

Project: **1440**

Project title: **EMAC Contribution to HTAP3-OPNS**

Principal investigator: **Mariano Mertens**

**Allocation period: 2024-07-01 to 2025-06-30**

## Project overview

Das **Göteborg-Protokoll (GP)** von 1999 des **UNECE-Übereinkommens über weiträumige grenzüberschreitende Luftverunreinigung (CLRTAP)** in seiner 2012 geänderten Fassung wurde einem Review unterzogen, das 2022 abgeschlossen wurde. Die Überprüfung ergab (unter anderem), dass die **derzeitigen Rechtsvorschriften zur Luftqualität in der UNECE-Region nicht ausreichen** um die langfristigen Luftreinhalteziele des CLRTAP zu erreichen. Darüber hinaus wird eine globale Reduzierung der Methanemissionen erforderlich sein, um diese Ziele zu erreichen. Das Exekutivorgan (EB) der CLRTAP beschloss auf seiner Sitzung im Dezember 2023, den **Prozess der Überarbeitung des GPs einzuleiten** und forderte die an den Überarbeitungen mitwirkenden Konventionsgremien auf, zu prüfen, **wie Methan in seiner Rolle als Ozonvorläufer in eine künftige Version des Gps aufgenommen werden könnte**.

Die **Task Force on Hemispheric Transport of Air Pollution (TF HTAP)** untersteht der **CLRTAP** und hat den Auftrag, den weiträumigen (hemisphärischen) Einfluss entfernter Quellen von Luftverschmutzung (einschließlich Methan) in der UNECE-Region zu quantifizieren. Zur **Unterstützung der Überarbeitung des GPs organisiert die TF HTAP derzeit eine neue Runde von Multimodell-Experimenten (HTAP3-OPNS)** mit dem Ziel, den weiträumigen Beitrag zu Ozon, PM und der Ablagerung von Stickstoff und Schwefel in verschiedenen Weltregionen zu quantifizieren.

Folgende „Scienceto-Policy“ Fragen sollen in HTAP3-OPNS beantwortet werden:

- Welchen relativen Beitrag leisten intra- und extraregionale Quellen zur Luftverschmutzung und deren Auswirkungen in den verschiedenen Weltregionen?
- Wie geeignet sind die aktuellen Modelle zur Quantifizierung dieser Beiträge? Können wir die Unterschiede zwischen den Modellen erklären?
- Wie werden sich diese Beiträge unter verschiedenen möglichen zukünftigen Emissionsszenarien und unter dem zukünftigen Klimawandel verändern?

In diesem Projekt planen wir den **einzigsten deutschen Beitrag zu den globalen Luftqualitätsprojektionen im Rahmen von HTAP3-OPNS** mit dem EMAC Klima-Chemie Modell. Dieser Beitrag ist dabei ein gemeinsamer Beitrag verschiedener Partner des EMAC-Konsortiums. Neben dem DLR sind folgende Personen Ansprechpartner\*innen:

**Prof. Dr. Tim Butler, RIFS-Potsdam**

Da im Rahmen von **HTAP3-OPNS kein eigenes Funding** zur Verfügung steht werden die Arbeiten in **diversen grund- und drittmittel finanzierten Projekten durchgeführt**. Im DLR sind dies u.a. die beiden folgenden Projekte:

**BMBF Projekt IMPAC<sup>2</sup>T, [impac2t-project.de](https://impac2t-project.de), FKZ: 01LN2207A, Laufzeit 03/2023 – 02/2028**

**DLR internes Projekt MoDa (Models and Data for Future Mobility\_Supporting Services), Laufzeit 01/2024 – 12/2027**

## Range of planned work from the scientific view

Es existiert ein ausführliches White-Paper zum Design der Simulationen (<https://nextcloud.gfz-potsdam.de/s/NqgxtQb6ELJw76S>). Dieses White-Paper ist zur Zeit noch nicht finalisiert und in

der Woche vom 22.4 – 25.4 finden weitere Online-Workshops statt um das Design zu finalisieren. Es wird hierbei jedoch nur noch kleine Änderungen geben.

Leider hat HTAP3-OPNS eine sehr enges Zeitfenster, welches vorsieht das **erste Simulationen im Frühjahr 2025 fertig sein sollen**. Der Start der Simulationen ist daher bereits im Juli 2024 geplant. Entsprechende Emissionen werden durch die TF HTAP zur Verfügung gestellt.

Grundsätzlich sind in HTAP3-OPNS drei verschiedene Simulationsstränge geplant:

1. Perturbationssimulationen basierend auf zukünftigen Emissionen zur Berechnung von Quelle-Rezeptor Beziehungen
2. Transiente Simulationen mit zukünftigen Emissionen für 2010 – 2050
3. Transiente Simulationen mit historischen Emissionen (2000 – 2020)

**Der Fokus für den Antragszeitraum liegen dabei auf den Simulationen der Stränge 1 & 2.** Die Simulationen für den Strang 3 werden im nächsten Antragszeitraum durchgeführt.

EMAC wird wir im Rahmen der Simulationen mit dem **Set-Up, welches im Projekt id0853 für die CCMI2 Simulationen genutzt wird, durchgeführt**. Dieses Set-Up sieht eine Auflösung von T42L90MA vor (mehr Details unter Mathematical/computational aspects). Es müssen lediglich die Emissionen entsprechend dem Simulationsprotokoll angepasst werden. Zusätzlich wird die Tagging Methode zur Quellzuordnung aktiviert werden.

Im Folgenden sind die geplanten Simulationen kurz dargestellt

## **AP 1.1: Perturbationssimulationen**

Geplant werden alle Perturbationssimulationen welche im Rahmen von HTAP3-OPNS als höchste Priorität genannt werden sowie die Perturbationssimulation für die Luftfahrt (siehe Abbildung 1). In diesen Simulationen werden in bestimmten Regionen die Emissionen bestimmter Spezies um 20 % reduziert. Jede der 25 Simulationen deckt ein Modelljahr ab (also 25 Modelljahre). Auf Basis der Ergebnisse der Perturbationssimulationen wird die HTAP Community einen Emulator erstellen, welcher es ermöglicht Auswirkungen von Emissionsänderungen auf die Luftqualität möglichst effizient zu quantifizieren.

Die Perturbationssimulationen basieren dabei auf den GAINS LRTAP Emissionen für das 'CLE' Szenario (siehe AP 1.2) für das Jahr 2050. Da auch viele Chemie-Transport-Modelle diese Perturbationssimulationen durchführen wird mit gegenwärtiger Meteorologie (2015) und nicht mit zukünftigen Klimabedingungen gerechnet. Hierfür werden wir EMAC gegen ERA5 nudgen.

Zusätzlich sehen wir noch 20 Jahre als Spin-Up für die entsprechenden Initialbedingungen vor, da auch Methan 2050er Bedingungen entsprechen soll. Da Methan eine lange Lebenszeit hat ist ein entsprechend langer Spin-Up notwendig.

Priorities for HTAP3 Simulations		2015 meteorology / 2050 emissions		Highest Priority		Next Priority		Lower Priority	
Base (CLE 2050 emissions)		BASE (CLE 2050)		1					
<b>Global Perturbations</b>									
Increase CH4 Conc	CH4INC			1					
Decrease CH4 Conc	CH4DEC			1					
Decrease CH4 Conc and all anthro emissions	CH4ALL			1					
Decrease CH4 Conc and anthro NOx emissions	CH4NOX			1					
Decrease All anthro emissions	GLOALL			1					
Decrease NOx	GLONOX			1					
Decrease VOC	GLOVOC			1					
Decrease CO	GLOCO			1					
<b>Global Scenario Runs</b>									
CLE 2015 emissions	CLE2015			1					
MTFR (2050)	MTFR								
HILO (2050)	HILO								
LOW (2050)	LOW								
<b>Regional Emissions Perturbation (2015 meteorology, 2050 CLE emissions)</b>									
		All	NOX	VOC	CO	SO2	NH3	PM	
N America	NAM	1	1	1					
EMEP Domain	EMEP	1	1	1					
EMEP West	EMEPW								
EMEP East	EMEPE								
East Asia	EAS	1	1	1					
South Asia	SAS	1	1	1					
South and East Mediterranean	SMD	1	1	1					
Middle East	MDE								
North Africa	NAF								
SE Asia	SEA								
Mex/C America/Caribbean	MCA								
Rest of World (SAM+SAF+PAN)	ROW								
South America	SAM								
Southern Africa	SAF								
Aust/NZ/Pacific	PAN								
Shipping	SHIP	1							
Aviation	AVI								

**Abbildung 1:** Liste der geplanten Sensitivitätssimulationen in HTAP3-OPNS. In diesem Projekt sollen alle Läufe mit "Highest Priority" sowie die Aviation Perturbation durchgeführt werden. Quelle: HTAP3-OPNS White Paper.

## AP 1.2: Transiente Zukunftsläufe

Die transienten Simulationen für den Zeitraum 2010 bis 2050 basieren auf den Emissionen von GAINS LRTAP und umfassen kurzlebigen Spurenstoffe sowie von Methan. Die weiteren Randbedingungen für die Klimaprojektionen (Meeresoberflächentemperaturen, Seeeis und Treibhausgase) entsprechen in allen Simulationen der SSP2-4.5 Projektion.

Mit EMAC sollen die drei wichtigsten Projektionen durchgeführt werden:

1. CLE
  - Emissionen gemäß dem Szenario "Current Legislation". Das Szenario basiert auf den Aktivitätsdaten von SSP2.4-5 und beinhaltet alle aktuellen und geplanten Luftschadstoff-Minderungen.
2. MFTR
  - Emissionen gemäß dem Szenario "Maximum feasible technical reduction". Es basiert auf den gleichen Aktivitätsdaten wie CLE, nimmt aber deutlich stärker Minderungsmaßnahmen an.
3. HILO
  - In diesem Szenario werden die Luftschadstoffemissionen gemäß MFTR gewählt und die Methanemissionen entsprechen CLE. Dieses Szenario untersucht den Einfluss starker Emissionsminderungen von Luftschadstoffen bei gleichzeitig verringerter Mitigation von Methan.

Für jede Simulation werden wir den Zeitraum 2010 – 2050 simulieren (40 Jahre), wobei wir zusätzlich noch 5 Jahre pro Simulation als Spin-Up vorsehen.

## Mathematical and/or computational aspects

Das "ECHAM/MESSy Atmospheric Chemistry" (EMAC) Modell ist ein numerisches Chemie- und Klimasimulationssystem. Es vereint Submodelle, die einzelne Prozesse in der Troposphäre und Mittelatmosphäre beschreiben und auch deren Wechselwirkung mit Ozeanen, Land und anthropogenen Einflüssen berücksichtigen. Dazu wird die zweite Version des "Modular Earth Submodel System" (MESSy2) genutzt (Jöckel et al., 2010). Das zugrunde liegende

Atmosphärenmodell ist die 5. Generation des "European Centre HAMBURG general circulation model" (ECHAM5, *Roeckner et al., 2006*), wobei die physikalischen Parametrisierungen alle durch entsprechende (weiterentwickelte) MESSy Submodelle ersetzt wurden. Lediglich der spektrale dynamische Kern, die großskalige Advektion (*Lin & Rood, 1996*) und das „nudging“-Verfahren stammen noch von ECHAM5. Für die hier vorgeschlagenen Simulationen soll EMAC (Version 2.55.x) in der T42L90MA Auflösung eingesetzt werden. Die spektrale Auflösung (T42) entspricht einem quadratischen Gauss'schen Gitter von  $2,8^\circ \times 2,8^\circ$ . Die vertikale Auflösung besteht aus 90 hybriden Druckleveln (L90). Dabei gibt der Zusatz „MA“ (middle atmosphere) den oberen Rand (Mitte der oberen Gitterbox) des Modells an: 0.01 hPa (ca. 80 km). Die zeitliche Schrittweite beträgt bei dieser Auflösung 12 Minuten. Die Berechnung der chemischen Kinetik in der Gasphase erfolgt im Submodell MECCA (*Sander et al., 2019*), das auf der "Kinetic Pre-Processor" (KPP) -Software (*Sandu and Sander 2006*) aufbaut, die in der Flüssigphase (Wolkentropfen und Niederschlag) im Submodell SCAV (*Tost et al., 2006*). Die Photolyseraten werden im Submodell JVAL (*Sander et al., 2014; Landgraf and Crutzen, 1998*) berechnet, heterogene Reaktionsraten an polaren Stratosphärenwolken und auf stratosphärischem Aerosol im Submodell MSBM (*Jöckel et al., 2010*). Troposphärisches Aerosol wird im Submodell MADE3 beschrieben (*Kaiser et al., 2019*). Die bisher genannten Submodelle haben den größten Ressourcenverbrauch und umfassen 80-90% des Gesamtbedarfs. Eine Übersicht der weiteren Submodelle ist in *Jöckel et al. (2010)* sowie auf der MESSy Projektseite zu finden ([www.messy-interface.org](http://www.messy-interface.org)).

Die im Vergleich zu rein physikalischen Klimamodellen relativ „grob“ erscheinende Modellauflösung (T42) ist der Tatsache geschuldet, dass die Prozesse für die Atmosphärenchemie (inkl. der Aerosolprozesse, Emissionen, Trocken- und Feuchtdeposition, Spurenstofftransport, etc.) die Charakteristik des Modells (im Vergleich zu einem Klimamodell ohne Chemie) im Bezug auf die Anforderungen an das HPC System entscheidend verändern:

1. Das Klima-Chemie-Modell (CCM) simuliert (je nach Setup) ein bis zwei Größenordnungen mehr prognostische Variablen (die chemischen Spurenstoffe) und liefert (optional) zusätzliche diagnostische Variablen im Vergleich zu einem Klimamodell (GCM) ohne Chemie.
2. Die numerischen Löser für die kinetischen ODE („ordinary differential equation“) Systeme, die die chemischen Reaktionen in Gas-, Flüssig- und Aerosolphase beschreiben, benötigen (je nach Setup) bis zu 90% des gesamten Rechenbedarfes.

Daraus folgt, dass für einen gegebenen Simulationszeitraum (z.B. eine Dekade) und eine gegebene Gitterauflösung ein CCM gegenüber einem GCM mindestens einen Faktor 10 mehr Rechenzeit benötigt, einen Faktor 10 bis 100 mehr Speicher pro „core“ benötigt und einen Faktor 10 bis 1000 (!) mal mehr Ausgaben für die weiteren Analysen schreibt. Die vermeintlich gröbere Gitterauflösung des CCMs dient somit der (teilweisen) Kompensation dieser (gegenüber einem GCM) erhöhten HPC Anforderungen.

## Algorithmic/mathematical/numerical methods and solution procedures

Im spektralen Kern von ECHAM werden die die Atmosphärendynamik beschreibenden primitiven Gleichungen in horizontaler Richtung mit einer spektralen Transformationsmethode gelöst. In vertikaler Richtung kommt die Methode der finiten Differenzen zum Einsatz und die Zeitintegration läuft über ein semi-implizites Leap-Frog-Verfahren mit Zeitfilter (*Asselin, 1972*). Die großskalige Advektion von Substanzen wie Wasserdampf, flüssiges Wasser und Eis sowie aller Spurengase und Aerosole wird mit einem Semi-Lagrangen Schema berechnet (*Lin & Rood, 1996*). Die meisten MESSy-Submodelle arbeiten auf dem der spektralen Auflösung korrespondierenden quadratischen Gauss'schen Gitter und behandeln z.B. parametrisierte subgridskalige Prozesse (Konvektion, konvektiver Transport von Spurenstoffen, Wolken, etc.), und die atmosphärische Chemie mit allen relevanten Prozessen. Abhängig von der Komplexität der verwendeten Chemie ist die Berechnung des chemischen Systems dabei meist wesentlich aufwendiger als alle anderen Berechnungen zusammen. Die Gesamtheit chemischer Reaktionen bildet ein steifes System gewöhnlicher Differentialgleichungen, das mit einer Rosenbrock-3-Methode mit adaptivem Zeitschritt gelöst wird. Die Parallelisierung des Modellsystems setzt auf

verteilten Speicher, mit verschiedenen Ansätzen für spektrale Felder, Gitterpunktfelder, bzw. die Traceradvektion. In der spektralen Darstellung werden die Felder entsprechend den Koeffizienten ihrer Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen verteilt. Bei der Gauss'schen Darstellung wird die Atmosphäre zonal und longitudinal sowie vertikal in Quader unterteilt.

## Particular suitability to solve the problem with help of HLRE-4

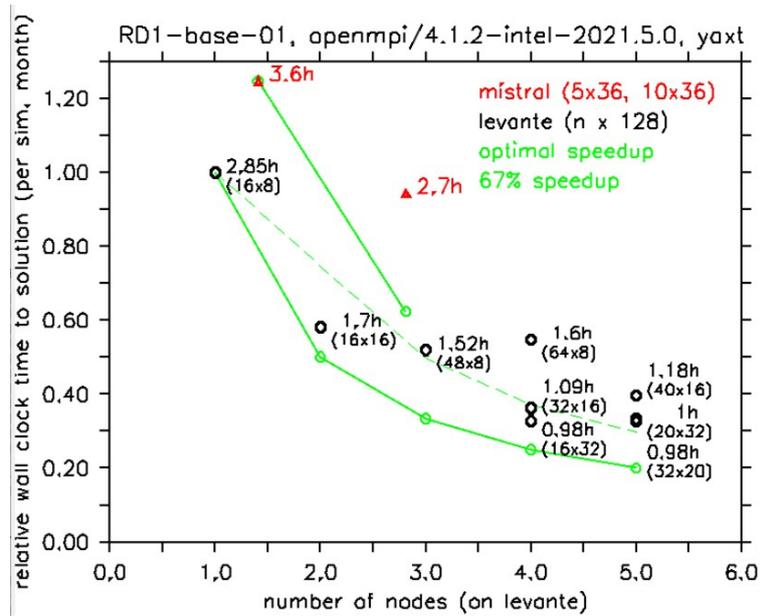
Unsere Erfahrungen am DKRZ in vorherigen vergleichbaren Projekten wie z.B. im Projekt ESCiMo (id0853) zeigt, dass aufgrund des notwendigen Ressourcenbedarfs (HPC-Leistung und Speicher), nur das DKRZ für diese Simulationen in Frage kommt.

## Performance benefits depending on the number of used CPUs (scalability)

Die Berechnungen des Ressourcenbedarfs für die geplanten Simulationen basieren auf Testsimulationen mit EMAC auf levante und den bereits durchgeführten Simulationen auf dem Projekt id0853. Demnach läuft EMAC2.55 freilauend mit Stratosphären- und Troposphärenchemie (jedoch ohne Aerosole) in der T42L90MA Auflösung unter der Verwendung von 4 Knoten optimal, das entsprechende Skalierungsverhalten ist in Abb. 2 dargestellt. Demnach werden 4,4 node-h pro Simulationsmonat, d.h. 53 node-h pro Simulationsjahr benötigt. Diese Zahlen basieren jedoch auf Simulationen, die mit dem „alten“ ECHAM5 (E5rad) Strahlungsschema durchgeführt wurden. Ein Modellsetup gleicher Auflösung, jedoch unter Einbeziehung detaillierter Aerosolprozesse benötigt 11 node-h pro Simulationsmonat bzw. 132 node-h pro Simulationsjahr. Durch zusätzliche on-line Diagnostiken und damit verbundenen zusätzlichen Tracern (insbesondere durch das „tagging“-Verfahren) erhöht sich der Bedarf auf (ohne Aerosol) 10 (120) node-h pro Simulationsmonat (-jahr).

Die Bedarfe an /work, /arch (und /doku) pro Simulationsjahr basieren auf den bereits durchgeführten Simulationen auf levante, für die Datenhaltung wurde das aktuell vorhandene Datenvolumen zu Grunde gelegt. Der Speicherbedarf in /work beträgt somit für eine typische Referenzsimulation ohne Aerosole und ohne „tagging“ ca. 0,27 TiB/Jahr, hierbei werden i.a. nur Monatsmittelwerte gespeichert.

Bei Verwendung des „tagging“ (und anderer Diagnostiken) erhöht sich der Bedarf um ca. 30%, also auf 0,35 TiB/Jahr bei der Speicherung von Monatsmittelwerten. Der Bedarf in /arch (für die Rohdaten, also die direkten Modellausgaben) beträgt 3,5 TiB/Jahr (Referenz), 4,4 TiB/Jahr (mit Aerosol) und 4,51 TiB/Jahr (mit „tagging“, ohne Aerosol).



**Abbildung 2:** Skalierungsverhalten von EMAC bei einem typischen CCMI-2 Modellsetup auf levante (zum Vergleich auf mistral in rot). Die Zahlen geben die Zeit („wall-clock“) für einen simulierten Monat an, die Zahlen in Klammern geben die verwendete X-Y „horizontal domain decomposition“ an. Grüne Linien und Punkte geben einen idealen (durchgezogen) und einen 67% (gestrichelt) „speed-up“ an.

## Required computing time and amount of storage space

Auf Basis der o.a. Analysen auf Levante ergibt sich für die geplanten Arbeiten im Antragszeitraum folgender Ressourcenbedarf in tabellarischer Übersicht:

Simulation	Setup	years	node-h/y	total node-h	/work [TiB] per year	/work [TiB]	/arch per year	/arch [TiB]
25 Perturbationssimulationen á 1 Jahr	T42L90MA inkl. „TAGGING“	25	120	3000	0.35	8.75	4.51	112.75
20 Jahre Spin-Up für Initialbedingung	T42L90MA inkl. „TAGGING“	20	120	2400	0.35	7.00	4.51	90.20
CLE	T42L90MA inkl. „TAGGING“	40	120	4800	0.35	14.00	4.51	180.40
MFTR	T42L90MA inkl. „TAGGING“	40	120	4800	0.35	14.00	4.51	180.40
HILO	T42L90MA inkl. „TAGGING“	40	120	4800	0.35	14.00	4.51	180.40
Spin-Ups für	T42L90MA	15	120	1800	0.35	5.25	4.51	67.65

transiente simulationen	inkl. „TAGGING“							
Summe			<b>node-h</b>	21 600	<b>/work</b>	63.00	<b>/arch</b>	811.80

Die Übertragung der Simulationen nach /doku ist für den nächsten Antragszeitraum vorgesehen.

## Additional value compared to other projects

Das Projekt „**EMAC Contribution to HTAP3-OPNS**“ liefert den einzigen globalen Beitrag der Luftqualitätsprojektionen zu HATP3-OPNS aus dem deutschen Raum und bietet somit eine wichtige Sichtbarkeit der deutsche Klima-Chemie-Community in der internationalen Community. Die HTAP-Community befindet sich dabei in engem Austausch mit der CCMI-Community, der TOAR-Community und der AerChem-MIP(2) Community um zu verhindern, dass Simulationen doppelt durchgeführt werden. Somit grenzt sich dieses Projekt auch zum Projekt id853 ab, in welchem die CCMI/CCMI2 und TOAR Simulationen durchgeführt werden. Im Vergleich zum Projekt bb1361 werden in diesem Projekt globale Simulationen nach dem HTAP3-OPNS Protokoll durchgeführt, während in bb1361 regionale Klima- und Luftqualitätsprojektionen nach den SSP Szenarien durchgeführt werden. In bb1361 werden die Ergebnisse aus diesem Projekt zur weiteren Einordnung genutzt.

Die Modellergebnisse werden der TF-HTAP zur Verfügung gestellt wo die Modelldaten für Multi-Modell Auswertung sowie zur Erstellung von Emulatoren verwendet werden. Hierdurch werden die Daten best möglichst von der wissenschaftlichen Community genutzt.

## References

Asselin, R. (1972): Frequency filter for time integrations, *Mon. Wea. Rev.*, 100, 487–490.

Jöckel, P., A. Kerkweg, A. Pozzer, R. Sander, H. Tost, H. Riede, A. Baumgaertner, S. Gromov and B. Kern (2010): Development cycle 2 of the Modular Earth Submodel System (MESSy2), *Geoscientific Model Development*, 3, 717–752, doi: 10.5194/gmd37172010.

Kaiser, J. C., Hendricks, J., Righi, M., Jöckel, P., Tost, H., Kandler, K., Weinzierl, B., Sauer, D., Heimerl, K., Schwarz, J. P., Perring, A. E., & Popp, T.: Global aerosol modeling with MADE3 (v3.0) in EMAC (based on v2.53): model description and evaluation, *Geoscientific Model Development*, 12, 541–579, doi: 10.5194/gmd-12-541-2019, URL <https://www.geosci-model-dev.net/12/541/2019/> (2019)

Landgraf, J. and Crutzen, P. J. (1998): An efficient method for online calculations of photolysis and heating rates, *J. Atmos. Sci.*, 55, 863–878.

Lin, S.J. and Rood, R. (1996): Multidimensional fluxform semiLagrangian transport schemes, *Mon. Wea. Rev.*, 124,2046–2070.

Roeckner, E., R. Brokopf, M. Esch, M. Giorgetta, S. Hagemann, L. Kornblueh, E. Manzini, U. Schlese and U. Schulzweida (2006): Sensitivity of simulated climate to horizontal and vertical resolution in the ECHAM5 atmosphere model, *J. Climate*, 19, 37713791.

Sander, R., P. Jöckel, O. Kirner, A. T. Kunert, J. Landgraf and A. Pozzer (2014): The photolysis module JVAL-14, compatible with the MESSy standard, and the JVal PreProcessor (JVPP), *Geoscientific Model Development*, 7, 2653–2662, doi: 10.5194/gmd-7-2653-2014, URL <http://www.geosci-model-dev.net/7/2653/2014/>

Sander, R., A. Baumgaertner, D. Cabrera-Perez, F. Frank, S. Gromov, J.-U. Grooß, H. Harder, V. Huijnen, P. Jöckel, V. A. Karydis, K. E. Niemeyer, A. Pozzer, H. Riede, M. G. Schultz, D. Taraborrelli and S. Tauer (2019): The community atmospheric chemistry box model CAABA/MECCA-4.0, *Geoscientific Model Development*, 12, 1365–1385, doi: 10.5194/gmd-12-1365-2019, URL <https://www.geosci-model-dev.net/12/1365/2019/>

Sandu, A. and Sander, R. (2006): Technical note: Simulating chemical systems in Fortran90 and Matlab with the Kinetic PreProcessor KPP2.1, *Atmos. Chem. Phys.*, 6, 187–195, doi:10.5194/acp61872006.

Tost, H., P. Jöckel, A. Kerkweg, R. Sander and J. Lelieveld (2006): Technical note: A new comprehensive SCAVenging submodel for global atmospheric chemistry modelling, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 6, 565–574, doi: 10.5194/acp65652006.