

Prof. dr hab. Joanna Wibig
Katedra Meteorologii i Klimatologii
Wydział Nauk Geograficznych
Uniwersytetu Łódzkiego

Ocena rozprawy doktorskiej mgr Izabeli Pawlak
pt. "Analiza zmienności zawartości ozonu w przyziemnej warstwie atmosfery
w województwie mazowieckim"
wykonanej w Instytucie Geofizyki Polskiej Akademii Nauk
pod kierunkiem dr. hab. Janusza Jarosławskiego, prof. PAN

1. Uwagi ogólne

Przedstawiona do oceny rozprawa liczy 149 stron tekstu, w tym 29 rysunków i 22 tabele. Praca składa się z ośmiu rozdziałów, wykazu literatury oraz spisu rysunków i tabel. Wszystkie rozdziały, oprócz podsumowania, dzielą się na podrozdziały. Spis literatury obejmuje 120 pozycji drukowanych i 5 stron internetowych, w olbrzymiej większości są to artykuły anglojęzyczne.

2. Ocena rozprawy

We wstępie (strony 6-17) Autorka prezentuje historyczny rys odkrycia ozonu, omawia rejony jego występowania i rolę w atmosferze. Ponieważ tematem rozprawy jest ozon w przyziemnej warstwie atmosfery prezentację, przestrzenno-czasowej zmienności ozonu w skali globalnej ogranicza do ozonu w warstwie przyziemnej. W ostatnim podrozdziale wstępu prezentuje zakres pracy. Celu głównego właściwie brakuje, bo trudno nim nazwać analizę zmienności zawartości ozonu w przyziemnej warstwie atmosfery w województwie mazowieckim. Analiza może być tylko narzędziem do uzyskania celu. Sformułowano natomiast cele szczegółowe w postaci zestawu pytań. Rozdział wstępny kończy się przedstawieniem kolejnych kroków, które mają doprowadzić do realizacji celów częściowych.

Procesy determinujące zawartość ozonu w przyziemnej warstwie atmosfery opisano w drugim rozdziale pracy, z podziałem na chemiczne i fizyczne. Wśród procesów chemicznych opisano podstawowe reakcje prowadzące do powstania i destrukcji ozonu przyziemnego, przedstawiono rolę tlenków azotu i lotnych związków organicznych oraz opisano inne składniki smogu fotochemicznego. W tej części rozprawy na wyróżnienie zasługuje analiza różnych reakcji chemicznych w zależności od proporcjonalnego udziału

różnych prekursorów ozonu, m. in. tlenków azotu, metanu i lotnych związków organicznych. Wśród procesów fizycznych wymieniono suchą depozycję oraz transport ze stratosfery. Tu interesującym elementem jest opis, w jaki sposób tempo suchej depozycji zależy od typu roślinności w cyklu dobowym i rocznym - wegetacyjnym.

W trzecim rozdziale przedstawiono czasowo-przestrzenną zmienność ozonu w przyziemnej warstwie atmosfery w województwie mazowieckim na podstawie godzinnych wartości stężenia ozonu w 6 stacjach pomiarowych z lat 2005-2012. Dwie z nich były zlokalizowane w środowisku zamiejskim reprezentując tło regionalne, pozostałe cztery były stacjami miejskimi. Przedstawiono zmiany wieloletnie, cykl roczny, tygodniowy i dobowy. Rozdział zawiera dużo interesujących wyników: pokazano, że stężenia ozonu są średnio wyższe na stacjach tła regionalnego niż miejskiego. Nieco inny jest też bieg roczny poza miastem, występuje tam wyraźne ostre maksimum stężenia ozonu w kwietniu, podczas gdy na stacjach tła miejskiego maksimum w biegu rocznym jest nieco niższe, bardziej wyrównane i trwa od kwietnia do sierpnia. Szczegółowa analiza biegu rocznego koncentracji ozonu w poszczególnych latach badanego okresu pokazuje, że maksima są ostre na wszystkich stacjach, z tym że na stacjach tła miejskiego jest większy rozrzut miesięcy, w których to maksimum jest osiąganego. Za poważną wadę tej analizy uważam jednak brak przedstawienia jakiegokolwiek parametru pokazującego zmienność koncentracji ozonu zarówno w skali roku, jak i miesięcy, tygodni czy doby: odchylenia standardowego, czy choćby zakresu wartości.

Bardzo ciekawe rozważania dotyczą zmienności koncentracji ozonu w cyklu tygodniowym. Rozdział jest dobrze zaplanowany, rozpoczyna się od omówienia możliwych przyczyn występowania zjawiska weekendowego, wśród których Autorka wymienia redukcję emisji NO_x w dni wolne od pracy, opóźnienie emisji NO_x w dni wolne od pracy i zwiększony dopływ promieniowania słonecznego w wyniku ograniczenia emisji sadzy. Tu także zauważono duże różnice między przebiegiem koncentracji na stacjach tła regionalnego i miejskiego. Porównano średnie dobowe przebiegi koncentracji ozonu oraz podstawowych związków biorących udział w produkcji i usuwaniu ozonu (NO_x , NO_2 i NO). Stwierdzono wyższą koncentrację ozonu w okresie weekendu niż od poniedziałku do piątku. Wytłumaczono to różnymi w dni wolne od pracy wartościami stężeń NO_x , NO_2 i NO . Pokazano jak w skali roku kształtują się zależności między stężeniami O_3 i NO_x , na stacjach tła regionalnego, ponieważ były to jedyne stacje, na których w cyklu rocznym różnica stężeń ozonu w dniach wolnych od pracy i roboczych zmieniała znak (latem była ujemna). Zbadano też statystyczną istotność różnic. Na rysunku 3.3 przedstawiającym średnie dobowe przebiegi koncentracji ozonu oraz podstawowych związków biorących udział w produkcji i usuwaniu ozonu podano legendę na wykresie wykonanym dla stacji Granica, ale oznaczenia pokazane na tej legendzie nie zostały niestety zastosowane w przypadku pozostałych stacji.

Analizę dobowego cyklu zmienności stężenia ozonu przeprowadzono osobno dla każdego miesiąca kalendarzowego, ponieważ amplituda tego cyklu miała wyraźny bieg roczny.

Pokazano maksymalne średnie miesięczne wartości amplitudy zmian dobowych. Niestety również w tym przypadku nie podano żadnych informacji na temat odchylenia standardowego, czy innego parametru charakteryzującego rozrzut badanych wielkości.

W kolejnym rozdziale Autorka przedstawiła wyniki analizy wpływu wybranych parametrów meteorologicznych na zmienność zawartości ozonu przyziemnego. Wśród wybranych parametrów znalazły się: temperatura powietrza, wilgotność względna powietrza, prędkość wiatru i całkowite promieniowanie słoneczne, które Doktorantka z jakiś znanych tylko sobie przyczyn nazywa globalnym. Tymczasem słowo globalny, pochodzi od słowa „glob”, które oznacza kulę ziemską. Słowo „globalne” nie pojawiło się omyłkowo, znalazło się nawet w tytule jednego z podrozdziałów. Doktorantka przetłumaczyła trochę bezmyślnie, bezpośrednio z angielskiego „global solar radiation”, ale czy Promotor czytał pracę?

Na podstawie wartości godzinnych wybranych elementów meteorologicznych policzono średnie miesięczne z wybranych godzin, innych dla każdej pory roku. Jest to oczywiście dozwolona procedura, choć niestandardowa, zatem jakiś komentarz, dlaczego nie skorzystano z klasycznych średnich dobowych byłby mile widziany. Współczynnik korelacji Pearsona wymaga by, obie korelowane zmienne miały rozkład zbliżony do normalnego, a przynajmniej symetryczny, czy sprawdzono, że korelowane zmienne pochodzą z takich rozkładów. Jeśli nie, to rzeczywiste progi statystycznej istotności mogą znacząco różnić się od przyjętych w pracy.

Pomijając te szczegóły, zaletą rozdziału czwartego jest wnikliwa dyskusja wyników, w większości przypadków bardzo przekonująca.

Kolejne trzy rozdziały Doktorantka poświęciła sieciom neuronowym i wykorzystaniu ich w prognozowaniu stężenia ozonu przyziemnego w badanym regionie. W pierwszej części przedstawiła w zarysie strukturę, sposób działania, użyteczność i zasady działania sztucznych sieci neuronowych (rozdział 5). Ta część rozprawy nie jest nadmiernie rozbudowana, ale pozwala sądzić, że Doktorantka wie jak zastosować to narzędzie w swoich badaniach.

Konstruowanie modelu, wybór rodzaju sieci, architektury oraz liczby i rodzaju neuronów wejściowych przedstawiono w rozdziale szóstym. Zbiór danych wejściowych podzielono na część uczącą, testową i walidacyjną. Przeprowadzono analizę wrażliwości sieci na wszystkie zmienne wejściowe i oceniono jakość modeli prognostycznych (osobno dla każdej z pięciu stacji, dla których dokonywano predykcji). Przedstawiono pięć miar błędów prognozy. Były to średni błąd prognozy, średni bezwzględny błąd prognozy, średni bezwzględny procentowy błąd prognozy, pierwiastek średniego kwadratowego błędu prognozy i globalny błąd modelu. Dodatkowo policzono korelację między wartościami prognozowanymi i rzeczywistymi. Oceniono jakość modeli prognostycznych dla podzbioru walidacyjnego na wszystkich badanych stacjach. Ta część analizy została wykonana poprawnie ze sporą starannością.

W rozdziale siódmym model, skonstruowany w oparciu o dane z roku 2015, jest testowany na danych z roku 2014. Badana jest dokładność prognozy maksymalnego 1-godzinnego

stężenia ozonu. Do oceny jakości modelu porównano przebiegi czasowe wartości modelowanych i mierzonych, a także przeprowadzono analizę reszt i błędów: średniego błędu prognozy, średniego bezwzględnego błędu prognozy, średniego bezwzględnego procentowego błędu prognozy oraz pierwiastka średniego kwadratowego błędu prognozy. Jest to bardzo rzetelna ocena możliwości opracowanego modelu, świadcząca o tym, że sieci neuronowe można z powodzeniem wykorzystać do prognozowania maksymalnych stężeń ozonu w krótkiej perspektywie czasowej. Jednak i w tym rozdziale można znaleźć kilka błędów. Brakuje jasnego określenia reszty z modelu. Na stronie 107 Autorka zapowiada przedstawienie histogramów odchylenia wartości wygenerowanych przez sieć od wartości rzeczywistych, co sugeruje, że reszta jest różnicą między wartością zmierzoną i symulowaną. I takie wartości są przedstawione na histogramach. Ale na stronie 110 znajdujemy stwierdzenie: maksymalna wartość reszt wynosiła $53,6 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (27.07.2014, xi (wartość zmierzona) = $79 \mu\text{g}/\text{m}^3$, yi (wartość obliczona) = $132,6 \mu\text{g}/\text{m}^3$). Podobnie przy opisie wyników uzyskanych na stacji Granica, reszty mieszczą się w przedziale od $-60 \mu\text{g}/\text{m}^3$ do $40 \mu\text{g}/\text{m}^3$. A w dalszej części znajdujemy informację, że maksymalne wartości reszt między obserwacją a prognozą wynosiły $52,2 \mu\text{g}/\text{m}^3$ oraz $53,9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ i obydwie były z przeszacowaniem obserwacji (strona 112). To „luźne” traktowanie znaku reszt zdecydowanie utrudnia śledzenie tekstu. Rysunki 7.1-7.5 są starannie wykonane pod względem graficznym, ale ich opis jest zbyt ubogi. Na histogramie pojawia się czerwona linia ciągła, która nie jest wspomniana w opisie, podobnie jak czerwona linia na wykresie rozrzutu. Nie podoba mi się również stosowanie średniej arytmetycznej, jako miary pozycyjnej w przypadku błędu względnego, którego rozkład nie przypomina normalnego i jest skrajnie asymetryczny. Średnia arytmetyczna powinna być w tym przypadku zastąpiona medianą.

Rozdział kończy porównanie prognoz uzyskanych z opracowanego modelu z prognozami numerycznego modelu chemii troposfery GEM-AQ wykorzystywanego przez Główny Inspektorat Ochrony Środowiska. Porównanie wypadło nieznacznie na korzyść sieci neuronowych, co nie deprecjonuje modelu GEM-AQ, który obok ozonu prognozuje stężenia sporej liczby innych zanieczyszczeń atmosfery.

Mimo wspomnianych uchybień uważam rozważania przeprowadzone w tym rozdziale za wartościowe i przekonujące. Pokazano, że model opracowany przez Doktorantkę dobrze spełnia swoje zadanie.

Czytając podsumowanie wracałam kilkakrotnie do tekstu, żeby sprawdzić, czy dobrze go zrozumiałam. Na stronie 132 znalazłam stwierdzenie „*Ponadto wykazano istnienie ozonowego zjawiska weekendowego (występowanie wyższych wartości stężeń ozonu w dni robocze niż w soboty i niedziele)*” i kilka linijek dalej następuje „*W trakcie analizy zjawiska w skali poszczególnych pór roku wykryto nietypowe zjawisko występowania niższych stężeń ozonu w dni robocze niż w soboty i niedziele na stacjach tła regionalnego w porze letniej*”. Nie umiem logicznie wytłumaczyć, dlaczego Doktorantka podaje tu wnioski dokładnie przeciwne do tych, które przedstawiła w rozdziale czwartym.

3. Uwagi drobne, głównie językowe

Praca zawiera sporo błędów językowych, np.

Według Andrews (strona 6), *według Stevenson i inni* (strona 8), *według Aneja i inni* (strona 14)

...ograniczonej ilości stacji (strona 12),

jednocześnie wraz ze wzrostem zawartości ... (strona 49)

każdy jeden pochłonięty foton światła (strona 67)

W wyniku skutecznego działania algorytmu błąd jest stopniowo zmniejszany, co skutkuje wzrostem skuteczności działania sieci (strona 77)

Przyjęty cel pracy został zrealizowany w następujący sposób: 1) uzyskanie wyników prognoz... (strona 79)

Okres prognozy w skali roku ograniczony jest do sześciu miesięcy w okresie od kwietnia do września (strona 80)

Odpowiednie parametry w postaci kolumn stanowiły zmienne modelu (strona 81)

Wszystkie wartości w zbiorze danych stanowiły wartości numeryczne należące do określonego przedziału (strona 81)

W początkowym etapie realizacji celu używano funkcji „Automatyczny projektant sieci” z użyciem modelu regresji (strona 82)

Proces generowania optymalnego modelu prognozy koncentracji ozonu przyziemnego opierał się na testowaniu ... (strona 82/83)

Doktorantka generalnie unika przecinków, mimo zamiłowania do długich, rozbudowanych zdań. Jednak czasem przecinek pojawia się w najmniej spodziewanym miejscu : „*Zjawiska, bezpośredniego dotarcia powietrza atmosferycznego do powierzchni ziemi...*” (strona 29).

4. Podsumowanie

Podsumowując, za główne walory rozprawy uważam:

- wnikliwą analizę procesów chemicznych i fizycznych determinujących zawartość ozonu w przyziemnej warstwie atmosfery
- wnikliwą analizę tygodniowego cyklu zmienności stężenia ozonu z uzasadnieniem różnic między przebiegiem zmienności w obszarach miejskich w na stacjach tła regionalnego
- analizę wpływu czynników meteorologicznych na zmienność stężenia ozonu w przyziemnej warstwie atmosfery

- opracowanie modelu prognostycznego zawartości ozonu w warstwie przyziemnej z wykorzystaniem sztucznych sieci neuronowych i pokazanie, że jest to skuteczne narzędzie wspomagające predykcję ozonu, a dokładność prognoz nie jest gorsza od uzyskiwanych z użyciem nowoczesnych modeli chemii atmosfery.

5. Wnioski końcowe

Recenzowana rozprawa jest dojrzałym opracowaniem naukowym, a przedstawione uwagi mają raczej charakter porządkujący. **W mojej ocenie praca Pani mgr Izabeli Pawlak spełnia wszelkie warunki stawiane rozprawom doktorskim. Dlatego proszę Wysoką Radę Instytutu Geofizyki Polskiej Akademii Nauk o dopuszczenie Autorki do dalszych etapów postępowania w przewodzie doktorskim.**

Joanna Wibig

Łódź, 11. września 2017 r.