

Обнаружение возможности оценки режимов образования приземного озона на основе данных дистанционного зондирования Земли

Т. Г. Крупнова¹, О. В. Ракова¹, Г. П. Стручкова², Т. А. Капитонова²,
С. А. Тихонова², Е. А. Выходцева³, В. М. Кочегоров³

¹ Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, 454080, Россия
E-mails: krupnovatg@susu.ru, rakovaov@susu.ru

² Институт физико-технических проблем Севера им. В. П. Ларионова СО РАН
Якутск, 677980, Россия
E-mails: pandoramy8@list.ru, kapitonova@iptpn.ysn.ru, sardankobeleva@gmail.com

³ Челябинский центр по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды — филиал ФГБУ «Уральское УГМС», Челябинск, 454080, Россия
E-mails: omp@chelpogoda.ru, kvm@chelpogoda.ru

Приземный озон (O_3) влияет на окислительную способность атмосферы и приводит к образованию высокотоксичного фотохимического смога. Поэтому крайне важно изучать закономерности синтеза O_3 в приземном слое воздуха. Он образуется в результате сложных фотохимических реакций с участием его предшественников: оксидов азота (NO_x) и летучих органических соединений (ЛОС). Образование приземного O_3 может быть ограничено в зависимости от режима, NO_x или ЛОС. Спутниковые данные могут быть весьма полезны для изучения режимов образования O_3 , так как обеспечивают непрерывные глобальные наблюдения за двумя предшественниками тропосферного озона, а именно диоксидом азота (NO_2) как индикатором NO_x и формальдегидом ($HCHO$) как надёжным индикатором ЛОС. В настоящей работе впервые в России было использовано полученное по данным инструмента TROPOMI (англ. TROPOspheric Monitoring Instrument) (спутник Sentinel-5P) отношение формальдегида к NO_2 ($HCHO/NO_2$). Показана связь между спутниковым индикатором $HCHO/NO_2$ и концентрацией O_3 , зарегистрированной наземными мониторами на территории города Челябинска. Наземные данные продемонстрировали, что высокая концентрация озона ($270\text{--}290\text{ мкг/м}^3$) наблюдалась в весенние дни 2020 г. во время карантина COVID-19. События с высоким содержанием O_3 показали нелинейную зависимость от соотношения $HCHO/NO_2$, а переход от режимов образования O_3 , ограниченных ЛОС, к режимам, ограниченным NO_x , происходил при значениях $HCHO/NO_2$ от 1 до 1,8. В Челябинске в зимнее время года устанавливается ЛОС-лимитированный (NO_x -насыщенный) режим образования озона из-за отопительного сезона и высоких выбросов NO_x . Весной, летом и осенью для Челябинска характерны ЛОС- NO_x - и NO_x -лимитированные режимы. Исследование имеет большое значение для разработки эффективных планов по снижению концентрации приземного O_3 в атмосфере российских промышленных городов.

Ключевые слова: дистанционное зондирование Земли, TROPOMI, наземные данные, приземный озон, режим образования озона

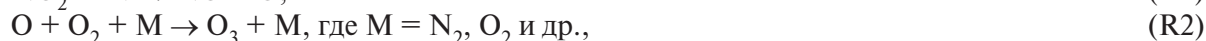
Одобрена к печати: 16.08.2025
DOI: 10.21046/2070-7401-2025-22-5-385-397

Введение

Приземный озон (O_3) — один из самых опасных загрязнителей городского воздуха. По последним данным, он становится причиной нескольких сотен тысяч преждевременных смертей и десятков миллионов приступов астмы во всём мире (Air..., 2006; Zhang et al., 2019), а также может вызывать рак кожи и меланому (Nuvolone et al., 2018; Rawat, Matta, 2021; Salonen et al., 2018). Примерно 12,2 % населения мира проживает в районах с высокой концентрацией O_3 ($80\text{--}160\text{ мкг/м}^3$) (Ni et al., 2024).

Приземный O_3 классифицируется как вторичный загрязнитель, поскольку он не выбрасывается напрямую, а синтезируется в результате химических реакций из прекурсоров

(Santiago et al., 2021). Образование озона происходит в результате фотохимического процесса, включающего взаимодействие оксидов азота (NO_x) и летучих органических соединений (ЛОС) под действием солнечного света (Khalil, 2018; Nguyen Duc et al., 2018; Zhang et al., 2021; Zhu et al., 2020). Сложная последовательность химических реакций, участвующих в образовании тропосферного озона, затрудняет установление чёткой связи с его основными предшественниками, ЛОС и NO_x . Образование тропосферного озона происходит в результате следующих реакций (Santiago et al., 2021):



В условиях, когда выбросы ЛОС незначительны, реакции (R1)–(R3) находятся в равновесии и поддерживают постоянную концентрацию O_3 . Однако высокая концентрация ЛОС изменяет этот баланс и приводит к образованию O_3 . Летучие органические соединения в атмосфере реагируют с гидроксильными радикалами (OH) с образованием органических радикалов (R), которые быстро взаимодействуют с кислородом в атмосфере (R4) и (R5) с образованием высокореакционноспособных кислородсодержащих продуктов. Эти продукты реагируют с выделяемым монооксидом азота (NO) с образованием диоксида азота (NO_2) (R6), что следует за последовательностью реакций (R1)–(R3) с образованием озона посредством фотолиза, способствуя увеличению концентрации озона (Santiago et al., 2021).

Методы дистанционного зондирования Земли могут быть весьма полезны для изучения влияния прекурсоров на концентрацию и режимы образования приземного O_3 . Существуют как зарубежные работы (Griffin et al., 2025), так и российские (Konstantinova, Bril, 2021), где было показано, что данные наземного мониторинга NO_x хорошо коррелируют со спутниковыми данными по колоночному NO_2 . Что касается концентрации органических веществ, то точный состав ЛОС определить сложно, а с использованием спутниковых данных вряд ли возможно. Формальдегид (HCHO) является кратковременным продуктом окисления многих ЛОС и промежуточным продуктом окисления почти всех ЛОС, поэтому спутниковые данные по концентрации HCHO могут выступать показателем общего уровня ЛОС (Sillman, 1995). Была проведена валидация с использованием косвенного подхода, применяя метод химического переноса (так как методы прямой валидации сталкиваются с серьёзными трудностями и показали свою ненадёжность), спутниковых данных и данных, полученных с помощью самолётов, и было показано, что спутниковые данные по концентрации HCHO могут быть использованы в качестве косвенного показателя ЛОС (Zhu et al., 2020).

В многочисленных исследованиях (Hong et al., 2021; Jung et al. 2022; Kleinman, 2005; Martin et al., 2004; Santiago et al., 2021; Song et al., 2023; Xue et al., 2022; Zhao et al., 2023) установлено, что соотношение HCHO к NO_x может служить показателем режима образования приземного O_3 . В случае использования данных дистанционного зондирования Земли применяется соотношение HCHO/NO_2 или в английской аббревиатуре FNR (*англ.* formaldehyde to nitrogen dioxide ratio). Впервые использовать спутниковые данные для расчёта HCHO/NO_2 или FNR было предложено Р. Мартином с соавторами (Martin et al., 2004) в ходе глобального эксперимента по мониторингу O_3 . Был разработан метод для характеристики чувствительности образования O_3 с применением FNR в столбе атмосферы, и проведена его валидация путём сравнения данных наблюдений с результатами моделирования. Была обнаружена высокая согласованность между спутниковыми данными и наблюдениями *in situ* с самолётов и с использованием аэростатов.

Б. Н. Дункан и соавторы (Duncan et al., 2010), а в дальнейшем С. Цзинь с коллегами (Jin et al., 2020) выполнили комплексные исследования по оценке использования FNR для определения чувствительности образования озона в различных регионах мира и определению

пороговых значений FNR для каждого режима в разных городах. В настоящее время подобные исследования проведены по Северной Америке, Европе и Восточной Азии. Для городов России такие исследования не осуществлялись. Задачи настоящей работы были следующими: 1) впервые в России определить режимы образования озона в промышленном городе, на примере города Челябинска, с использованием данных инструмента TROPOMI (англ. TROPOspheric Monitoring Instrument); 2) исследовать роль ЛОС и NO_x в образовании приземного O_3 и их сезонную изменчивость в разные годы (2019–2022); 3) определить конкретные значения соотношений HCHO/NO_2 , характерные для различных режимов образования приземного O_3 .

Территория и методы исследования

Район исследования

Челябинск расположен на восточном склоне Уральских гор (рис. 1). Население города в 2024 г. составляло около 1,2 млн. Челябинск — типичный российский промышленный город. Площадь города составляет 530 км². Здесь расположено несколько крупнейших металлургических предприятий России, в том числе единственный в стране цинковый завод; крупнейший металлургический комбинат; коксохимическое производство; трубопрокатный завод; электрометаллургический комбинат, производящий широкую номенклатуру ферросплавов. Помимо грузовых перевозок и личного транспорта (многие семьи в городе имеют более одного автомобиля), в Челябинске хорошо развита сеть общественного транспорта, включая автобусные, трамвайные и троллейбусные парки, а также строится новое метро (Горяев, Абрамов, 2024).

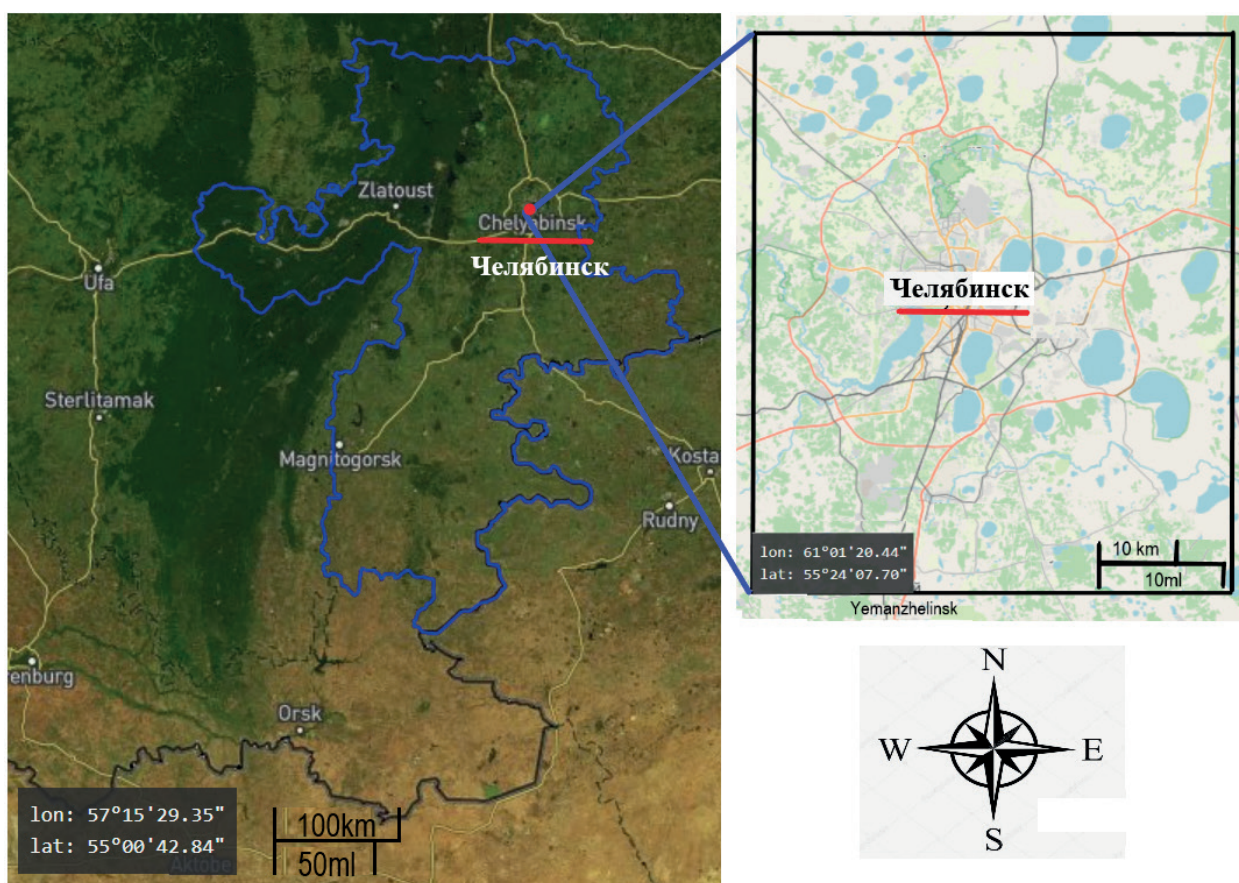


Рис. 1. Карта исследуемой территории. Синяя линия — граница Челябинской области, чёрная линия — граница Челябинской городской агломерации, взятая для расчёта

Наземное наблюдение за концентрацией приземного озона

Для анализа использовались наземные данные с мониторинговой станции Федеральной службы по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды России (Росгидромет). Приземный O_3 измерялся ультрафиолетовым фотометрическим анализатором (ОПТЕК, F-105, Россия) с пределом обнаружения 1 мкг/м^3 . Калибровочные проверки проводились с использованием прослеживаемых стандартов O_3 . Мониторинг загрязнения выполнялся непрерывно с измерениями каждые 20 мин (72 раза в день).

Спутниковые наблюдения, связь спутниковых данных по соотношению $НСНО/NO_2$ с наземными измерениями концентрации приземного озона

Для анализа был выбран период мониторинга 2019–2022 гг. Для оценки концентрации $НСНО$ (моль/м^2) и NO_2 (моль/м^2) в столбе атмосферного воздуха использовались данные спектрометра TROPOMI, установленного на борту спутника Sentinel-5 Precursor, запущенного Европейским космическим агентством (*англ.* European Space Agency) (Veefkind et al., 2012). Основные аналитические операции с архивными данными TROPOMI, полученными через облачную платформу GEE (*англ.* Google Earth Engine) (Apicella et al., 2022; Gorelick et al., 2017), осуществлялись согласно общепринятой методике, описанной в работе А. Э. Морозовой с соавторами (2025) и в других работах российских авторов (Пашинов и др., 2024; Тронин и др., 2023). GEE — это вычислительная платформа, которая в настоящее время бесплатна для некоммерческого и исследовательского использования. Продукты для обработки данных NO_2 и $НСНО$ имеют специальные параметры качества, определённые как *qa_value*, которые указаны в руководстве пользователя для обеспечения отображения только высококачественных данных. При использовании продукта обработки данных TROPOMI NO_2 игнорировались данные с *qa_value* $< 0,75$ (Eskes et al., 2022). При применении продукта обработки данных TROPOMI $НСНО$ игнорировались данные с *qa_value* $< 0,50$ (Romahn et al., 2022). Платформа GEE автоматически фильтрует данные, удаляя пиксели с более низкими значениями, чем *qa_value* для обоих наборов данных. Одна из проблем при анализе спутниковых данных $НСНО$ заключается в том, что ежедневные наблюдения являются относительно зашумлёнными. Чтобы учесть этот слабый сигнал $НСНО$, рекомендуется усреднять либо по времени, либо по пространству при использовании спутниковых данных TROPOMI $НСНО$. В этой статье мы рассчитывали среднее значение за три месяца для территории, ограниченной прямоугольной фигурой по координатам границ города Челябинска. После вычисления среднего значения по каждому отдельному загрязнителю за определённый период мы делили среднее значение $НСНО$ на среднее значение NO_2 , чтобы определить FNR. Затем значения NO_2 , $НСНО$ и FNR были нанесены на карту. Все эти процедуры проводились с помощью редактора кода GEE, который позволяет проводить удобный для пользователя анализ с использованием языка программирования JavaScript. Соответственно, нами были написаны коды на JavaScript, которые позволили получить соответствующие карты пространственного распределения концентрации и FNR. Также с помощью специального кода мы проводили выгрузку средних значений FNR для каждой даты и сопоставляли с концентрацией приземного O_3 в полдень. В работе была выполнена дополнительная фильтрация аномальных значений, в том числе с учётом облачности и дымовых шлейфов, наличие которых проверялось как рекомендовано в предыдущих исследованиях (Морозова и др., 2025). Пороговые значения для переходных режимов были определены с помощью статистического анализа. Эмпирическая связь была исследована с использованием полиномиальных моделей третьего порядка, как предложено Цзинем с соавторами (Jin et al., 2020). Расчёт итоговой статистики проводился в программе IBM SPSS Statistic 23.

Результаты и их обсуждение

Содержание НСНО и NO₂ в столбе тропосферы

Уровень НСНО часто используется в качестве меры оценки выбросов ЛОС, поскольку значительная часть химических реакций между гидроксильными радикалами и ЛОС приводит к образованию НСНО. Уравнения (R7)–(R9) показывают простой пример образования НСНО из метана (CH₄). Отщепление водорода от CH₄ с последующим быстрым присоединением кислорода к алкильному радикалу (R7) приводит к образованию метилпероксидного радикала, который может окислять NO до NO₂ (R8), образуя метилалкоксидный радикал и в конечном итоге приводя к образованию озона. Атом водорода из алкоксирадикала отделяется в ходе реакции с кислородом (R9) наряду с удалением HO₂ с образованием формальдегида:



На рис. 2 показано пространственное распределение средних значений концентрации НСНО в столбе тропосферы для разных сезонов, полученных для города Челябинска и его окрестностей. Более высокие уровни НСНО наблюдаются летом (см. рис. 2), основной причиной чего является биогенная эмиссия ЛОС. Пик выбросов природных ЛОС приходится на летние месяцы, когда НСНО образуется в результате окисления изопрена. Изопрен и терпены — основные ЛОС, вырабатываемые растениями (McGenity et al., 2018; Rosenkranz et al., 2021). Влияние выбросов изопрена на образование озона в городских районах хорошо задокументировано (Watson et al., 2006). Для городской территории Челябинска зимой основным источником формальдегида становятся первичные выбросы от сжигания топлива (Крупнова и др., 2022). По-видимому, зимой формальдегид лишь частично связан с окислением ЛОС и образованием озона, в отличие от летних месяцев.

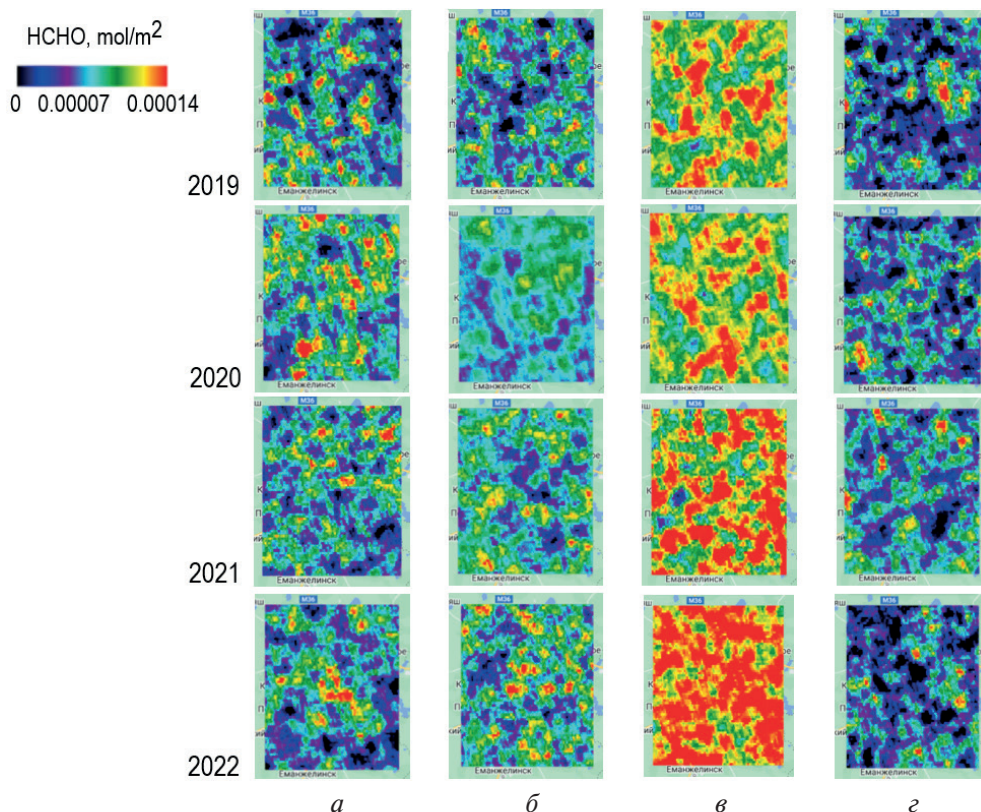


Рис. 2. Пространственное распределение средних значений концентрации НСНО (в моль/м²) за 2019–2022 гг.: а — зима; б — весна; в — лето; г — осень

Тенденция изменения концентрации NO_2 (рис. 3) — противоположна тенденции изменения НСНО . Концентрация NO_2 была высокой зимой (максимальное значение около $0,0025 \text{ моль/м}^2$) и низкой летом (минимальное значение около $0,0001 \text{ моль/м}^2$). Высокие значения концентрации NO_2 зимой были связаны с отопительным сезоном. Рост NO_2 начинается в октябре, а в апреле концентрация его уменьшается, что совпадает с началом и концом отопительного сезона соответственно. Более того, концентрация NO_x была самая высокая в городе, при относительно низкой фоновой концентрации вокруг города.

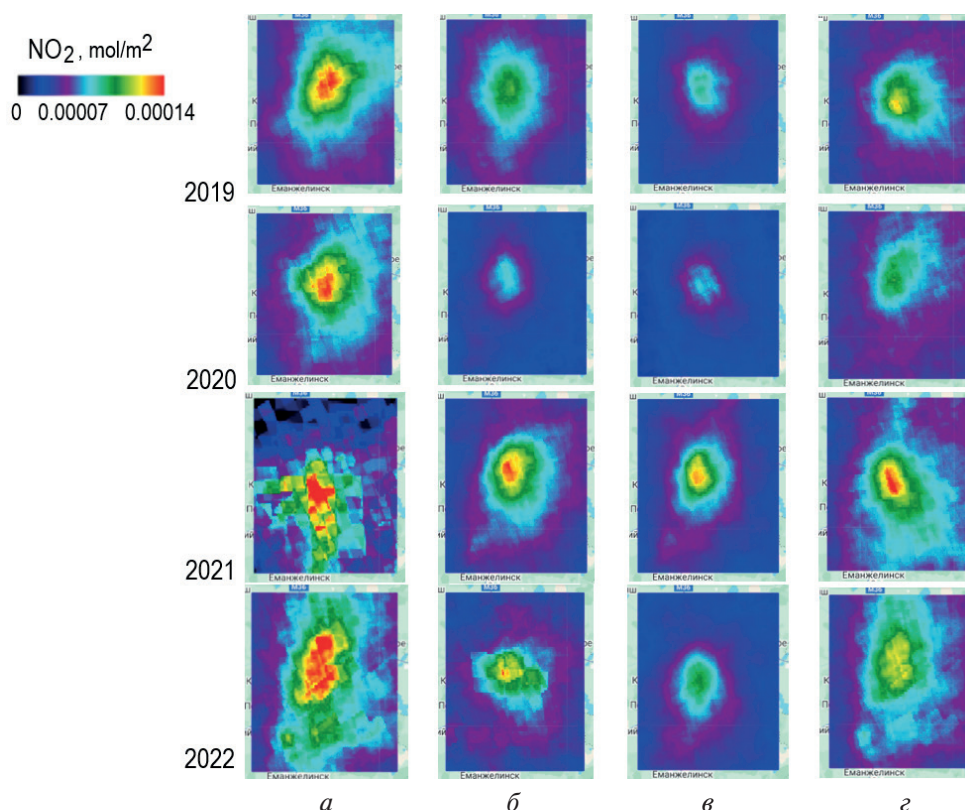


Рис. 3. Пространственное распределение средних значений концентрации NO_2 (в моль/м^2) за 2019–2022 гг.: а — зима; б — весна; в — лето; г — осень

Это говорит о том, что оксиды азота во все сезоны преимущественно выбрасываются антропогенными городскими источниками, а не привносятся в результате крупномасштабных переносов. Антропогенные NO_x образуются в результате процессов сгорания и могут служить индикатором как промышленной деятельности, так и выбросов теплоэнергетики и транспорта. Наши предыдущие исследования (Krupnova et al., 2024) показали, что пики оксидов азота при измерениях на наземных станциях не совпадают с часами пиковой нагрузки транспорта, а коррелируют с колебаниями нагрузки и выбросов тепловых электростанций. То есть содержание оксидов азота в городской зоне Челябинска в первую очередь определяется сжиганием топлива на городских и промышленных тепловых электростанциях.

Наименьшая концентрация NO_2 характерна для периода с весны по осень 2020 г. с экстремальным минимумом летом 2020 г., совпавшим с глубокой изоляцией во время локдауна COVID-19.

Региональный порог соотношения $\text{НСНО}/\text{NO}_2$

Более высокие значения FNR связаны с режимами производства O_3 , чувствительными к NO_x , в то время как более низкие значения FNR — с режимами производства O_3 , чувствительными к ЛОС. Однако существуют некоторые разногласия между исследованиями относительно

конкретных значений FNR, которые соответствуют этим двум режимам производства O_3 . Например, Дункан с соавторами (Duncan et al., 2010) обнаружили, что значения FNR ниже 1 указывают на чувствительность к ЛОС, FNR между 1 и 2 — на переход между чувствительностью к ЛОС и NO_x (переходная зона), а значения FNR выше 2 свидетельствуют о производстве O_3 , чувствительном к NO_x . В то время как исследование Цзиня с соавторами (Jin et al., 2020) предполагает, что FNR ниже 3,2 указывает на производство O_3 , чувствительное к ЛОС, FNR между 3,2 и 4,1 — на переходную зону, а FNR выше 4,1 говорит о производстве O_3 , чувствительном к NO_x . Истинное пороговое значение $HCHO/NO_2$ между режимом образования озона, чувствительным и к ЛОС, и к NO_x , может варьироваться от воздушного бассейна к воздушному бассейну, поэтому пороговые значения, указанные в литературе, могут отличаться от того, что действительно верно для Челябинской индустриальной агломерации. В настоящей работе были изучены значения FNR территории города Челябинска. На *рис. 4* показаны полученные на основании спутниковых данных TROPOMI соотношения $HCHO/NO_2$ в различные сезоны в течение периода исследований.

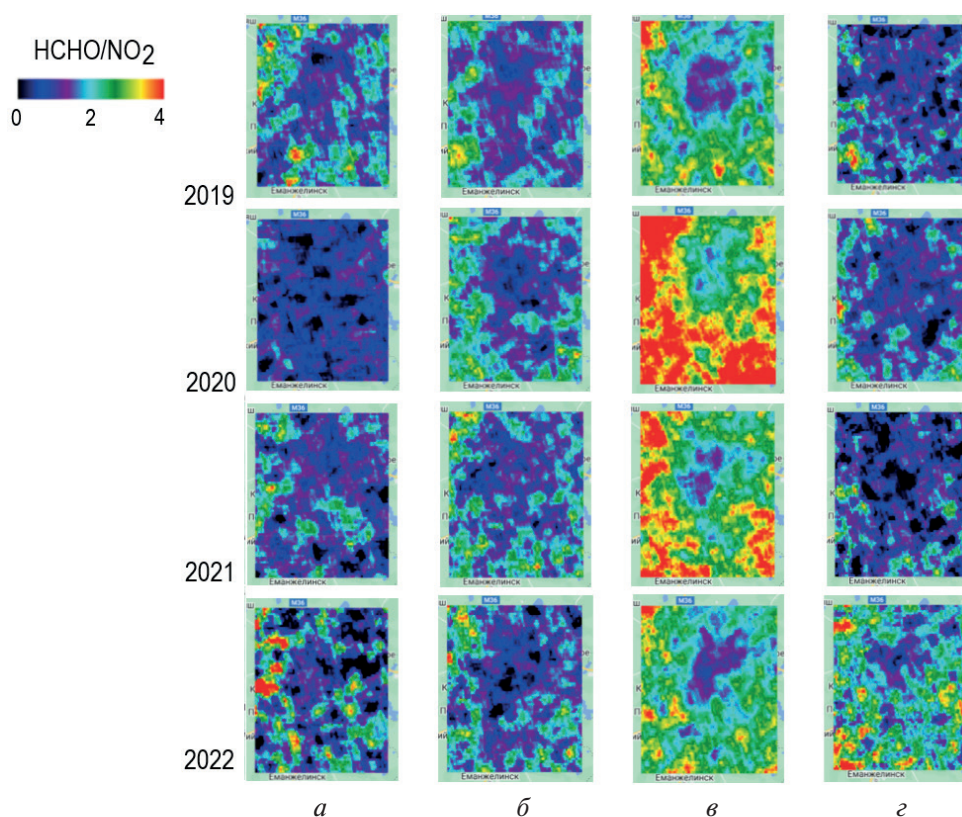


Рис. 4. Соотношения $HCHO/NO_2$, полученные на основании спутниковых данных TROPOMI: а — зима; б — весна; в — лето; г — осень

В этом исследовании мы использовали полиномиальную модель третьего порядка для нахождения пороговых значений соотношений $HCHO/NO_2$. На *рис. 5* (см. с. 392) видно, что пороговый диапазон $HCHO/NO_2$ в 2019–2022 гг. составил 1,0–1,8, границы FNR по годам и сезонам были стабильны. Таким образом, для Челябинской городской агломерации мы можем использовать следующие характеристики режимов образования приземного O_3 : соотношение $HCHO/NO_2 < 1$ представляет собой уменьшение образования O_3 с уменьшением уровня ЛОС (ЛОС-лимитированный режим), а $HCHO/NO_2 > 1,8$ характерно для NO_x -лимитированного режима. Интервал значений $1 < FNR < 1,8$ характеризует переходный режим (ЛОС– NO_x -лимитированный режим), когда на производство O_3 влияют как выбросы ЛОС, так и выбросы NO_x . Эти результаты близки к результатам для китайских городов (Li et al., 2021).

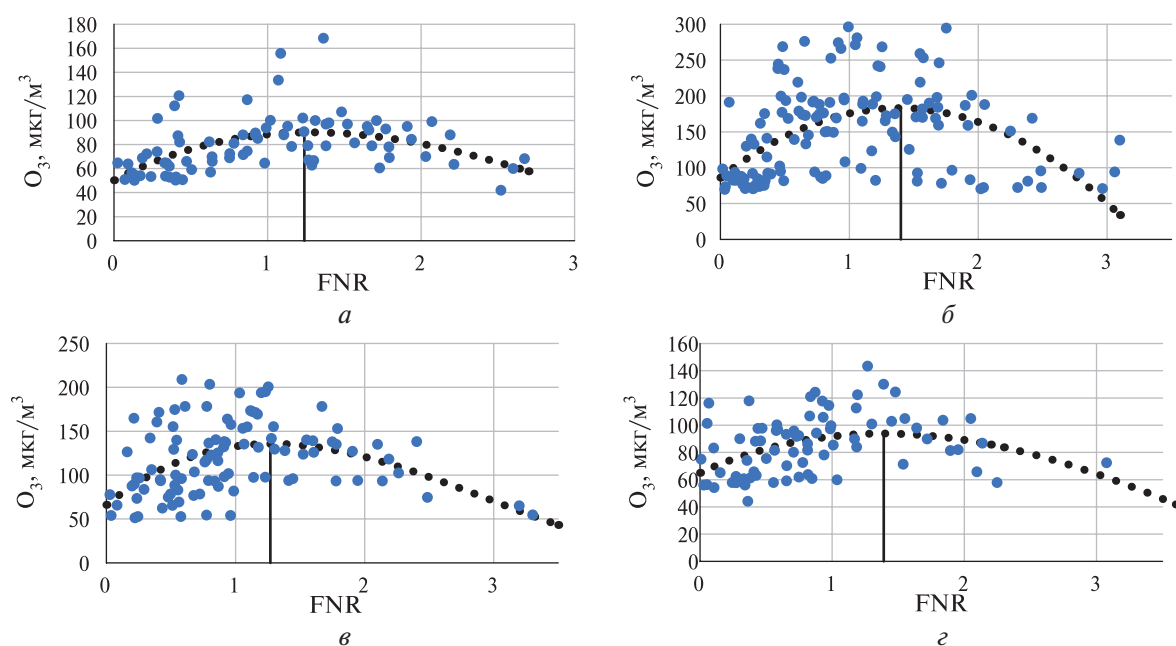


Рис. 5. Определение регионального порогового диапазона HCHO/NO_2 (FNR) с помощью полиномиальной модели третьего порядка для идентификации режима образования приземного озона (в $\text{мкг}/\text{м}^3$): а — 2019 г.; б — 2020 г.; в — 2021 г.; з — 2022 г.

Анализ полученных данных показывает, что зимой на территории Челябинской городской агломерации в исследуемый период осуществлялся ЛОС-лимитированный режим ($\text{FNR} < 1$), из-за отопительного сезона и высоких выбросов NO_x . Весна, лето и осень характеризовались ЛОС– NO_x -лимитированными условиями ($1 < \text{FNR} < 1,8$). Наземные исследования показали, что наибольшая приземная концентрация O_3 наблюдалась весной 2020 г. в период глубокого локдауна по COVID-19 (рис. б).

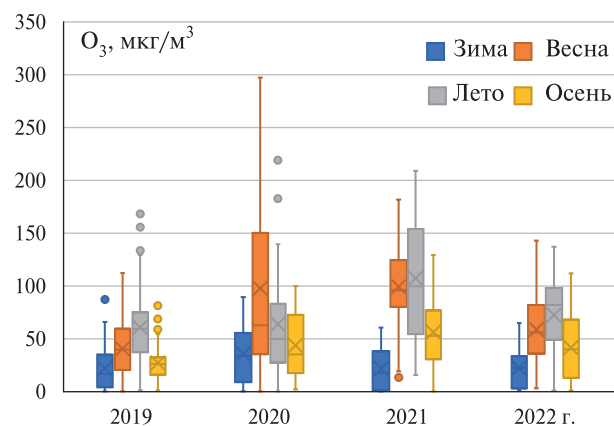


Рис. 6. Коробочковая диаграмма приземной концентрации O_3 (в $\text{мкг}/\text{м}^3$) в различные сезоны в 2019–2022 гг. Среднее значение обозначено крестиком, медиана — центральной линией, 25-й и 75-й проценты концентрации показаны краями коробочек

При этом с 4 по 16 мая 2020 г. наблюдалась anomalно высокая концентрация приземного O_3 в диапазоне 270–290 $\text{мкг}/\text{м}^3$. Это было связано, во-первых, с метеорологической аномалией 2020 г. В первой декаде мая погоду на Урале формировал мощный высотный антициклон, установилась anomalно жаркая погода. На фоне блокирующего антициклона наблюдалась длительная волна тепла. Во-вторых, из-за локдауна многие предприятия уменьшили свои выбросы, количество транспорта также значительно сократилось. Anomalно жаркий май привёл к активному синтезу приземного озона в Челябинске. При этом выбросы NO_x

из-за локдауна были минимальными, а титрование озона не происходило. Это стало причиной возникновения чрезвычайно высокой опасной концентрации приземного озона.

Выводы

В настоящей статье впервые были применены полученные с помощью инструмента TROPOMI (спутник Sentinel-5P) отношения HCHO/NO_2 для интерпретации локальной химии приземного O_3 в российском промышленном городе. Это имеет большое значение для разработки эффективных планов по снижению концентрации приземного озона. Данные TROPOMI показывают чёткий сезонный цикл изменения концентрации NO_2 , пик которого приходится на зиму. Формальдегид также характеризуется выраженным сезонным циклом, но с пиком летом. Вероятно, это связано с биогенными выбросами ЛОС. В основном, для Челябинска, как для промышленного города, характерен ЛОС-лимитированный (в зимний период) и переходный ЛОС– NO_x -лимитированный режим (весна, лето, осень). Анализ данных, полученных во время карантина 2020 г., показал, что снижение выбросов оксидов азота не привело к снижению O_3 , а наоборот, в сочетании с синоптической ситуацией спровоцировало чрезвычайно высокую концентрацию приземного O_3 .

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 24-27-20017 «Влияние температурных инверсий на эпизоды загрязнения атмосферного воздуха в промышленном городе» и при финансовой поддержке Правительства Челябинской области, https://rscf.ru/prjcard_int?24-27-20017.

Литература

1. Горяев Н. К., Абрамов Н. С. Экономическое обоснование выделенных полос для общественного транспорта на примере города Челябинска // Вестн. ЮУрГУ. Сер. «Экономика и менеджмент». 2024. Т. 18. № 1. С. 182–188. DOI: 10.14529/em240117.
2. Крупнова Т. Г., Ракова О. В., Кочегоров В. М. и др. Проблема анализа содержания формальдегида в атмосферном воздухе и идентификации источников (на примере города Челябинска) // Вестн. ЮУрГУ. Сер. «Химия». 2022. Т. 14. № 3. С. 139–150. DOI: 10.14529/chem220315.
3. Морозова А. Э., Сизов О. С., Миронова М. А. Дистанционная оценка качества атмосферного воздуха в пределах крупнейших месторождений нефти и газа России (2019–2023) // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2025. Т. 22. № 1. С. 285–300. DOI: 10.21046/2070-7401-2025-22-1-285-300.
4. Пашинов Е. В., Лозин Д. В., Втюрин С. А., Кобец Д. А. Первые результаты расчёта баланса парниковых газов для регионов РФ по балансовой методике // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2024. Т. 21. № 6. С. 398–403. DOI: 10.21046/2070-7401-2024-21-6-398-403.
5. Тронин А. А., Седеева М. С., Неробелов Г. М., Васильев М. П. Мониторинг содержания диоксида азота в атмосфере городов Европы и России по спутниковым данным // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2023. Т. 20. № 1. С. 287–297. DOI: 10.21046/2070-7401-2023-20-1-287-297.
6. Air Quality Guidelines: Global Update 2005: Particulate matter, ozone, nitrogen dioxide and sulfur dioxide / World Health Organization. Geneva, 2006. 22 p.
7. Apicella L., De Martino M., Quarati A. Copernicus user uptake: From data to applications // ISPRS Intern. J. Geo-Information. 2022. V. 11. No. 2. Article 121. 34 p. DOI: 10.3390/ijgi11020121.
8. Duncan B. N., Yoshida Y., Olson J. R. et al. Application of OMI observations to a space-based indicator of NO_x and VOC controls on surface ozone formation // Atmospheric Environment. 2010. V. 44. No. 18. P. 2213–2223. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2010.03.010.
9. Eskes H., van Geffen J., Boersma F. et al. Sentinel-5 precursor/TROPOMI Level 2 Product User Manual Nitrogen dioxide. Royal Netherlands Meteorological Institute, Ministry of Infrastructure and Water Management, 2022. 168 p.
10. Gorelick N., Hancher M., Dixon M. et al. Google Earth Engine: Planetary-scale geospatial analysis for everyone // Remote Sensing of Environment. 2017. V. 202. P. 18–27. DOI: 10.1016/j.rse.2017.06.031.

11. Griffin D., Hempel C., McLinden C. et al. Development and validation of satellite-derived surface NO₂ estimates using machine learning versus traditional approaches in North America // <https://egusphere.copernicus.org/>. Preprint egusphere-2025-1681. 2025. 20 p. DOI: 10.5194/egusphere-2025-1681.
12. Hong Q., Liu C., Hu Q. et al. Evaluating the feasibility of formaldehyde derived from hyperspectral remote sensing as a proxy for volatile organic compounds // *Atmospheric Research*. 2021. V. 264. Article 105777. DOI: 10.1016/j.atmosres.2021.105777.
13. Jin X., Fiore A., Boersma K. F. et al. Inferring changes in summertime surface ozone–NO_x–VOC chemistry over U.S. urban areas from two decades of satellite and ground-based observations // *Environmental Science and Technology*. 2020. V. 54. No. 11. P. 6518–6529. DOI: 10.1021/acs.est.9b07785.
14. Jung J., Choi Y., Mousavinezhad A. et al. Changes in the ozone chemical regime over the contiguous United States inferred by the inversion of NO_x and VOC emissions using satellite observation // *Atmospheric Research*. 2022. V. 270. Article 106076. DOI: 10.1016/j.atmosres.2022.106076.
15. Khalil M. A. K. Steady states and transport processes in urban ozone balances // *NPJ Climate and Atmospheric Science*. 2018. V. 1. Article 22. DOI: 10.1038/s41612-018-0035-7.
16. Kleinman L. I. The dependence of tropospheric ozone production rate on ozone precursors // *Atmospheric Environment*. 2005. V. 39. No. 3. P. 575–586. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2004.08.047.
17. Konstantinova A. M., Bril A. A. Monitoring of NO₂ emission at Russian cities scale using TROPOMI (Sentinel-5P) data // *Proc. All-Russian Conf. with Intern. Participation “Spatial Data Processing for Monitoring of Natural and Anthropogenic Processes” (SDM-2021)*. 2021. V. 3006. P. 476–483.
18. Krupnova T. G., Rakova O. V., Simakhina V. I. et al. Surface ozone in the industrial city of Chelyabinsk, Russia // *Geography, Environment, Sustainability*. 2024. V. 17. No. 4. P. 223–234. DOI: 10.24057/2071-9388-2024-3364.
19. Li R., Xu M., Li M. et al. Identifying the spatiotemporal variations of ozone formation regimes across China from 2005 to 2019 based on polynomial simulation and causality analysis // *Atmospheric Chemistry and Physics Discussion*. 2021. 28 p. DOI: 10.5194/acp-2021-291.
20. Martin R. V., Parrish D. D., Ryerson T. B. et al. Evaluation of GOME satellite measurements of tropospheric NO₂ and HCHO using regional data from aircraft campaigns in the southeastern United States // *J. Geophysical Research: Atmospheres*. 2004. V. 109. No. D24. Article D24307. 11 p. DOI: 10.1029/2004JD004869.
21. McGenity T. J., Crombie A. T., Murrell J. C. Microbial cycling of isoprene, the most abundantly produced biological volatile organic compound on Earth // *The ISME J.* 2018. V. 12. P. 931–941. DOI: 10.1038/s41396-018-0072-6.
22. Nguyen Duc H., Chang L. T.-C., Trieu T. et al. Source contributions to ozone formation in the New South Wales Greater Metropolitan Region, Australia // *Atmosphere*. 2018. V. 9. No. 11. Article 443. DOI: 10.3390/atmos9110443.
23. Ni J., Jin J., Wang Y. et al. Surface ozone in global cities: A synthesis of basic features, exposure risk, and leading meteorological driving factors // *Geography and Sustainability*. 2024. V. 5. P. 64–76. DOI: 10.1016/j.geosus.2023.09.008.
24. Nuvolone D., Petri D., Voller F. The effects of ozone on human health // *Environmental Science and Pollution Research*. 2018. V. 25. No. 9. P. 8074–8088. DOI: 10.1007/s11356-017-9239-3.
25. Rawat K., Matta G. Ozone: Risk assessment, environmental, and health hazard // *Hazardous Gases: Risk Assessment on Environment and Human Health*. Academic Press, 2021. P. 301–312. DOI: 10.1016/B978-0-323-89857-7.00019-0.
26. Romahn F., Pedernana M., Loyola D. et al. Sentinel-5 precursor/TROPOMI Level 2 Product User Manual Formaldehyde HCHO. Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, 2022. 131 p.
27. Rosenkranz M., Chen Y., Zhu P., Vlot A. C. Volatile terpenes — mediators of plant-to-plant communication // *The Plant J.* 2021. V. 108. No. 3. P. 617–631. DOI: 10.1111/tpj.15453.
28. Salonen H., Salthammer T., Morawska L. Human exposure to ozone in school and office indoor environments // *Environment Intern.* 2018. V. 119. P. 503–514. DOI: 10.1016/j.envint.2018.07.012.
29. Santiago V., Inoue K., Tonokura K. Diagnosis of ozone formation sensitivity in the Mexico City Metropolitan Area using HCHO/NO₂ column ratios from the ozone monitoring instrument // *Environmental Advances*. 2021. V. 6. Article 100138. DOI: 10.1016/j.envadv.2021.100138.
30. Sillman S. The use of NO_y, H₂O₂, and HNO₃ as indicators for ozone–NO_x–hydrocarbon sensitivity in urban locations // *J. Geophysical Research: Atmospheres*. 1995. V. 100. No. D7. P. 14175–14188. DOI: 10.1029/94JD02953.
31. Song H., Zhao W., Yang X. et al. Ozone sensitivity analysis and ozone formation regimes division in the Beijing–Tianjin–Hebei region based on satellite remote sensing data // *Atmosphere*. 2023. V. 14. Article 1637. DOI: 10.3390/atmos14111637.
32. Veefkind J. P., Aben I., McMullan K. et al. TROPOMI on the ESA Sentinel-5 Precursor: A GMES mission for global observations of the atmospheric composition for climate, air quality and ozone layer applications // *Remote Sensing of Environment*. 2012. V. 120. P. 70–83. DOI: 10.1016/j.rse.2011.09.027.

33. Watson L. A., Wang K.-Y., Hamer P., Shallcross D. E. The potential impact of biogenic emissions of isoprene on urban chemistry in the United Kingdom // *Atmospheric Science Letters*. 2006. V. 7. P. 96–100. DOI: 10.1002/asl.140.
34. Xue J., Zhao T., Luo Y. et al. Identification of ozone sensitivity for NO₂ and secondary HCHO based on MAX-DOAS measurements in northeast China // *Environment Intern.* 2022. V. 160. Article 107048. DOI: 10.1016/j.envint.2021.107048.
35. Zhang J., Wei Y., Fang Z. Ozone pollution: A major health hazard worldwide // *Frontiers in Immunology*. 2019. V. 10. Article 2518. DOI: 10.3389/fimmu.2019.02518.
36. Zhang K., Duan Yu., Huo J. et al. Formation mechanism of HCHO pollution in the suburban Yangtze River Delta region, China: A box model study and policy implementations // *Atmospheric Environment*. 2021. V. 267. Article 118755. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2021.118755.
37. Zhao I., Mo H., Wang H. et al. A comparative study of ground-gridded and satellite-derived formaldehyde during ozone episodes in the Chinese Greater Bay Area // *Remote Sensing*. 2023. V. 15. Article 3998. DOI: 10.3390/rs15163998.
38. Zhu L., González Abad G., Nowlan C. R. et al. Validation of satellite formaldehyde (HCHO) retrievals using observations from 12 aircraft campaigns // *Atmospheric Chemistry and Physics*. 2020. V. 20. P. 12329–12345. DOI: 10.5194/acp-20-12329-2020.

Discovery of the possibility of assessing surface ozone formation regimes based on Earth remote sensing data

T. G. Krupnova¹, O. V. Rakova¹, G. P. Struchkova², T. A. Kapitonova²,
S. A. Tikhonova², E. A. Vykhodtseva³, V. M. Kochegorov³

¹ South Ural State University, Chelyabinsk 454080, Russia
E-mails: krupnovatg@susu.ru, rakovaov@susu.ru

² V. P. Larionov Institute of Physical-Technical Problems of the North SB RAS
Yakutsk 677980, Russia

E-mails: pandoramy8@list.ru, kapitonova@iptpn.ysn.ru, sardankobeleva@gmail.com

³ Chelyabinsk Center for Hydrometeorology and Environmental Monitoring —
Branch of FSBI “Ural UGMS”, Chelyabinsk 454080, Russia
E-mails: omp@chelpogoda.ru, kvm@chelpogoda.ru

Surface ozone (O₃) affects the oxidizing capacity of the atmosphere and leads to the formation of highly toxic photochemical smog. Therefore, it is extremely important to study the patterns of O₃ synthesis in the surface air layer. It is produced from complex photochemical reactions involving its precursors: nitrogen oxides (NO_x) and volatile organic compounds (VOCs). Surface O₃ formation can be limited by NO_x or VOCs depending on the regime. Satellite-based data can be very useful for studying the modes of O₃ formation, as they provide continuous global observations for two species indicative of O₃ precursors, namely nitrogen dioxide (NO₂) for NO_x and formaldehyde (HCHO) as reliable VOC indicator. In this work, HCHO to NO₂ ratios (HCHO/NO₂) obtained from the TROPOMI instrument (Sentinel-5P satellite) were used for the first time in Russia. The relationship between the satellite indicator HCHO/NO₂ and O₃ concentrations recorded by ground-based monitors in Chelyabinsk urban area was shown. Ground-based data showed that high ozone concentrations (270–290 µg/m³) were observed on spring days of 2020 during the COVID-19 quarantine. High O₃ events showed a non-linear dependence on the HCHO/NO₂ ratio, and the transition from VOC-limited to NO_x-limited O₃ formation regimes occurred at HCHO/NO₂ values from 1 to 1.8. Chelyabinsk in winter was characterized by VOC-limited (NO_x-saturated) conditions due to the heating season and high NO_x emissions. Spring, summer and fall were characterized by VOC–NO_x- and NO_x-limited conditions in Chelyabinsk. The study has great importance for elaborating effective plans to reduce surface O₃ concentration in the atmosphere of Russian industrial cities.

Keywords: satellite remote sensing, TROPOMI, ground-based data, surface ozone, ozone production regime

Accepted: 16.08.2025

DOI: 10.21046/2070-7401-2025-22-5-385-397

References

1. Goryaev N. K., Abramov N. S., Economic justification of public transport lanes in Chelyabinsk, *Bull. South Ural State University. Ser. Economics and Management*, 2024, V. 18, No. 1, pp. 182–188 (in Russian), DOI: 10.14529/em240117.
2. Krupnova T. G., Rakova O. V., Kochegorov V. M. et al., Problem of air formaldehyde content analysis and source identification (evidence from Chelyabinsk), *Bull. South Ural State University. Ser. Chemistry*, 2022, V. 14, No. 3, pp. 139–150 (in Russian), DOI: 10.14529/chem220315.
3. Morozova A. E., Sizov O. S., Mironova M. A., Remote assessment of atmospheric air quality within Russia's largest oil and gas fields (2019–2023), *Sovremennye problemy distantsionnogo zondirovaniya Zemli iz kosmosa*, 2025, V. 22, No. 1, pp. 285–300 (in Russian), DOI: 10.21046/2070-7401-2025-22-1-285-300.
4. Pashinov E. V., Lozin D. V., Vturin S. A., Kobets D. A., First results of greenhouse gas balance calculation for the regions of Russia based on the balance technique, *Sovremennye problemy distantsionnogo zondirovaniya Zemli iz kosmosa*, 2024, V. 21, No. 6, pp. 398–403 (in Russian), DOI: 10.21046/2070-7401-2024-21-6-398-403.
5. Tronin A. A., Sedeeva M. S., Nerobelov G. M., Vasiliev M. P., Monitoring of nitrogen dioxide content in the atmosphere of cities in Europe and Russia using satellite data, *Sovremennye problemy distantsionnogo zondirovaniya Zemli iz kosmosa*, 2023, V. 20, No. 1, pp. 287–297 (in Russian), DOI: 10.21046/2070-7401-2023-20-1-287-297.
6. *Air Quality Guidelines: Global Update 2005. Particulate matter, ozone, nitrogen dioxide and sulfur dioxide*, World Health Organization, Geneva, 2006, 22 p.
7. Apicella L., De Martino M., Quarati A., Copernicus user uptake: From data to applications, *ISPRS Intern. J. Geo-Information*, 2022, V. 11, No. 2, Article 121, 34 p., DOI: 10.3390/ijgi11020121.
8. Duncan B. N., Yoshida Y., Olson J. R. et al., Application of OMI observations to a space-based indicator of NO_x and VOC controls on surface ozone formation, *Atmospheric Environment*, 2010, V. 44, No. 18, pp. 2213–2223, DOI: 10.1016/j.atmosenv.2010.03.010.
9. Eskes H., van Geffen J., Boersma F. et al., *Sentinel-5 precursor/TROPOMI Level 2 Product user manual nitrogendioxide*, Royal Netherlands Meteorological Institute, Ministry of Infrastructure and Water Management, 2022, 168 p.
10. Gorelick N., Hancher M., Dixon M. et al., Google Earth Engine: Planetary-scale geospatial analysis for everyone, *Remote Sensing of Environment*, 2017, V. 202, pp. 18–27, DOI: 10.1016/j.rse.2017.06.031.
11. Griffin D., Hempel C., McLinden C. et al., Development and validation of satellite-derived surface NO₂ estimates using machine learning versus traditional approaches in North America, <https://egusphere.copernicus.org/>, Preprint egusphere-2025-1681, 2025, 20 p., DOI: 10.5194/egusphere-2025-1681.
12. Hong Q., Liu C., Hu Q. et al., Evaluating the feasibility of formaldehyde derived from hyperspectral remote sensing as a proxy for volatile organic compounds, *Atmospheric Research*, 2021, V. 264, Article 105777, DOI: 10.1016/j.atmosres.2021.105777.
13. Jin X., Fiore A., Boersma K. F. et al., Inferring changes in summertime surface ozone–NO_x–VOC chemistry over U.S. urban areas from two decades of satellite and ground-based observations, *Environmental Science and Technology*, 2020, V. 54, No. 11, pp. 6518–6529, DOI: 10.1021/acs.est.9b07785.
14. Jung J., Choi Y., Mousavinezhad A. et al., Changes in the ozone chemical regime over the contiguous United States inferred by the inversion of NO_x and VOC emissions using satellite observation, *Atmospheric Research*, 2022, V. 270, Article 106076, DOI: 10.1016/j.atmosres.2022.106076.
15. Khalil M. A. K., Steady states and transport processes in urban ozone balances, *NPJ Climate and Atmospheric Science*, 2018, V. 1, Article 22, DOI: 10.1038/s41612-018-0035-7.
16. Kleinman L. I., The dependence of tropospheric ozone production rate on ozone precursors, *Atmospheric Environment*, 2005, V. 39, No. 3, pp. 575–586, DOI: 10.1016/j.atmosenv.2004.08.047.
17. Konstantinova A. M., Bril A. A., Monitoring of NO₂ emission at Russian cities scale using TROPOMI (Sentinel-5P) data, *Proc. All-Russian Conf. with Intern. Participation "Spatial Data Processing for Monitoring of Natural and Anthropogenic Processes" (SDM-2021)*, 2021, V. 3006, pp. 476–483.
18. Krupnova T. G., Rakova O. V., Simakhina V. I. et al., Surface ozone in the industrial city of Chelyabinsk, Russia, *Geography, Environment, Sustainability*, 2024, V. 17, No. 4, pp. 223–234, DOI: 10.24057/2071-9388-2024-3364.

19. Li R., Xu M., Li M. et al., Identifying the spatiotemporal variations of ozone formation regimes across China from 2005 to 2019 based on polynomial simulation and causality analysis, *Atmospheric Chemistry and Physics Discussion*, 2021, 28 p., DOI: 10.5194/acp-2021-291.
20. Martin R. V., Parrish D. D., Ryerson T. B. et al., Evaluation of GOME satellite measurements of tropospheric NO₂ and HCHO using regional data from aircraft campaigns in the southeastern United States, *J. Geophysical Research: Atmospheres*, 2004, V. 109, No. D24, Article D24307, 11 p., DOI: 10.1029/2004JD004869.
21. McGenity T. J., Crombie A. T., Murrell J. C., Microbial cycling of isoprene, the most abundantly produced biological volatile organic compound on Earth, *The ISME J.*, 2018, V. 12, pp. 931–941, DOI: 10.1038/s41396-018-0072-6.
22. Nguyen Duc H., Chang L. T.-C., Trieu T. et al., Source contributions to ozone formation in the New South Wales Greater Metropolitan Region, Australia, *Atmosphere*, 2018, V. 9, No. 11, Article 443, DOI: 10.3390/atmos9110443.
23. Ni J., Jin J., Wang Y. et al., Surface ozone in global cities: A synthesis of basic features, exposure risk, and leading meteorological driving factors, *Geography and Sustainability*, 2024, V. 5, pp. 64–76, DOI: 10.1016/j.geosus.2023.09.008.
24. Nuvolone D., Petri D., Voller F., The effects of ozone on human health, *Environmental Science and Pollution Research*, 2018, V. 25, No. 9, P. 8074–8088, DOI: 10.1007/s11356-017-9239-3.
25. Rawat K., Matta G., Ozone: Risk assessment, environmental, and health hazard, In: *Hazardous Gases: Risk Assessment on Environment and Human Health*, Academic Press, 2021, pp. 301–312, DOI: 10.1016/B978-0-323-89857-7.00019-0.
26. Romahn F., Pedernana M., Loyola D. et al., *Sentinel-5 precursor/TROPOMI Level 2 Product User Manual Formaldehyde HCHO*, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, 2022, 131 p.
27. Rosenkranz M., Chen Y., Zhu P., Vlot A. C., Volatile terpenes — mediators of plant-to-plant communication, *The Plant J.*, 2021, V. 108, No. 3, pp. 617–631, DOI: 10.1111/tpj.15453.
28. Salonen H., Salthammer T., Morawska L., Human exposure to ozone in school and office indoor environments, *Environment Intern.*, 2018, V. 119, pp. 503–514, DOI: 10.1016/j.envint.2018.07.012.
29. Santiago V., Inoue K., Tonokura K., Diagnosis of ozone formation sensitivity in the Mexico City Metropolitan Area using HCHO/NO₂ column ratios from the ozone monitoring instrument, *Environmental Advances*, 2021, V. 6, Article 100138, DOI: 10.1016/j.envadv.2021.100138.
30. Sillman S., The use of NO_y, H₂O₂, and HNO₃ as indicators for ozone-NO_x-hydrocarbon sensitivity in urban locations, *J. Geophysical Research: Atmospheres*, 1995, V. 100, No. D7, pp. 14175–14188, DOI: 10.1029/94JD02953.
31. Song H., Zhao W., Yang X. et al., Ozone sensitivity analysis and ozone formation regimes division in the Beijing–Tianjin–Hebei region based on satellite remote sensing data, *Atmosphere*, 2023, V. 14, Article 1637, DOI: 10.3390/atmos14111637.
32. Veefkind J. P., Aben I., McMullan K. et al., TROPOMI on the ESA Sentinel-5 Precursor: A GMES mission for global observations of the atmospheric composition for climate, air quality and ozone layer applications, *Remote Sensing of Environment*, 2012, V. 120, pp. 70–83, DOI: 10.1016/j.rse.2011.09.027.
33. Watson L., Wang K.-Y., Hamer P., Shallcross D., The potential impact of biogenic emissions of isoprene on urban chemistry in the United Kingdom, *Atmospheric Science Letters*, 2006, V. 7, pp. 96–100, DOI: 10.1002/asl.140.
34. Xue J., Zhao T., Luo Y. et al., Identification of ozone sensitivity for NO₂ and secondary HCHO based on MAX-DOAS measurements in northeast China, *Environment Intern.*, 2022, V. 160, Article 107048, DOI: 10.1016/j.envint.2021.107048.
35. Zhang J., Wei Y., Fang Z., Ozone pollution: A major health Hazard worldwide, *Frontiers in Immunology*, 2019, V. 10, Article 2518, DOI: 10.3389/fimmu.2019.02518.
36. Zhang K., Duan Yu., Huo J. et al., Formation mechanism of HCHO pollution in the suburban Yangtze River Delta region, China: A box model study and policy implementations, *Atmospheric Environment*, 2021, V. 267, Article 118755, DOI: 10.1016/j.atmosenv.2021.118755.
37. Zhao I., Mo H., Wang H. et al., A comparative study of ground-gridded and satellite-derived formaldehyde during ozone episodes in the Chinese Greater Bay Area, *Remote Sensing*, 2023, V. 15, Article 3998, DOI: 10.3390/rs15163998.
38. Zhu L., González Abad G., Nowlan C. R. et al., Validation of satellite formaldehyde (HCHO) retrievals using observations from 12 aircraft campaigns, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2020, V. 20, pp. 12329–12345, DOI: 10.5194/acp-20-12329-2020.