

Softwarové zpracování dat nejen pro matematické modely podzemní vody

doktorandský seminář 10. 2. 2010

Mgr. **Kamil Nešetřil**, linka 3019, kancelář A04029, Kamil.Nesetril@tul.cz

hydrogeolog (Mgr. - Přírodovědecká fakulta UK - 2002), praxe 5 let modelování podzemní vody (AQUATEST a.s.)

Použité zkratky

*	Není zdarma ani pro nekomerční použití	GIS	Geografický informační systém
CENIA	Informační agentura životního prostředí ČR	GUI	Graphical user interface
FOSS	Free and open source software	GWB	Geochemist's Workbench

Proč tak ze široka? Protože kvalitním zpracováním dat často dospějeme k jednoduchému a kvalitnímu modelu, který není příliš náročný na programové vybavení. Komplikované zadávání vstupních dat do numerického modelu tak odpadne. Špatný model není ten s nepřesnými čísly, ale takový, který je založen na chybných předpokladech a neporozumění jaký proces je řídicí (chybný koncepční model).

Postup práce

zpracování geospatial dat může u pokročilých modelovacích GUI probíhat téměř pouze v nich (GMS*)

- metodika ke které jsem se dopracoval:

- 1 sbírat data
- 2 zobrazit data zejm. Grapher* pro grafy, GIS pro prostorová data
- 3 interpretovat data co nám data říkají
- 4 doplnit data vymyslet si co neznám (např. doplnit body v ploše tak, aby interpolátor nezakmitával)
vyhodit data, která jsou nelogická (chyby měření atd.) a která nejsem schopen interpretovat,
či např. představují nedůležité malé heterogenity
- 5 identifikovat klíčové procesy
- 6 sestavit jednoduchý model (pokud možno analytický) a vyhodnotit výsledky a podle toho směřovat další práci (např. ji ukončit:-)
- 7 dále možno zvolit komplexnější model
- 8 importovat do něj zpracovaná data (interpolace, import .shp ...)

...

Datové formáty

- AutoCAD* uzavřený .dwg, otevřený .dxf
- GIS .shp (shape file) zastaralý, skoro úplně otevřený
geodatabáze moderní způsob ukládání dat GISy do jakékoliv databáze
- různé rastrové formáty GIS, Surfer* .grd atd.
- obrázky např. .jpg a k němu tzv. world file (.jpw se souřadnicemi, možno vyexportovat z GISu)

Zpracování a zobrazení dat - obecně

- MS Excel*
doplňky
statistika EZ Analyze
všemožné úpravy a urychlení ASAP Utilities
výpočty molekulových hmotností Molecular weight *příklad vzorce: =MW ("CaCO3")*
- matrix plot (matice korelačních grafů) **IDAMS**, „R“
- statistika OpenStat
Mann-Kendall's test (makro v Excelu pro prokázání monotonie časové řady)

Zobrazení 1D dat (tj. grafy)

- FOSS „R“ www.r-project.org
platforma pro statistické výpočty a zobrazování dat
GUI: např. R Commander; RKWard pro KDE
- komerční Veusz; SciDAVis perspektivní GUI
Grapher* profesionální a naprosto flexibilní **grafy**
\$300; bez možnosti akademické licence
- freeware MS Excel* jednoduché grafy
EnviroInsite

Zobrazení 2D dat

zobrazení bodových a plošných informací z různých informačních zdrojů

- GIS mapy, **lokalizované grafy**, v menší míře interpolace, data z WMS a ArcIMS serverů
- FOSS mnohdy problém s kvalitou grafických výstupů
- GRASS silný nástroj; složitý na učení a práci
- Quantum GIS jednoduché GUI, které umí využívat funkce GRASSu
- MapWindow .net www.sspa.com/Software/kt3d.shtml
obsahuje doplněk **KT3D_H2O** – interpolace; kombinace interpolace hladin a analytického řešení pro studny
- OpenJUMP; gvSIG; uDIG Java

- proprietární freeware [Janitor](#) česká produkce (CENIA) komerční ESRI ArcGIS* (licence: ArcView*, ArcEditor*, ArcInfo*) datový model ([Groundwater Analyst](#), ...) – snadné překlopení dat do GUI GMS pro technické kreslení, využíváno např. stavaři podobě jako GIS se jedná o platformu, do které existuje mnoho pluginů (i pro geospatial)
- [Surfer](#)* silný, přívětivý, zaměřený na rastry (interpolace), \$700
- Grapher* částečně i pro 2D data

Zobrazení 3D dat

vizualizace geologie

- [EnviroInsite](#) výborný software, \$300, akademická licence zdarma
- Interactive Groundwater včetně jakéhosi matematického modelu, cíl: pokročilé GUI se zaměřením na multiscale modeling
- Surfer* částečně ([blokdigramy](#))

Pukliny

[RockWare](#) (měřená data – disky); *EnviroInsite vůbec; 3D software (CAD)*

Geochemická data

- [AquaChem](#)* grafy (na mapě lokality i všechny jiné), napojení na PHREEQC a PHT3D, ideální pro interpretaci dat uživatelsky přívětivé, určeno pro zpracování dat; modelování je spíše doplňkové akademická licence \$1450 pro celou učebnu
- GWB* lepší na modelování, horší na zobrazování měřených dat (ale dotahuje v tom AquaChem)
- EnviroInsite Stiffovy diagramy

GUI pro modelování zdarma

Analytické

- 3D transport www.sspa.com/Software/atrans.shtml
- analytické elementy www.civil.uwaterloo.ca/jrcraig/VisualAEM
- chlorované uhlovodíky včetně biodegradace www.epa.gov/ada/csomos/models/remchlor.html
- mé životní dílo excelový kalkulátor – poskytnu na vyžádání
- životní dílo Františka Pastuszka důchodce z Vodních zdrojů Praha
- analytická řešení (někdy nabušená do Excelu) publikovaná např. v časopise Groundwater (Wiley) – viz mou sbírku na vyžádání

Numerické

- [ModelMuse](#) GUI pro MODFLOW a PHAST (tj. 3D transport s PHREEQC); výborný software
- VS2D 2D vertikální; včetně transportu tepla; i radiální proudění
- Hydrus-1D 1D vertikální velmi komplexní transport ve vadózní zóně
- Processing MODFLOW (PMWin) verze 5.3 zdarma (jednoduché, zastaralé, nerozvíjené) – GUI pro Modflow a navazující modely

Přenos dat do numerického modelu

- MODFLOW Hydrogeologic Unit Flow Package (HUF) 3D grid nezávislý na výpočetním gridu (interpoluje se z HUF do výpočetního gridu)
- interpolace 2D v dané vrstvě; 3D – jen některá GUI – nikdy jsem nepoužil ModelMuse umožňuje interpolaci mezi body i liniemi – různé metody; zadávání pomocí vzorečku
- import dat polygony, body, linie, databáze

Zajímavé datové zdroje

- WMS a ArcIMS servery (do GISu je možno stáhnout tematickou mapu z mapového portálu - např. [CENIA](#)) např. historické mapy, klad mapových listů, ortofoto mapa, geologická, katastrální a mnohé další
- eWater, eEarth – evropská hydrogeologická a geologická databáze průzkumných a monitorovacích vrtů (Geofond)

Závěr a doporučení

Existuje velké množství softwarových nástrojů, pomocí kterých je možno zpracovat a zobrazit data potřebná pro sestavení matematického modelu. Doporučuji:

- široce používat volně stažitelné: Janitor (případně MapWindow či jiný GIS)
- zajistit bezplatnou akademickou licenci: EnviroInsite
- zakoupit licence: Grapher*

Grapher* je možno pro zobrazování geochemie částečně nahradit kombinací GWB* (nevytváří mapy) + EnviroInsite (mapy).

Pro benchmarkování či výuku doporučuji ModelMuse, VS2DI, Hydrus-1D, případně VisualAEM a PMWin.

S programem Interactive Groundwater nemám zkušenosti. Programy Grapher a Surfer* jsou produktem firmy Golden Software, Inc.*

Další užitečné programky – ochutnávka na příště

- Zotero bibliografický manažer – doplněk do Firefoxu
- *portable* nabízím svou sbírku programů, které se nemusí instalovat