

# Supplementary Materials: Modeling of Regionalized Emissions (MoRE) into Water Bodies: An Open-Source River Basin Management System

Stephan Fuchs, Maria Kaiser, Lisa Kiemle, Steffen Kittlaus, Shari Rothvoß, Snezhina Toshovski, Adrian Wagner, Ramona Wander, Tatyana Weber, Sara Ziegler

**Table S1.** Basic input data used in the application example and their origin.

| Topic                            | Basic Input Data <sup>1</sup>  | Dataset   | Source             |
|----------------------------------|--|---|--------------------|
| <b>Modeling units</b>            | Analytical units   | Administrative boundaries   | [1]                |
|                                  |  | Digital elevation model   | [2]                |
|                                  | Point sources  | Wastewater treatment plants   | [3]                |
|                                  |  | Industrial direct dischargers   | [4]                |
|                                  |  | Abandoned mining sites  | [5]                |
|                                  | Average elevation, average slope   | Digital elevation model<br>precipitation                                | [2]<br>[6]         |
| <b>Area</b>                      | area of surface water bodies,  | CORINE Land Cover   | [7]                |
|                                  | area of wetlands,  | Degree of sealing   | [8]                |
|                                  | area of arable land,   |   |                    |
|                                  | area of grassland,   |   |                    |
|                                  | area of naturally covered surfaces,  |   |                    |
|                                  | area of settlements,   |   |                    |
|                                  | area of impervious surfaces,   |   |                    |
|                                  | area of open spaces,   |   |                    |
|                                  | area of mountain regions,  |   |                    |
|                                  | area of surface mining,  |   |                    |
|                                  | area of impervious commercial areas within settlements                     |   |                    |
|                                  | percentage of tile drained areas in agricultural land                      |   | [9]                |
|                                  | area of impervious surfaces within settlements inside agglomeration areas  | CORINE Land Cover<br>Degree of sealing<br>Agglomerations of Germany     | [7]<br>[8]<br>[10] |
|                                  | area of main rivers,   |   | [11]               |
| area of tributaries,             |  |   |                    |
| area of lakes along main rivers, |  |   |                    |
| area of lakes along tributaries  |  |   |                    |
| length of combined sewers        | Statistics on public waste water disposal                                  | [12]  |                    |
| length of sanitary sewers        |  |   |                    |
| <b>Runoff</b>                    | monthly precipitation  | Precipitation   | [6]                |
|                                  | Runoff (calculated in pre-processing)                                      | Modeled precipitation (grid)  | [6]                |
|                                  |  | Water levels at gauges  | [13]               |
|                                  | Longterm evapotranspiration  | Evapotranspiration  | [14]               |
|                                  | Discharge from wastewater treatment plants                                 | Statistics on public waste water disposal                               | [12]               |
|                                  |  | Wastewater treatment plants   | [3]                |
| <b>Inhabitants</b>               | number of inhabitants  | Number of inhabitants for NUTS-3 level                                  | [15–16]            |
|                                  |  | Population (GEOSTAT-raster)   | [17]               |
|                                  |  | Population in Europe  | [18]               |
|                                  | number of inhabitants connected to separate sewers and WWTP <sup>2</sup> , | Statistics on self-supply and -disposal in water for private households | [19]               |
|                                  | percentage of inhabitants connected to separate sewers,                    |   |                    |
|                                  | percentage of inhabitants connected  |   |                    |

|                          |   |  |         |
|--------------------------|---|--|---------|
|                          | separate sewers and WWTP <sup>2</sup> ,<br>percentage of inhabitants only connected to<br>sewers,<br>percentage of inhabitants not connected to<br>sewers |  |         |
|                          | Water consumption (inhabitant specific)   | Public water supply and disposal             | [20]    |
| <b>Sewer<br/>systems</b> | storage volume of stormwater<br>sedimentation tanks in separate sewer<br>systems  | Statistics on public waste water<br>disposal | [12]    |
|                          | storage volume of stormwater overflow<br>tanks in combined sewer systems, area<br>specific  | Statistics on public waste water<br>disposal | [12]    |
|                          | percentage of storage volumes of<br>throughflow tanks in the total storage<br>volume of stormwater sedimentation tanks<br>(US_ss_SHR_vol_tft_sst)         | Statistics on public waste water<br>disposal | [12]    |
|                          | percentage of storage volumes of<br>throughflow tanks in the total storage<br>volume of stormwater overflow tanks<br>(US_cso_SHR_vol_tft_sot)             | stormwater cadastre                          | [21–22] |

<sup>1</sup> The processing steps are described in detail in [23–25]; <sup>2</sup> waste water treatment plant.

**Table S2.** Substance specific input data used in the application example.

| Path | Input Data  | Unit     | Source  |
|------|---|----------|---------|
| AM   | copper emissions via abandoned mining (point sources)                                   | kg/a     | [5]     |
| ID   | copper emissions via industrial direct dischargers (point sources)                      | kg/a     | [4]     |
| WWTP | copper concentration in runoff via waste water treatment plants<br>(point sources)      | µg/L     | [24]    |
| US   | copper inhabitant load  | mg/(E·a) | [23,26] |
|      | copper surface load from impervious surfaces within<br>agglomeration areas              | g/(ha·a) | [27]    |
|      | copper surface load from impervious surfaces  | g/(ha·a) | [27]    |
|      | percentage of dissolved copper inhabitant load  | %        | [28]    |
|      | copper concentration in runoff from commercial areas                                    | µg/L     | [28]    |
| AD   | copper deposition rate  | g/(ha·a) | [29]    |
| SR   | copper concentration in precipitation   | µg/L     | [29]    |
|      | copper emissions from fertilizer via surface runoff from<br>vegetation covered surfaces | kg/a     | [30–40] |
| ER   | copper content in topsoil of agricultural land  | mg/kg    | [41]    |
|      | copper content in topsoil of naturally covered surfaces                                 | mg/kg    | [41]    |
| GW   | copper concentration in runoff via groundwater  | µg/L     | [42]    |
| TD   | copper concentration in runoff via tile drainage  | µg/L     | [43]    |

## References

1. Bundesamt für Kartographie und Geodäsie (BKG). *Vektordaten der Verwaltungsgrenzen 1:250 000 der Bundesrepublik Deutschland (VG250) für das Jahr 2010*; 2010. (In German)
2. National Aeronautics and Space Administration (NASA). Shuttle Radar Topography Mission (SRTM) Digital Elevation Model. 2005. Available online: <http://www2.jpl.nasa.gov/srtm/index.html> (accessed on 30 July 2014).
3. Umweltbundesamt (UBA). e-Kommunalabwasser.: Datenbank zur Berichterstattung zur Kommunalabwasserrichtlinie. Auszug aus dem Berichtsjahr 2012 erhalten am 24.02.2016, 2016. Available online: [http://wiki.enda.eu/e\\_kommu/index.php/Hauptseite](http://wiki.enda.eu/e_kommu/index.php/Hauptseite).

4. Umweltbundesamt (UBA). Deutsches Schadstofffreisetzungs- und -verbringungsregister (PRTR), PRTR-Gesamtdatenbestand (Stand 24.09.2015) in Form einer SQLite-Datenbank. 2016. Available online: <http://www.thru.de/thrude/downloads/>.
5. Marscheider-Weidemann, F.; Tettenborn, F.; Hillenbrand, T. *Daten zu Schwermetallemissionen aus Altbergbaustandorten: 2006-2011*: Karlsruhe, 2013.
6. Haylock, M.R.; Hofstra, N.; Klein Tank, A. M. G.; Klok, E.J.; Jones, P.D.; New, M. A European daily high-resolution gridded data set of surface temperature and precipitation for 1950–2006. *J. Geophys. Res.* **2008**, *113*, doi:10.1029/2008JD010201.
7. European Environment Agency (EEA). CORINE Land Cover vector data. 2012. Copernicus Land Monitoring Services, 2016. Available online: <http://land.copernicus.eu/pan-european/corine-land-cover/view> (accessed on 19 April 2016).
8. European Environment Agency (EEA). Versiegelungsgrade in der Auflösung 20m x 20m für das Jahr 2012. Copernicus Land Monitoring Services, 2016. Available online: <http://land.copernicus.eu/pan-european/high-resolution-layers/imperviousness/view> (accessed on 22 April 2016).
9. Behrendt, H.; Huber, P.; Kornmilch, M.; Opitz, D.; Schmoll, O.; Scholz, G.; Uebe, R. *Nährstoffbilanzierung der Flußgebiete Deutschlands*. (Title in English: Accounting nutrients in German river basins), 1st ed; Umweltbundesamt: Berlin, Germany, 1999.
10. Brinkhoff, T. *Agglomerations of Germany*; 2011. Available online: [http://www.citypopulation.de/Deutschland-Agglo\\_d.html](http://www.citypopulation.de/Deutschland-Agglo_d.html) (accessed on 1 March 2011).
11. Venohr, M. *Modellierung der Einflüsse von Temperatur, Abfluss und Hydromorphologie auf Stickstoffretention in Flusssystemen*. Dissertation. (Title in English: Modeling the influences of temperature, discharge and hydromorphology on nitrogen retention in river basins): Berlin, Germany, 2006.
12. Forschungsdatenzentrum der Statistischen Ämter des Bundes und der Länder (FDZ). *Statistik der öffentlichen Abwasserbeseitigung*. Bezugsjahr 2010, 2013. Available online: [www.forschungsdatenzentrum.de](http://www.forschungsdatenzentrum.de) (accessed on 3 September 2014).
13. *Die Messwerte für die Abflusspegel für den Zeitraum 2012-2014: Datenlieferung*. (Title in English: Water level measurements for the years 2012-2014), 2016.
14. Mu, Q.; Zhao, M.; Running, S.W. *MODIS Global Evapotranspiration Project (MOD16)*; 2013. Available online: <http://www.nts.gov/umt.edu/project/mod16> (accessed on 30 July 2014).
15. Statistisches Amt der Europäischen Union (EUROSTAT). *Absolute und relative Bevölkerungsveränderung auf Ebene der NUTS-3 Regionen*; 2014. Available online: [http://appsso.eurostat.ec.europa.eu/nui/show.do?dataset=demo\\_r\\_gind3&lang=de](http://appsso.eurostat.ec.europa.eu/nui/show.do?dataset=demo_r_gind3&lang=de) (accessed on 6 February 2014).
16. EUROSTAT. *Bevölkerungsdichte auf NUTS3 Ebene*. Available online: <http://appsso.eurostat.ec.europa.eu/nui/show.do> (accessed on 21 October 2014).
17. Statistisches Amt der Europäischen Union (EUROSTAT). *GEOSTAT-Bevölkerungsraster nach Zensus 2011*; 2014. Available online: [http://epp.eurostat.ec.europa.eu/portal/page/portal/gisco\\_Geographical\\_information\\_maps/popups/references/population\\_distribution\\_demography](http://epp.eurostat.ec.europa.eu/portal/page/portal/gisco_Geographical_information_maps/popups/references/population_distribution_demography) (accessed on 21 October 2014).
18. EUROSTAT. *Bevölkerungszahlen für die europäischen Länder*; 2015. Available online: <http://ec.europa.eu/eurostat/tgm/table.do?tab=table&init=1&language=de&pcode=tps00001&plugin=1> (accessed on 18 March 2016).
19. Forschungsdatenzentrum der Statistischen Ämter des Bundes und der Länder (FDZ). *Statistik über die Wassereigenversorgung und -entsorgung privater Haushalte*. Bezugsjahr 2010, 2013. Available online: [http://dok.fdz-metadaten.de/3/32/322/322510/stat/Metadaten\\_private\\_Wasserversorgung.pdf](http://dok.fdz-metadaten.de/3/32/322/322510/stat/Metadaten_private_Wasserversorgung.pdf) (accessed on 3 September 2014).
20. *Öffentliche Wasserversorgung und öffentliche Abwasserentsorgung. Öffentliche Wasserversorgung - 2010: Fachserie 19 Reihe 2.1.1*. (Title in English: Federal Statistical Office (StaBu). Public water supply and sewage disposal. Public water supply – 2010): Wiesbaden, Germany, 2013.
21. LANUV. *Auszug aus der REBEKA-Datenbank. Fachbereich 53: Hochwasserschutz, Stadtentwässerung, Klima u. Wasserwirtschaft: Datenlieferung per E-Mail durch Birgit Wienert*, 2014.
22. Landesanstalt für Umwelt, Messungen und Naturschutz Baden-Württemberg (LUBW). *Auszug aus der WIBAS-Datenbank zu den Regenüberlaufbecken: Datenlieferung durch Referat 41, Stand 15.08.2014*, 2014.
23. Fuchs, S.; Scherer, U.; Wander, R.; Behrendt, H.; Venohr, M.; Opitz, D.; Hillenbrand, T.; Marscheider-Weidemann, F.; Götz, T. *Calculation of Emissions into Rivers in Germany using the MONERIS*

- Model: Nutrients, heavy metals and polycyclic aromatic hydrocarbons*, 1st ed; Federal Environment Agency (Umweltbundesamt): Dessau-Roßlau, 2010.
24. Fuchs, S.; Weber, T.; Wander, R.; Tshovskii, S.; Kittlaus, S.; Reid, L.; Bach, M.; Klement, L.; Hillenbrand, T.; Tettenborn, F. *Effizienz von Maßnahmen zur Reduktion von Stoffeinträgen*. Endbericht. (Title in English: Efficiency of measures to reduce substance emissions), 1st ed; Umweltbundesamt: Dessau-Roßlau, 2017.
  25. Fuchs, S.; Tshovskii, S.; Wander, R.; Kittlaus, S.; Reid, L. *Aktualisierung der Stoffeintragsmodellierung (Regionalisierte Pfadanalyse) für die Jahre 2012 bis 2014*. (Title in English: Updating of emissions modeling (regionalized pathway analyzes) for the year 2012 to 2014): Karlsruhe, 2016. Unpublished.
  26. Wander, R. *Quellenbezogene Analyse und Quantifizierung der Schmutzstofffrachten im Trockenwetter- und Regenwasserabfluss von Kanalisationssystemen*. (Title in English: Source based analysis and quantification of pollutant loads in dry weather flow and rainwater flow in sewer system), 1st ed: Karlsruhe, 2004.
  27. Fuchs, S.; Wander, R.; Rogozina, T.; Hilgert, S.; Scherer, U. *Methodische Optimierung von Modellansätzen zur Schadstoffbilanzierung in Flussgebietseinheiten zur Förderung der Umsetzungsstrategie zur Wasserrahmenrichtlinie: Endbericht für das Vorhaben FZK: 370 822 202/01*. (Title in English: Methodical Optimization of Model Approaches on Pollutant Balancing in River Basin Districts to Promote the Implementation): Karlsruhe, 2012.
  28. Fuchs, S.; Scherer, U.; Hillenbrand, T.; Marscheider-Weidemann, F.; Behrendt, H.; Opitz, D. *Emissions of heavy metals and lindane into river basins of Germany: Research report 20022233*: Berlin, 2002.
  29. EMEP/Norwegian Institute for Air Research (EMEP/NILU). *Concentrations of heavy metals and persistent organic pollutants in air and precipitation*. Measurement data online; 2016. Available online: <http://www.nilu.no/projects/ccc/emepdata.html> (accessed on 10 February 2016).
  30. Statistisches Bundesamt (StaBu). *Wasserwirtschaft: Klärschlamm entsorgung aus der öffentlichen Abwasserbehandlung*; 2016. Available online: <https://www.destatis.de/DE/ZahlenFakten/GesamtwirtschaftUmwelt/Umwelt/UmweltstatistischeErhebungen/Wasserwirtschaft/Tabellen/TabellenKlaerschlammverwertungsart.html#Fussnote1ba> (accessed on 21 April 2016).
  31. Lieferung der Bundesländer. *Bereitstellung von Daten über Schwermetallkonzentrationen im landwirtschaftlich verwendeten Klärschlamm*, 2016.
  32. Fuchs, S.; Dimitrova, S.; Kittlaus, S.; Wander, R.; Reid, L.; Tettenborn, F.; Bach, M. *Aktualisierung der Stoffeintragsmodellierung (Regionalisierte Pfadanalyse) für die Jahre 2009 bis 2011*. (Title in English: Updating of emissions modeling (regionalized pathway analyzes) for the year 2009 to 2011. Unpublished): Karlsruhe, 2014. Unpublished.
  33. Statistisches Bundesamt (StaBu). *Viehbestand: Fachserie 3, Reihe 4.1*. (Title in English: Livestock): Wiesbaden, 2014.
  34. Statistisches Bundesamt (StaBu). *Viehbestand: Fachserie 3, Reihe 4.1*. (Title in English: Livestock): Wiesbaden, 2013.
  35. Statistisches Bundesamt (StaBu). *Viehbestand: Fachserie 3, Reihe 4.1*. (Title in English: Livestock): Wiesbaden, 2012.
  36. Statistisches Bundesamt (StaBu). *Viehhaltung der Betriebe / Agrarstrukturerhebung: Fachserie 3, Reihe 2.1.3*. (Title in English: Animal husbandry of Farms/ Agricultural Structural Survey): Wiesbaden, 2014.
  37. Statistisches Bundesamt (StaBu). *Düngemittelversorgung Wirtschaftsjahr 2014/2015: Fachserie 4, Reihe 8.2*. (Title in English: Fertilizer Ordinance Fiscal year 2014/2015): Wiesbaden, 2015.
  38. Statistisches Bundesamt (StaBu). *Düngemittelversorgung Wirtschaftsjahr 2013/2014: Fachserie 4, Reihe 8.2*. (Title in English: Fertilizer Ordinance Fiscal year 2013/2014): Wiesbaden, 2014.
  39. Statistisches Bundesamt (StaBu). *Düngemittelversorgung Wirtschaftsjahr 2012/2013: Fachserie 4, Reihe 8.2*. (Title in English: Fertilizer Ordinance Fiscal year 2012/2013): Wiesbaden, 2013.
  40. Internationale Kommission zum Schutz des Rheins (IKSR). *Bestandaufnahme zur Einleitung rheinrelevanter Stoffe im Deutschen Rheineinzugsgebiet – Stand 2000*. (Title in English: Inventory of discharge of substances relevant for the Rhine River within the German Rhine catchment area); DKSR: Koblenz, 1999.
  41. LABO. *Hintergrundwerte für anorganische und organische Stoffe in Böden*. (Title in English: Background values of inorganic and organic substances in soils), 3rd ed.

42. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR). *Hintergrundwerte im Grundwasser*; 2014. Available online: [http://www.bgr.bund.de/DE/Themen/Wasser/Projekte/abgeschlossen/Beratung/Hintergrundwerte/hgw\\_projektbeschr.html?nn=1546496](http://www.bgr.bund.de/DE/Themen/Wasser/Projekte/abgeschlossen/Beratung/Hintergrundwerte/hgw_projektbeschr.html?nn=1546496) (accessed on 20 April 2016).
43. Clara, M.; Hochedlinger, G.; Weiß, S.; Windhofer, G.; Hanefeld, W.; Scheffknecht, C.; Zessner, M. *Emissionsmodellierung ausgewählter organischer und anorganischer Parameter im Einzugsgebiet der Dornbirner Ach*. Projektbericht. (Title in English: Modelling of emissions for selected organic and inorganic parameters in the Dornbirner Ach catchment area. project report): Wien, Bregenz, 2014.



© 2017 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).