



Journal of Geophysical Research - Atmospheres

Supporting Information for

Investigating the Understanding of Oxidation Chemistry Using 20 Years of
Airborne OH and HO₂ Observations

David O. Miller¹, William H. Brune¹

¹Department of Meteorology and Atmospheric Science, Pennsylvania State University,
University Park, PA, USA.

Contents of this file

Figure S1

Tables S1 to S3

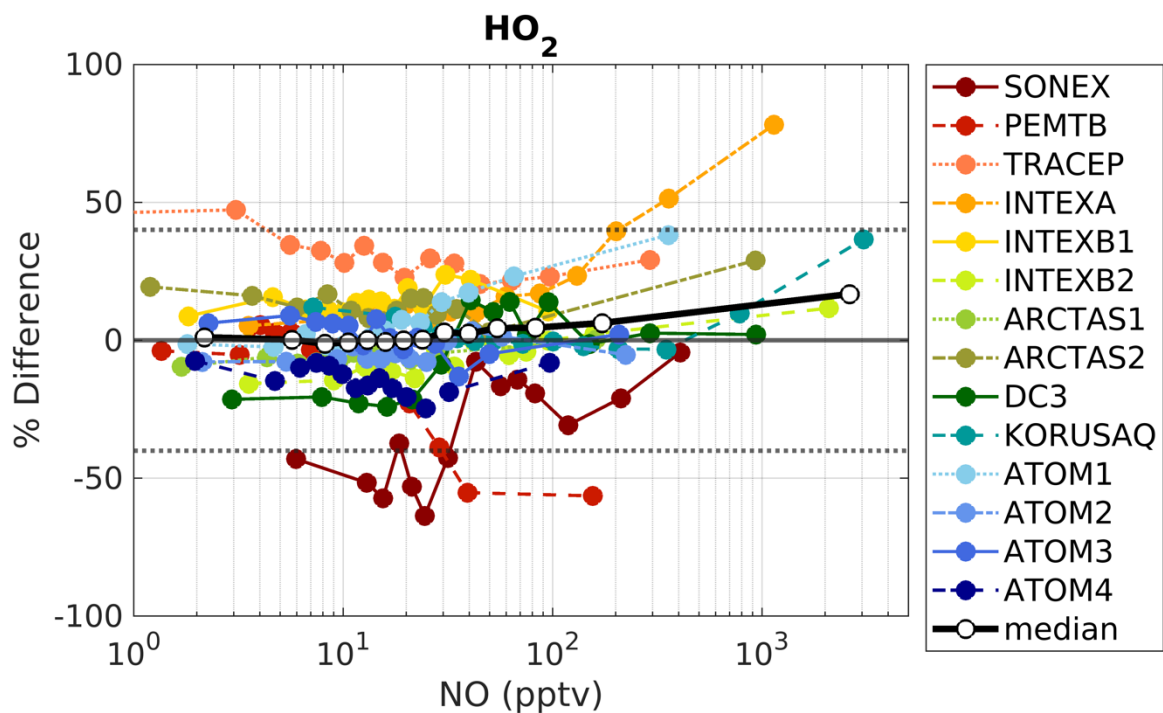


Figure S1: Dependence of HO_2 percent difference on NO. For each mission, median values for PD and NO were determined for equal numbers of one-minute data points, so that the spacing on the NO axis varies. The horizontal dashed lines at -40% and $+40\%$ indicate the combined observation and model uncertainties.

Table S1. Species used as model inputs for the missions in this study. The dark gray colored rows mark the species common to all missions and are used as inputs for the common input set MCM model runs.

Species	SONEX	PENT-B	TRACE-P	INTEX-A	INTEX-B1	INTEX-B2	ARCTAS-A	ARCTAS-B	DC3	KORUS-AQ	ATom-1	ATom-2	ATom-3	ATom-4
CH ₄	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
CO	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
H ₂ O ₂	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
HCHO	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
NO	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
NO ₂	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
O ₃	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Alcohols														
C ₂ H ₅ OH	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
CH ₃ OH	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Aldehydes														
ACR	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
C ₂ H ₅ CHO	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
C ₃ H ₇ CHO	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
CH ₃ CHO	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
MACR	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Alkanes														
BUT1ENE	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
C ₂ H ₆	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
C ₃ H ₈	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
CHEX	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
IC ₄ H ₁₀	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
IC ₅ H ₁₂	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
M23C4	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
M2PE	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
M3PE	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
NC ₁₀ H ₂₂	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
NC ₄ H ₁₀	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
NC ₅ H ₁₂	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
NC ₆ H ₁₄	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•

NC ₇ H ₁₆	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
NC ₈ H ₁₈	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
NC ₉ H ₂₀	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Alkenes														
C ₂ H ₄	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
C ₃ H ₆	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
MEPROPENE	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Alkynes														
C ₂ H ₂	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
C ₅ H ₈	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Aromatics														
BENZENE	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
EBENZ	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
MXYL	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
OETHTOL	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
OXYL	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
PBENZ	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
PXYL	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
TM124B	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
TOLUENE	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
HCOOH	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Chloro														
CH ₂ CL ₂	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
CH ₂ CLCH ₂ CL	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
CH ₃ CCL ₃	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
CH ₃ CL	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
CHCL ₃	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
TCE	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
TRICLETH	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Ketones														
CH ₃ COCH ₃	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
MEK	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
MVK	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Monoterpenes														
APINENE	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
BPINENE	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Nitrates														
HNO ₃	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•

C ₂ H ₅ NO ₃	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
CH ₃ NO ₃	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
IC ₃ H ₇ NO ₃	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
NC ₃ H ₇ NO ₃	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
NC ₄ H ₉ NO ₃	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
PEANO ₃	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
PPN	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
CH ₃ CN	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Unclassified														
CH ₃ CO ₃ H	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
CH ₃ OOH	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
DMS	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
HO ₂ NO ₂	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
SO ₂	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
MTBE	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
PAN	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
STYRENE	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
TM123B	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
TM135B	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
# of obs	32	31	44	48	41	51	62	60	48	66	61	61	61	61

Table S2. Statistics for observed and modeled *OH*. *MCM* rows are the results using the Master Chemical Mechanism. *Prev* rows are the results from previous analyses (SONEX through ARCTAS-B). The slope, intercept, and R^2 are from the York fit. The values in parentheses are the corresponding results using the common input set.

Mission	Model	Slope	Intercept	R^2	Median ratio	Median PD	# of points	Frac. within $\pm 40\%$
SONEX	MCM	0.66 (0.65)	0.02 (0.01)	0.75 (0.75)	0.68 (0.66)	-38.59 (-41.17)	558	50.18 (47.31)
	Prev	0.70	-0.10	0.64	0.63	-44.94		40.50
PEM	MCM	0.83 (0.80)	0.61 (0.59)	0.56 (0.56)	1.10 (1.05)	9.71 (5.19)	1410	78.01 (80.43)
	Prev	0.74	0.85	0.60	1.15	14.06		75.04
Tropics-B	MCM	1.09 (0.88)	0.21 (0.30)	0.56 (0.67)	1.22 (1.03)	20.05 (3.06)	1354	62.56 (71.96)
	Prev	0.68	0.85	0.59	1.18	16.71		62.85
TRACE-P	MCM	0.63 (0.62)	1.08 (0.75)	0.50 (0.65)	0.86 (0.76)	-14.70 (-27.17)	3216	70.27 (66.70)
	Prev	0.64	1.12	0.57	0.88	-12.53		71.80
INTEX-A	MCM	0.81 (0.76)	0.20 (0.20)	0.50 (0.50)	0.93 (0.86)	-7.32 (-15.03)	1375	80.95 (77.02)
	Prev	0.83	0.19	0.50	0.95	-5.32		81.31
INTEX-B (P1) (N. Pacific)	MCM	0.77 (0.56)	0.52 (0.76)	0.40 (0.45)	0.97 (0.79)	-2.97 (-24.05)	1549	70.37 (60.30)
	Prev	0.70	0.66	0.54	0.95	-5.34		68.24
ARCTAS-A (Arctic)	MCM	1.34 (1.21)	-0.12 (-0.09)	0.48 (0.49)	1.15 (1.07)	13.99 (7.13)	2971	59.91 (60.70)
	Prev	1.17	-0.00	0.48	1.17	15.45		59.10
ARCTAS-B (W. Canada)	MCM	1.23 (1.02)	-0.08 (-0.05)	0.24 (0.23)	1.18 (0.99)	16.15 (-0.60)	2866	59.07 (60.19)
	Prev	1.06	0.19	0.28	1.22	19.62		56.42
SONEX - ARCTAS-B	MCM	0.97 (0.83)	0.08 (0.12)	0.65 (0.70)	1.02 (0.90)	1.69 (-10.41)	15299	66.43 (65.59)
	Prev	0.92	0.15	0.71	1.03	2.92		65.31
<hr/>								
DC3	MCM	0.78 (0.62)	0.17 (0.19)	0.65 (0.62)	0.84 (0.69)	-17.33 (-37.24)	3587	77.53 (53.02)
	MCM	0.89 (0.57)	0.44 (0.88)	0.63 (0.64)	1.02 (0.74)	1.70 (-29.51)	5392	82.29 (58.92)
KORUS-AQ	MCM	1.34 (1.27)	-0.18 (-0.10)	0.54 (0.56)	1.27 (1.23)	23.92 (20.87)	2330	62.27 (62.68)
	MCM	1.08 (1.10)	-0.04 (-0.06)	0.65 (0.69)	1.05 (1.06)	5.29 (6.26)	2003	78.48 (79.59)
ATom-1	MCM	1.06 (1.01)	-0.00 (0.03)	0.35 (0.29)	1.06 (1.02)	5.71 (2.15)	2383	73.69 (70.35)
	MCM	1.01 (0.94)	0.04 (0.08)	0.61 (0.59)	1.03 (0.98)	2.88 (-1.98)	1399	76.13 (71.69)
ATom-2	MCM	0.97 (0.80)	0.07 (0.15)	0.64 (0.65)	1.01 (0.88)	1.12 (-12.67)	32393	71.70 (64.37)
	MCM	0.97 (0.80)	0.07 (0.15)	0.64 (0.65)	1.01 (0.88)	1.12 (-12.67)	32393	71.70 (64.37)
<hr/>								
ATom-3	MCM	0.78 (0.62)	0.17 (0.19)	0.65 (0.62)	0.84 (0.69)	-17.33 (-37.24)	3587	77.53 (53.02)
	MCM	0.89 (0.57)	0.44 (0.88)	0.63 (0.64)	1.02 (0.74)	1.70 (-29.51)	5392	82.29 (58.92)
ATom-4	MCM	1.34 (1.27)	-0.18 (-0.10)	0.54 (0.56)	1.27 (1.23)	23.92 (20.87)	2330	62.27 (62.68)
	MCM	1.08 (1.10)	-0.04 (-0.06)	0.65 (0.69)	1.05 (1.06)	5.29 (6.26)	2003	78.48 (79.59)
ALL	MCM	1.06 (1.01)	-0.00 (0.03)	0.35 (0.29)	1.06 (1.02)	5.71 (2.15)	2383	73.69 (70.35)
	MCM	1.01 (0.94)	0.04 (0.08)	0.61 (0.59)	1.03 (0.98)	2.88 (-1.98)	1399	76.13 (71.69)
ALL	MCM	0.97 (0.80)	0.07 (0.15)	0.64 (0.65)	1.01 (0.88)	1.12 (-12.67)	32393	71.70 (64.37)
	MCM	0.97 (0.80)	0.07 (0.15)	0.64 (0.65)	1.01 (0.88)	1.12 (-12.67)	32393	71.70 (64.37)

Table S3. Statistics for observed and modeled HO_2 . *MCM* rows are the results using the Master Chemical Mechanism. *Prev* rows are the results from previous analyses (SONEX through ARCTAS-B). The slope, intercept, and R^2 are from the York fit. The values in parentheses are the corresponding results using the common input set.

Mission	Model	Slope	Intercept	R^2	Median ratio	Median PD	# of points	Frac. within $\pm 40\%$
SONEX	MCM	0.48 (0.47)	1.08 (1.09)	0.83 (0.83)	0.72 (0.71)	-32.96 (-34.16)	558	60.04 (57.35)
	Prev	0.42	1.20	0.76	0.65	-41.80		43.01
PEM	MCM	1.25 (1.21)	-4.50 (-4.40)	0.84 (0.85)	0.93 (0.91)	-6.81 (-9.85)	1410	81.56 (80.43)
	Prev	1.04	-0.58	0.82	1.02	2.38		93.26
Tropics-B	MCM	1.44 (1.21)	-0.97 (0.27)	0.76 (0.81)	1.35 (1.23)	29.61 (20.61)	1354	69.35 (84.25)
	Prev	0.81	6.28	0.58	1.36	30.26		67.06
TRACE-P	MCM	0.96 (0.88)	3.60 (3.85)	0.48 (0.76)	1.20 (1.12)	18.46 (11.09)	3216	69.15 (77.16)
	Prev	0.98	4.14	0.64	1.26	22.71		68.03
INTEX-A	MCM	1.15 (1.05)	-0.20 (0.12)	0.61 (0.64)	1.15 (1.09)	14.11 (8.42)	1375	86.04 (90.47)
	Prev	1.12	-0.71	0.64	1.09	8.20		90.04
INTEX-B (P1) (N. Pacific)	MCM	0.99 (0.87)	-0.99 (-0.21)	0.77 (0.77)	0.94 (0.88)	-5.96 (-13.15)	1549	87.60 (82.76)
	Prev	0.97	-0.79	0.78	0.94	-5.97		86.83
ARCTAS-A (Arctic)	MCM	0.92 (0.89)	0.09 (0.12)	0.77 (0.78)	0.95 (0.92)	-5.07 (-8.18)	2971	90.54 (88.62)
	Prev	0.92	0.40	0.80	0.99	-1.01		94.08
ARCTAS-B (W. Canada)	MCM	1.44 (1.59)	-4.06 (-6.07)	0.66 (0.73)	1.14 (1.16)	12.81 (15.03)	2866	80.50 (77.98)
	Prev	1.45	-3.05	0.61	1.18	16.50		74.88
SONEX - ARCTAS-B	MCM	1.12 (1.06)	-0.56 (-0.41)	0.68 (0.77)	1.07 (1.02)	6.36 (2.40)	15299	79.65 (81.54)
	Prev	1.08	0.13	0.69	1.10	9.16		79.58
<hr/>								
DC3	MCM	1.01 (0.80)	-0.76 (0.89)	0.56 (0.81)	0.92 (0.87)	-8.17 (-13.65)	3587	77.67 (81.29)
KORUS-AQ	MCM	0.95 (0.80)	1.28 (2.43)	0.69 (0.68)	1.04 (0.92)	3.50 (-7.86)	5392	84.77 (76.13)
ATom-1	MCM	1.12 (1.13)	-0.81 (-0.60)	0.37 (0.74)	1.06 (1.09)	6.07 (8.34)	2330	79.14 (83.10)
ATom-2	MCM	1.09 (1.19)	-1.58 (-2.11)	0.50 (0.83)	0.96 (0.99)	-4.42 (-0.70)	2003	84.17 (92.27)
ATom-3	MCM	1.27 (1.13)	-2.00 (-1.28)	0.64 (0.69)	1.01 (0.97)	0.58 (-2.82)	2383	74.53 (76.12)
ATom-4	MCM	1.08 (1.00)	-2.03 (-1.64)	0.76 (0.77)	0.87 (0.84)	-14.11 (-17.67)	1399	83.70 (82.84)
ALL	MCM	1.07 (0.96)	-0.46 (0.16)	0.63 (0.73)	1.03 (0.98)	2.56 (-1.90)	32393	80.32 (81.04)