakes using an Uwitech-corer (Fa. UWITEC, Mondsee, Austria). Approximately 2 cm<sup>3</sup> sediment were treated according to Kalbe and Werner (1974) and Battarbee and Kneen (1982) and diatoms were finally mounted in Naphrax<sup>®</sup>. Identification mainly followed Krammer and Lange-Bertalot (1986, 1988, 1991a, b), Lange-Bertalot and Moser (1994), Lange-Bertalot (2001) and Krammer (1997a, b, 2000, 2002, 2003) and after counting nearly 1000 diatom valves at 1000x magnification (Zeiss-Axioplan, 1,4 plan-apochromat), abundances were expressed as percentage of the total count. Taxonomy of critical taxa was ascertained using a scanning electron microscope (Zeiss DSM 960A). The data set was analysed in a first step using a Canonical Correspondence Analysis (CCA, ter Braak 1986, Jongman et al. 1995) with the program CANOCO 4.5 (ter Braak and Śmilauer 2002). To detect significant environmental parameters for the species distribution, a Monte Carlo Permutations test (using CANOCO 4.5) with Forward Selection was used. The data are available under <u>www.biologie.uni-rostock.de/abt/botanik/AG-Phykologie/index-engl.htm</u>) and enfolded in the *paltran* package (Adler 2009) for R (R Development Core Team 2009).

In addition to the surface sediment samples colleted from the deepest part of the lakes, of 50 lakes (those which are different from Hübener et al. 2001, Figure 1, Table 1 MV001 – MV050) a second sample closer to the sore (50 m distance to the shore) was collected and treated as described above. To compare these samples, for each lake the difference (open water sample – second sample) between the taxa was calculated. The relative abundances of the single taxa from the different sample locations were correlated with lake parameters like depth, area, TP level and pH using Generalized linear models (e.g., Faraway 2006).



Figure 1: Geographical distribution of the training set lakes in Mecklenburg-Western Pomerania (MV).

Random subsets of the 84 training set lakes were created with a growing size of 50, 51, 52, ..., 83 lakes. For each subset a transfer function was calculated. This was repeated 1000 times for each subset size. In order to identify the optimal lake composition for each subset size, the 1000 transfer functions were compared concerning their error statistics (R<sup>2</sup><sub>boot</sub>, mean error<sub>boot</sub>, max error<sub>boot</sub>, Root Mean Error of Prediction<sub>boot</sub> = RMSEP<sub>boot</sub>) using bootstrap (Efron 1982) as cross validation method (1000 runs) (Birks 1998). The transfer functions were automatically generated using a loop in R 2.8.1 and the packages *analogue* (Simpson and Oksanen 2009) for WA and *paltran* (Adler 2009) for WA-PLS. It was tested if a better optimal RMSEP<sub>boot</sub> could be found for the arbitrarily chosen subset sizes of 60 and 67 lakes using 100000 randomly selected sample combinations. As this was not the case we assume here, that 1000 randomly selected sample combinations are sufficient, although it is theoretically possible that the best solution might not be found this way.



Figure 2: Distribution of the three dominant planktonic diatom taxa within the MV training set in relation to Total Phosphorous. *St. minutulus* = *Stephanodiscus minutulus*, *Cyclost. dubius* = *Cyclostephanos dubius*, *Cyclot. radiosa* = *Cyclotella radiosa*, wa.optimum = taxa optimum concerning TP using the whole MV data set and WA-regression.

To evaluate the performance of the different transfer functions, already published transect samples of four lakes in Northern Germany (Adler and Hübener 2007) were used as independent test set. In each of these lakes, surface sediment samples in combination with water chemical variables had been collected on transects along the prevailing wind direction. It was assumed that the surface samples represented the diatom composition over a growing season. We compared the measured free water TP levels of this test set with the WA-PLS (WA) inferred TP levels calculated from the transfer functions of our several different training sets. For this comparison a linear mixed effect model (Pinheiro and Bates 2000) was chosen (see also Adler and Hübener 2007). As all transect lakes were part of the North German training set, they had to be excluded when inferring TP levels for samples of them (maximal n minus occurrence of the lake within the training set). The prediction error<sub>trans</sub> was calculated as the mean error of inferred TP levels (Adler and Hübener 2007), here, only the open water samples (a minimum of 50 m away from the shore) were used to calculate the prediction error. The optimised sample combination for each subset was compared with the nearest

neighbours of the transect samples within the training set. To calculate the nearest neighbours for the transect samples the function *distance()* of the package analogue (Simpson and Oksanan 2009) was used, choosing chord distance as distance measurement.

In a second approach those taxa which showed no significant response to TP were excluded from WA-PLS respectively WA. To test if a taxon reacted significantly to changing TP-levels a Genaralized Additive Model (GAM, Hastie and Tibshiranie 1990) was performed. (This method is included in the functions *wa* and *wapls* of the *paltran* package.

Table 3: Error statistic for different subsets of the MV data set and the prediction error for the transect samples of lake Dudinghausen. (\* only open water transect samples were used)

lakes	taxa	R <sup>2</sup>	mean error	max error	RMSE	R <sup>2</sup> boot	$\text{mean error}_{\text{boot}}$	max error <sub>boot</sub>	RMSEP <sub>boot</sub>	max error <sub>transect</sub> [µg/l]*	mean error <sub>transect</sub> [µg/l]*
54	234	0.645	0.000	0.445	0.197	0.391	0.001	0.588	0.278	20.387	9.931
54 <sub>sig. Taxa</sub>	37	0.596	0.000	0.518	0.210	0.388	-0.002	0.574	0.276	14.120	6.871
67	238	0.576	0.000	0.490	0.237	0.389	-0.009	0.579	0.306	13.000	7.228
67 <sub>sig. Taxa</sub>	44	0.568	0.000	0.465	0.240	0.447	-0.001	0.498	0.286	3.331	2.148
85	270	0.468	0.000	0.650	0.277	0.209	-0.015	0.744	0.353	11.256	3.880
85 <sub>sig. Taxa</sub>	53	0.382	0.000	0.753	0.299	0.220	-0.015	0.761	0.349	5.500	3.204
135	299	0.444	0.000	0.732	0.280	0.268	-0.005	0.830	0.333	13.715	4.391
135 <sub>sig. Taxa</sub>	91	0.430	0.000	0.816	0.283	0.294	0.002	0.829	0.326	8.962	6.880

#### Results

The North German (MV) data set comprised 389 taxa from samples of 84 profundal lake-sediments, 90% of the taxa were periphytic; 62 of them (16%) occurred in more than 20 lakes (44 benthic (71%) and 18 planktonic taxa (29%)). The most abundant planktonic species were *Stephanodiscus minutulus* (max. abundance: 83% / mean abundance: 28.67% / number of occurrence: 79 lakes), *Cyclostephanos dubius* (80% / 6.82% / 70), *Cyclotella radiosa* (39% / 6.48% / 74), *Cyclotella ocellata* (55% / 5.69% / 60), *Asterionella formosa* (62% / 4.05% / 58), and *St. alpinus* (33% / 4.81% / 69) (Figure 2). Hill's N2 diversity was on average 5.7 (1.4 up to 18.0). Several lakes had a clearly different species composition that justifies characterising them as outliers. E.g., the mean relative abundance of *Cyclostephanos dubius* is 6.82%, but in lake MV063 (Table 2) this taxon was found with a relative abundance of 80% in association with Stephanodiscus hantzschii (9%) and Aulacoseira granulata (3%).

The total phosphorus (TP) gradient ranged from 16 to 955  $\mu$ g l<sup>-1</sup> (Table 1), the pH gradient was short (7.86 – 9.45) with one outlier (Schwarzer See, pH 6.52). Using canonical correspondence analysis (CCA) in combination with a Monte Carlo Permutation Test (using

Forward Selection) five environmental parameters were found to be significant: TP, water depth, pH, conductivity and dissolved organic carbon (DOC). TP was found to be the most important environmental variable within the system of 84 lakes, followed by pH and conductivity. The explained variance of the species composition (accounted for total inertia) by these five parameters was 15%. Total Nitrogen (TN) did not explain a significant amount of variation independently, because of a negative correlation with water depth ( $r^2 = 0.51$ ) and a positive correlation with TP ( $r^2 = 0.47$ ). Between TP and pH a correlation ( $r^2 = 0.51$ ) was found, too, whereas all other variables were only slightly correlated ( $r^2 < 0.33$ ). The variance within the training set in relation to the first three CCA-axes was high. The eigenvalues of axis one and two are nearly the same (axis 1: 0.11018 axis 2: 0.09753). As TP is highly correlated with the second axis, other variables associated to the first axis like conductivity, pH and water depth influenced the training set strongly.

The differences between the two samples within one lake were found to be quite high. Typical planktonic taxa, like Cyclotella radiosa (MV043: 17.6% in the sample from the deepest part / 2.4% in the sample taken only 50 m from the shore), Asterionella formosa (MV052: 15.3% / 0%) and Fragilaria crotonensis (MV022: 7.6% / 0.2%) had lower abundances in the near shore samples than in the samples taken at the deepest part of the lake. However, in several lakes the opposite was found: Asterionella formosa had lower abundances in the samples from the deepest part than in the bankside samples (n = 13, e.g., MV013: 6.6% / 12.7%). And although Cyclotella ocellata generally had higher abundances in the samples taken at the deepest part (e.g., MV013: 26.3% / 7.7%), there were five exceptions where the abundance in the samples closer to the shore were clearly higher (e.g., MV001: 0.2% / 7.11%, MV035: 21.8% / 36.77%). Cyclostephanos dubius even had 21 times higher abundances close to the shore. Typical benthic taxa (e.g., Fragilaria construens, Achnanthes minutissima, F. brevistriata), on the other hand, usually had higher abundances close to the shore. Nevertheless in the cases of Fragilaria construens and F. brevistriata the opposite occurred, too, as their abundances were higher in the middle of the lake. However, when testing the differences between the species' relative abundances of open water and shore near samples related to water depth of the point of sampling, lake area, and chemical variables like TP, TN and pH no significant correlation was found.

When testing the effect of TP to the single taxa, 53 taxa were found to have a significant (p < 0.05) response to TP (independent of the shape of the response curve) using the whole (n = 84) data set. While many of the taxa showed a close correlation to TP, in some species no significant relationship or a linear rather than a unimodal response was detected

(Figure 2, lower panels). E.g., *Stephanodiscus minutulus* was not correlated to the mean TP levels over the year of the lakes (even not to single seasonal TP levels) (Figure 2). Others like *Cyclostephanos dubius* showed a clearly skewed distribution. Only rarely symmetrical distributions were found (e.g., *Cyclotella radiosa*, Figure 2 lower right panel).



Figure 3: Diagnostic plots of a WA-PLS regression for the whole training set comprising 84 lakes.

Results of the performance of a WA-PLS using all 84 lake-central samples are shown in Figure 3. Here, a trend becomes evident in the residuals for both, inferred values and bootstrap inferred values. Using bootstrap (1000 runs), for nearly all subsets the first component always had the lowest RMSEP.

From 1000 transfer functions of each subset that sample combination was chosen which resulted in the transfer function with the lowest  $RMSEP_{boot}$ . In Figure 4,  $RMSEP_{boot}$ ,  $R^2_{boot}$  and maximum error<sub>boot</sub> are shown for those best selected subsets. As can be seen,  $R^2_{boot}$ 

was relatively constant at a level of 0.4 - 0.45 in the subsets of less than 68 lakes (maximal error<sub>boot</sub> < 0.58) when all taxa were included. In subsets of 68 or more lakes, the performance of the transfer function decreased significantly. The same applies to RMESP<sub>boot</sub>: With increasing sample size (n) RMSEP<sub>boot</sub> increased stepwise. This positive relationship between sample size and RMSEP<sub>boot</sub> respectively R<sup>2</sup><sub>boot</sub> is statistically significant.

In the subsets of less than 76 lakes,  $RMSEP_{boot}$  was lower when only those taxa with a significant response to TP were included in comparison to including all taxa. Also the maximal error<sub>boot</sub> was always and  $R^2_{boot}$  was nearly always lower using only the significant taxa (see also Table 3).

These transfer functions, based on different subset-sizes optimised by there related RMSEP<sub>boot</sub>, were used to infer TP levels for already published transect samples of Lake Dudinghausener See (Adler and Hübener 2007). For the mean error<sub>trans</sub> respectively the maximum error<sub>trans</sub> a negative correlation with the RMSEP<sub>boot</sub> and the maximum error<sub>boot</sub> of the transfer function was evident until a subset size of 67 lakes (compare Figure 4). Using a subset size larger than 67 lakes, the mean error<sub>trans</sub> as well as the maximum error<sub>trans</sub> in Lake Dudinghausener See were relatively constant. The same applied to the other three lakes of the test set (Tiefer See, Cambser See and Groß Peetscher See, Adler and Hübener 2007). However, both the mean error<sub>trans</sub> and maximum error<sub>trans</sub> of Lake Tiefer See started to increase again using subset sizes larger than 70 samples.

Using only those taxa which have a significant response to TP, a minimum of the mean  $\text{error}_{\text{trans}}$  and maximum  $\text{error}_{\text{trans}}$  is reached at a sample size of 67 for the transect samples of Lake Dudinghausener See. Including more lakes the errors increase again slightly.

The mean error<sub>trans</sub> still was negatively correlated with RMSEP<sub>boot</sub> and R<sup>2</sup><sub>boot</sub> when other parameters like maximum error<sub>boot</sub>, minimum error<sub>boot</sub> or R<sup>2</sup><sub>boot</sub> were used to find the best-fitted transfer function of the 1000 within each subset. Using the mean transect prediction error<sub>trans</sub> as selection criterion to find the best subset size, the mean error<sub>trans</sub> was correlated positively with n, nevertheless still a negative correlation to RMSEP<sub>boot</sub> and R<sup>2</sup><sub>boot</sub> was found (subset size 50: mean error<sub>trans</sub> = 1.8 µg/l, R<sup>2</sup><sub>boot</sub> = 0.06, RMSEP<sub>boot</sub> = 0.40, subset size 67: 2.6 µg/l, R<sup>2</sup><sub>boot</sub> = 0.24, RMSEP<sub>boot</sub> = 0.36, subset size 85: 2.8 µg/l, R<sup>2</sup><sub>boot</sub> = 0.21, RMSEP<sub>boot</sub> = 0.35).



Figure 4: RMSEP<sub>boot</sub>,  $R^2_{boot}$ , mean error<sub>boot</sub> and the mean and maximum prediction error for the transect samples of Lake Dudinghausener See in relation to the sample sizes of the used subsets. Out of 1000 generated sample combinations for each subset, that combination was chosen which had the lowest RMSEP<sub>boot</sub> when performing a WA-PLS transfer function on it. The other parameters belonged to that particular subset. All taxa = all taxa of the subset were included when creating the transfer function, sig. taxa = only those taxa that have a significant response to TP were used.

The sample combination of the best transfer function of each subset (based on  $RMSEP_{boot}$ ) was compared with the nearest neighbours of the transect samples within the training set (of same sample size). On average an accordance of 70% was found. That means that, e.g., of the best sample combination of the subset size 51, ~36 samples were identical with the 51 modern analogues (based on chord distance measurement) of the transect samples within the training set.

The residuals of the transfer functions based on 54 respectively 67 samples only showed a weak trend, which was much less distinctive than that of the whole data set (Figure 3).

Surprisingly, all inferred TP levels have their highest prediction error in the middle of the lake (Figure 5).



Figure 5: Inferred TP values based on transect sediment samples through lake Dudinghausen using different subset-sizes (including all taxa) for creating the transfer functions. The dashed horizontal line illustrates the mean measured TP level over the year.

#### Discussion

The need for the development of local data sets has been discussed by various authors (Battarbee et al. 2001, Racca et al. 2004, Adler and Hübener 2007, Hübener et al. 2008). Especially with regard to the water framework directive (EU 2000) this is vital, as eutrophication strongly influenced the diatom composition of North German waters during the last decades (e.g., Dreßler et al. 2006) which, however, is not reflected by existing European data sets. Thus, a local data set was required. Hübener et al. (2008, 2009) showed for sediment cores taken of lakes from Northern Germany, that those core sections representing the recent past are best associated with the MV data set. Thus, the development of this data set and its expansion as presented in this paper are justified.

The differences between the sediment samples taken within one lake often were very high. This spatial variability of surface sediment samples within a lake was also described by several other studies (Lotter and Bigler 2000, Kauppila 2002, Heiri 2004, Adler and Hübener 2007). As no correlation was found to water depth or any other analysed environmental variable, this variation might be due to a variable that was not measured (e.g., wind). Furthermore, this variation might be the result of several in part randomly acting factors which influence the process of sedimentation (processes of taphonomy, Choen 2003). Thus,

the species composition found in a single surface sample taken from a lake is only one of several possible compositions that reflect the diatom associations of the lake over a growing season and should be interpreted as this. The difference between 21.8% and 36.8% in the relative abundance of *Cyclotella ocellata* in a sediment core therefore does not necessarily reflect a change in the environmental conditions as this difference lies within the range of variation occurring in the surface sediment samples of a single lake (MV035, see Results).

But how many lakes should a training set consist of? And how do the lakes have to be selected to ensure the development of a good and reliable transfer function with the lowest prediction error possible? In Mecklenburg-Western Pomerania, approx. 230 dimictic lakes of a size greater than 20 ha exist. Which of these should be included in a local training set? The quality of single data sets is rarely discussed in the literature (e.g., Racca et al. 2004). On the one hand, they can be chosen in that way, that parameters other than that of interest (here TP) only have a small influence on the diatom associations (e.g., by choosing lakes alongside a wide TP gradient but with only minimal variation in pH). This kind of sample design will reduce the prediction error (e.g., Fallu and Pienitz 1999). By including more diverse lakes, on the other hand, the prediction error may increase (e.g., Philbert and Prairie 2002, Adler and Hübener 2007) but the accuracy of the resulting transfer functions supposedly also increases (Racca et al. 2004). For the here presented extension of the MV data set (Hübener et al. 2001) 50 lakes were chosen only by size and stratification. Analyses using multivariate methods like CCA or DCA did not identify a distinctive subset which to use best for the development of a transfer function.

Long time monitorings of lake TP are rarely done (e.g., Alefs 1996, Bennion et al. 1995), thus, the evaluation of transfer functions based on real measurements is quite difficult. The classical error parameters (RMSEP,  $R^2_{cross val}$ , mean error<sub>cross val</sub>, max error<sub>cross val</sub>) based on re-sampling methods discussed by Birks (1998) are the most often used tools to describe the predictive power of a transfer function. The RMSEP for the MV data set (including all lakes, transfer function based on a WA-PLS algorithm, using bootstrap) was quite high (RMSEP<sub>boot</sub> = 0.353) in comparison with other TP data sets (CH data set (Lotter et al. 1998) RMSEP<sub>boot</sub> = 0.232 (WA-PLS 2. comp, number of lakes = 79), NI data set (Anderson and Odgaard 1994) RMSEP<sub>boot</sub> = 0.218 (WA-PLS 2. comp, 54), CEURO data set (Wunsam and Schmidt 1995) RMSEP<sub>boot</sub> = 0.305 (WA-PLS 2. comp, 85)). This was mentioned by several reviewers when using this data set in other publications (e.g., Dreßler et al. 2006, Adler and Hübener 2007, Hübener et al. 2008). So in this study, a subset with a better model performance, i.e. a more distinct correlation to TP was searched for. However, the RMSEP might overestimate the real

101

bias (Hastie and Tibshirani 1990; ter Braak 1995), independent test sets allow better evaluations of the predictive power of a transfer function (Birks and Birks 2006). Adler and Hübener (2007) introduced transect studies as independent test sets for assessing the predictive power of different techniques of creating transfer functions. Here, we use these transect samples to test the predictive power of the transfer functions based on subsets of the MV data set.

Instead of Racca et al. (2004) and Hausmann and Kienast (2006), who used a kind of backward selection to find an optimal subset of their training set, here, a the method of best subset selection (e.g. Hastie et al. 2009) was used to optimize the MV training set. The number of 1000 randomly selected sample combinations for each subset size is very low in comparison with the possible number of combinations (for the subsets with a low sample number, for the subset size 83 it is much too large of cause). Using the classical WA-PLS approach, the relation of the RMESP<sub>boot</sub> to the samples size (n) is positive, i.e. higher n resulted in higher RMSEP<sub>boot</sub> values. For the mean predicted error for the transect samples the same could be expected, if the RMSEP was a good tool to evaluate a transfer function. But the opposite was the case: A higher n resulted in a lower mean prediction error<sub>trans</sub> (Table 3 and Figure 5). This effect was found in three of the four lakes for which these transect samples were available. Only in Lake Tiefer See the lowest mean error<sub>trans</sub> was found using a subset of 67 lakes. Including more lakes within the MV training set, the training set itself contained more variability of the diatom assemblages in relation to TP. The higher this variability is, the worse becomes the predictive power calculated with bootstrap, but the better becomes the predicted power regarding the transect samples. If one followed the RMSEP as only test criterion, the maximal prediction error<sub>trans</sub> would be 20µg/l or rather 14µg/l when using only significant taxa and a small data set (Table 3) for Lake Dudinghausener See. Especially when defining lake reference conditions this error can lead to misclassifications. Thus, RMSEP here is ill-suited to evaluate the transfer functions.

The diatom associations within one lake in associated transect samples were found to be highly variable concerning the relative abundance of single taxa (Ader and Hübener 2007). As all of these transect samples related to the same water chemistry, they reflect the natural variability of diatom associations within the surface sediment of these lakes. Including more lakes within a training set, this natural variability will be represented within the training set. However, including all second surface sediment samples (near shore samples M001.1-M051.1) into the training set, the RMSEP of the resulting transfer function was lower than for the transfer function based on the samples from only the central/deepest point of the 84 lakes.
Thus, it seems that the inclusion of the second sediment samples (M001.1-M051.1) didn't raise the variability of the training set and that this leads not to a better prediction error for the transect samples.

One requirement for the used taxa in palaeolimnology is that they should have a significant relation to the environmental variable of interest (e.g., Roberts 1998). In the function for WA and WA-PLS of the R (Core development Team 2009) package *paltran* (Adler 2009) a tool based on GAM's was incorporated that excluded those taxa that had no significant response to the environmental variable analysed This improved the predictive power of the transfer functions (Table 3). Again the RMSEP<sub>boot</sub> was here not a good parameter to find the best transfer function using only those taxa with a significant response to TP (Table 3).

An alternative way of comparing different transfer functions was introduced by Hübener et al. (2008) based on the four parameters R<sup>2</sup><sub>cross val</sub>, mean(error)<sub>cross vall</sub>, max(error)<sub>cross val</sub> and RMSEP<sub>cross val</sub>: The parameters were sorted and graded from zero to two in that way that the parameter with the best value (e.g., highest  $R^{2}_{boot}$ , lowest mean error<sub>boot</sub>) got two points, the second best on, and the rest zero points (Hübener et al. 2008, Table 4). Testing this approach with the transfer functions based on the randomly chosen subset sizes shown in Table 3 (54<sub>sig. Taxa</sub>, 67<sub>sig. Taxa</sub>, 85<sub>sig. Taxa</sub>, and 135<sub>sig. Taxa</sub>) a good agreement with the prediction error<sub>trans</sub> was found as the transfer function based on 67<sub>sig. Taxa</sub>, which had the lowest prediction error<sub>trans</sub> concerning the transect samples reaches the highest number of points. Thus, an optimal training set might be found by this approach when no real test set is available. For the transfer functions based on all taxa, however, this approach did not work, as both the transfer functions based on 54 and 67 samples had the highest number of points whereas the transfer function based on 85 samples has the lowest prediction error concerning the transect samples. Here, the only possible criterion for comparing the quality of data sets respectively transfer functions was the R<sup>2</sup><sub>boot</sub>. As long as the R<sup>2</sup><sub>boot</sub> was high, the residuals of the transfer functions for the single optimised subsets showed a low trend (not shown). When the  $R^{2}_{\text{hoot}}$  decreases strongly the training set is influenced considerably by a second parameter, e.g., pH. Therefore, the subset of 67 samples might be the optimal size, as enfolding more lakes increases the mean error<sub>trans</sub> of Lake Tiefer See. The mean error<sub>trans</sub> of Lakes Dudinghausener See, Campser See and Groß Peetscher See was nearly constant or decreasing when including more lakes into the training set. Including more diversity within the training set does not seem to result in a worse mean error<sub>trans</sub>, rather the opposite is the case (Table 2, Figure 5). Nevertheless, when dealing with sediment core data where no comparison with measured data is possible, the  $R^2_{boot}$  seems to be the best error parameter in addition to a trend analysis of the residuals of the resulting transfer function to choose the best training set. As the  $R^2_{boot}$  for lower n (n<55) is high, too, but the mean erorr<sub>trans</sub> is higher than when including more lakes into the training set, the number of lakes used should be as high as possible.

As the lake combination of the subsets equals to 70% the nearest neighbours of the transect samples, the MAT approach (Modern analogue Techniques, ter Braak 1995) is no alternative to this sample selection.

The selected 67 lakes of the training set contained all different lake types from the data set (Table 1, bold samples), including some shallow lakes. Performing a CCA plot for the MV training set (not shown), there was no trend for this 67 samples visible. This means that several other parameters that were not measured here might influence the species composition. Compared to this best subset secletion process the backward selection process as proposed by Hausmann and Kienast (2006) is faster and not so compute-intensive. Using that backward selection, however, the first sample that would be deleted from the MV training set would be lake Schwarzer See (pH = 6.52). Surprisingly, in our forward selection this lake was always included. As CCA and related methods give only an overview of the data in comparison with single taxa modelling (Guisan et al. 1999), this method by Hausmann and Kienast (2006) should be used carefully. Especially those samples that have special environmental conditions (outlier) can give important information about species distribution (e.g., Quinn and Keough 2002).

When using only those taxa that are significantly correlated to TP, more than 70% of all taxa were removed. On the one hand, this improved the mean  $\operatorname{error}_{\operatorname{trans}}$  e.g., for Lake Dudinghausener See, on the other hand, the R<sup>2</sup><sub>boot</sub> of the resulting transfer functions was clearly reduced (Figure 5). It should be tested if the use of the HOF model (Huisman et al. 1993) will give different results, especially if more taxa were included. Neverthless, taxa with rare occurrences might display their preference in the same way or even better than those that occurred many times in a data set. Therefore, a general exclusion of all not significant taxa might result in a loss of important information and is not recommended here in general.

Using both transfer functions based on all taxa or only on those that were significantly related to TP, the highest error occurred in the middle of the lakes (Figure 5, see also Adler and Hübener 2007). This is surprising as most surface sediment samples in the training set came from this region and therefore, here the lowest error would be expected. Furthermore, the WA-PLS (second component) used in Adler and Hübener (2007) (using 10 fold cross validation as validatin method) results in a higher prediction error<sub>trans</sub> than the simple WA

(WA-PLS first component) as used here (based on bootstrap). Adler and Hübener (2007) chose the second component, as the RMSEP based on 10 fold cross validation was lower for the seconded than for the first component, the opposite concerning bootstrap. Using the randomisation test developed by van der Voet (1994), for both cross validation methods (bootstrap and 10-fold cross validation) the error<sub>boot</sub> of the second component of the resulting WA-PLS transfer functions were not significant different to the first component. This showed, that the use of WA-PLS lead not to a significant reduction of the prediction error for this particular training set.

# Conclusion

The North German data set (MV) was introduced including a high variability in taxa composition and environmental variables. To improve the performance of the resulting transfer functions subsets were created. Using independent test sets, it was found that the RMSEP<sub>boot</sub> was negatively correlated with the prediction error. As only criterion to find the best subset of a training set, it was practicable to use the  $R^2_{boot}$  in combination with a high number of lakes contained in the data set.

#### Acknowledgments

We would like to thank Fred Brezezinski for assistance when sampling the diatom surface sediment samples, Sabiene Stolle and Regine Paschen for analysing the water chemistry, and Unn Klare for helping with the language and giving valuable comments on the manuscript. This study was funded by the German Federal Environmental Foundation.

#### Literature

- Adler S (2009) paltran: WA, WA-PLS, MW and POM for paleolimnology. R package version 1.3-0. http://CRAN.R-project.org/package=paltran.
- Adler S, Hübener T (2007) Spatial variability of diatom associations in surface lake sediments and its implications for transfer function. Journal of Paleolimnology 37: 573-590.
- Alefs J, Müller J, Wunsam S (1996) Die Rekonstruktionder epilimnischen Phosporkonzentrationen im Ammersee seit 1958. Wasser Abwasser 137:443–447.

- Anderson NJ, Odgaard BV (1994) Recent palaeolimnology of three shallow Danish lakes. Hydrobiologia 275: 411-22.
- Battarbee RW, Jones VJ, Flower RJ, Cameron NG, Bennion H, Carvalho L, Juggins S (2001). Diatoms. In Smol JP, Birks HJB, Last WM (eds), Tracking environmental change using lake sediments. Volume 3: Terrestrial, Algal and Siliceous Indicators. Kluwer, Dordrecht: 155–202.
- Battarbee RW, Juggins S, Gasse F, Anderson NJ, Bennion H, Cameron NG (2000). European Diatom Database (EDDI). An information system for paleoenvironmental reconstruction. European Climate Science Conference, European Commission, Vienna, Austria 1998: 1–10.
- Battarbee RW, Monteith DT, Juggins S, Simpson GL, Shilland EW, Flower RJ, Kreiser AM (2008) Assessing the accuracy of diatom-based transfer functions in defining reference pH conditions for acidified lakes in the United Kingdom, The Holocene 18: 57-67.
- Battarbee, RW, Kneen MJ (1982). The use of electronically counted microspheres in absolute diatom analysis. Limnology and Oceanography 27: 184–188.
- Bennion H, Fluin J, Simpson GL (2004). Assessing eutrophication and reference conditions for Scottish freshwater lochs using subfossil diatoms. Journal of applied Ecology 41: 124–138.
- Bennion H, Wunsam S, Schmidt R (1995) The validation of diatom-phosphorus transfer functions: an example from Mondsee, Austria. Freshwater Biology 34: 271-283.
- Birks HH, Birks HJB (2006) Multi-proxy studies in palaeolimnology. Veget Hist Archaeobot 15: 235–251.
- Birks HJB (1998) Numerical tools in palaeolimnology–progress, potentialities, and problems. Journal of Paleolimnology 20:307–332.
- Birks, HH, Birks HJB, Kaland PE, Moe D (1988). The Cultural Landscape—Past, Present and Future. Cambridge University Press, Cambridge.
- Bjerring R, Bradshaw EG, Amsinck SL, Johansson LS, Odgaard BV, Nielsen AB, Jeppsen E (2008) Inferring recent changes in the ecological state of 21 Danish candidate reference lakes (EU Water Framework Directive) using palaeolimnology. Journal of Applied Ecology 45: 1566–1575.
- Bradshaw EG, Nielsen AB, Anderson NJ (2006) Using diatoms to assess the impacts of prehistoric, preindustrial and modern land-use on Danish lakes. Reg Environ Change 6: 17–24.
- Cameron NG, Birks HJB, Jons VJ, Berge F, Catalan J, Flower RJ, Garcia J, Kawecka B, Koinig KA, Marchetto A, Sanchez-Castillo P, Schmidt R, Sisko M, Solovieva N, Stefkova E, Toro M (1999) Surface-sediment and epilithic diatom pH calibration sets for remote European mountain lakes (AL:PE Project) and their comparison with the Surface Water Acidification Programme (SWAP) calibration set. Journal of Paleolimnologie 22: 291-317.
- Cohen AS (2003) Paleolimnology The History and Evolution of Lake Systems. Oxford University Press, Oxford.
- Dreßler M, Selig U, Dörfler W, Adler S, Schubert H, Hübener T (2006) Environmental changes and the migration period in Europe by the example of Lake Dudinghausen (northern Germany). Quaternary Research 66: 25-37.
- Efron B. (1982) The jackknife, the bootstrap and other resampling plans. SIAM, Philadelphia.
- EU (2000) Direktive 2000/60/EC of the European Parlament and the Council of 23.10.2000 establishing a framework for Community action in the field of water policy. Official Journal of the EC L327: 1-72.
- Fallu MA, Pienitz R (1999) Diatomées lacustres de Jamésie-Hudsonie (Québec) et modèle de reconstitution des concentrations de carbone organique dissous. Ecoscience 6 (3): 603-620.

- Faraway JJ (2006) Extending the Linear Model with R: Generalized Linear, Mixed Effects and Nonparametric Regression Models (Texts in Statistical Science). Chapman and Hall/CRC, London.
- Guisan, A, Weiss SB, Weiss AD (1999) GLM versus CCA spatial modelling of plant species distribution. Plant Ecology 143: 107-122.
- Hall RI, Smol JP (1999) Diatoms as indicators of lake eutrophication. In: Stoermer EF and Smol JP (eds.) The Diatoms: Applications for the Environmental and Earth Sciences. University Press, Cambridge.
- Hastie T, Tibshirani R, Friedman J (2009) The Elements of Statistical Learning. Springer Verlag, New York.
- Hastie T, Tibshirani R (1990) Generalized additive models. Chapman and Hall, London.
- Hausmann S, Kienast F (2006) A diatom-inference model for nutrients screened to reduce the influence of background variables: Application to varved sediments of Greifensee and evaluation with measured data. Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology 233: 96-112.
- Hausmann S, Pienitz R (2007) Seasonal climate inferences from high-resolution modern diatom data along a climate gradient: a case study. Journal of Paleolimnology 38: 73-96.
- Heiri O (2004) Within-lake variability of subfossil chironomid assemblages in shallow Norwegian lakes. Journal of Paleolimnology 32: 67-84.
- Hübener T, Adler S, Selig U. (2001) Nutzung einer Diatomeen Gesamtphosphat Korrelation zur Trophieindikation. Erste Ergebnisse aus mecklenburgischen Seen. RMB 9: 37-45.
- Hübener T, Adler S, Werner P, Schuldt M, Erlenkeuser H, Meyer H, Bahnwart M (2009) A multi-proxy paleolimnological reconstruction of trophic state reference conditions for stratified carbonate-rich lakes in northern Germany. Hydrobiologia (2009) 631: 303–327.
- Hübener T, Dörfler W (2004) Reconstruction of the trophic development of the Lake Krakower Obersee (Mecklenburg, Germany) by means of sediment-diatom- and pollen-analysis. Studia Quaternaria 21: 101–108.
- Hübener T, Dreßler M, Schwarz A, Langner K, Adler S (2008) Dynamic adjustment of training sets ('movingwindow' reconstruction) by using transfer functions in paleolimnology - a new approach. Journal of Paleolimnology 40: 79-95.
- Huisman J, Olff H, Fresco LFM (1993) A hierarchical set of models for species response analysis. Journal of Vegetation Science 4, 37-46.
- Jongman RHG, ter Braak CJF van Tongeren OFR (1995) Data analysis in community and landscape ecology. Cambridge University Press. Cambridge.
- Kalbe L, and H Werner, 1974. Das Sediment des Kummerower Sees. Untersuchungen des Chemismus und der Diatomeenflora. Internationale Revue der Gesamten Hydrobiologie 596: 755–782.
- Kauppila T (2002) Variability of surface sediment diatom assemblages in Lake Salkolanjaervi, Finnland. Proceedings of the 15<sup>th</sup> international diatom symposium, Perth, 1998: 263–274.
- Krammer K (1997a) Die cymbelloiden Diatomeen. Eine Monographie der weltweit bekannten Taxa, Teil 1 Allgemeines und Encyonema Part. Bibliotheca Diatomologica,Vol. 36. Cramer Berlin, Stuttgart.
- Krammer K (1997b) Die cymbelloiden Diatomeen, Eine Monographie der weltweit bekannten Taxa, Teil 2 Encyonema part., Encyonopsis and Cymbellopsis. Bibliotheca Diatomologica, Vol. 37. Cramer, Berlin, Stuttgart.
- Krammer K (2000) The Genus Pinnularia. In Lange-Bertalot, H. (ed.), Diatoms of Europe, Vol. 1. A.R.G. Gantner Verlag, Ruggel.

- Krammer K (2002) Cymbella. In Lange-Bertalot, H. (ed.), Diatoms of Europe, Vol. 3. A.R.G. Gantner Verlag, Ruggel.
- Krammer K (2003) Cymbopleura, Delicata, Navicymbula, Gophocymbelloides, Afrocymbella. In Lange-Bertalot, H. (ed.), Diatoms of Europe, Vol. 4. A.R.G. Gantner Verlag, Ruggel.
- Krammer K, Lange-Bertalot H (1986) Süßwasserflora von Mitteleuropa, Bacillariophyceae 2/1. In Ettl H, Gerloff J, Heinig H, Mollenhauer D (eds), Süsswasserflora von Mitteleuropa, Vol. 2, no. 1. Gustav Fisher Verlag, Stuttgart.
- Krammer K, Lange-Bertalot H (1988). Süßwasserflora von Mitteleuropa, Bacillariophyceae 2/2. In Ettl H, Gerloff J, Heinig H, Mollenhauer D (eds), Süsswasserflora von Mitteleuropa, Vol. 2, no. 2. Gustav Fisher Verlag, Stuttgart.
- Krammer K, Lange-Bertalot H (1991a). Süßwasserflora von Mitteleuropa, Bacillariophyceae 2/3. In Ettl H, Gerloff J, Heinig H, Mollenhauer D (eds), Süsswasserflora von Mitteleuropa, Vol. 2, no. 3. Gustav Fisher Verlag, Stuttgart.
- Krammer K, Lange-Bertalot H (1991b) Süßwasserflora von Mitteleuropa, Bacillariophyceae 2/4. In Ettl H, Gerloff J, Heinig H, Mollenhauer D (eds), Süsswasserflora von Mitteleuropa, Vol. 2, no. 4. Gustav Fisher Verlag, Stuttgart.
- Lange-Bertalot H (2001): *Navicula* sensu stricto, 10 genera separated from *Navicula* sensu lato, *Frustulia*.- In Lange-Bertalot H. (ed.), Diatoms of Europe, 2, A.R.G. Gantner, Ruggell, Liechtenstein.
- Lange-Bertalot H, Moser G (1994) Brachysira, Monographie der Gattung. Bibliotheca Diatomologica, Vol. 29. Cramer, Berlin, Stuttgart.
- Lorenz S, Lampe R, Jahnke W, Meyer H, Küster M, Hübener T (2008): Beckenentwicklung, Sedimentationsgeschichte und Paläohydrologie der Müritz in den letzten 14.000 Jahren. Neubrandenbg. Geolog. Beiträge 8: 42-49.
- Lotter AF, Bigler C (2000) Do diatoms in the Swiss Alps reflect the length of ice-cover? Aquatic Science 62: 125-141.
- Lotter AF, Birks HJB, Hofmann W (1998) Modern diatom, cladocera, chironomid, and chrysophyte cyst assemblages as quantitative indicators for the reconstruction of past environmental conditions in the Alps. II. Nutrients Journal of Paleolimnology. 19: 443-463.
- Overpeck JT, Webb T, Prentice IC (1985) Quantitative interpretation of fossil pollen spectra: dissimilarity coefficients and the method of Modern Analogs. Quat Res 23:84–108.
- Philibert A, Prairie YT (2002) Diatom-based transfer functions for western Quebec lakes (Abitibi and Haute Mauricie): the possible role of epilimnetic CO2 concentration in influencing diatom assemblages. Journal of Paleolimnology 27: 465-480.
- Pinheiro JC, Bates DM (2000) Mixed-effects models in S and S-plus. Statistics and Computing, Springer, New York.
- Quinn GP, Keough MJ (2002) Experimental Design and Data Analysis for Biologists. Cambridge Universite Press, Cambridge.
- R Development Core Team (2009). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0, URL <u>http://www.R-project.org</u>.
- Racca JMJ, Gregory-Eaves I, Pienitz R, Prairie YT (2004) Tailoring palaeolimnological diatom-based transfer functions. Can.J.Fish.Aquat.Sci. 61: 2440-2454.
- Roberts N. (1989). The Holocene. An environmental history. Basil Blackwell, Cambridge.
- Schönfelder I, Gelbrecht J, Schönfelder J, Steinberg CEW (2002) Relationship between littoral diatoms and their chemical environment in northeastern German lakes and rivers. J. Phycology 38: 66-82.

- Schwarz A (2005) Rekonstruktion der Entwicklung des Schulzensees und des Tiefen Sees (Mecklenburg-Vorpommern) seit dem Spätglazial mittels Diatomeenanalyse unter besonderer Berücksichtigung der Trophiegeschichte. Greifswalder Geographische Arbeiten 41: 1-166.
- Simpson GL, Oksanen J (2009) analogue: Analogue matching and Modern Analogue Technique transfer function models. (R package version 0.6-8). (http://cran.r-project.org/package=analogue).
- Smol JP, 2008. Pollution of Lakes and Rivers—A Paleoenvironmental Perspective. Blackwell Publishing, Oxford.
- Smol JP, Birks HJB, Last WM (2001) Tracking Environmental Change Using Lake Sediments: Terrestrial, Algal, and Siliceous Indicators. Kluwer Academic Publishers, Boston.
- ter Braak CJF, Juggins S, Birks HJB, van der Voet H (1993) Weighted averaging partial least squares regression (WA-PLS): definition and comparison with other methods for species-environment calibration. In *Multivariate Environmental Statistics* (Eds. G.P. Patil and C.R. Rao): 529-560. North Holland, Amsterdam.
- ter Braak CJF (1986) Canonical Correspondence Analysis: a new eigenvector technique for multivariate direct gradient analysis. Ecology 67: 1167-1179.
- ter Braak CJF, Śmilauer P (2002) CANOCO Reference Manual and CanoDraw for Windows User's Guide. Software for Canonical Community Ordination (version 4.5). Microcomputer Power, Ithaca.
- ter Braak CJF, van Dam H (1989) Inferring pH from diatoms: a comparison of old and new calibration methods. Hydrobiologia 178: 209-223.
- ter Braak CJF. (1995) Non-linear methods for multivariate statistical calibration and their use in palaeoecology: a comparison of inverse (k-nearest neighbours, partial least squares and weighted averaging partial least squares) and classical approaches. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 28:165-180.
- van der Voet H (1994) Comparing the predictive accuracy of models using a simple randomization test. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 25: 313-323.
- Vollenweider RA, Kerekes J (1982) Eutrophication of Waters, Monitoring, assessment and Control. OECD, Paris.
- Wunsam S, Schmidt R (1995) A diatom-phosphorus transfer function for Alpine and pre-alpine lakes. Memorie dell Istituto Italiano di Idrobiologia 53: 85-99.

# Spatial variability of diatom assemblages in surface lake sediments and its implications for transfer functions

S. Adler and T. Hübener

http://www.springerlink.com/content/mt8583778h9q43r7/

# Dynamic adjustment of training sets ('moving-window' reconstruction) by using transfer functions in paleolimnology—a new approach

T. Hübener, M. Dreßler, A.Schwarz, K. Langner and S. Adler

http://www.springerlink.com/content/v08713725p091563/

Seasonal diatom assemblage change in two North German lowland lakes – implications for transfer functions in paleolimnology

Sven Adler, Thomas Hübener, Regine Paschen

Department of Biodiversity, University of Rostock, Wismarsche Str. 8, 18057 Rostock, Germany

#### Abstract

Two lowland lakes in northern Germany were sampled using sediment traps over a period of one year. Dry mass, species composition of diatoms and diatom biovolume were analysed monthly. Dry mass was highest in spring and decreased until the end of the year, while diatom biovolume was high in May, July, August and November. Differences in biomass, biovolume and species composition were found among sediment trap locations within each lake. Taxon composition of the traps was compared with the species composition found in the surface sediment. Surface sediment samples were most similar to sediment trap species composition found in May, July and August. Several taxa, such as Asterionella formosa or Fragilaria crotonensis, showed highly variable abundances throughout the year. When reanalysing the North German diatom training set using seasonal total phosphorus (TP) data, it was found that only 63 of the 270 taxa had a significant correlation to spring TP. 93 taxa were best correlated with summer TP and 99 taxa with autumn TP. A new form of the classical weighted averaging (WA) transfer function was developed incorporating that different taxa were best correlated to different seasonal TP - the WA<sub>seasonal</sub>. When comparing WA models based either on mean annual TP, spring TP, summer TP or autumn TP with the new WA<sub>seasonal</sub>, the performance of WA<sub>seasonal</sub> was slightly better than all others.

# Introduction

In paleolimnological studies, transfer functions are a well-established tool, which quantifies the link between modern species relative abundance data (e.g., diatoms, chironomids), environmental variables (e.g., Total Phosphorus (TP), temperature, pH, salinity) and fossil assemblages from sediment cores (Birks 1998, Cohen 2003, Battarbee et al. 2005, Birks and Birks 2006).

Most modern species samples (training sets) for diatoms are based on surface sediment samples (Cohen 2003). It is assumed that in these samples, the entire range of species occurring over the growing season is represented (e.g., Marchetto and Musazzi 2001, Flower 1990, Cameron 1995). In terms of model performance, it has been observed that in high arctic or alpine lakes, where the ice-free period is only several weeks and only one major plankton growing phase exists which is dominated by a few number of benthic and planktonic species, the correlation between surface diatom samples and measured environmental variables ( $log_{10}(TP)$ ) is quite good (e.g., Swith data set (Lotter et al. 1998): R<sup>2</sup>= 0.62, RMSE =0.1929, RMSEP<sub>boot</sub> = 0.22888). In comparison, in the lowland North German data set (MV) (Adler and Hübener 2007, Adler and Hübener submitted) the performance is rather poor for  $log_{10}(TP)$  (RMSEP<sub>boot</sub> = 0.35). In lowland lakes, a minimum of three different growing phases can be observed, during which several different dominant benthic and planktonic species coexist (Hutchinson 1961, Padisak et al. 2003, Kirilova et al. 2008).

Many diatom training sets are available, such as those compiled in the European Diatom Database EDDI (http://.craticula.ncl.ac.uk/Eddi/jsp/index.jsp) or those collected by the Diatom Paleolimnology Data Cooperative (http://diatom.acnatsci/dpdc/Datasets.asp). While sampling design for obtaining diatom surface samples is similar among the different data sets, the sampling design to obtain the related environmental variables differs considerably. Several studies collected water samples only one time in the growing season (e.g., Miettinen 2003), three to five times a growing season (Hall and Smol 1999, Cohen 2003, Miettinen 2003), monthly (e.g., Bennion 1995), and sometimes sampling frequency differed among sites within a data set (Chen et al. 2008). To test which of the environmental variables have a significant impact on diatom species distribution, ordination methods like the canonical correspondence analysis (CCA) (e.g., Hausmann and Pienitz 2007) or redundancy analysis (RDA) are the most common tools in paleolimnology. Most studies used either the annual average or only the values of one part of the growing season of the measured environmental variables for these analyses , which might be not adequate for the

understanding of seasonal diatom distribution (e.g., Bradshaw et al. 2002), and also subsequently, when calculating species optima from the data. In doing so, the seasonal development in species composition through the year is ignored.

In general, the seasonal development of planktonic diatom associations is well known (e.g., Raubitschek et al. 1999, Rautio et al. 2000, Koester and Pienitz 2006, Hausmann and Pienitz 2007, Kirilova et al. 2008), but seldom incorporated in the use of transfer functions (Hausmann and Pienitz 2007). It is rarely known how the species composition in surface sediments is related to seasonal differences in species and nutrient composition (H.J.B. Birks 2000, Paleolimnology Symposium, Cohen 2003). Several taxa often only occur either in spring, summer or autumn, but mostly this is ignored when building transfer functions as it is not possible to distinguish between these taxa when surface sediment samples are used.

In this study we attempted to incorporate the seasonal development of species composition in the development of transfer functions. During one year the seasonal distribution of diatom assemblages in two lowland lakes of the North German diatom data set (MV data set) (Hübener et al. 2001, Adler and Hübener 2007, Hübener et al. 2008, Adler and Hübener submitted) was investigated using sediment traps. Sediment traps were sampled monthly and the collected diatom associations were compared with the surface sediment at the end of the sampling period. Secondly, the MV diatom data set was reanalysed for the influence of seasonal changes in environmental variables on the error statistics of the TP model. Based on these results, a seasonal weighted average transfer function (WA<sub>seasonal</sub>) was developed. For this, we identified for each taxon the season where it is best correlated with TP, calculated a WA optimum for this season (optimum<sub>season</sub>) and used the taxa-specific optima<sub>season</sub> in a WA regression.

# Methods

To analyse the seasonal differences in the diatom composition, sediment traps were installed in two lakes in Northern Germany for one growing season, as detailed below. Additionally, the local North German training set (MV) (Adler and Hübener 2007, Adler and Hübener submitted) was reanalysed using regression trees and generalized additive models (GAM, Hastie and Tibshirani 1990, Wood 2006). The results were used for a variation of the classical transfer function of weighted average regression (WA) (ter Braak and van Dam 1989) called seasonal weighted average regression (WA<sub>seasonal</sub>).



Figure 1: Position of the sediment traps within the lakes TIE (A) and DUD (C) and location of the study sites in Germany (D). The year trap in DUD was situated between the shore near trap and the open water trap. Penal C shows a draft of the traps used.

### Lakes for sediment trap study

The two study sites Lake Dudinghausener See (DUD) and Lake Tiefer See (TIE) are located in the lake district of the north-eastern lowlands of Germany (Mecklenburg-Vorpommern, Mecklenburg-Western Pomerania). They are situated within ground moraine landscape of Weichsel-glacial origin. The lakes are characterised as well-buffered carbonaterich hard water lakes. Intensive agricultural use of the catchments area in the recent decades has resulted in eutrophic conditions in the lakes (Dreßler et al 2006, Schwarz 2005). Characteristic variables of the lakes are listed in Table 1. The two investigated lakes were chosen for their differences in lake basin morphology (see Fig. 1).

The lake morphology of DUD is characterized by a nearly homogeneously shaped basin. The lake is almost completely surrounded by agricultural areas and only a small part at the north side is flanked by forest. Large areas of cattail (*Typha* sp.) are located at the western and eastern edges. Lake TIE is almost completely surrounded by forest, with only small agricultural areas at the north-eastern shore. The basin is very steep, with a maximum depth

of 32 m and is one of the deepest lakes in the region. (See also Selig et al. 2006, Schwarz 2005, Dreßler et al. 2006, Adler and Hübener 2007, Selig et al. 2007, Selig and Leipe 2008).



Figure 2: Development of important environmental variables from May to November 2003 in DUD (black line) and TIE (grey line).

#### North German training data set (MV)

The Mecklenburg-Vorpommern data set (Adler and Hübener 2007, <u>www.biologie.uni-rostock.de/abt/botanik/AG-Phykologie/index-engl.htm</u>) consists of 84 lakes located in the north-eastern German lowlands (Mecklenburg-Vorpommern, MV). The lakes are typical kettle-type, formed in the glacial till of Weichselian origin, and are well-buffered, hard water and carbonate-rich lakes. Intensification of agriculture in the lake catchments during recent decades has resulted in more or less eutrophic conditions in the most of the lakes. For each lake, water samples were collected three times a year (spring, summer and autumn) at a water depth of 0.5 m and analysed for 19 environmental variables (unpublished data) using standard

methods. Physical variables (temperature,  $O_2$ -saturation, conductivity, redox potential, pH) were measured with the measuring probe TORPHIL 406, version 3.0 (COMTEX). Water samples for chemical analyses (e.g., TP, TN) were taken at the middle of the lakes in a depth of 0.5 m. All lakes, except nine shallow lakes, are dimictic and have surface areas >50 ha. Littoral deposits are mainly muddy (stones occur only rarely) and the shores are mainly fringed by *Phragmites australis*.

	Dudinghausener See	Tiefer See	
Area [ha]	18.8	15.9	-
Max. depth [m]	15.3	30.6	
Ave. depth [m]	6.9	10.6	
Depth gradient (LAWA 1996)	3.6	6.01	
Stratification	di- holomictic	di- holomictic	
Clasification (LAWA 1998)	mt - e1	mt	
TP (μg l <sup>-1</sup> )*	50	30	
pH*	8.75	8.87	

Table 1: Limnological variables of the two lakes studied.

Surface sediment samples were collected from the deepest part of the lakes using a Mondsee-corer (Fa. Uwitech, Mondsee, Austria). Portions of approximately 2 cm<sup>3</sup> sediment were treated according to Kalbe and Werner (1974) and Battarbee and Kneen (1982), i.e. they were dried at 105 °C, treated with 10 ml of 30% HCl, washed twice with distilled water, followed by centrifugation (12 min, 4000 revolutions min-1) and treated with 10 ml H2SO4, 1 ml saturated KMnO4 and a few drops of oxalic acid. Diatoms were mounted in Naphrax<sup>®</sup> for counting. Diatom identification mainly followed Krammer and Lange Bertalot (i.e. Krammer and Lange Bertalot (1986, 1988, 1991a, b, Lange Bertalot 2001, Lange-Bertalot and Moser 1994, Lange-Bertalot 2001 and Krammer (1997a, b, 2000, 2002, 2003)) and after counting nearly 1000 diatom-valves at 1000x magnification (Zeiss-Axioplan, 1.4 plan-apochromat), abundances were expressed as a percentage of the total count. Taxonomy of critical taxa was ascertained using a scanning electron microscope (Zeiss DSM 960A).

lake	month	TP	02	O2 %	рН	conductivity	Redox	°C	Chlorid	Fe	TN[mg/l]	NO2[µg/l]
DUD	may	15.2	13.6	142.3	8.5	385.7	72.0	15.4	35.5	7.0	1.430	8.5
	jun	38.4	5.8	66.3	8.2	360.3	87.7	20.9	35.5	8.9	1.240	3.1
	july	24.2	7.9	91.8	8.2	385.2	83.6	20.4	35.5	2.4	1.030	4.9
	august	10.5	6.9	78.6	8.0	392.0	102.2	19.9	42.5	2.6	0.950	1.0
	september	9.6	6.7	67.8	7.8	354.9	74.5	14.0	39.0	2.5	0.720	2.2
	october	28.5	6.6	57.0	7.7	317.8	46.8	8.2	39.0	3.0	0.350	5.5
	november	29.7	9.1	77.0	7.9	311.0	50.8	6.8	10.6	3.5	1.090	5.5
TIE	may	24.7836735	8.8	NA	8.3	350	160	16.5	21.27	7.83	0.843	3.36
	jun	23.2346939	8.7	NA	8.2	390	110	20.9	35.45	4.43	0.867	2.8
	july	26.0228571	8.5	NA	8.2	384	75	21.5	21.27	12.97	0.809	0.84
	august	13.3212245	10.4	NA	8.3	335	150	20.6	28.36	11.5	0.819	2.94
	september	9.91346939	9.3	NA	8.1	310	130	14.0	28.36	2.63	0.563	1.4
	october	23.8542857	8.2	NA	8	270	105	8.2	7.09	2.26	0.849	1.26
	november	13.0114286	9.1	NA	7.8	260	100	7.0	14.18	2.35	0.927	1.54

Table 2: Seasonal development of some environmental variables of DUD and TIE within the sample period.

#### Sediment traps

In the beginning of March 2003, in both lake one trap was placed 50 m close to shore, and one in the open water region of the lake. Each trap had three collecting tubes (diameter 5 cm, length 1 m). Each of these collecting tubes was held by a second tube (Figure 1). Until the end of March 2004 the collecting tubes were changed at the beginning of each month, except in the period from December to February because the lakes were frozen. In DUD two more sediment traps were installed, one was emptied monthly, but lost in July. The other one was only emptied in November 2003 (year trap). The collecting tubes were emptied in the laboratory. After stepwise decanting and sedimentation, a homogeneous suspension of 50 ml was produced from the original water column of the collecting tube. The dry mass was determined from 20 ml of this suspension by filtering through a 45- $\mu$ m filter, and dried subsequently for 24 h at 130 °C. In order to calculate the biovolume of planktonic diatoms, 5 ml of the 50 ml suspension were analysed using the Utermöhl-method (Utermöhl 1959).

From the remaining 25 ml of suspension, 2-3 mg of sediment was used to identify the diatom assemblages. Sample preparation, identification and calculation of the relative abundances of the diatom taxa followed the same procedure as described for the MV data set above.

In November 2003, three surface sediment samples were taken within 10 m of each sediment trap using a Mondsee-corer and treated as described above. In the multivariate statistical analyses these samples were used as passive samples (ter Braak and Šmilauer 2002).

Additionally, each month the physical and chemical water variables were collected as described for the MV data set.



Figure 3: Development of the dry mass and diatom biovolume (DBV) found in the tubes of the sediment traps (here, the mean for each trap is shown). 1- shore near trap, 2-open water trap.

# Data analysis

Detrendet component analysis (DCA, Hill and Gauch 1980) and canonical correspondence analysis (CCA, ter Braak 1986, Jongman et al. 1995) were performed with CANOCO 4.5 (ter Braak and Šimlauer 2002) and the R package vegan (Oksanen et al. 2009) using the functions *cca()*, *decorana()* and *envfit()*. A dummy variable "location" was used to distinguish between different sites within a lake (0 for shore near, 1 for open water region). To test for environmental variables that explained a significant amount of variation in the species distribution and to test whether there was a significant difference between diatom assemblages at different trap locations, Monte Carlo permutation tests () were used as implemented in CANOCO. For analysing differences of single taxa distributions between the sediment traps within the lakes, mixed effect models (Pinheiro and Bates 2000) were used as implemented in the R package lme4 (Bates and Maechler 2009) choosing year and lake as random variable.



Figure 4: Seasonal development of the eight most abundant taxa within DUD (upper panel) and TIE (lower panel). First bar – shore near trap, second bar – open water trap. The winter trap in TIE was open between December 03 and March 04. Ac.min = Achnanthes minutissima, St.al = Stephanodiscus alpinus, Ct.oc = Cyclotella ocellata, St.mi = Stephanodiscus minutulus, Ct.ra = Cyclotella radiosa, Ct.kr = Cyclotella krammeri, Ct.co = Cyclotella comensis, Fr.co = Fragilaria construens.

To create a seasonal influenced WA (WA<sub>seasonal</sub>), for each taxon of the MV data set the response to spring, summer, autumn and the average Total Phosphorous (TP) was modelled using GAM's. First, a dummy variable `season` was created where every taxon was assigned the value sp (spring), su (summer), au (autumn) or av (average) respectively, depending on its

significant response to one of the seasonal TP concentrations. If a taxon had a significant response to more than one seasonal TP concentration, the season code for the response model with the highest F value was chosen. If a taxon had no significant response to any of the seasonal TP concentrations, the dummy variable was set to the value av. Second, four WA models were developed using as response the taxa of the training set and as predictors spring, summer, autumn and the average TP, respectively. As a result four WA optima were available for the different seasons, i.e., TP<sub>spring</sub>, TP<sub>summer</sub>, TP<sub>autumn</sub>, and TP<sub>average</sub>. Then, a vector "optimum" was defined including all taxa and one of the four seasonal optima for each taxon based on the dummy variable "season". For example, if the value of the season variable for a taxon was sp, the spring optimum was assign to the optima vector. The thus constructed seasonal weighted average model was applied to the dataset samples using inverse deshrinking (see WA algorithm in ter Braak and Juggins 1993, Birks 1995, 1998) and R2, RMSE, mean error and max error were calculated. As cross validation procedure the bootstrap method (Efron 1982) (number of runs =1000) was used as described in Birks et al. (1990). All calculations were performed using parts of the WA algorithm in the package paltran 1.2 (Adler 2009) in R 2.9.1 (R Development Core Team 2009). The resulting model performance of the WAseasonal was compared with the results of the conventional WA regression. All TP data were log10-transformed before analysis.

# Results

The seasonal development of the measured environmental variables was characteristic of this type of dimictic lowland lakes (Figure 2). In spring TP and TN were high; both decreased in summer In autumn, TP and TN values increased again. TP levels of TIE were similar to those of DUD despite in June and November, when TP levels of DUD were higher. In 2003, the mean TP levels of DUD were lower than the mean TP concentration of this lake measured during the previous years (e.g., Table 1, Adler and Hübener 2007). TN was always lower in TIE than in DUD, except in October. With decreasing nutrient concentrations, pH was decreasing too, as well as the conductivity.

Variable	LambdaA	Р	F
depth	0.13	0.002	3.54
NO2-sp	0.13	0.002	3.32
TP_au	0.09	0.002	2.62
TP_so	0.08	0.004	2.36
Secci_so	0.07	0.044	2.28
Con_au	0.08	0.006	2.25
Redox_sp	0.07	0.008	2.20
O2g_au	0.08	0.022	2.17
temp_so	0.07	0.050	2.12
Redox_au	0.07	0.010	2.04
O2s au	0.06	0.008	2.01
Con_so	0.07	0.016	1.94
pH_so	0.06	0.048	1.77
Secci_au	0.05	0.040	1.70
TN_so	0.05	0.028	1.69
cl-sp	0.05	0.110	1.65
O2g_so	0.05	0.112	1.45
temp_au	0.04	0.116	1.39
no2-so	0.04	0.192	1.38
TP_sp_lo	0.04	0.160	1.36
O2s_sp	0.04	0.162	1.29
TN_au	0.03	0.174	1.27
O2g_sp	0.04	0.178	1.27
TN_sp	0.03	0.417	1.04
no2-aut	0.03	0.401	1.04
pH_au	0.04	0.401	1.03
cl-so	0.03	0.447	1.01
no3-sp	0.02	0.381	1.00
temp_sp	0.02	0.583	0.90
pH_sp	0.03	0.613	0.88
O2s_so	0.03	0.635	0.87
no3-aut	0.03	0.649	0.78
Con_sp	0.02	0.617	0.76
cl-aut	0.02	0.790	0.72
no3-so	0.02	0.860	0.66
Secci_sp	0.02	0.637	0.64
Podov so	0.01	0 020	0.55

Table 3: Results of the Monte Carlo permutation tests for the MV training set and the seasonal environmental variables: sp = spring, so = summer, au = autumn

The seasonal pattern of planktonic dry mass collected in the sediment traps, expressed as the mean dry mass of the three collecting tubes, is shown in Figure 3. The highest dry mass accumulation was observed in May and June, with  $55\%_{ns}$  ( $58\%_{ow}$ ) of the year total in Lake DUD, and  $62\%_{ns}$  ( $53\%_{ow}$ ) in Lake TIE (ns = near shore / ow = open water), whereas data for Lake Tiefer See were missing for October and November. The dry mass produced in DUD in May 2003 was nearly three times the dry mass produced in TIE, whereas in July, September and October the dry mass produced in both lakes was of comparable size in the open water traps. In general, the near-shore sediment traps collected more dry mass than the open water traps: dry mass<sub>ns</sub> was double the dry mass<sub>ow</sub> for June, August, and November in DUD and for June and September in TIE).

The biovolume of planktonic diatom species (DBV<sub>plankton</sub>), expressed as averages of the three tubes within each trap, was highest in May. The DBV<sub>plankton</sub> produced in May in DUD (140.2  $\mu$ m<sup>3</sup><sub>sn</sub> / 68  $\mu$ m<sup>3</sup><sub>ow</sub>) was clearly higher than the DBV<sub>plankton</sub> produced in TIE (24.8  $\mu$ m<sup>3</sup><sub>sn</sub> / 0.8  $\mu$ m<sup>3</sup><sub>ow</sub>). In June, the DBV<sub>plankton</sub> of Lake Dudinghausener See decreased strongly whereas in July and August, it increased again. In September, both the DBV<sub>plankton</sub> of Lake Tiefer See and the open water trap in Lake Dudinghausener See reached their minimum

(Figure 3). While in Lake Tiefer See, until September  $DBV_{plankton}$  was always higher in the near shore trap, in Lake Dudinghausener See  $DBV_{plankton}$  of the open water trap was higher than that of the shore near trap in May, September and October. For lake TIE the samples of October and November were lost.



Figure 5: DCA plot of the species found in the tubes of the sediment traps of Lake Dudinghausener See. First number: 1- shore near trap, 2 - open water trap, second number: month when the trap was emptied, third number: year (3: 2003, 4: 2004). As each trap had three tubes, every trap is represented three times. The samples of the surface sediment (sed) were collected in November 2003 around the traps (1 - shore near, 2 - open water, 3 - year trap), and defined as passive samples.

Over the entire season 156 and 163 taxa were found in DUD and TIE respectively, 27 (29) of them were planktonic. The main planktonic species were *Stepanodiscus alpinus Cyclotella ocellata*, *Stephanodiscus minutulus*, *Cyclotella radiosa*, *Asterionella formosa*, and *Aulacusaira granulata* (Figure 4). On average 47 ( $\pm$ 10) taxa were found per tube each month in DUD, in TIE 59 ( $\pm$ 5). Within one month, individual species abundance differed by 10% or more between the three tubes of one sediment trap (e.g.,*Stephanodiscus minutulus*, trap 1, May 2003: first tube 55%, second tube 31%, third tube 51%).

In both lakes, the spring and autumn diatom assemblages found in the sediment traps were dominated by Stephanodiscus minutulus (Figure 4). The relative abundance of S. minutulus varied strongly between the months in DUD, whereas in TIE it was relative constant. Other important planktonic taxa in spring were Cyclotella ocellata, Fragilaria crotonensis and S. aplinus (DUD) and C. comensis, C. krammeri and S. alpinus (TIE). In summer, C. ocellata (June), Fragilaria crotonensis (July) and Asterionella formosa (September) were highly dominant in Lake Dudinghausener See (Figure 4 upper panel), whereas in Lake Tiefer See, St. minutulus (June), Aulacoseira subarctica (July) and C. comensis (August) were the dominant taxa. In autumn, C. krammeri, C. comensis, St. minutulus and St. alpinus were dominant in Lake Tiefer See, and C. ocellata together with St. minutulus were the main planktonic species in Lake Dudinghausener See. The high relative abundances of Asterionella formosa and Fragilaria crotonensis during the summer in Lake Dudinghausener See were neither reflected in the surface sediment nor in the sediment trap which collected over the entire season. A. formosa had a relative abundance of 42% in September, when only ~15% of the annual biomass production of Dudinghausener See took place. Benthic taxa on average were represented within the traps with less than 10%. The most abundant benthic taxon was Achnanthes minutissima, which reached a maximum in the May trap in DUD. In the surface sediment samples of TIE, S. minutulus seems to be underrepresented.

Using a DCA, four different groups of diatom assemblages were detectable in the sediment trap samples of DUD throughout the year: Samples of September (*ns* and *ow*) and July (only *ow*) were located on the left of the resulting DCA plot, those of March (winter trap) on the right, June and November samples on the top right, close to August (*ns*), and the remaining samples at the bottom (Figure 5). Furthermore, a separation between near shore (1-) and open water (2-) samples was visible within the groups. The surface sediment samples (plotted as passive samples (weight = 0.001) within the DCA using CANOCO 4.5) all lie in the same region as the sediment trap samples from May-June, August and October-November (from the open water region). The samples of the year trap (treated as passive samples) lie directly in the middle of all samples. This separation was not as obvious in Lake Tiefer See, nevertheless, the same pattern was observed. The samples within a DCA of Lake Tiefer See from May were clearly distinct from all the other samples, which were mostly similar.

taxon	code	non-zero	Hill's N2	<b>p</b> <sub>spring</sub>	<b>p</b> <sub>summer</sub>	<b>p</b> <sub>autumn</sub>	F <sub>spring</sub>	F <sub>summer</sub>	F <sub>autumn</sub>	opt <sub>average</sub>	opt <sub>spring</sub>	opt <sub>summer</sub>	opt <sub>autumn</sub>
Stephanodiscus minutulus (agg.)	XXG974	76	51.0	0.322	0.960	0.284	1.15	0.02	1.25	81.40	63.28	76.26	90.43
Cyclotella radiosa	XXG970	73	33.3	0.184	0.364	0.605	1.72	1.04	0.51	83.68	79.31	81.81	77.40
Achnanthes lanceolata (agg.)	XXG978	64	29.3	0.060	0.000	0.000	3.10	9.94	11.60	54.42	54.45	49.36	47.73
Navicula cryptotenella	XXG979	47	29.1	0.691	0.006	0.017	0.35	5.00	4.01	65.50	66.87	57.95	59.81
Stephanodiscus alpinus (agg.)	ST009A	67	26.4	0.678	0.052	0.140	0.30	2.57	1.96	71.66	73.63	57.60	74.83
Fragilaria crotonensis	XXG985	56	25.7	0.082	0.017	0.023	2.79	3.98	4.46	56.58	53.94	51.82	54.33
Navicula tripunctata	NA095A	37	25.0	0.238	0.041	0.074	1.46	3.21	2.91	58.08	56.88	51.51	57.33
Navicula cryptotenella	XXG982	71	24.3	0.176	0.000	0.000	1.78	16.32	11.45	53.85	57.67	44.13	47.97
Achnanthes conspicua	AC023A	45	23.4	0.245	0.003	0.035	1.42	5.80	3.90	59.69	57.34	53.45	55.18
Geisleria cummerowi (agg.)	NA128A	53	22.5	0.164	0.000	0.000	1.91	16.66	10.51	51.57	56.16	42.79	44.70
Fragilaria brevistriata	XXG993	74	20.3	0.065	0.115	0.830	2.71	2.35	0.12	95.28	85.73	102.68	74.91
Cocconeis neothumensis	CO067A	59	20.3	0.022	0.000	0.000	3.74	14.49	17.92	48.35	52.53	40.46	39.42
Aulacoseira granulata	XXG988	62	20.1	0.988	0.305	0.110	0.00	1.18	2.42	95.73	67.78	96.31	107.39
Achnanthes clevei (agg.)	AC006A	59	19.9	0.051	0.000	0.000	2.97	14.64	16.69	47.90	52.55	39.65	39.83
Asterionella formosa	AS001A	72	19.8	0.396	0.005	0.052	0.95	5.10	2.89	72.47	64.67	68.11	76.00
Fragilaria construens (agg.)	FR002A	70	19.8	0.919	0.453	0.130	0.04	0.72	2.20	80.39	66.14	91.72	59.21
Navicula cari	NA051A	51	19.2	0.008	0.000	0.000	6.03	10.53	16.68	46.73	48.09	41.93	39.53
Amphora inariensis	AM013A	49	19.2	0.001	0.000	0.000	6.61	18.58	16.96	42.24	44.35	34.49	37.35
Gomphonema olivaceum (agg.)	XXG939	23	18.7	0.184	0.006	0.027	1.72	6.37	4.23	53.54	53.91	44.24	50.44
Cyclostephanos dubius	XXG919	67	18.7	0.303	0.009	0.100	1.17	5.71	2.54	111.26	80.86	123.34	108.82
Stephanodiscus neoastraea	ST022A	61	18.5	0.028	0.047	0.196	3.76	3.00	1.67	102.22	95.55	90.57	104.24
Fragilaria pinnata (agg.)	XXG995	74	18.2	0.388	0.787	0.729	0.97	0.16	0.23	77.69	74.72	71.69	72.73
Cyclotella ocellata	XXG991	59	16.6	0.336	0.052	0.053	1.11	2.91	2.88	64.43	59.96	53.80	73.78
Nitzschia palea	XXG976	44	16.4	0.003	0.320	0.283	5.62	1.16	1.28	98.50	92.18	90.24	96.99
Navicula pupula	XXG930	31	15.4	0.065	0.003	0.001	3.08	5.76	7.86	54.28	50.19	54.83	43.01
Fragilaria ulna	XXG922	78	15.2	0.018	0.009	0.067	4.81	5.71	3.04	115.23	95.12	123.40	112.11
Fragilaria capucina var. vaucheriae	FR007A	43	15.1	0.113	0.144	0.282	2.17	1.94	1.29	85.70	66.15	83.51	92.80
Navicula scutelloides	NA028A	24	14.8	0.020	0.001	0.003	3.79	9.80	7.51	47.68	52.27	38.19	42.89
Epithemia adnata	XXG951	27	14.7	0.388	0.001	0.064	0.97	6.61	2.72	83.42	73.12	91.89	66.37
Fragilaria capucina (agg.)	FR009A	43	14.5	0.194	0.406	0.144	1.71	0.84	2.07	99.46	85.00	94.67	108.39
Gomphonema parvulum (agg.)	XXG938	28	14.2	0.001	0.012	0.067	6.93	4.53	2.78	118.96	100.90	122.22	113.22
Nitzschia dissipata	XXG928	30	13.9	0.578	0.026	0.107	0.56	3.92	2.45	60.78	66.05	49.07	55.97
Achnanthes exigua (agg.)	AC008A	24	13.8	0.001	0.001	0.000	9.40	6.91	11.16	41.63	39.40	41.99	36.02
Stephanodiscus hnatzschii (agg.)	XXG973	55	12.8	0.001	0.000	0.000	7.69	33.45	20.42	170.92	103.81	203.48	171.71
Fragilaria capucina var. mesolepta	FR009B	21	12.5	0.260	0.039	0.047	1.35	3.77	3.53	120.50	85.43	124.92	125.71
Achnanthes minutissima (agg.)	XXG997	70	12.4	0.000	0.008	0.000	11.77	5.86	17.93	44.52	41.59	48.07	36.21
Encyonema cespitosum	CM070A	14	12.1	0.850	0.068	0.171	0.10	2.64	1.77	69.58	64.15	72.31	64.57
Navicula reinhardtii	NA026A	14	11.9	0.017	0.001	0.008	3.98	8.65	4.99	44.67	47.11	36.64	39.22
Cyclotella comensis (agg.)	XXG998	31	11.5	0.028	0.002	0.000	4.20	8.25	12.53	42.70	46.60	39.24	35.57
Navicula cryptocephala	NA007A	17	11.2	0.302	0.000	0.029	1.22	12.86	3.47	77.16	61.04	84.50	59.47

Table 4: Significant response to seasonal TP for the most abundant taxa within the MV training set: bold = selected values.

In both lakes, differences between the sediment traps located close to the shore and those of the open water region were visible. In general, *C. ocellata, F. crotonensis* and *Aulacoseira subarctica* had higher relative abundances in the sediment traps close to the shore (except in June) (Figures 4 and 5). This difference was significant when tested using a mixed effect model (*C. ocellata* p = 0.002, t = 2.707, n = 81; *A. subarctica* p = 0.046, t = 1.772, n = 81, *F. crotonensis* p = 0.018, n = 81, t = 2.459, n = 81) using lake and tube number (always three replicates, Figure 1) as random factor. The relative abundances of *St. minutulus* (p = 0.000, t = 4.399, n = 81) and *St. alpinus* (p = 0.132, t = 1.808, n = 81) were higher in the open water region as could be expected for planktonic taxa, whereas the relative abundances of *St. alpinus* were not significantly different between near shore and open water samples. The relative abundance of *Achnanthes minutissima*, a typical benthic taxon, was higher in the sediment trap of the open water region (Figure 4), but this difference was not significant.

The winter trap sample of DUD was separated from all other samples in the DCA (Figure 5, right side). This was due to a high relative abundance of *S. alpinus*, which accounted for 26.8%, much more than the yearly average. In lake TIE the highest abundance for *S. alpinus* was found in the winter trap as well (Figure 4).



Figure 6: Smoothing functions of the seasonal GAM's for *Stephanodiscus alpinus* (upper four panels) and *Fragilaria brevistriata* (lower four panels).

The taxa inventory was similar in both lakes but abundances varied strongly (Figure 4). *Cyclotella comensis* on average had a significantly higher relative abundance within Lake Tiefer See than in Lake Dudinghausener See and *C. ocellata* vice versa. In both lakes, the same seasonal trend for both species was visible, but it was less distinct in Lake Tiefer See.

When computing a canonical correspondence analysis (CCA) on the sediment trap species compositions and the environmental variables found in the lakes, all environmental variables shown in Figure 2 (Table 2) except REDOX explained a significant amount of variation in the species data. Highest F values were reached by TP (25.25), NO<sub>2</sub> (16.57) and conductivity (16.22).

The CCA for the MV surface sediment diatom data set and seasonal values of the environmental variables using Monte Carlo permutations tests showed that  $TP_{summer}$  (F = 2.26) and  $TP_{autum}$  (F = 2.62) were the most important TP fractions, while  $TP_{spring}$  was not significant. In this analysis water depth was identified as most important variable explaining variation in diatom assemblages (Table 3).

Table 5: Comparison of the model performance of the seasonal WAs of the MV training set. CV = coefficient of variance.

	mean TP	sd TP	с٧	R2	Mean errro	Max error	RMSE	R2 <sub>boot</sub>	Mean errro <sub>boot</sub>	$\textit{Max error}_{\textit{boot}}$	$\textbf{RMSEP}_{boot}$
WA <sub>av</sub>	116.74	125.25	1.07	0.4682	-6.24E-16	0.7227	0.2772	0.2035	-0.0152	0.7448	0.3545
WA <sub>sp</sub>	90.86	71.14	0.78	0.3752	-1.29E-15	0.7635	0.2691	0.1673	-0.0123	0.8436	0.3385
WA <sub>su</sub>	132.60	195.38	1.47	0.5390	-1.03E-15	0.7555	0.3020	0.2761	-0.0237	0.8211	0.3984
WA <sub>au</sub>	126.77	140.83	1.11	0.4343	-8.93E-16	0.8963	0.3298	0.1848	-0.0091	1.1131	0.4163
WA <sub>season</sub>	116.74	125.25	1.07	0.5586	-5.13E-16	0.6461	0.2525	0.2327	-0.0115	0.7366	0.3334

When the response of species in the MV data set to seasonal TP concentrations (spring, summer, autumn and average) was explored using a generalized additive model (GAM), only 63 out of 270 considered taxa showed a significant response to spring TP (Figure 6). Ninety-three taxa were most strongly related to summer TP and 99 taxa to autumn TP. Only 15 Taxa were best correlated with the average TP (Table 4). The seasonal response differed among the most common taxa, with *Stephanodiscus hantzschii* and *Cyclotella ocellata* being best correlated with the average TP, while *Asterionella formosa* and *Fragilaria crotonensis* showing significant responses to summer TP (Table 4).

When using the  $WA_{seasonal}$  approach to infer the average TP, as detailed in the methods section, almost all performance parameters for inference models showed better values than the conventional models (Table 5).

# Discussion

The question of how well the environmental variables of a lake are correlated with the species composition found in the surface sediments is fundamental for the quality of transfer functions. Hereby, diatom community structure follows strongly the changes in environmental variables. This has been shown for several studies comparing diatom associations between lakes (e.g., Battarbee et al. 1999, Reid 2005, Hassan et al. 2006, Kirilova et al. 2008), but rarely was discussed regarding diatom associations within a lake according to seasonal changes. An exception is the work of Hausmann and Pienitz (2007), who discussed the influence of ice breakup dates for spring diatom associations and DOC for summer diatom composition and the work of Kauppila et al. (2002), who developed an autumn TP diatom transfer function. As nutrients influenced the phytoplankton growth (inclusive diatoms) over the whole growing season, a detailed analysis of these seasonal effects of single nutrients might improve the quality of transfer functions.

In this study a high species turnover throughout the year was detected which was mainly correlated with changes in TP. Nevertheless, other variables like temperature, sun shine length and pH might be important, too, but trends in these variables are difficult to capture when they have not been measured continuously. Data loggers may provide more accurate estimations of these high variable variables.

# Seasonal development

The variation of dry mass collected over the year likely was not mainly caused by diatoms, because a large amount of biomass is produces by blue and green algae, which bloom after the spring diatom bloom (e.g. Reynolds 1984) (Figure 2 upper and lower panels). The differences of dry mass between the seasons and lakes showed a good accordance with the development of TP and TN.

The high planktonic diatom biovolume ( $DBV_{plankton}$ ) of July and August was not caused by different cell sizes, as the high abundance of the large *S. alpinus* in June did not lead to a higher value of  $DBV_{plankton}$ . The reason for high summer biovolumes rather was

simply a high total number of frustules per volume. Therefore, it is likely that the fact that the sediment samples around the traps were not only influenced by spring diatom associations, but also summer assemblages, was caused by the high  $DBV_{plankton}$  in July, August and October.

The low relative abundance of *A. formosa* in the surface sediments (3 %) despite its high relative abundances in single-month sediment traps was likely a result of the varying diatom biomass production in the lake through out the seasons. The same effect is visible concerning *F. crotonensis*: The high relative abundance in July had only a minor influence in the resulting relative abundance in surface sediments and the year trap in Lake Dudinghausener See. As *F. crotonensis* was found in higher abundances than *A. formosa* throughout the entire season, the relative abundance of *F. crotonensis* in the year trap was consequently higher. Therefore, the diatom association found in the sediment reflects the development of species compositions over the whole year (e.g. Battarbee et al. 2001)



Figure 7: Measured mean TP values plotted against inferred TP values using the optima estimated based on the mean TP values (WA, filled dots) and optima based on the seasonal analysis (WA<sub>seasonal</sub>, open dots). Left panel: inferred TP without any cross validation. Right panel: Using bootstrap method to infer TP.

Total phosphorus (TP) was the most important variable explaining the species composition in the sediment traps. Therefore, it appears that the seasonal patterns in diatom assemblages on our study sites depended highly on the changes in nutrient availability. Single species found in the sediment therefore did not depend on the average TP or spring TP, instead they have their own seasonal TP optimum which they depend on. This was shown for the MV data set, too. However, for the MV data set only three measured times were available.

The result the maximum water depth of the lakes within the MV training set influenced the results significant (and not the area of the lakes) might be a hint, that processes of Taphonomie (e.g. Cohen 2003) influenced the species composition in the surface sediment additionally to the environmental variables that control the phytoplankton and phytobenthos (e.g. Shemesh et al. 1989, Barker et al. 1990, Barker et al 1994).

# WAseasonal

One problem in comparing the five WA models is that they predict different things: The single season models for spring, summer and autumn predict  $TP_{spring}$ ,  $TP_{summer}$ , and  $TP_{autumn}$ , which have different mean TP values and standard deviations (Table 5, column 2 and 3 untransformed values) and therefore different coefficient of variance (CV). Thus, a direct comparison of the model performance was only possible for WA<sub>av</sub> and WA<sub>seasonal</sub>, as both predict mean TP values. Here, performance parameters of WA<sub>seasonal</sub> were all better than those of WA<sub>av</sub>.

Concerning the RMESP, the observed improvement achieved by the WA<sub>seasonal</sub> was not yet high, though. However, in combination with the sediment traps it became obvious, that by measuring the environmental variables only three times over the growing season, the real TP optimum in this data set could be found not for every species. Sampling environmental data more frequently of course is time intensive, but in terms of environmental reconstruction it seems to be necessary to understand species distributions more detailed. Problematic was here the differences found between the species composition within the sediment traps and the surface sediment in Lake Tiefer See (Figure 4). The high relative abundance of S. minutulus and S. alpinus over the year were not reflected in the surface sediment. This general problem must be analysed more detailed in the future. The here found differences between sediment traps and surface sediment species composition were already described before by several authors (e.g., Rautio et al. 2000, Kattel et al. 2007). In combination with the results of Bradshaw and Anderson (2003), who found that abundances of living Cyclostephonos dubius were highly correlated with nitrate whereas sediment found Cyclostephonos dubius were highly correlated with TP but not with nitrate, the question arose, how single taxa relate to the environmental conditions of a lake. Especially when dealing with questions of climate change (e.g., Hausmann and Pienitz 2007) this relationship has to be analysed carefully.

In conclusion of the here found results, it can be assumed that the WA<sub>seasonal</sub> might be able to improve transfer functions for lowland data sets, when the related environmental variables are collected monthly over the whole season, and thus incorporate more information about the seasonal specific species optima. These results are applicable for WA-PLS and ML regression, too. As these two methods usually perform better than the simple WA,, here further error reductions can be expected.

# Acknowledgments

This work was supported by the by the German Federal Environmental Foundation. We would like to thank Unn Klare for helping with the language and giving valuable comments on the manuscript, Fred Brezezinski, Gunnar Hirte, Jens Niederstrasser and Klaus Hennenberger for assistance when changing the tubes of the traps.

# Literature

- Adler S (2009) paltran: WA, WA-PLS, MW and POM for paleolimnology. R package version 1.3-0. http://CRAN.R-project.org/package=paltran.
- Adler S, Hübener T (2007) Spatial variability of diatom associations in surface lake sediments and its implications for transfer function. Journal of Paleolimnology 37: 573-590.
- Barker P, Gasse F, Roberts N, Taieb M (1990) Taphonomy and diagenesis in diatom assemblages; a later Pleistocene palaeoecological study from lake Magadi. Hydrobiologia 214: 267-272.
- Barker PA, Roberts N, Lamb HF, van der Kaars S, and Benkaddour A (1994) Interpretation of Holocene lake level change from diatom assemblages in Lake Sidi Ali, Middle Atlas Marocco. Journal of Paleolimnology. 12: 223-234.
- Bates D, Maechler M (2009) lme4: Linear mixed-effects models using S4 classes. R package version 0.999375-31.http://CRAN.R-project.org/package=lme4.
- Battarbee RW, Anderson NJ, Jeppesen E, Leavitt PR (2005) Combining palaeolimnological and limnological approaches in assessing lake ecosystem response to nutrient reduction Freshwater Biology 50: 1772–1780.
- Battarbee RW, Jones VJ, Flower RJ, Cameron NG, Bennion H, Carvalho L, Juggins S (2001). Diatoms. In Smol JP, Birks HJB, Last WM (eds), Tracking environmental change using lake sediments. Volume 3: Terrestrial, Algal and Siliceous Indicators. Kluwer, Dordrecht: 155–202.
- Battarbee RW, Kneen MJ (1982). The use of electronically counted microspheres in absolute diatom analysis. Limnology and Oceanography 27: 184–188.
- Battarbee, RW (1999) The importance of palaeolimnology to lake restoration. Hydrobiologia, 395/396: 149-159.
- Bennion H (1995) Surface-sediment diatom assemblages in shallow, artificial, enriched ponds, and implications for reconstructing trophic status. Diatom Res 10:1–19.

Birks HH, Birks HJB (2006) Multi-proxy studies in palaeolimnology. Veget Hist Archaeobot 15: 235–251.

- Birks HJB (1995) Quantitative Palaeoenvironmental reconstructions. In: Maddy D, Brew JS (eds) Statistical modelling of quaternary science data. Cambridge,pp 161–255.
- Birks HJB (1998) Numerical tools in palaeolimnology-Progress, potentialities, and problems. Journal of Paleolimnology 20:307–332.
- Birks HJB, Line JM, Juggins S, Stevenson AC and ter Braak CJF (1990) Diatoms and pH reconstruction. Philosophical Transactions of the Royal Society of London; Series B, 327: 263–278.
- Bradshaw EG, Anderson NJ (2003). Environmental factors that control the abundance of Cyclostephanos dubius (Bacillariophyceae) in Danish lakes, from seasonal to century scale, European Journal of Phycology 38: 265-276.
- Bradshaw EG, Anderson NJ, Jensen JP, Jeppesen E (2002) Phosphorus dynamics in Danish lakes and the implications for diatom ecology and palaeoecology. Freshwater Biol 47:1963–1975.
- Cameron NG (1995) The representation of diatom communities by fossil assemblages in a smal acid lake. Journal of Paleolimnology 14: 185-223.
- Chen G, Dalton C, Leira M, Taylor D (2008) Diatom-based total phosphorus (TP) and pH transfer functions for the Irish Ecoregion Journal of Paleolimnology 40:143–163.
- Cohen AS (2003) Paleolimnology The History and Evolution of Lake Systems. Oxford University Press, Oxford.
- Dreßler M, Selig U, Dörfler W, Adler S, Schubert H, Hübener T (2006) Environmental changes and the migration period in Europe by the example of Lake Dudinghausen (northern Germany). Quaternary Research 66: 25-37.
- Efron B. (1982) The jackknife, the bootstrap and other resampling plans. SIAM, Philadelphia.
- Flower RJ (1990) Seasonal changes in sedimenting material collected by high aspect ration sediment traps operated in a holomictic eutrophic lake. Hydrobiologia 214: 311-316.
- Hassan G, Espinosa MA, Isla FI (2006) Modern diatom assemblages in surface sediments from estuarine systems in the southeastern Buenos Aires province, Argentina. Journal of Paleolimnology 35:39–53.
- Hastie T, Tibshirani R (1990) Generalized additive models. Chapman and Hall, London.
- Hausmann S, Pienitz R (2007) Seasonal climate inferences from high-resolution modern diatom data along a climate gradient: a case study. Journal of Paleolimnology 38: 73-96.
- Hill MO, Gauch HG (1980) Detrended correspondence analysis, an improved ordination technique. Vegetatio 42: 47-58.
- Hübener T, Adler S, Selig U. (2001) Nutzung einer Diatomeen Gesamtphosphat Korrelation zur Trophieindikation. Erste Ergebnisse aus mecklenburgischen Seen. RMB 9: 37-45.
- Hübener T, Dreßler M, Schwarz A, Langner K, Adler S (2008) Dynamic adjustment of training sets ('movingwindow' reconstruction) by using transfer functions in paleolimnology - a new approach. Journal of Paleolimnology 40: 79-95.
- Hutchinson GE (1961) The paradox of the plankton. Am. Nat. 95: 137-146.
- Jongman RHG, ter Braak CJF, van Tongeren OFR (1995) Data Analysis in community and landscape ecology. Cambridge University Press, Cambridge.
- Kalbe L, Werner H (1974). Das Sediment des Kummerower Sees. Untersuchungen des Chemismus und der Diatomeenflora. Internationale Revue der Gesamten Hydrobiologie 596: 755–782.

- Kattel GR, Battarbee RW, Mackay A, Birks HJB (2007). Are cladoceran fossils in lake sediment samples a biased reflection of the communities from which they are derived? Journal of Paleolimnology 38:157– 181.
- Kauppila T, Moisio T, Salonen VP 2002. A diatom-based inference model for autumn epilimnetic total phosphorus concentration and its application to a presently eutrophic boreal lake. Journal of Paleolimnology 27: 261–273.
- Kirilova EP, Bluszcz P, Heiri O, Cremer H, Ohlendorf C, Lotter AF, Zolitschka B (2008) Seasonal and interannual dynamics of diatom assemblages in Sacrower See (NE Germany): a sediment trap study. Hydrobiologia 614:159–170.
- Kirilova EP, Bluszcz P, Heiri O, Cremer H, Ohlendorf C, Lotter AF, Zolitschka B (2008) Seasonal and interannual dynamics of diatom assemblages in Sacrower See (NE Germany): a sediment trap study. Hydrobiologia 614:159–170.
- Köster D, Pienitz R (2006) Seasonal diatom variability and paleolimnological inferences a case study. Journal of Paleolimnology 35: 395–416.
- Krammer K (1997a) Die cymbelloiden Diatomeen. Eine Monographie der weltweit bekannten Taxa, Teil 1 Allgemeines und Encyonema Part. Bibliotheca Diatomologica,Vol. 36. Cramer Berlin, Stuttgart.
- Krammer K (1997b) Die cymbelloiden Diatomeen, Eine Monographie der weltweit bekannten Taxa, Teil 2 Encyonema part., Encyonopsis and Cymbellopsis. Bibliotheca Diatomologica, Vol. 37. Cramer, Berlin, Stuttgart.
- Krammer K (2000) The Genus Pinnularia. In Lange-Bertalot, H. (ed.), Diatoms of Europe, Vol. 1. A.R.G. Gantner Verlag, Ruggel.
- Krammer K (2002) Cymbella. In Lange-Bertalot, H. (ed.), Diatoms of Europe, Vol. 3. A.R.G. Gantner Verlag, Ruggel.
- Krammer K (2003) Cymbopleura, Delicata, Navicymbula, Gophocymbelloides, Afrocymbella. In Lange-Bertalot, H. (ed.), Diatoms of Europe, Vol. 4. A.R.G. Gantner Verlag, Ruggel.
- Krammer K, Lange-Bertalot H (1986) Süßwasserflora von Mitteleuropa, Bacillariophyceae 2/1. In Ettl H, Gerloff J, Heinig H, Mollenhauer D (eds), Süsswasserflora von Mitteleuropa, Vol. 2, no. 1. Gustav Fisher Verlag, Stuttgart.
- Krammer K, Lange-Bertalot H (1988). Süßwasserflora von Mitteleuropa, Bacillariophyceae 2/2. In Ettl H, Gerloff J, Heinig H, Mollenhauer D (eds), Süsswasserflora von Mitteleuropa, Vol. 2, no. 2. Gustav Fisher Verlag, Stuttgart.
- Krammer K, Lange-Bertalot H (1991a). Süßwasserflora von Mitteleuropa, Bacillariophyceae 2/3. In Ettl H, Gerloff J, Heinig H, Mollenhauer D (eds), Süsswasserflora von Mitteleuropa, Vol. 2, no. 3. Gustav Fisher Verlag, Stuttgart.
- Krammer K, Lange-Bertalot H (1991b) Süßwasserflora von Mitteleuropa, Bacillariophyceae 2/4. In Ettl H, Gerloff J, Heinig H, Mollenhauer D (eds), Süsswasserflora von Mitteleuropa, Vol. 2, no. 4. Gustav Fisher Verlag, Stuttgart.
- Lange-Bertalot H (2001): Navicula sensu stricto, 10 genera separated from Navicula sensu lato, Frustulia.- In Lange-Bertalot H. (ed.), Diatoms of Europe, 2, A.R.G. Gantner, Ruggell, Liechtenstein.
- Lange-Bertalot H, Moser G (1994) Brachysira, Monographie der Gattung. Bibliotheca Diatomologica, Vol. 29. Cramer, Berlin, Stuttgart.
- Lotter AF, Birks HJB, Hofmann W (1998) Modern diatom, cladocera, chironomid, and chrysophyte cyst assemblages as quantitative indicators for the reconstruction of past environmental conditions in the Alps. II. Nutrients. Journal of Paleolimnology 19: 443-463.

- Marchetto A, Musazzi S (2001) Comparison between sedimentary and living diatoms in Lago Maggiore (N. Italy): implications of using transfer function. J.Limnology 60: 19-26.
- Miettinen JO (2003) A diatom-total phosphorus transfer function for freshwater lakes in southeastern Finland, including cross-validation with independent test lakes. *Boreal Env. Res.* 8: 215–228.
- Oksanen J, Kindt R, Legendre P, O'Hara B, Simpson GL, Solymos P, Stevens MHH and Wagner H (2009) vegan: Community Ecology Package. R package version 1.15-2. <u>http://CRAN.R-project.org/package=vegan</u>.
- Padisak J, Scheffler W, Kasprzak P, Koschel R, Krienitz L (2003). Interannual variability in the pytoplankton composition of lake Stechlin (1994-2000). Arch. Hydrobiol. Spec. Issues Advanc. Limnol. 58: 101-133.
- Pinheiro JC, Bates DM (2000) Mixed-effects models in S and S-plus. Statistics and Computing, Springer, New York.
- R Development Core Team (2009). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0, URL <u>http://www.R-project.org</u>.
- Raubitschek S, Lücke E, Schleser GH (1999) Sedimentation patterns of diatoms in Lake Holzmaar, Germany (on the transfer of climate signals to biogenic silica oxygen isotope proxies). Journal of Paleolimnology 21: 437-448.
- Rautio M, Sorvari S, Korhola A (2000) Diatom and crustacean zooplankton communities, their seasonal variability and representation in the sediments of subarctic Lake Saanajärvi. J.Limnol. 59: 81-96.
- Reid M (2005) Diatom-based models for reconstructing past water quality and productivity in New Zealand lakes. Journal of Paleolimnology 33: 13–38.
- Reynolds CS (1984) The Ecology of Freshwater Phytoplankton. Cambridge University Press, Cambridge.
- Schwarz A (2005) Rekonstruktion der Entwicklung des Schulzensees und des Tiefen Sees (Mecklenburg-Vorpommern) seit dem Spätglazial mittels Diatomeenanalyse unter besonderer Berücksichtigung der Trophiegeschichte. Greifswalder Geographische Arbeiten 41: 1-166.
- Selig U, Hübener T, Heerkloss R, Schubert H (2004) Vertical gradient of nutrients in two dimictic lakes influence of phototrophic sulfar bacteria on the nutrient balance. Aquatic Science 66: 247-256.
- Selig U, Leipe T (2008): Stratigraphy of nutrients and metals in sediment profiles of two dimictic lakes in North-Eastern Germany. Environmental Geology 55:1099-1107.
- Selig U, Leipe T, Dörfler W (2007) Paleolimnological Records of Nutrient and Metal Profiles in Prehistoric, Historic and Modern Sediments of Three Lakes in North-eastern Germany. Water, Air, and Soil Pollution 184: 183-194.
- Selig,U, Michalik M, Hübener T (2006) Assessing P status and trophic level of two lakes by speciation of particulate phosphrus forms. J.Limnol. 65: 17-26.
- Shemesh A, Burkle LH, Froelich PN (1989) Dissolution and preservation of Antarctic diatoms and the effect of sediment thanatocoenoses. Quat. Res. 31: 288-308.
- ter Braak CJF (1986) Canonical Correspondence Analysis: a new eigenvector technique for multivariate direct gradient analysis. Ecology 67: 1167-1179.
- ter Braak CJF, Juggins S (1993) Weighted averaging partial least squares regression (WA-PLS): an improved method for reconstructing environmental variables from species assemblages. Hydrobiolgia 269/270: 485–502.
- ter Braak CJF, Śmilauer P (2002) CANOCO Reference manual and CanoDraw for windows user's guide. Software for canonical community ordination (version. 4.5), Microcomputer Power, Ithaca, USA.

- ter Braak CJF, van Dam H (1989) Inferring pH from diatoms: a comparison of old and new calibration methods. Hydrobiologia 178: 209-223.
- Utermöhl H (1959) Zur Vervollkommnung der quantitativen Phytoplankton Methodik. Mitt. Int. Ver. Theor. Angew. Limnol. 9.

Wood S (2006) Generalized Additive Models - An Introduction with R, Chapman and Hall/CRC, London.

Yet another transfer function: Are multinomial, class based transfer functions in paleolimnology an alternative to WA-PLS regression?

S. Adler<sup>1</sup>, N.J. Anderson<sup>2</sup> and A.F. Lotter<sup>3</sup>, T. Hübener<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Biodiversity University of Rostock Wismarsche Str. 8 18057 Rostock Germany e-mall: <u>sven.adler2@uni-rostock.de;</u> thomas.huebener@uni-rostock.de

<sup>2</sup>Department of Geography Loughborough University Loughborough LE11 3TU. U.K.

<sup>3</sup>Institute of Environmental Biology Faculty of Science, Utrecht University Laboratory of Palaeobotany and Palynology Budapestlaan 4 NL-3584 CD Utrecht The Netherlands

#### Abstract

A new method of creating transfer functions was developed based on multinomial regression (**m**ultinomial transfer function MTF) and compared with WA-PLS regression. For this purpose diatom abundance data were converted into abundance classes. Then, a GLM was modelled for each taxon and abundance class. The resulting probability functions were used to predict Total Phosphorous (TP) for the samples of the training sets and additional independent transect samples.

Five different training sets were used to compare both approaches. When testing the taxa occurring in the training sets, it was found that only about 30% of all taxa showed a significant response to TP, only about 10% were distributed unimodally. Thus, techniques that can deal with skewed species distribution and the occurrence of rare taxa were needed.

Comparing both approaches, the RMSE for different training sets was lower for the MTF than for WA-PLS, the related R<sup>2</sup> was higher. The residuals showed a less distinctive trend for each training set using MTF instead of WA-PLS. Using Leave-One-Out as cross validation method, for three out of five training sets the RMSEP<sub>LOO</sub> was higher using MTF than for WA-PLS. These differences turned out to bee not significant using a randomization test. When predicting TP for the transect samples, either both approaches performed equally or the MTF had lower RMSEP<sub>trans</sub>. As the MTF approach only uses class data this better performance of the MTF indicates that the complex information of the diatom abundance data as used by the classical WA-PLS might not be needed to infer TP levels.
## Introduction

The sensitivity of diatoms (Bacillariophyceae) to changing environmental conditions has often been demonstrated (e.g., Battarbee 2001) and led to their widespread use as indicators in both marine and freshwaters (e.g., Weckström 2006). As their silica cell wall generally is well preserved after death, diatoms are extensively used in paleolimnology (e.g., Bennion 1995, Birks 1998, Lotter and Bigler 2000, Smol and Cumming 2000, Köster et al. 2004) and can play an important role in the definition of goals for lake restoration (Anderson 2000, EU 2000, Reid 2005, Hübener et al. 2009). Much of the relevance of diatoms for applied studies has been established during the debate about lake acidification and resulted in the quantification of the relationships between pH and species abundances and the development of transfer functions (ter Braak and van Dam 1989, Birks et al. 1990). After the initial work on diatom-pH relationships, models were developed for salinity and phosphorus, too. The modelling of species responses to environmental variables has been done using a range of different calibration methods (ter Braak and van Dam 1989, Birks 1998, Vasko et al. 2000, Racca et al. 2001, Korhola et al. 2002). First, the relationship between the environmental parameters (e.g., Total Phosphorus, TP) and the biotic response is modelled; second, this model is applied at biotic assemblages found in sediment cores to infer environmental parameters in the past (Birks 1995).

The quality of the predicted environmental parameters depends on the training set and on the calibration method itself (e.g., Adler and Hübener 2007, Battarbee et al. 2008, Holden et al. 2008). The main challenge is finding enough modern analogues within the training set and a calibration model which accurately reflects the species optimum in relation to the considered environmental variable. Several studies analysed the quality of different transfer functions and their advantages and disadvantages (Köster et al. 2004, Battarbee et al. 2008, Adler and Hübener 2007, Hübener et al. 2008). During the development of transfer functions, WA-PLS regression (ter Braak and Juggins 1993) was found to be the most practicable calibration method, especially when dealing with diatoms. WA-PLS regression calculates "updated species optima" (ter Braak and Juggins 1993) in comparison to WA optima (ter Braake and van Dam 1989). These updated optima should be able to account for skewed species responses to different environmental variables and solve the problems of over- and underestimation of species optima of the simple WA (ter Braak and Juggins 1993). Methods that tried to improve the predictive power of WA and WA-PLS in terms of selecting an optimal training set are the local weighted WA regression (Battarbee et al. 2005) and the moving window approach (Hübener et al. 2008). Completely different approaches are based on Bayesian statistics (e.g., Vasko et al. 2000, Holden et al. 2008) or Artificial Neural Networks (e.g., Racca et al. 2001). Especially the approaches based on Bayesian statistics in combination with high computational power might be a good alternative to the standard tools as the uncertainty of the prediction can be estimated (e.g., Haslet et al. 2006, Holden et al. 2008). Nevertheless, as WA-PLS gave good and reliable results in palaeolinmology, all new and generally more complex approaches must be analysed for their advantages and disadvantage in comparison to the established WA-PLS approach.

Here, the idea of multinomial modelling (Gelman and Hill 2007) was used as an extension of the Generalized Linear Model (McCullagh and Nelder 1989). The species response data were assigned to abundance classes. For each of these classes a binomial response curve was modelled. These response curves then were used to infer Total Phosphorous (TP) levels following the principle of maximum likelihood. The results were compared with those based on the WA-PLS regression. Additional to the classical error parameters of transfer functions, which are based on re-sampling methods (Efron 1982, Birks 1998), diatom samples from transect studies (Adler and Hübener 2007) were used as a really independent test set to evaluate the predictive power of both methods.

## **Study sites**

The training sets used to test the quality of the introduced approach are listed in Table 1. These training sets came from different regions in Europe, initialised by the EDDI-project (Battarbee et al. 2000). All of them were listed to be training sets to reconstruct lake Total Phosphorous (TP) levels, as TP turned out to be the most important environmental variable using Canonical Correspondence Analysis (CCA, ter Braak 1986) or related methods for analysis. The additional MV training set originally contained 389 taxa (Adler and Hübener 2007, Adler and Hübener submitted). To allow a comparison of this training set with the others, taxa classification followed the codes of the EDDI data base (Juggins 2003). This led to merged taxa aggregates and therefore to a reduction of the number of available taxa to 270 for the MV training set.

175

training set / test set	code	lakes/samples	TP[µgL <sup>-1</sup> ]	рН	contributor	examples of related literature
Switzerland	СН	69	5.8-211.0 (41.9)	7.65-8.90 (8.21)	Lotter	Lotter et al. 1998
Denmark	DK	28	27.0-1189 (230)	7.85-9.45 (8.40)	Anderson	Anderson and Odgaard 1994
Central Europe	CEU	85	5-266 (23.5)	6.35-8.61 (7.17)	Wusam	Wusam & Schmidt 1995
North Ireland	NI	54	11.0-800 (108.0)	7.09-8.60 (7.81)	Anderson	Anderson & Rippey 1994
North Germany	MV	84	16.0-955.0 (119)	7.86-945 (8.39)	Adler and Hübener	submitted
Dudinghausener See	DUD	16	27.8-65.4(50.3)*	7.7-8.9(8.75)*	Adler	Adler and Hübener 2007
Tiefer See	TIE	17	15.6-45.3(30.1)*	8.3-9.1(8.87)*	Adler	Adler and Hübener 2007

Table 1: Training sets used in this study. Data are accessible at <u>http://craticula.ncl.ac.uk/ Eddi/jsp/index.jsp</u> and <u>www.biologie.uni-rostock.de/abt/botanik/AG-Phykologie/index-engl.htm</u>. (\*) measured monthly during one growing season.

As independent test set transect samples of two lakes in North Germany, Lake Dudinghausener See and Lake Tiefer See, were used. Along transects through these lakes surface sediment samples were collected, assuming the diatom associations found within the samples represented the diatom frustules accumulated throughout one year. Additionally, monthly data of chemical and physical water parameters were available for both lakes. For details see Adler and Hübener (2007). As the single training sets CH, DK, CEU and NI did not contain enough modern analogues (Overpeck et al. 1985) to predict TP for the surface sediment samples of Lake Tiefer See, here only the MV training set could be evaluated using this lake. For the transect samples of lake Dudinghausen, both the MV and the NI training set had enough analogues to allow a realistic estimation of the prediction error.

# **Statistical Methods**

In paleolimnology, most commonly percent abundance data are used as basis in the analysis of species' responses by WA and WA-PLS regression and calibration (Birks 1995, Cohen 2003, Hausmann and Kienast 2006). The relative abundance of each taxon was available for all training sets.

The shape of the taxa response curves to Total Phosphorous (TP) was modelled with a Generalized Linear Model (GLM) (Mc Gullagh and Nelder 1989) using quasi-binomial distribution as the possible abundance of each taxon ranged from 0 to 100%. In accordance with Potapova et al. (2004) a non-significant response was assumed if no term of the fitted GLM was significant. If both, the linear and the quadratic terms were significant, an approximately unimodal symmetric response curve was implied. And if only the linear term was significant, the taxon's abundance increased or decreased along the gradient.

In a second step, relative abundance data were transformed into class data: The class breadth was not equally spaced because of the unequal distribution of the abundance data. To allow comparability with other laboratories the number and breadth of classes should as differ as necessary but as easy as possible. In the data sets used in this study, benthic taxa mostly have low relative abundances and, therefore, the following classification was used: <0 - 1% =1; <1-5% = 2; <5 - 10% = 3; <10 - 30% = 4; <30 - 60% = 5; >60% = 6. This classification was somewhat subjective and can influence the results strongly (see results and discussion).

Instead of using the function polr() in the package MASS (Venables and Rippley 2002) or vglm() in package VGAM (Yee 2009) an own algorithm was created based on logistic regression analysis (e.g., Faraway 2006) using the function glm() with a second order polynomial. This was done because rare taxa occurring only in one class could not be modelled with these functions. The use of the function glm allowed to model taxa with a minimum occurrence within three lakes. The new function was called *mtf()* and was embedded in the package paltran 1.3 (Adler 2009) for the open source platform R version 2.9.1 (R Development Core team 2009).

Within the function mtf(), for each taxon the distribution concerning each class is modelled (Figure 2) using logistic regression. If a taxon occurred only less than 4 times (default within the function mtf() can be changed) these occurrences were set to be zero or added to the next lower class (default), as a GLM performed not well unless n<3.

For inferring e.g. TP values for a given sediment core sample the Maximum Likelihood principle (e.g., Jongman et al. 1995) was used:

$$p_{env} = \prod_{j=1}^{k} p_{j,c}$$

where  $p_{j,c}$  is a vector enfolding the values of the probability curve for the whole environmental gradient of species j in class c, if the abundance of species j in the core sample belongs to class c. The resulting vector  $p_{env}$  again is a probability graph. That value of the environmental parameter which corresponds to the maximum of  $p_{env}$  was used as inferred value for the core sample.

WA-PLS was calculated using the package paltran 1.3 (Adler 2009). As cross validation method Leave-on-out (LOO) was chosen for both, WA-PLS and MTF.



Figure 1: Distribution of *Fragilaria crotonensis*, *Asterionella formosa*, *Achnanthes minutissima* and *Cyclotella comensis* in relation to Total Phosphorous levels using combined data of the five different training sets training sets used in this study (Table 1).

# Results

Analysing species responses to TP using a GLM and all data sets, it was found that only 30% of the taxa showed a significant response (linear, sigmoidal or unimodal) and only about 10% of all taxa showed a significant unimodal response to TP (see Table 2). By including taxa which occurred in 3, 5, 10 or more lakes in the modelling process, the number of taxa with a significant response could be increased. In general, only those species that occurred 20 times and more within a data set showed any significant response to an environmental parameter. Thus, a method was needed that can model both skewed and unimodal species distributions and that is not impaired by data with rare non-zero values.

Just by plotting the relative abundance data of single species from different data sets within on diagram against TP (Figure 1), four different types can be distinguish:

- (i) Type *Fragilaria crotonensis* the merging of the data sets resulted in a (skewed) unimodal response curve, where every single data set displayed a part of the curve.
- (ii) Type Achnanthes minutissima the merging of different data sets confirmed the information of the single data set concerning the species optimum.

- (iii) Type Asterionella formosa the species optimum is confirmed by the merging of different data sets, but a large variance indicated, that other environmental parameters should be considered.
- (iv) Type *Cyclotella comensis* different data sets suggested different optima.

Table 2: Number of taxa within each single data set which have significant linear (linear-res) and significant unimodal (unimodal-res) responses to TP respectively pH.

dataset	total number	linear-res.		unimodal-res.		linear-res.			
	of taxa	to TP	%	to TP	%	to pH	%	to pH	%
CEU	238	76	31.9	23	9.7	10	4.2	7	2.9
СН	248	51	20.6	18	7.3	18	7.3	2	0.8
MV	271	47	17.3	23	8.5	17	6.3	5	1.8
NI	197	37	18.8	20	10.2	26	13.2	19	9.6
DK	149	13	8.7	5	3.4	9	6.0	2	1

Comparing the results of WA-PLS and MTF based on  $R^{2}_{LOO}$ , mean error<sub>LOO</sub>, max error<sub>LOO</sub> and RMSEP<sub>LOO</sub> for different training sets, it was not possible to find a clear or concluding statement. For the three large training sets (CEU, NI and MV) the error parameters of the MTF approach were worse than for the WAPLS approach (Table 3). Focussing on the DK and CH training sets, however, the RMSEP<sub>LOO</sub> and the maximum error<sub>LOO</sub> were lower for MTF. For all training sets, the values of the parameter's maximal error and the RMSE were lower for the MTF approach, whereas the R<sup>2</sup> was higher for MTF than for WAPLS (Table 3, Figure 3).

Going into detail (Figure 4), those samples that had the highest prediction error within the MV training set using WA-PLS (sample MV068, MV056, MV086, MV026, MV001 and MV080) had a high prediction error using the MTF approach, too. These samples were characterised as samples at the fringes of the covered TP gradient (Table 1) (TP levels MV068:  $35.89 \mu g/l$ , MV086:  $954.99 \mu g/l$ ) or dominated by only one taxon (MV0026 *Stephanodiscus minutulus*: 67%). For sample MV086 and MV056, the prediction error was reduced slightly using MTF, whereas for MV026 and MV068 the prediction error increased. Overall no general trend could bee detected. By excluding *S. minutulus* from the MV training set both, approaches inferred very similar TP levels using Leave-one-out (LOO) for the training set (not shown). The error parameter reached comparable levels; the MTF approach had slightly better values (Table 3).

In the CH training set, for those samples that were problematic according to the WA-PLS regression (Figure 4 lower panels: CH008, CH037, CH009, CH022) the error could be reduced by using the MTF approach. Again these samples were characterised by very low or high TP levels (CH037: 5.8  $\mu$ g/l, CH022: 12  $\mu$ g/l, CH008: 211  $\mu$ g/l). Nevertheless, other samples (e.g., CH064) also had a higher error using MTF. But on average, the prediction error for the single samples was reduced by using MTF.

For both calibration methods Hill's N2 influenced the predictive power: The higher the diversity, the lower was the prediction error (Figure 4). This correlation was not significant, but nevertheless obvious for all data sets used.



Figure 2: Distribution of *Stephanodiscus hantzschii* in relation to TP in the MV training set. Upper panel: Abundance values were scaled to the interval [0,1]. Single abundance values were assigned to the abundance classes used in this study. Bold line: scatter smooth for the dependency of the abundance of *S. hantschii* to TP. Lower panel: Distribution functions for the single classes for *S. hantschii*.

Using the independent test set to evaluate the predictive power of WA-PLS and MTF, it was found, that the  $RMSEP_{trans}$  for Lake Dudinghausener See were equal using the MV and the NI training set and both types of transfer function (Table 3) and lower using the MTF approach for Lake Tiefer See Instead of the WA-PLS regression

The function mtf() in package paltran 1.3 (Adler 2009) allowed the use of different classifications for the diatom relative abundance values regarding class width and number of classes. The effect of changing classes was shown exemplarily for the CH, NI and MV training sets (Table 4). For all three training sets, the maximum prediction error<sub>LOO</sub> was



lowest using only four or three classes (class 1:  $0\% < x \le 5\%$ , class 2:  $5\% < x \le 30\%$ , class 3: x > 30%).

Figure 3: Residuals of the WA-PLS and the MTF approach using the MV training set. Left panels: predicted TP levels minus measured TP levels, right panels: Predicted TP levels estimated using LOO minus measured TP levels. The grey line is a scatter smooth, approximating the trend within the residuals.

# Discussion

#### Handling the different species responces

The low number of taxa with a significant response to TP within the different data sets is remarkable, as they all are called TP training sets. A more careful selection of the samples contained in the training sets might increase the number of significant taxa (e.g., Hausmann and Kienast 2006). Nevertheless, other authors have published similar results that suggest, that diatom based training sets are in general very heterogeneous (e.g., Potapowa et al 2004). Racca et al. (2004) proposed to exclude all those taxa with no significant correlation to TP, which would lead to an elimination of 85% of all taxa from a data set. The effect of excluding a not significant taxon from the data set can be seen in Table 3. *Stephanodiscus minutulus* is described by different authors as indicator for high trophic levels. Nevertheless, in the North

German data set this taxon has no significant response to TP (Adler and Hübener submitted). When excluding *S. minutulus* from the training set, the error parameters decreased, i.e. the prediction became more precise. This supports the suggestion of Racca et al. (2004) to exclude those taxa that are not significantly related to the variable of interest.



Figure 4: Prediction error against Hill's N2 using Leave one out (LOO) for the prediction. Dotted lines: 2.5 and 97.5 % quantile, meaning that 95% of the data lie between both lines, broken lines: 25 and 75% quantile, meaning that 50% of the data lie between both lines.

In general three possibilities are possible when a taxon shows no significant response to an environmental variable. First, a taxon occurred only rarely, and some kinds of statistical tests (e.g., GLM, Generalized Additive Models (GAM) Hastie and Tibshirani 1990 or HOF model, Huisman et al. 1993, Oksanen 2002)) don't find any significant response to an environmental variable. To exclude these taxa is not quite reasonable, as a higher number of training set samples might disclose their significance. Second, the length of the covered environmental gradient is not large enough to find any significant response. E.g., *S. minutulus* might show a significant response if only there were more lakes with low TP levels included in the North German data set, where S minutulus didn't occure. In those two cases, their presence might contribute to the knowledge of their ecological requirement and their ecological optimum concerning the environmental parameter of interested. Removing those taxa might delete important ecological information. The third possibility is, that in a special data set the taxa really do not depend on the environmental parameter of interested.

Table 3: Comparison of the WA-PLS and the MTF approach. All taxa of the single training sets were included, despite the MV training set, where both WA-PLS and MTF were performed with and without(\*) *Stephanodiscus minutulus*. Comp. = number of components using WA-PLS, %red. = percent reduction of the RMSEP using the MTF instead of the WA-PLS, MSEP<sub>trans</sub> = Root mean squared error of prediction for the inferred TP levels in relation to the mean measured TP level over the year for the transect samples of Tiefer See (\*\*) and Dudinghausener See. Bold letters: best value within the comparison of each training set

training set	method	comp.	n	R <sup>2</sup>	mean error	max error	RMES	$R^{2}_{LOO}$	mean error <sub>LOO</sub>	$max \; error_{\text{LOO}}$	RMSEPLOO	%red.	<b>RMSEP</b> trans	%red.
СН	WA-PLS MTF	1	69	0.621 <b>0.780</b>	<b>0.000</b> -0.017	0.550 <b>0.285</b>	0.193 <b>0.163</b>	0.479 <b>0.510</b>	<b>0.007</b> 0.017	0.633 <b>0.529</b>	0.227 <b>0.221</b>	2.7	-	-
CEU	WA-PLS MTF	2	86	0.722 <b>0.830</b>	0.000 0.009	0.534 <b>0.481</b>	0.193 <b>0.169</b>	<b>0.446</b> 0.333	<b>0.003</b> 0.016	<b>0.613</b> 0.812	<b>0.274</b> 0.307	-12.1	-	-
NI	WA-PLS MTF	2	54	0.874 <b>0.923</b>	<b>0.000</b> 0.004	0.254 <b>0.223</b>	0.136 <b>0.108</b>	<b>0.598</b> 0.486	<b>-0.009</b> 0.052	<b>0.576</b> 0.903	<b>0.243</b> 0.280	-15.1	12.92** <b>12.78</b> **	1.1
DK	WA-PLS MTF	2	28	0.794 <b>0.869</b>	<b>0.000</b> 0.010	0.398 <b>0.354</b>	0.154 <b>0.132</b>	0.286 0.279	0.030 <b>-0.005</b>	0.839 <b>0.695</b>	0.293 <b>0.290</b>	0.9	-	
MV	WA-PLS MTF	2	87	0.587 <b>0.700</b>	0.000 -0.022	0.710 0.779	0.244 <b>0.223</b>	0.246 0.228	-0.012 0.018	0.819 1.004	0.333 0.362	-8.7	20.75 <b>13.73</b>	33.8
	WA-PLS* MTF*	2	87	0.651 <b>0.733</b>	<b>-0.005</b> -0.012	<b>0.692</b> 0.698	0.225 <b>0.208</b>	0.282 <b>0.295</b>	-0.019 <b>-0.003</b>	0.797 <b>0.793</b>	<b>0.325</b> 0.333	-2.4	9.81 <b>9.14</b>	6.8

Possible but problematic in this case might be the combination of single data sets (e.g., SWAP training set, Battarbee et al. 2008, Dressler et al. 2006) to enlarge the environmental gradient. These different data sets are controlled by different geomorphologic environmental variables. Differences in abundances and species distribution will influence the resulting optima of the taxa of these merged data sets, as can see in Figure 1. By comparing the distribution of different taxa throughout training sets in Europe the results of Cameron et al. 1999, that diatom optima concerning on environmental variable differed between different regions can be confirmed. The estimated optima differed between the data sets as the relative abundances differed, too (Figure 1). Merging data sets from different regions (e.g., SWAP, combined TP training set, Juggins 2003) leads to artificial taxa optima or "updated" optima when using WA-PLS, that are not in accordance with the real species distribution. Approaches like the locally weighted WA regression (Battarbee et al. 2005) available in C2 1.5.1 (Juggins 2004) and paltran 1.2 (Adler 2009) and the moving window approach (Hübener et al. 2008) available in paltran 1.2, which combined the idea of modern analogues with WA and WA-PLS, are preferable when dealing with merged data sets (see also Hübener et al 2009).

For these reasons a general exclusion of all non-significant taxa might be difficult (Holden et al. 2008). Nevertheless, the example of *S. minutulus* showed that the exclusion of single non-significant, highly abundant taxa might improve the prediction.

# Examination of values of inferred parameters

In the last decades several calibration methods have been used in paleoecology. Several of them required a lot of computational power (e.g., Holden et al. 2008, Hübener et al. 2008) and were based on a complex mathematical background (e.g., Vasko et al. 2000, Racca et al. 2001, Holden et al. 2008). Several different computer programs were developed, some are free to use, others not. The advanced paleolimnologist has to choose between several methods, with the evaluation of the different transfer functions being in most cases based on re-sampling methods like bootstrap, Leave-one-out (LOO) or 10 fold cross validation. Only rarely different methods were compared using real test sets (e.g., Alefs 1996, Adler and Hübener 2007, Battarbee et al. 2008, Holden et al. 2008), even though the RMSEP is known to overestimate the prediction error (Hastie and Tibshirani 1990, ter Braak 1995) and should not be considered as the only tool to find the best model (e.g., Birks and Birks 2006, Adler and Hübener 2007, Holden 2008). If a new method is to be established, the criterion of the quality of this method is simple: The prediction error has to be reduced or additional information about the reconstruction must be provided. The approach by Holden et al. (2008) provides only slightly lower prediction errors than WA-PLS (it is more sensitive to outliers and small changes in the taxa composition), nevertheless, it precisely assesses the uncertainty of the reconstruction.

The WA-PLS method was established to remove the errors of WA regression, especially the under- or overestimation of species optima at the upper and lower part of the environmental gradient (ter Braak and Juggins 1993). With regard to the few unimodally distributed taxa within the here analysed training sets, such kinds of methods are badly needed. The MTF approach had the same focus. This approach allows modelling very skewed species distributions, but instead of one "updated optima" as it is calculated within the WA-PLS approach (ter Braak and Juggins 1993), the MTF calculates several different optima for each class (Figure 2). This way, modelling of species responses in the training set is more fine-scaled and better adapted and, thus, inferred values are more realistic.

For the training sets NI, CEU and MV no significant reduction of the prediction error was found for the re-sampling method using the MTF approach, the RMSEP<sub>LOO</sub> was higher than for the WA-PLS approach. Nevertheless, the RMSEP<sub>trans</sub> were comparable or even lower for

the MTF than for the WA-PLS for those training sets, where enough modern analogues were available.  $RMSEP_{LOO}$  and  $R^{2}_{LOO}$ , however, indicate the precise opposite.

Table 4: Error statistic for the MTF approach using the CH, NI and MV training sets with different abundance classes and the prediction error for the transect samples of Lake Dudinghausener See. All values based on log10 transformations. The values of the RMSEP<sub>DUD</sub> were transformed back after calculation.

training set	class borders	R <sup>2</sup>	mean error	max error	RMSE	$R^{2}_{LOO}$	mean error <sub>LOO</sub>	max error <sub>LOO</sub>	RMSEPLOO	RMSEP <sub>DUD</sub> [µg/l]
СН	0.1.5.10.30.60	0.864	-0.009	0.277	0.122	0.510	0.017	0.529	0.221	-
-	0,1,5,30,60	0.864	-0.009	0.305	0.122	0.536	0.012	0.514	0.214	-
	0.5,30,60	0.863	0.001	0.324	0.124	0.543	0.018	0.509	0.214	-
	0,5,30	0.869	0.003	0.324	0.121	0.546	0.017	0.501	0.213	-
NI	0,1,5,10,30,60	0.923	0.004	0.223	0.108	0.486	0.052	0.903	0.280	12.785
	0,1,5,30,60	0.924	0.004	0.224	0.107	0.509	0.050	0.869	0.273	15.209
	0,5,30,60	0.871	-0.014	0.246	0.143	0.487	0.032	0.722	0.277	15.955
	0,5,30	0.870	-0.014	0.246	0.143	0.485	0.031	0.722	0.277	11.371
MV	0,1,5,10,30,60	0.703	-0.022	0.770	0.223	0.228	-0.018	1.004	0.362	13.730
	0,1,5,30,60	0.682	-0.023	0.777	0.233	0.240	-0.006	1.006	0.361	11.825
	0,5,30,60	0.634	-0.024	0.833	0.255	0.218	-0.005	0.987	0.380	9.130
	0,5,30	0.635	-0.023	0.833	0.255	0.220	-0.004	0.987	0.379	9.245
	0,5,30	0.635	-0.023	0.833	0.255	0.220	-0.004	0.987	0.379	9.245

For all training sets used, the residuals of the predicted TP levels showed a less distinctive trend using the MTF compared to the WA-PLS (Figure 3, left hand side). This means, that the MTF reduced the influence of other environmental parameters, as the variance of the data was reduced by using classes. The species distribution obviously was modelled more accurately by using MTF than WA-PLS. On the other hand, the residuals using LOO showed only slightly less distincitve trends for the MTF, the maximum error was even higher than for the WA-PLS. Thus, using re-sampling methods like the here shown LOO, the predictive power of the MTF approach is affected more than the WA-PLS approach (Figure 3, right hand side). The reason is that for several classes only four or three samples for each taxon were available. Deleting one of the samples (as done in LOO recursively) led to a complete loss of several classes, as a glm can only be performed with 3 or more non-zero values. This might lead to the conclusion, that this approach is only useful for large training sets. But the example of the DK and the CH training sets showed that the opposite can be the case, i.e. the MTF can also result in lower RMSEP<sub>LOO</sub> for smaller training sets.

#### Relative Abundance data versus ordinal abundance classes

Other methods used in paleolimnology might be even better suited to reconstruct TPlevels: As shown in Adler and Hübener (2007) the ML approach (ter Braak and van Dam 1989) performed better than both WA-PLS and MTF for the transect samples. Thus, the MTF cannot be considered a general improvement. However, one advantage of this method should be considered: The MTF approach works with class data, which contains much less precision about the distribution of a taxon in relation to a given environmental variable than abundance data. In the MTF approach it doesn't matter if a taxon has a relative abundance of 19% or 29%, both values are assigned to class 4. Reducing the number of classes (Table 4) resulted in a lower error<sub>max</sub> for the transfer functions and a lower prediction error for the transect samples (e.g., RMSEP<sub>DUD</sub>). The differences concerning species composition between adjusted transect samples were found to be high for those four lakes (Adler and Hübener 2007). Using class data instead of relative abundance data, these differences were smoothed. E.g. the abundances of *S. minutulus* ranged from 35% to 57% in the open water samples of lake Dudinghausener See (despite sample 9: 62%). All these abundances were assigned to the class 5 by the MTF approach. As the quality of the inferred TP-levels did not differ between the WA-PLS and the MTF approach, it can be concluded that the high precision contained in the abundance data is not required for the reconstruction of TP-levels for the here used test sets.

A negative relation between prediction error and Hill's N2 was found for both approaches (Figure 4). A higher Hill's N2 means there are more less-abundant taxa, or more taxa with high relative abundance values. The two here used calibration methods can estimate the taxa distribution regarding TP more accurately for samples with a high N2. It seems, that a clear dominance of one or two taxa within a lake cannot be modelled by TP alone. Other environmental parameters seem to have a strong influence in these situations. In general, the training set samples with the highest prediction error have low N2 levels but are located also at the fringes of the covered TP gradient (Figure 4: MV026, MV068, CH008, CH064, CH037). Therefore, predicted values for core samples that lie in the border area of the training set (out of the range covered by 95% of the data, see Figure 4) should be handled with caution (see also Holden et al. 2008). Here, both approaches showed the same problems dealing with those samples.

The class width and the number of classes used influenced the predictive power of the training sets (Table 4). The reductions were most remarkable: the RMSEP<sub>LOO</sub> and the maximum error<sub>LOO</sub> changed between 1 and 20%, the RMSEP<sub>trans</sub> could be reduced by 10 and 34%. Differences between the training sets were also detectable (Table 4). Methods therefore are required to find the best classification, as generally no independent test sets are available for paleolimnological research questions. If class data in combination with the MTF approach was found be useful for a wider range of test sets, the analysis of diatom samples might

become much faster. The analysts then only had to assign the taxa to few abundance classes instead of counting up to 500 frustules. As TP explained only a small part of the species variance (Figure 2) it is questionable, whether it is important to know, if a taxon occurred with a relative abundance of 25% or 35% as the use of class date when inferring TP levels lead to the same results as when using relative abundance data.

In a first version of the package paltran (1.0) instead of MTF a function called POM, based on Porportional Odds modelling (McCullagh *et al.* 1989, Guisan and Harrell 2000, Dobson 2001), was implemented using the function polr() (package MASS, Venables and Ripley, 2002). The difference between both is that for the POM it was assumed that the classes were not independent. (If a taxon is a member of class 3 (<=5 - 10%) it must have occurred before with lower relative frequency, i.e. in classes 1 and 2). The results of the function pom(), however, were not better in terms of RMSEP<sub>LOO</sub> but worse in terms of RMSEP<sub>trans</sub> for both Dudinghausener See and Tiefer See. Therefore, the POM approach was found to give no improvements compared to the MTF and the function *pom()* was removed.

# Conclusion

Focussing only on the prediction parameters of the different transfer functions (R<sup>2</sup>, maximum error, mean error and RMSEP), both approaches generated very similar results for two of the used training sets, for the three others WA-PLS performed better than MTF. But when using the independent transect samples, MTF performed better than WA-PLS. So far, it cannot be concluded that the MTF approach generally is preferable to the WA-PLS. Nevertheless, it is remarkable, that based on class data, the same results could be obtained as when using relative abundance data. Further tests are needed to verify this. However, our results raise the question whether the relation of additionally gained information/accuracy and the work of collecting diatom abundance data is appropriate in comparison to the less time intensive use of class data.

#### Acknowledgments

We would like to thank Unn Klare for helping with the language and giving valuable comments on the manuscript. This study was funded by the German Federal Environmental Foundation.

#### Literature

- Adler S (2009) paltran: WA, WA-PLS, MW and POM for paleolimnology. R package version 1.3-0. http://CRAN.R-project.org/package=paltran.
- Adler S, Hübener T (2007) Spatial variability of diatom associations in surface lake sediments and its implications for transfer function. Journal of Paleolimnology 37: 573-590.
- Alefs J, Müller J, Wunsam S (1996) Die Rekonstruktionder epilimnischen Phosporkonzentrationen im Ammersee seit 1958. Wasser Abwasser 137:443–447.
- Anderson NJ (2000) Diatoms, temperature and climatic change. Eur J Phycol 35:307–314.
- Battarbee RW, Jones VJ, Flower RJ, Cameron NG, Bennion H, Carvalho L, Juggins S (2001). Diatoms. In Smol JP, Birks HJB, Last WM (eds), Tracking environmental change using lake sediments. Volume 3: Terrestrial, Algal and Siliceous Indicators. Kluwer, Dordrecht: 155–202.
- Battarbee RW, Juggins S, Gasse F, Anderson NJ, Bennion H, Cameron NG (2000). European Diatom Database (EDDI). An information system for paleoenvironmental reconstruction. European Climate Science Conference, European Commission, Vienna, Austria 1998: 1–10.
- Battarbee RW, Monteith DT, Juggins S, Evans CD, Jenkins A, Simpson GL (2005) Reconstructing pre acidification pH for an acidified Scottish loch: a comparison of palaeolimnological and modeling approaches. Environ Pollut 137:135–149.
- Battarbee RW, Monteith DT, Juggins S, Simpson GL, Shilland EW, Flower RJ, Kreiser AM (2008) Assessing the accuracy of diatom-based transfer functions in defining reference pH conditions for acidified lakes in the United Kingdom, The Holocene 18: 57-67.
- Bennion H, Wunsam S, Schmidt R (1995) The validation of diatom-phosphorus transfer functions: an example from Mondsee, Austria. Freshwater Biology 34: 271-283.
- Birks HH, Birks HJB (2006) Multi-proxy studies in palaeolimnology. Veget Hist Archaeobot 15: 235-251.
- Birks HJB (1995) Quantitative Palaeoenvironmental reconstructions. In: Maddy D, Brew JS (eds) Statistical modelling of quaternary science data. Cambridge,pp 161–255.
- Birks HJB (1998) Numerical tools in palaeolimnology–progress, potentialities, and problems. Journal of Paleolimnology 20:307–332.
- Birks HJB, Line JM, Juggins S, Stevenson AC (1990) Diatoms and pH reconstruction. Phil.Trans.R.Soc.Lond.B 327: 263-278.
- Cameron NG, Birks HJB, Jons VJ, Berge F, Catalan J, Flower RJ, Garcia J, Kawecka B, Koinig KA, Marchetto A, Sanchez-Castillo P, Schmidt R, Sisko M, Solovieva N, Stefkova E, Toro M (1999) Surface-sediment and epilithic diatom pH calibration sets for remote European mountain lakes (AL:PE Project) and their comparison with the Surface Water Acidification Programme (SWAP) calibration set. Journal of Paleolimnologie 22: 291-317.
- Cohen AS (2003) Paleolimnology The History and Evolution of Lake Systems. Oxford University Press, Oxford, 500 pp.
- Dobson A (2001) An Introduction to Generalized Linear Models, Second Edition, Chapman & Hall/CRC, London.
- Dreßler M, Selig U, Dörfler W, Adler S, Schubert H, Hübener T (2006) Environmental changes and the migration period in Europe by the example of Lake Dudinghausen (northern Germany). Quaternary Research 66: 25-37.
- Efron B. (1982) The jackknife, the bootstrap and other resampling plans. SIAM, Philadelphia.

- E U (2000) Direktive 2000/60/EC of the European Parlament and the Council of 23.10.2000 establishing a framework for Community action in the field of water policy. Official Journal of the EC L327: 1-72.
- Faraway JJ (2006) Extending the Linear Model with R: Generalized Linear, Mixed Effects and Nonparametric Regression Models (Texts in Statistical Science). Chapman & Hall/CRC, London.
- Gelmann A, Hill J (2007) Data Analysis using Regression and Multilevel/Hierarchical Models, Cambridge University Press, Cambridge.
- Guisan A, Harrell FE (2000) Ordinal response regression models in ecology. J. Veg. Sci. 11: 617-626.
- Haslett J, Whiley M, Bhattacharya S, Salter.Townshend M, Wilson SP, Allen JRM, Huntely B, Mitchell FJG (2006) Bayesian palaeoclimate reconstruction. J R Stati Soc A 169: 395-438.
- Hastie T, Tibshirani R (1990) Generalized additive models. Chapman and Hall, London.
- Hausmann S, Kienast F (2006) A diatom-inference model for nutrients screened to reduce the influence of background variables: Application to varved sediments of Greifensee and evaluation with measured data. Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology 233: 96-112.
- Holden PB , Mackay AW , Simpson GL (2008) A Bayesian palaeoenvironmental transfer function model for acidified lakes. Journal of Paleolimnology 39: 551-566.
- Hübener T, Adler S, Werner P, Schuldt M, Erlenkeuser H, Meyer H, Bahnwart M (2009) A multi-proxy paleolimnological reconstruction of trophic state reference conditions for stratified carbonate-rich lakes in northern Germany. Hydrobiologia (2009) 631: 303–327.
- Hübener T, Dreßler M, Schwarz A, Langner K, Adler S (2008) Dynamic adjustment of training sets ('movingwindow' reconstruction) by using transfer functions in paleolimnology - a new approach. Journal of Paleolimnology 40: 79-95.
- Huisman J, Olff H, Fresco LFM (1993) A hierarchical set of models for species response analysis. Journal of Vegetation Science 4, 37-46.
- Jongman RHG, ter Braak CJF, van Tongeren OFR (1995) Data analysis in community and landscape ecology. Cambridge University Press. Cambridge.
- Juggins S (2003) Europaen Diatom Database Iniziative. (EDDI), http://craticula.ncl.ac.uk/Eddi/jsp/index.jsp
- Korhola A, Vasko K, Toivonen HTT, Olander H (2002) Holocene temperature changes in northern Fennoscandia reconstructed from chironomids using Bayesian modelling. Quaternary Science Reviews 21: 1841-1860.
- Köster D, Racca, JMJ, Pienitz R (2004) Diatom-based inference models and reconstructions revisited: methods and transformations. Journal of Paleolimnology 32: 233-246.
- Lotter AF, Bigler C (2000) Do diatoms in the Swiss Alps reflect the length of ice-cover? Aquatic Science 62: 125-141.
- McCullagh P, Nelder JA (1989). Generalized Linear Models. Chapman and Hall, London.
- Oksanan J (2002) HOF: Gradient analysis using Huisman-Olff-Fresco models with maximum likelihood. http://cc.oulu.fi/~jarioksa/pages/hof2.htm.
- Overpeck JT, Webb T, Prentice IC (1985) Quantitative interpretation of fossil pollen spectra: dissimilarity coefficients and the method of Modern Analogs. Quat Res 23:87–108.
- Potapova MG, Charles DF, Ponader KC, Winter DM (2004) Quantifying species indicator values for trophic diatom indices: a comparison of approaches. Hydrobiologia 517: 25–41.

- R Development Core Team (2009). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0, URL <u>http://www.R-project.org</u>.
- Racca JMJ, Gregory-Eaves I, Pienitz R, Prairie YT (2004) Tailoring palaeolimnological diatom-based transfer functions. Can.J.Fish.Aquat.Sci. 61: 2440-2454.
- Racca JMJ, Philibert A, Racca R, Prairie YT (2001) A comparison between diatom-based pH inference models using Artificial Neural Networks (ANN), Weighted Averaging (WA) and Weighted Averaging Partial Least Squares (WA-PLS) regressions. Journal of Paleolimnology 26: 411-422.
- Reid M (2005) Diatom-based models for reconstruction past water quality and productivity in New Zealand lakes. J Paleolimnol 33:13–38.
- Smol JP, Cumming BF (2000) Tracking long-term changes in climate using algal indicators in lake sediments. J.Phycol. 36: 986-1011.
- ter Braak CJF (1986) Canonical Correspondence Analysis: a new eigenvector technique for multivariate direct gradient analysis. Ecology 67: 1167-1179.
- ter Braak CJF (1995) Non-linear methods for multivariate calibration and their use in paleoecology: a comparison of inverse (K Nearest Neighbours, PLS and WAPLS) and classical approaches. Chemometrics Intell Lab Syst 28:165–180.
- ter Braak CJF, Juggins S (1993) Weighted averaging partial least squares regression (WA-PLS): an improved method for reconstructing environmental variables from species assemblages. Hydrobiolgia 269/270: 485–502.
- ter Braak CJF, van Dam H (1989) Inferring pH from diatoms: a comparison of old and new calibration methods. Hydrobiologia 178: 209-223.
- Vasko K, Toivonen, HTT, Korhola A (2000) A Bayesian multinomial Gaussian response model for organismbased environmental reconstruction. Journal of Paleolimnology 24: 243-250.
- Venables, WN, Ripley BD (2002) Modern Applied Statistics with S. Fourth Edition. Springer, New York.
- Weckström K (2006) Assessing recent eutrophication in coastal waters of the Gulf of Finland (Baltic Sea) using subfossil diatoms Journal of Paleolimnology 35:571–592.
- Yee TW (2009) VGAM: Vector Generalized Linear and Additive Models. R package version 0.7-8. <u>http://www.stat.auckland.ac.nz/~yee/VGAM</u>.

# A comparison of relative abundance versus class data in diatombased quantitative reconstructions

S. Adler<sup>1</sup>, T. Hübener, M. Dreßler, A. F. Lotter, N. J. Anderson

http://www.sciencedirect.com/science? ob=ArticleListURL& method=list& ArticleList ID=1584204136& sort=r& st=13&view=c& acct=C000050221& version=1& urlVers ion=0& userid=10&md5=4157cc3f39b82e1408305f5e8d731b9b&searchtype=a

# The new statistical package *paltran 1.3* for paleolimnological analyses: WA-, WA-PLS-Regression and the Moving Window Approach for R 2.9.0

Sven Adler

University Rostock, Institute for Biosciences, General and Systematic Botany, Wismarsche Straße 8, 18057 Rostock, Germany. e-mail: sven.adler2@uni-rostock.de

#### Abstract

The new package *paltran* (*paleolimnological transfer functions*) for the free open source software R was developed including Weighted Averaging regression (WA), Weighted Averaging –Partial Least Square regression (WA-PLS) and the Moving Window Approach (MW) including jackknife, bootstrap and 10-fold cross validation for error estimation. Additionally, a simple function for plotting the results in a stratigraphic plot is included. The number of components of the WA-PLS and the window size of the MW function are free to choose, i.e. locally weighted WA regression is also implemented in *paltran*. Thus, some frequently used regression techniques in paleolimnology are available for R now, if the *paltran* package is used in combination with the *analogue* package (functions for Modern Analogue Techniques (MAT), WA and distance measurement). The current version of the *paltran* package is available at:

http://www.biologie.uni-rostock.de/abt/botanik/AG-Phykologie/index-engl.htm or http://cran.r-project.org/

Keywords: WA, WA-PLS, MW, transfer function, paltran, R

## Introduction

The open source software R (R Development Core Team 2009) is becoming a standard tool to analyse biological data (e.g. Zuur et al. 2007, Zuur et al. 2009). Many useful packages exist for ecological and paleoecological research questions e.g. *analogue* (Simpson and Oksanen 2009) for Modern Analogue Technique (MAT) (ter Braak 1995) and Weighted Average regression (WA) (ter Braak and van Dam 1989), *vegan* (Oksanan et al. 2007) including ordination techniques, *lme4* (Pinheiro et al. 2007) for Mixed effect Models, *mgcv* (Wood 2006) including Generalized Additive (Mixed) Models, and *ade4* (Chessel et al. 2004) (collection of many useful multidimensional analyses). The advantage of R is the possibility of a free combination of different tools and the facility to include given functions in own algorithms, without changing between different computer programs (e.g. CANOCO 4.5, PRIMER 5.0, PC-ORD 5.0 and GEN-STAT 10, C2 1.5.1) and data format (e.g., .cep, .csv, .txt, .xls).

The Moving Window approach (MW) (Hübener et al. 2008) is a combination of Detrended Correspondence Analysis (DCA) (Hill and Gauch 1980) and several runs of a Weighted Average –Partial Least Square- Regression (WA-PLS) (ter Braak and Juggins 1993). Thus, performing the MW approach, a lot of time is needed working with C2 (Juggins 2005). This study aims to develop a package for R that implements a function for MW and local weighted WA regression (Battarbee et al. 2005) for the standard transfer function tools WA (see also R package *analogue* (Simpson and Oksanen 2008)) and WA-PLS.

## Methods

All code was written in the R language (e.g., Braun and Murdoch 2008) using R 2.8.1 and implemented with R 2.9.0. The code were included in the package and can be considered in the corresponding folder of the package respectively typing the function name (e.g. wa, wapls, mw) in the R console after loading the package. All code was carefully tested using various real data sets (e.g. the CH data (Switzerland), Lotter et al. (1997) or CEURO data (Central Europe data set), Wusam and Schmidt (1995)) and several runs. However, the code was not assessed with artificially extremely skewed data. A detailed description of each function is given in the R help files (type e.g. *wa* after loading the package). In the following, only general points are described. The MW approach is described in detail by Hübener et al. (2008)



**Figure 1:** MW-principle: First the core sample is plotted as passive sample in an ordination plot of the training set (upper left panel). Secondly the 20 nearest neighbours of the core sample within the training set are analysed (upper right panel) and used as training  $set_{20}$  for a WA-PLS to infer e.g. Total Phosphorous (TP) for the core sample (Table 1). Than the next set of nearest neighbours (40,60) are calculated and used for inferring TP. The different WA-PLS runs based on 20, 40, 60 samples are than compared of their error statistics (see Table 1).

#### WA and WA-PLS

The algorithm for the function *wa*() (WA) and *wapls*() (WA-PLS) follows ter Braak and Juggins (1993). The results were compared with the output from C2 1.5.1 (Juggins 2005). The prediction error of each sample can be estimated using Leave-One-Out (LOO), bootstrap and 10-fold cross validation (Efron 1982).

Using computers, random numbers are in fact pseudo random numbers as there are generated using special functions (e.g. Dalgaard 2008). To make the results repeatable when using bootstrap or n-fold cross validation, the staring point for the random generator is fixed within the algorithm, but can be changed (default: seed =1, see also options in C2). A different starting point will lead to different results if the number of runs is low. The mean error respectively the maximum error is calculated simply using the mean of the residuals and maximum of the residuals.

#### MW

The function cal for the MW approach is mw() (moving window – transfer function). To run these function the package *vegan* is required. Within the algorithm of mw(), first DCA (CA or CCA) is conducted on the training set using the function *decorana()* (*cca()*) in *vegan*. Secondly, the core samples (e.g. samples of a sediment core) are predicted into the resulting ordination plot of the training set using the function *predict.decorana()* (*predict.cca()*). Thirdly, based on these sample scores, the k<sub>i</sub> nearest neighbours of the training set (k<sub>i</sub> = 20, 40, 60 set as default) for each core samples are identified using the function *vegdist()* (package *vegan*) (Figure 1) using Euclidean distances measurement on the first and seconad DCA axis (default, can be set higher including the third and fourth axis too). If large training sets (n>100 ?) are being used, the number of nearest neighbours k<sub>i</sub> can be higher, they are free to choose. Using the k<sub>i</sub> nearest neighbours as training sets *i* times a WA-PLS is performed for each sample of the core data (Table 1). From these *i* WA-PLS training sets, the one with the best error statistics ( $R^2_{cross val}$ , max error<sub>cross val</sub>, mean error<sub>cross val</sub> and RMSEP<sub>cross val</sub>) (see Hübener et al. 2008 for details) is chosen to infer the environmental factor for the specific sample of the core data. Instead of Eulidean distance all other distances provided by the function *vegdist*() can be used.

Table 1: Principe of model selection in the MW approach. For each training set a WA-PLS is performed. The bootstrapped parameters are ordered and got points from 0 to two, whereas the parameter with the best value (e.g. highest  $R^2_{boot}$ , lowest mean error<sub>boot</sub>) got two points. The sum of all points decide which component to use, respectively which set of nearest neighbours (for detail see Hübener et al. 2008). Here 1000 bootstrap cycles were used.

n	comp	RMSE	R <sup>2</sup>	mean(error)	max(error)	R <sup>2</sup> boot		mean(error) <sub>boot</sub>		max(error) <sub>boot</sub>		RMSEP <sub>boot</sub>	Σ	TP [log <sub>10</sub> (μg/l)]	TP [μg/l]
20	1	0.185	0.487	0	0.424	0.012	1	0.003	2	0.493	2	0.290	2 7	1.64	43.67
	2	0.143	0.694	0	0.417	0.004	0	0.008	1	0.548	1	0.349	1 3	1.52	33.33
	3	0.100	0.851	0	0.320	0.014	2	-0.013	0	0.593	0	0.388	0 2	1.50	31.57
40	1	0.253	0.356	0	0.571	0.002	0	-0.003	2	0.672	2	0.351	2 6	1.62	41.64
	2	0.211	0.550	0	0.574	0.001	1	-0.015	1	0.704	1	0.396	1 4	1.40	24.99
	3	0.158	0.749	0	0.467	0.004	2	-0.050	0	0.723	0	0.433	0 2	1.32	21.03
60	1	0.262	0.456	0	0.688	0.129	2	0.005	2	0.727	2	0.347	28	1.68	48.24
	2	0.235	0.564	0	0.664	0.095	1	0.007	0	0.775	1	0.383	1 3	1.59	38.48
	3	0.205	0.668	0	0.608	0.047	0	0.005	1	1.344	0	0.452	0 1	1.55	35.69
							ļ	,							
20	1	0.185	0.487	0	0.424	0.012	1	0.003	1	0.493	2	0.290	26	1.64	43.67
40	1	0.253	0.356	0	0.571	0.002	0	-0.003	2	0.672	1	0.351	0 3	1.62	41.64
60	1	0.262	0.456	0	0.688	0.129	2	0.005	0	0.727	0	0.347	1 3	1.68	48.24

It is also possible instead of using DCA or CA (CCA) to calculate the nearest neighbours directly form the original species data (use option mw.type="sample"). Again, all distance measurements provided by *vegdist*() (e.g., Bray–Curtis dissimilarity) can be used.

Additionally rare species can be down weighted and model selection can be run using only  $R^{2}_{cross val}$ , max error<sub>cross val</sub>, mean error<sub>cross val</sub> as the RMSEP might overestimate the real bias (ter Braake and van Dam 1989)





Alternatively, a upgrading of the randomisation test (Van der Voit 1995) can bee used to find the optima window size. Let k be the size of the smaller window and k+n the size of the larger window. For the transfer function based on k samples the sample specific error will be estimated (bootstrap or LOO) and additionally the prediction error will be estimated for the n samples. These k+n prediction errors will than be compared with the sample specific error of the transfer function based on k+n samples using the randomisation test as described in the appendix of Van der Voet (1994). If the error of the transfer function based on k samples for the k+n samples is significant lower or just equal than the error of the transfer function based on k+n samples, the smaller window size will be used to infer the environmental parameter for the given test sample. If the prediction error is higher for the transfer function based on k samples, the larger MW size will be used to infer the environmental parameter for the given test sample.

## **Results and Discussion**

The results of functions *wa()* and *wapls()* correspond well with the output of C2, when the *paltran* package was tested using several different real data sets. More specific, the inferred environmental factors, R<sup>2</sup>, RMSE, species optima, species scores and sample scores were identical. When comparing the error parameters it must be assured that in both programs the same number of decimal places were used. However, the error parameter differed between C2 and *paltran*, when using bootstrap and cross validation. This is due to different algorithms in both programs and the random functions for generating random numbers At this state the algorithm of C2 is faster for the error estimation using either LOO, cross-validation or bootstrapping. Improvements are need, in general a more object orientated programming of the functions is required. Using LOO the results (especial RMSEP<sub>loo</sub>) of WA using C2 and paltran are equal, but different when using WA-PLS. In C2 the results between the first component of WA and WA-PLS differed slightly. In *paltran* before each run of LOO, 10-fold cross validation and bootstrap the subsets are cheque for taxa with only zeros as entry. These are then deleted. Making those commands passive in the *paltran* code for WA-PLS the results equals the results of C2.



Figure 3: Comparison of the predicted TP levels for the transect samples of lake Tiefer See (Adler and Hübener 2007). Number of inferred TP levels for each single approach based on sediment samples alongside a transect through the lake (here only the surface sediment samples from the open water region were used) = 12. Dashed line = mean of the measured open water TP. Line within the box = median of the inferred TP levels. All transfer function based on the combined TP data set of the European Diatom data base () in combination with the North German training set (Adler and Hübener 2007). MW(error.par) = the optimal window size was estimated by the error parameters of the related transfer functions (for detail see Hübener et al. 2008). MW(rand.test) = the optimal window size was estimated by the modified randomisation test (Van der Voet 1994).

The graphical output of the function wa() and wapls() presents the error between inferred environmental variables and measured environmental variables of the train set. When using bootstrap or 10-fold cross validation only the mean of the inferred values are plotted. When the user is interested in the single values, these can be found in the output of both functions (see help file for wa() and wapls()).

An alternative WA algorithm to that one used in *paltran* is given in the package *analogue* (including modern analogue techniques too). The algorithms of the *analogue* package are strait forward, so the computing time for bootstrap is much lower.

The results of the function mw() are also equal to the results published by Hübener et al. 2007 that were derived using C2. Hübener and colleagues (2008) used both Euclidean distances from a DCA and chord distances applying to the original taxa data to identify the nearest neighbours, both is possible using *paltran*. Nevertheless Gausin logit response transfer functions (ML) are not implemented jet. When using the randomisation test instead of the combination of RMSEP, R<sup>2</sup>, error<sub>max</sub> and error<sub>mean</sub> to chose the optimal window size the prediction error could be reduced in case of the independent test set introduced by Adler and Hübener (2007) (Figure 3). The use of the randomization test might be therefore a good alternative, but more experience with these approach is needed before recommending it.

Other types of transfer functions should be invoke in paltran in the future, respectively the algorithm of the function wa(), wapls() and mw() will be programmed more object orientated and in a more faster way. Nevertheless, as the algorithms are slow, WA-PLS is available for R and it is possible now to use and compare the MW approach with other calibration methods without spending too much time with the computer.

The simple plot functions palplot (Figure 3) is at this stage only valuable to have a fast overview on the results. Programs like C2 and TILIA represents more (Windows-) user friendly possibilities for plotting the results. Nevertheless, as in R all graphics can bee programmed, R offers great potentials to program graphical outputs for special research questions so that the user don't have to repeat all single steps for each plot several times. A alternative is given in the R package *palaeo* (Juggins 2006) and the package *rioja* (Juggins 2009). When starting the programming of *paltran*, the *rioja* package (Juggins 2009) was not available. Thus now three packages are available for paleolimnologist and it might bee useful in the future to merge the different functions into one package. This will make the use of R for paleolimnologists more practicable, as they don't have to switch between different packages and different ways of coding within the functions.

#### Acknowledgments

I would like to thank Petra Werner for helping with the language. Additionally I like to thank the anonymous reviewer for giving important suggestions and for finding bugs in a previous version of the package. Steve Juggins (the second reviewer) gave also helpfully comments. This study was funded by the German Federal Environmental Foundation.

# Literature:

- Battarbee RW, Monteith DT, Juggins S, Evans CD, Jenkins A, Simpson GL (2005) Reconstructing preacidification pH for an acidified Scottish loch: a comparison of palaeolimnological and modeling approaches. Environ Pollut 137:135–149
- Braun WJ, Murdoch DJ (2008). A first course in statistical programming with R. CambridgeUniversity Press, Cambridge, pp 163
- Chessel D, Dufour AB, Thioulouse J (2004) The ade4 package-I- One-table methods. R News. 4: 5-10
- Dalgaard, P (2008) Introductory Statistics with R. Springer, New York, pp 267
- Dreßler M, Selig U, Dörfler W, Adler S, Schubert H, Hübener T (2006) Environmental changes and the migration period in Europe by the example of Lake Dudinghausen (northern Germany). Quarternary Research 66/1: 25-37
- Efron B. 1992. The jacknife, the bootstrap and other resampling plans. SIAM Philadelphia, 92 pp.
- Hastie T, Tibshirani R, Friedman J (2001) The Elements of Statistical Learning. Springer, New York, pp 533
- Hill MO, Gauch HG (1980) Detrended correspondence analysis, an improved ordination technique. Vegetatio 42: 47-58
- Hübener T, Dreßler M, Schwarz A, Langner K, Adler S (2008) Dynamic adjustment of training sets (`moving windows` reconstruction) by using transfer functions in paleolimnology - a new approache. J. Paleolimnol 40:79-95
- Jongman RHG, ter Braak CJF, van Tongeren OFR (1995) Data Analysis in community and landscape ecolpgy. Cambridge University Press, Cambridge, pp 299
- Juggins S (2005) C2 Version 1.4: Software for ecological and palaeoecological data analysis and visualisation. Newcastle upon Tyne: University of Newcastle.
- Juggins S (2006) palaeo: Functions for the analysis of palaeoecological data. R package version 1.0.
- Oksanen J, Kindt R, Legendre P, O'Hara B, Henry M, Stevens H (2007) vegan: Community Ecology Package. R package version 1.8-8. <u>http://cran.r-project.org/, http://r-forge.r-project.org/projects/vegan/</u>
- Pinheiro J, Bates D, DebRoy S, Sarkar D, the R Core team (2007) nlme: Linear and Nonlinear Mixed Effects Models. R package version 3.1-83.
- R Development Core Team (2009) R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0, URL <u>http://www.R-project.org</u>
- Simpson GL, Oksanen, J. (2009). analogue: Analogue matching and Modern Analogue Technique transfer function models. (R package version 0.6-8). (<u>http://cran.r-project.org/package=analogue</u>).
- ter Braak CJF, Juggins S (1993) Weighted averaging partial least squares regression WA PLS: an improved method for reconstructing environmental variables from species assemblages. Hydrobiologia 269:485-502

- ter Braak, C.J.F. & van Dam, H. 1989. Inferring pH from diatoms: a comparison of old and new calibration methods. Hydrobiologia 178:209-23.
- ter Braak CJF (1995) Non-linear methods for multivariate calibration and their use in paleoecology: a comparison of inverse (K-Nearest Neighbours, PLS and WA-PLS) and classical approaches. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 28: 165-180
- van der Voet, H. 1994. Comparing the predictive accuracy of models using a simple randomization test. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 25: 313-323.

Venables WN, Ripley BD (2002) Modern Applied Statistics with S. Fourth Edition. Springer, New York. pp 495

Wood SN (2006) Generalized Additive Models: An Introduction with R. Chapman and Hall, New York, pp. 416

- Zuur AF, Ieno EN, Smith GM (2007) Analysing Ecological Data. Springer, New York, pp. 672
- Zuur AF, Ieno EN, Walker NJ, Saveliev AA, Smith GM (2007) Mixed Effects Modles and Extensions in Ecology with R. Springer, New York, pp. 574

# Anteilserklärung

Folgende Arbeitsanteile der im Anhang befindlichen Veröffentlichungen und Manuskripte wurden durch den Verfasser dieser Arbeit (Sven Adler) erarbeitet:

1. Sample selection for training sets: The North German diatom training set (Studie I)

- Probennahme der 50 Seen (MV001-MV050), sowohl hinsichtlich der Präsedimentproben als auch der Wasserchemie.
- Anfertigung der Diatomeenpräparate und Auswertung derselbigen, sowie Analyse der Wasserchemie.
- Statistische Auswertung der Daten in Kombination mit den Daten von Hübener et al. (2001).
- Verfassung des Manuskriptes.

2. Spatial variability of diatom assemblages in surface lake sediments and its implications for transfer functions (Studie II)

- Probennahme der Transektproben der vier Seen, sowohl hinsichtlich der Präsedimentproben als auch der monatlich erfassten Wasserchemie und Aufwuchsproben.
- Anfertigung der Diatomeenpräparate und Auswertung derselbigen, sowie Analyse der Wasserchemie.
- Statistische Auswertung der Daten
- Verfassung des Manuskriptes

3. Dynamic adjustment of training sets ('moving-window' reconstruction) by using transfer functions in paleolimnology—a new approach (Studie III)

- Entwicklung der Idee der variablen Fenstergröße, sowie des Auswahlverfahrens für die optimale Fenstergröße
- Durchführung aller statistischen Analysen und Berechnungen, sowie Anfertigung aller Abbildungen des Manuskriptes.
- Verfassen des Material- und Methodenteils und des Ergebnisteils des Manuskripts sowie anteilig der Diskussion.

4. Seasonal diatom assemblage change in two North German lowland lakes – implications for transfer functions (Studie IV)

- Entwicklung, Ausbringung und monatliche Bergung der Sedimentfallen, sowie Probennahme der Wasserchemie der zwei Seen.
- Anfertigung der Diatomeenpräparate und Auswertung derselbigen, sowie Analyse der Wasserchemie.
- Statistische Auswertung der Daten, Entwicklung der Idee der WA<sub>seasonal</sub>
- Verfassung des Manuskriptes

5. Yet another transfer function: Are multinomial, class based transfer functions in paleolimnology an alternative to WA-PLS regression? (Studie V)

- Idee der Nutzung von ordinal skalierten Daten in der Paleoökologie
- Statistische Auswertung der Daten
- Verfassung des Manuskriptes

6. A comparison of relative abundance versus class data in diatom-based quantitative reconstructions (Studie VI, accepted with minor revisions)

- Anwendung der Ergebnisse der Studie 5 auf die klassischen Methoden der Paleoökologie, der WA bzw. WA-PLS Regression.
- Statistische Auswertung der Daten
- Verfassung des Manuskriptes

7. The new statistical package *paltran* 1.3 for paleolimnological analyses: WA-, WA-PLS Regression and the Moving Window Approach for R 2.9.2 (Studie VII)

- Programmierung aller Funktionen des Paketes paltran.
- Implementierung von *paltran* auf CRAN
- Verfassung des Manuskriptes

Sven Adler

# Veröffentlichungen:

#### Submitted

- Gilles A, <u>Adler S</u>, Kaschner K, Schidat M, Siebert U, Modelling harbour porpoise seasonal density as a function of the German Bight environment. submitted in Journal of Applied Ecology.
- <u>Adler S</u>, Hübener T., Lotter A., Anderson N.J., Dressler M. Diatom relative abundance data vs. class data do we need relative abundance data for recent lake managements and paleoecological reconstruction? Accepted in Journal of Environmental Management
- Adler S. The new statistical package paltran 1.3 for paleolimnological analyses: WA-, WA-PLSRegression and the Moving Window Approach for R 2.9.0, Accepted in Journal of Palaeolimnology.

#### 2009

- Hübener T, <u>Adler S</u>, Werner P, Schult M, Erlenkeuser H, Meyer H, Bahnwart M (2009a). A multi-proxy paleolimnological reconstruction of trophic state reference conditions for stratified carbonate-rich lakes in Northern Germany. Hydrobiologia (2009) 631: 303–327.
- Hübener T, <u>Adler S</u>, Schult M Michaelis D, Meyer H, Grootes PM, Huels M, Erlenkeuser H (2009b)
  Paläolimnologische Untersuchungen zur Rekonstruktion von typenspezifischen Referenzzuständen in schleswig-holsteinischen Seen (Seentypen 11, 14). Landesamt für Natur- und Umwelt des Landes SH, Kiel-Flintbeck.
- Dähne M, Gallus A, Verfuß UK, <u>Adler S</u>, Benke H (2009) Teilbericht Akustische Erfassung von Schweinswalen. In: Erprobung eines Bund/Länder-Fachvorschlags für das Deutsche Meeresmonitoring von Seevögeln und Schweinswalen als Grundlage für die Erfüllung der Natura 2000 - Berichtspflichten mit einem Schwerpunkt in der deutschen AWZ von Nord- und Ostsee, Teilbericht Marine Säugetiere (FFH-Berichtsperiode 2007-2012), Bericht für das Bundesamt für Naturschutz, Insel Vilm.
- Schwemmert P, <u>Adler S</u>, Guse N, Markones N, Garthe S (2009) Influence of water flow velocity, water depth and colony distance on distribution and foraging patterns of terns in the Wadden Sea. Fisheries Oceanography 18: 161–172.
- Garthe S, Markones N, Hüppop O, <u>Adler S</u> (2009) Effects of hydrographic and meteorological factors on seasonal seabird abundance in the southern North Sea. Marine Ecology Progress Series, accepted.
- Sonntag N, Garthe S, <u>Adler S</u> (2009) A freshwater species wintering in a brackish environment: habitat selection and diet of Slavonian grebes in the southern Baltic Sea Estuarine, Coastal and Shelf Science Volume 84 (2), 186-194

# 2008

- Hübener T, Dreßler M, Schwarz A, Langner K, <u>Adler S</u> (2008) Dynamic adjustment of training sets ('movingwindow' reconstruction) by using transfer functions in paleolimnology—a new approach. J Palaeolim. 40:79-95.
- Adler S (2008) New package paltran 1.0: WA, WA-PLS, (POM) and MW for paleolimnology in R 2.6.1. http://www.r-project.org

- Diederichs A, Nehls G, Dähne M, <u>Adler S</u>, Koschinski S, Verfuß U (2008). Methodologies for measuring and assessing potential changes in marine mammal behaviour, abundance or distribution arising from the construction, operation and decommissioning of offshore windfarms. COWRIE Ltd. ISBN: 978-0-9557501-2-0
- Meding A, Dähne M, Verfuß UK, <u>Adler S</u>, Benke . (2008) Teilvorhaben I: Akustisches Monitoring mit stationären Schweinswal-Detektoren (T-PODs). In: Endbericht für das F+E-Vorhaben "Untersuchungen an Schweinswalen in der Ostsee als Grundlage für die Implementierung des Bestandserholungsplanes für die Schweinswale der Ostsee (Jastarnia-Plan)", (BfN-FKZ: 804 86 011 - K1), Ed. Bräger, S., Deutsches Meeresmuseum, 9-65 pp.
- Dähne M, Verfuß UK, <u>Adler S</u>, Meding A, Honnef CG, Bräger S, Benke H (2008) What can static acoustic monitoring (SAM) achieve for marine protected areas (MPA) monitoring – Results and power analysis of a five-year study on harbour porpoises in the German Baltic Sea. European Research on Cetaceans 22: 1-5.
- Markones N, Garthe S, Dierschke V, <u>Adler S</u> (2008). Small-scale temporal variability of seabird distribution patterns in the south-eastern North Sea. In Wollny-Goerke K., Eskildsen K. (eds.) Marine mammals and seabirds in front of offshore wind energy. Teubner Verlag, Wiesbaden: 115-140.

#### 2007

- <u>Adler S</u>, Hübener T (2007). Spatial variability of diatom assemblages in surface lake sediments and its implications for transfer functions, J Palaeolim. 37: 573-590.
- Meding A, Dähne M, Verfuß U, <u>Adler S</u> and Benke H (2007) Teilvorhaben I: Akustisches Monitoring mit stationären Schweinswal-Detektoren (PODs). In: Dritter Zwischenbericht für das F+E-Vorhaben "Untersuchungen an Schweinswalen in der Ostsee als Grundlage für die Implementierung des Bestandserholungsplanes für die Schweinswale der Ostsee (Jastarnia-Plan)", (BfN-FKZ: 804 86 011 K1), Ed. Bräger, S., Deutsches Meeresmuseum, 1-40 pp.
- Dähne M, Honnef CG, Verfuß UK, Meding A, <u>Adler S</u>, Benke H (2007) Endbericht über das Erprobungsvorhaben: Praktische Erprobung eines Schweinswalmonitorings in der Ostsee im Sinne der FFH-Richtlinie. Deutsches Meeresmuseum, Stralsund, 1-50 pp.
- Wölfel J, <u>Adler S</u>, Hübener T & Karsten U (2007) Diatoms inhabiting a wind flat of the Baltic Sea species diversity and seasonal succession. Estuarine, Coastal and Shelf Science 75: 296-307

#### 2006

- Hübener T, Werner P, <u>Adler S</u>, Schult M, Meyer H, Erlenkeuser H, Grootes PM, Huels M (2006). Paläolimnologische Untersuchungen zur Rekonstruktion von typspezifischen Referenzzuständen in schleswig-holsteinischen Seen, Landesamt für Natur und Umwelt des Landes Schleswig Holstein.
- Dreßler M, Selig U, Dörfler W, <u>Adler S</u>, Schubert H, Hübener T (2006). Environmental changes and the Migration Period in northern Germany as reflected in the sediments of Lake Dudinghausen. Quaternary Research 66: 25–37.
- Hübener T, <u>Adler S</u>, Selig U (2001). Nutzung einer Diatomeen Gesamtphosphat-Korrelation zur Trophieindikation. Erste Ergebnisse aus mecklenburgischen Seen Rostock. Meeresbiolog. Beitr. (2001) 9: 37-45

# Vorträge

- Adler S. (2008) 18 years coastal near monitoring can the effect of climate change be detected in phytoplankton composition in the baltic sea? *LTER* (Long Term Ecological Research)-*Tagung München*.
- Adler S. (2007) Is the use of diatoms relative abundance data in comparison with ordinal data in paleoecology a real improvement? *Deutsche Diatomologentagung*.
- Adler S. (2006). Regressionsanalysen im Unterricht und in der Wissenschaft. Fachtagung für den mathematisch naturwissenschaftlichen Unterricht, Rostock.
- Adler S. (2006). Förderung der Sozialkompetenz anhand eines Schulformübergreifenden Projekts. Entwicklung der Unterrichtsqualität an Schulen in Mecklenburg-Vorpommern. Landeskonferenz zur Qualitätsentwicklung, Güstrow.
- Adler S. (2005) Moderne statistische Verfahren zur Analyse multivariater Daten. IOW Rostock.
- Adler S. (2005). Moderne Methoden der Bioindikation zur Ermittlung ökologischer Verbreitungsoptima von Diatomeen. *Deutsche Diatomologentagung*.

# Danksagung

Auch diese Arbeit ist nur mit der Unterstützung von vielen Kollegen und Freunden zum Abschluss gebracht worden.

Bedanken möchte ich mich bei Fred Brzezinski. Ohne ihn wäre nicht eine Sedimentprobe und Sedimentfalle aus den vielen Seen geborgen worden. Sabine Stolle, Regine Paschen und Prof. Ulf Karsten haben mich tatkräftig im Labor bei der Analyse der Wasserchemie unterstützt. Bei den vielen Probenahmen und Sedimentfallen-Bergungen haben weiterhin Jana Wölfel, Anne Richter, Susi Hofmann, Mark Schneider, Kai Gloyna, Klaus Hennenberg, Jens Niederstrasser und Gunnar Hirte tatkräftig mit angefasst.

Dank eines Marie Curie Stipendiums der Europäischen Union konnte ich an der Universität von Bergen (Norwegen) für vier Monate arbeiten und lernen. John Birks hat mit viel Interesse meine Arbeit aufgenommen und mit einer Reihe von Hinweisen deren Qualität verbessert. Auch hat John als Reviewer der Studien II, III und VI gute konstruktiv Kritik zu den einzelnen Aspekten dieser Studien gegeben. Besonderen Dank gilt Einar Heegaard, der über einen Zeitraum von vier Monaten jede Woche einen Tag opferte, um mir einen vertiefenden Einblick in die Welt der GLM's, GAM's und GLMM's zu geben.

Thomas Hübener hat in vielerlei Hinsicht diese Arbeit ermöglicht, vorangetrieben und zum Erfolg mit beigetragen. Beginnend bei der Beantragung eines Stipendiums, Planungen von Probennahmen, Mithelfen beim Konstruieren und Bergen der Sedimentfallen hat Thomas mit vielen fachlichen Diskussionen und Hinweisen diese Arbeit ermöglicht. Aber auch die vielen Skatabende, Tagungen (mit Skatabenden...), Exkursionen nach Polen, Kroatien, Norwegen und Schweden und persönlichen Gespräche haben viel dazu beigetragen, dass die Zeit in der Botanik der Universität Rostock mir unvergesslich bleiben wird. Danke Thomas!

Prof. Porembski und den Kollegen der Allgemeinen und Speziellen Botanik möchte ich ebenfalls für eine schöne und lehrreiche Zeit danken. Besonderen Dank gilt Petra Kiehl, die immer für alle Probleme eine Lösung gefunden hat, Mirko Dreßler, mit dem ich so schön über alles konstruktiv streiten kann und der mir seine Daten zum "rumspielen" überlassen hat. Gabi Schöley, die die Übersicht über den Papierkram behalten hat. Noch einmal erwähnt werden muss in diesem Zusammenhang Regine Paschen. Ob Unterstützung im Labor oder im Feld, Wettervorhersagen, Literaturrecherche, Probendurchsicht am Utermöhl-Mikroskop,
einen immer aufgefüllten Wasserkocher morgens um 8.00 Uhr, fast immer gut gelaunte Geschichten vom Urlaub, den Kindern, Enkelkindern und Ehemann und dabei nie ein Blatt vor den Mund genommen. In allen Bereichen warst Du die gute Seele der AG Phykologie. Auch Dir einen lieben Dank für die schöne Zeit.

Ermöglicht wurde diese Arbeit durch ein Stipendium der Deutschen Bundesstiftung Umwelt. Neben der finanziellen Unterstützung sind die vielen Stipendiaten- Seminare zu erwähnen, auf denen ich die Möglichkeit hatte, Kontakte zu andern Doktoranden zu knüpfen. Frau Dr. Schlegel-Starmann hat als meine Betreuerin bei der DBU den Aufenthalt in Norwegen ermöglicht und in vielen Gesprächen ein offenes Ohr für ihre Stipendiaten bewiesen. Vielen Dank!

Zu guter letzt sind da Lena, Theodor, Wanja Lotta, Edda und Ulrike zu nennen, die mir neben der gegebenen Motivation und Freiraum für diese Arbeit auch immer gezeigt haben, wo die wesentlichen Dinge im Leben liegen. Lieben Dank Euch Fünf!

Jed

Sven Adler

## Selbstständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die hier vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt und ohne fremde Hilfe verfasst habe, keine außer denen von mir angegebenen Hilfsmittel und Quellen dazu verwendet habe und die den benutzten Werken inhaltlich und wörtlich entnommenen Quellen als solche gekennzeichnet habe.

Rostock, den 21.12.2009

Sven Adler

## Copyright

Durch die partielle Veröffentlichung der Ergebnisse dieser Arbeit bestehen Rechte von Dritten. Welche Zeitschrift oder Verlage die rechte zur Zeit innehaben, ist der Liste der Publikationen zu entnehmen.