

JEDNODUCHÉ ALTERNATIVNÍ MODELY PODZEMNÍ VODY

Disertační práce

Studijní program: P 3901 Aplikované vědy v inženýrství
Studijní obor: 3901V055 Aplikované vědy v inženýrství

Autor práce: **Mgr. Kamil Nešetřil**
Školitel: doc. Ing. Jan Šembera, Ph.D.

Prohlášení

Byl jsem seznámen s tím, že na mou disertační práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím disertační práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li disertační práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Disertační práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací se školitelem.

Současně čestně prohlašuji, že tištěná verze práce se shoduje s elektronickou verzí, vloženou do IS STAG.

V Liberci dne

Podpis:

Handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Kamil Kostel'.

Poděkování

Tato práce vznikla mj. za podpory Technologické agentury České republiky v rámci řešení projektů č. TA02020177 „Informační systém pro podporu rozhodování o využití krajiny po rekultivaci (MARE)“ a č. TA04020207 „Informační systém pro analýzy a predikce zásob podzemní vody v závislosti na lidské činnosti a klimatických změnách“ (ZÁVOD).

Abstrakt

Epistemologická nejistota modelů podzemní vody se projevuje v nejistotě koncepčního modelu, a to zejména ve struktuře modelu. S ní je možno se vyrovnat využitím více (i velmi jednoduchých) koncepčních modelů založených na různých přístupech či předpokladech. Práce shrnuje existující klasifikace nejistot (zejm. koncepčního modelu) a navrhuje novou klasifikaci využití modelů. Prezentované případové studie srovnávají jednoduché a komplexní modely, testují alternativní hypotézy sadou jednoduchých modelů či představují alternativní prediktivní modely. Taková strategie se ukazuje jako velmi účelná obzvláště při nedostatku vstupních dat, kdy není možné model validovat. Obhajitelnost modelů je semikvantitativně vyhodnocena. Aby takové modely bylo možno snadno formulovat, vytvářet a využívat, byl vyvinut informační systém využívající nástroje, přístupy a technologie business intelligence – konkrétně platformu Pentaho.

Klíčová slova

hydrogeologie, podzemní voda, matematický model, nejistota, epistemologická nejistota, koncepční model, struktura modelu, ekvifinalita, alternativní modely, jednoduchost software pro správu dat o životním prostředí (EDMS), business intelligence (BI), Pentaho, ETL, GeoBI, datový model

Abstract

Epistemological uncertainty of groundwater models is reflected in the conceptual model uncertainty, especially in the model structure. It is possible to cope with it by using more (even very simple) conceptual models based on different approaches or assumptions. The thesis summarizes the existing classifications of uncertainty (esp. that of conceptual model), and proposes a new classification of model usage. The presented case studies compare simple and complex models, test alternative hypotheses by a set of simple models or represent alternative predictive models. Such a strategy is very effective especially in the absence of adequate input data when it is not possible to validate the model. Tenability of the models is evaluated semi-quantitatively. For such models to be easy to formulate, develop and exploit, an information system using tools, approaches and technologies of business intelligence (Pentaho platform) has been developed.

Keywords

hydrogeology, groundwater, mathematical model, uncertainty, epistemic uncertainty, conceptual model, model structure, equifinality, multiple model ensemble, parsimony, simplicity environmental data management software (EDMS), business intelligence (BI), Pentaho, ETL, GeoBI, data model

Obsah

Seznam obrázků.....	7
Seznam tabulek.....	8
Seznam zkratk.....	9
Úvod	11
1 Východiska práce	12
1.1 Matematické modely podzemní vody.....	12
1.1.1 Fáze tvorby modelu, koncepční model.....	13
1.2 Klasifikace a hodnocení nejistoty (modelu)	14
1.3 Významný zdroj nejistoty – epistemologická nejistota.....	19
1.4 Projev epistemologické nejistoty – nejistota koncepčního modelu.....	19
1.5 Alternativní koncepční modely.....	21
1.5.1 Volba nejlepšího modelu – průměrování modelů.....	22
1.5.2 Volba nejlepšího modelu – testování hypotéz.....	22
1.5.3 Alternativní geologické modely	24
1.5.4 Princip ekvifinality	25
1.6 Jednoduchost a komplexnost modelů podzemní vody.....	26
1.7 Alternativní jednoduché modely	29
1.8 Ekvifinalita – vymezení vůči dostupným publikacím	31
1.9 Formulace zvoleného přístupu	32
2 Případové studie.....	34
2.1 Ekvifinalita – interakce povrchové a podzemní vody.....	34
2.2 Srovnání jednoduchého a komplexního modelu – ovlivnění podzemních vod jezem	37
2.3 Kombinace principiálně odlišných modelů – model délky kontaminačního mraku....	40
2.3.1 Model ustálené délky kontaminačního mraku.....	40
2.3.2 Model dovoleného čerpání.....	41
2.4 Transport ropných uhlovodíků.....	42
2.4.1 Vstupní data.....	43
2.4.2 Matematický model.....	44
2.4.3 Závěr.....	45
2.5 Transport chlorovaných uhlovodíků – advekční a bilanční model.....	45
2.5.1 Advekční model – predikce.....	46
2.5.2 Bilanční model – testování hypotézy	46
2.5.3 Diskuse a závěr.....	47
2.6 Přirozená biodegradace ropných uhlovodíků	47
2.7 Hodnocení nejistoty koncepčního modelu podle Refsgaarda et al. 2006.....	48

3	Informační systém HgIS	49
3.1	Požadavky na systém z hlediska funkčnosti.....	49
3.2	Existující EDMS, výměnné formáty a datové modely.....	51
3.2.1	Existující EDMS	51
3.2.2	Existující výměnné formáty a datové modely	51
3.2.3	Software pro geologickou vizualizaci a modelování.....	56
3.2.4	Hodnocení stávajících řešení.....	60
3.3	Požadavky na systém z hlediska architektury.....	60
3.4	Typy informačních systémů	61
3.5	Business intelligence	63
3.6	Návrh informačního systému HgIS.....	65
3.6.1	Geologická vizualizace – EnviroInsite	66
3.6.2	Databáze.....	66
3.6.3	Datová pumpa (ETL).....	71
3.6.4	Reporting (tiskové sestavy).....	73
3.6.5	Mapový server	74
3.7	Implementace.....	75
3.7.1	Datová pumpa (ETL).....	75
3.7.2	Reporting (tiskové sestavy).....	75
3.7.3	Mapová online aplikace	76
3.7.4	Správa nestrukturovaných dat a dokumentů.....	78
3.8	Aplikace HgIS.....	78
3.9	Diskuse a závěr	78
3.9.1	Plánované rozšíření.....	80
4	Shrnutí vědeckých výsledků	81
	Shrnutí a závěr	82
	Použitá literatura	84
	Přílohy	99
	A. Příklady citátů z odborné literatury týkající se jednoduchosti a komplexnosti modelů a dobré praxe v modelování	99
	B. Dokumentace případových studií.....	102
	C. Dokumentace HgIS.....	102

Seznam obrázků

Obrázek 1: Základní pojmy z oblasti modelování.....	13
Obrázek 2: Schéma různých typů nejistoty v modelech.....	16
Obrázek 3: Klasifikace nedokonalého poznání.....	17
Obrázek 4: NUSAP	18
Obrázek 5: Testování modelů.....	23
Obrázek 6: Citlivost predikcí modelu na alternativní geologické modely	25
Obrázek 7: Schematický diagram – jednoduchý model (A) a komplexnější model (B).....	27
Obrázek 8: Schematický diagram – shoda modelu s pozorováním.....	29
Obrázek 9: Data a znalosti – jednoduchý model má o jednu transformaci méně.....	32
Obrázek 10: Ideový řez zájmovým územím – koncepční model.....	35
Obrázek 11: Hypotéza ztráty vodnosti v důsledku přetoku do subglaciálního koryta.....	36
Obrázek 12: Schematický hydrogeologický řez a koncepční model.....	37
Obrázek 13: Schéma bilančního výpočtu: Objem pístu vody z řeky odpovídá zvětšení zvodně.....	38
Obrázek 14: Numerický 2D vertikální model.....	39
Obrázek 15: Výsledky modelu ustálené délky kontaminačního mraku a modelu čerpání.....	42
Obrázek 16: Schéma lokality.....	43
Obrázek 17: Hydrostratigrafický řez s vyznačením kolektorů.....	46
Obrázek 18: Klíčové elementy IS pro integrované vodní zdroje.....	49
Obrázek 19: Schéma architektury HgIS.....	65
Obrázek 20: Původní datový model EnviroInsite	67
Obrázek 21: Návrh databáze HgIS (datový sklad) – vybrané tabulky	69
Obrázek 22: Návrh databáze HgIS (datový sklad) – všechny tabulky	70
Obrázek 23: Uživatelské rozhraní Spoon – nabídka kroků (levý sloupec) po zadání výrazu „row“ ..	72
Obrázek 24: Spouštění transformací PDI v PBA za pomoci tzv. řešení	73
Obrázek 25: Okno Pentaho Report Designer při editaci reportu geologického profilu vrtu.....	74
Obrázek 26: Univerzální report průběhu veličin – graf a tabulka	76
Obrázek 27: Uživatelské rozhraní on-line mapové aplikace	77
Obrázek 28: Textové zobrazení geologického profilu vrtu v online mapové aplikaci	77

Seznam tabulek

Tabulka 1: Fáze tvorby modelu – srovnání terminologií	13
Tabulka 2: Klasifikace nejistoty podle pěti vrstev	14
Tabulka 3: Matice nejistot	17
Tabulka 4: Matice rodokmenu (<i>pedigree matrix</i>) pro monitoring emisí	18
Tabulka 5: Matice rodokmenu pro hodnocení obhajitelnosti koncepčního modelu	20
Tabulka 6: Vhodné a nevhodné využití modelů podzemní vody podle citátů v příloze A	28
Tabulka 7: Vstupní data modelu dovoleného čerpání	41
Tabulka 8: Vstupní data pro hodnocení přirozené atenuace	44
Tabulka 9: Shrnutí případové studie „Transport ropných uhlovodíků“	45
Tabulka 10: Matice rodokmenu (<i>pedigree matrix</i>) pro prezentované případové studie	48
Tabulka 11: EDMS	53
Tabulka 12: Standardy pro výměnu dat a datové modely	54
Tabulka 13: Software pro geologické modelování	57
Tabulka 14: Typy IS souvisejících s problematikou správy dat o životním prostředí	61
Tabulka 15: Běžné komponenty GIS	62
Tabulka 16: Komponenty BI	62
Tabulka 17: Hlavní rozdíly mezi OLTP a OLAP.	63
Tabulka 18: Komponenty HgIS	65
Tabulka 19: Popis tabulek původního datového modelu EnviroInsite	67
Tabulka 20: Popis důležitých tabulek databáze HgIS (datový sklad)	68
Tabulka 21: Unikátnost HgIS	79
Tabulka 22: Splnění požadavků na systém z hlediska architektury	79

Seznam zkratek

BI	<i>Business intelligence</i> – využívání dat o firmě pro podporu rozhodování manažerů
CIU	Chlorované uhlovodíky
DNAPL	<i>Dense non-aqueous phase liquids</i> – Kapalná fáze těžší než voda
DS	Distribučním sklad pohonných hmot
DSS	<i>Decision support system</i> – Systém pro podporu rozhodování
EDMS	<i>Environmental data management software</i> – Software pro správu dat o životním prostředí
DWH	<i>Data warehouse</i> – Datový sklad: databáze aktuálních i historických dat pro analýzu
EI	EnviroInsite – software pro vizualizaci hydrogeologických dat
ETL	<i>Extract, transform, load</i> – Datová pumpa
FOSS	<i>Free and open source software</i> (téže FLOSS) – software zdarma s otevřenou licencí
GeoBI	<i>Geospatial business intelligence</i>
GIS	Geografický informační systém
GUI	<i>Graphical user interface</i> – Grafické uživatelské rozhraní
HGIS	Hydrogeologický informační systém – významný výsledek této práce
IF	Impakt faktor
IS	Informační systém
IS MARE	Informační systém MARE
IS ZÁVOD	Informační systém ZÁVOD
JÚ	Vodárenské jímací území
LIMS	<i>Laboratory information management system</i> – Laboratorní informační systém
MARE	Projekt TA ČR: TA02020177 – Informační systém pro podporu rozhodování o využití krajiny po rekultivaci
NDA	<i>Non-disclosure agreement</i> – Dohoda o mlčenlivosti
n. s.	Nerostné suroviny
ODBC	<i>Open Database Connectivity</i>
OGS	<i>Open Geospatial Consortium</i> – organizace mj. vydávající geoinformační standardy
OLAP	<i>Online Analytical Processing</i>
OLTP	<i>Online Transaction Processing</i>
PBA	<i>Pentaho Business Analytics</i> – nasazený server firmy Pentaho
PCE	Tetrachlorethylen
PDI	<i>Pentaho Data Integration</i> – neboli Kettle: ETL od firmy Pentaho
QA/QC	<i>Quality Assurance / Quality Control</i> – Jištění jakosti a kontrola kvality
RU	Ropné uhlovodíky
SOA	<i>Service Oriented Architecture</i>
SQL	<i>Structured Query Language</i> – dotazovací jazyk relačních databází
SŘBD	Systém řízení báze dat = DBMS – <i>Database Management System</i>
SW, sw	Software
TCE	Trichlorethylen
TUL	Technická univerzita v Liberci

WFS	<i>Web Feature Service</i> – standard webové služby pro poskytování vektorových map
WMS	<i>Web Map Service</i> – standard webové služby pro poskytování rastrových map
WMTS	<i>Web Map Tile Service</i>
XML	<i>Extensible Markup Language</i>
ZÁVOD	Projekt TA ČR: TA04020207 – Informační systém pro analýzy a predikce zásob podzemní vody v závislosti na lidské činnosti a klimatických změnách

Úvod

Celý profesní život se autor předkládané práce zabývá modelováním podzemní vody a po počáteční fascinaci komplexními modely zjišťoval, že složité modely s vysokým počtem stupňů volnosti (parametrů) často nejsou užitečným podkladem pro porozumění probíhajícím procesům ani pro rozhodování – mimojiné proto, že často nejsou adekvátně podpořeny daty. Navíc je obtížné je sestavit a výsledky vyhodnotit. Předkládaná práce proto demonstruje užitečnost využití více jednoduchých modelů. Pro usnadnění jejich tvorby byl vyvinut informační systém HgIS.

V modelování podzemní vody čelíme nejistotě ve výsledcích modelu. Ta je dána nejistotou vstupních dat a nejistotou naší interpretace těchto dat (tzv. epistemologická nejistota – tzn. nedostatečné pochopení fungování systému). Při modelování podzemní vody je dobrou praxí hodnotit nejistotu predikcí na základě shody modelu s validačními daty. Skutečná nejistota je však často hlubší – podzemí totiž není přístupné přímému pozorování, a proto často bývá důležitější nejistota interpretací. Tyto úvahy vyžadují jednoznačné vymezení pojmů, které však nejsou v literatuře používány jednoznačně – v první kapitole je proto představeno shrnutí existujících klasifikací nejistot. Je zde definována epistemologická nejistota a její projevy: nejistota koncepčního modelu a nejistota struktury modelu. Pro vypořádání se s takovou nejistotou je v práci obhajována a využita strategie více jednoduchých modelů, které jsou založeny na různých přístupech či předpokladech. Tyto jednoduché modely mohou být formulovány jako testování hypotéz a jednoznačně snižovat nejistotu porozumění fungování studovaného systému. Využití modelů pro testování hypotéz je spolu s dalšími uvedeno v navržené klasifikaci využití modelů (kapitola 1.9). V práci je diskutováno použití principu ekvifinality a tohoto pojmu v oblasti modelování podzemní vody. Kapitola 1 vychází z článků zabývajících se zejm. hydrogeologií, i když principy využití alternativních jednoduchých modelů jsou platné pro různé obory.

V kapitole 2 je prezentováno využití alternativních jednoduchých modelů v modelování různých hydrogeologických úloh. Jedna úloha je řešena více modely, které jsou založeny na různých přístupech a předpokladech. Vysoká nejistota modelů je dána nedostatkem adekvátních vstupních dat. Proto také nebylo možno výsledky modelů kalibrovat ani validovat, ale případně pouze srovnávat výsledky jednotlivých modelů mezi sebou. Prezentované případové studie srovnávají jednoduché a komplexní modely, testují alternativní hypotézy sadou jednoduchých modelů či představují alternativní prediktivní modely. Obhajitelnost modelů je semikvantitativně vyhodnocena s využitím metodiky nalezené v literatuře (kapitola 2.7).

Postupně stále více vyvstávala potřeba efektivní správy dat, která je předpokladem pro tvorbu alternativních koncepčních modelů a o pro vývoj znovu využitelných matematických modelů. K tomu je možno využít existující software pro správu dat o podzemní vodě a životním prostředí, které se však ukázaly jako nevyhovující. Velmi se však osvědčilo využití nástrojů, přístupů a technologií z naprosto jiné oblasti – manažerské informatiky. Úlohy řešené při zpracování dat o podzemní vodě a životním prostředí jsou do značné míry podobné úlohám business intelligence. Business intelligence spočívá ve sběru a analýze dat (např. o firmě) pro podporu manažerského rozhodování. Manažer i hydrogeolog potřebují načítat archivní data z různorodých zdrojů (databáze, soubory atd.). Není ani tak důležité interaktivně editovat data, ale především je zobrazovat a analyzovat. Oba potřebují tiskové sestavy, které jsou automaticky generovány, ale přitom je možno je ručně upravovat. Je proto vhodné, aby byly mj. v editovatelných formátech, jako je MS Word a MS Excel. Proto byl vyvinut informační systém HgIS (kapitola 3). Pro vizualizaci a analýzu dat a pro matematické modelování podzemní vody existuje mnoho užitečných nástrojů. Jen v některých případech je rozumné implementovat jejich funkcionalitu přímo do HgIS. Důležitou součástí HgIS je proto možnost, aby si uživatel mohl interaktivně vytvořit export dat pro využití v libovolném nástroji. Při vývoji HgIS se

uplatnily přístupy, nástroje a technologie business intelligence jako je např. datová pumpa (tzv. ETL), která umožňuje automatizovaně importovat data z různých zdrojů a to i málo strukturovaných, jako je MS Word. ETL byl též využit pro export dat.

Pro rychlou orientaci je tedy možno říci, že kapitola 1 představuje teoretický úvod do problematiky nejistoty, alternativních modelů a jednoduchosti v modelování. První kapitola přináší ukázky praktického využití principů z kapitoly 2 na modelech různých lokalit. Třetí kapitola prezentuje systém, který usnadňuje práci s hydrogeologickými daty včetně jejich interpretace a formulace adekvátních koncepčních modelů a implementaci jednoduchých matematických modelů. Výsledkem práce není formální metodika – uvedené principy je však možno uplatnit při zpracování dalších případových studií.

Tři dříve zvažované názvy předkládané práce charakterizují stručně její náplň: Kombinace principiálně odlišných jednoduchých modelů – případové studie a nástroj. Jednoduché alternativní modely podzemní vody – případové studie a nástroj. Ekvifinalita v modelování podzemní vody a využití nástrojů business intelligence.

Předkládaná práce má do jisté míry syntetický charakter a může být tudíž obtížněji uchopitelná. Práce cituje velké množství literatury a nezachází příliš do detailů – ty jsou do jisté míry na příloženém CD. Pro úplnost obsahuje práce převzaté obrázky a citáty, které jsou uvedeny v původním jazyce (angličtině) bez překladu.

1 Východiska práce

1.1 Matematické modely podzemní vody

Každý model je abstrakcí, zjednodušením a interpretací reality (Refsgaard et al. 2006). Model také může být zjednodušená teorie (Refsgaard a Henriksen 2004). Model tedy může být „black box“, teorie však nikoliv.

Podle Bevena a Younga (2013) neexistují (alespoň zatím) modely v hydrologii plně založené na fyzikálních principech. Autor předkládané práce se domnívá, že se v hydrogeologické praxi často přeceňuje fyzikální pojetí úlohy, ačkoliv v důsledku heterogenit a měřítko není toto pojetí plně možné (i když stále více možné než v případě hydrologie povodí). Alternativou k těmto redukcionistickým modelům (*deterministic reductionism*) jsou techniky založené na datech (Young 1998; Clark et al. 2011). Pro modely podzemní vody byly využity metody jako *soft computing*, strojové učení a *data mining* a to například: využití neuronových sítí (Coulibaly et al. 2001; Michael et al. 2005), dynamiky systémů (Roach a Tidwell 2009), rozhodovacích stromů atd. (Litaor et al. 2010; Rapantová et al. 2012; Farrell et al. 2007). Přístupy prezentované v předkládané práci jsou většinou fyzikálně založené modely, i když jejich matematická formulace není vždy plně korektní. Většímu využití alternativních strategií modelování však může přispět informační systém HgIS prezentovaný v kapitole 3.

V předkládané práci je uváděna terminologie týkající se matematického modelování. Pojmy jsou jednoduše a jednoznačně vysvětleny v článku (Beven a Young 2013). Jedná se o pojmy týkající se rozčlenění modelů (*lumped × distributed, deterministic × stochastic, inductive × deductive, black-box × process-based, inductive × deductive*), nejistoty (*aleatory × epistemic; conditional validation, split-record test, postaudit*) a typů modelování (*simulation, ex-ante forecasting, ex-post forecasting, hindcasting a projection – “what-if” simulations*). Pojmy tedy nebudou v předkládané práci dále objasňovány.

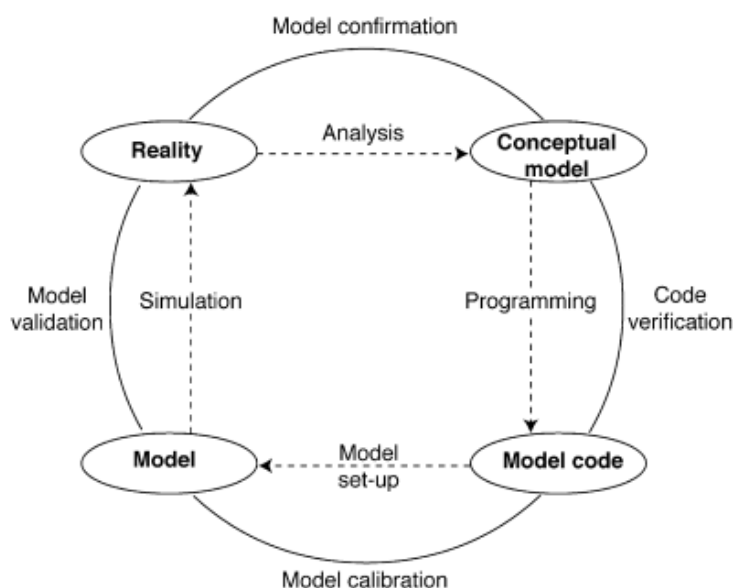
1.1.1 Fáze tvorby modelu, koncepční model

Tabulka 1 ukazuje fáze tvorby modelu podle různých autorů. Dále je používána terminologie Bevena (2001, 2012), podle níž percepční model představuje subjektivní porozumění (vnímání) probíhajícími procesům, které může být čistě kvalitativní. Koncepční model je jeho konkrétní zjednodušené vyjádření (např. řídicí rovnice, doména, okrajové podmínky, parametry), které se týká konkrétní lokality. Procedurální model je pak implementace koncepčního modelu v konkrétním software (sw) bez ohledu na to, zda jde o numerické, či analytické řešení.

Tabulka 1: Fáze tvorby modelu – srovnání terminologií

Beven (2001, 2012)		Gupta et al. (2012)	
Fáze	Charakter fáze	Fáze	Charakter fáze
Percepční model	Porozumění fungování systému – i bez vnímatelného vyjádření	Percepční model	Představy o fungování systému + interpretace dat
		Koncepční model	Zjednodušení percepčního modelu (např. nákres)
Koncepční model	Rovnice a parametry – zjednodušení a formalizace percepčního modelu	Matematický model	Rovnice a parametry – formalizace koncepčního modelu
Procedurální model	Software	Výpočetní model (<i>computational</i>)	Numerické či analytické řešení

Další pohled na fáze tvorby modelu uvádí Refsgaard a Henriksen (2004) – viz obrázek 1.



Obrázek 1: Základní pojmy z oblasti modelování. Zdroj: Refsgaard a Henriksen (2004)

Ověřování modelu má tři stupně – mohli bychom říci s klesající silou pojmu (Refsgaard a Henriksen 2004):

- verifikace (tak striktní ověření se může vztahovat jedině na software jako takový),
- validace (srovnání výsledku modelu s měřeními pro konkrétní model lokality) a
- potvrzení (*confirmation* – pro koncepční model).

Validace nespočívá v testování úplnosti modelu či jeho absolutní pravdivosti (jako u vědecké teorie), ale ověřuje, zda je model přijatelný pro zvolený účel. Koncepční model není možné verifikovat či validovat, nýbrž je možné jej pouze potvrdit (*confirmation*). Každý koncepční model je zjednodu-

šením probíhajících procesů a může být proto vyvrácen (falzifikován), pokud jej prozkoumáme do dostatečného detailu a uplatníme na něj dostatečně vysoká kritéria (Refsgaard a Henriksen 2004). Tvorbou hydrogeologických koncepčních modelů se zabývají z praktického hlediska Krešić a Mi-kszewski (2012).

1.2 Klasifikace a hodnocení nejistoty (modelu)

Výsledky matematického modelu nemají význam, pokud není zřejmá jejich důvěryhodnost. Proto je vhodné ověřovat model a hodnotit nejistotu modelu. Kreye et al. (2011) uvádí klasifikaci nejistot včetně nejistot modelu. Z klasifikace plyne rozdíl mezi nejistotou koncepčního modelu a strukturální nejistotou modelu, což jsou pojmy, které jsou v literatuře hojně používány. Z článku je převzata tabulka 2, jež byla doplněna dalšími údaji z citované literatury. Hvězdička naznačuje druhy nejistot důležité z hlediska této disertace.

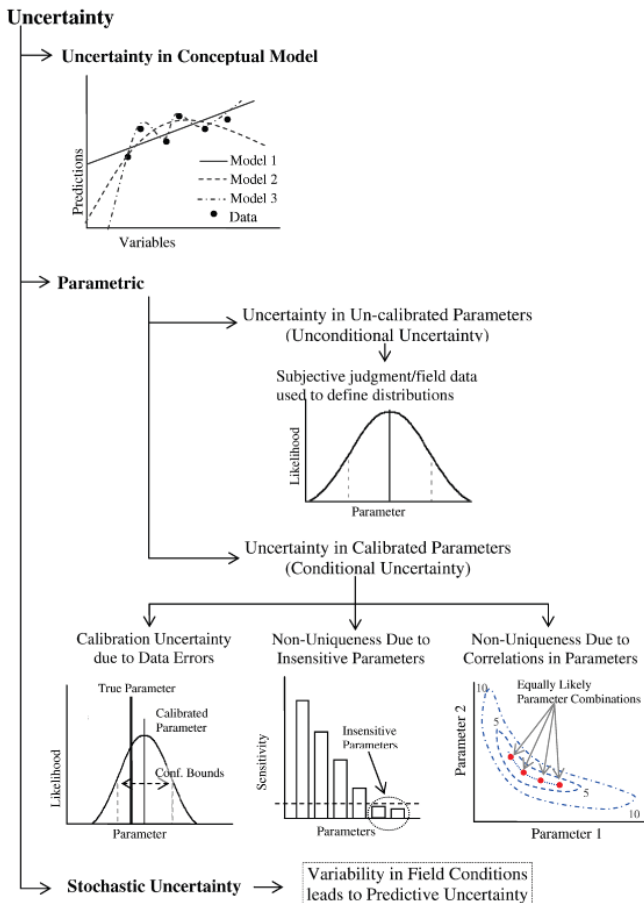
Tabulka 2: Klasifikace nejistoty podle pěti vrstev

Vrstva	Popis
Povaha (Nature)	Všeobecná charakteristika nejistoty: <ul style="list-style-type: none"> • stochastická (<i>aleatory</i>) čili ontologická (daná inherentní variabilitou) <ul style="list-style-type: none"> ○ variabilita (nahodilé chování systému) – Warmink et al. (2010) ○ nejednoznačnost (rozpory v informacích) – Warmink et al. (2010) • *epistemologická čili systematická (daná nedokonalou znalostí)
Příčina (Cause)	Důvod či zdroj nejistoty: <ul style="list-style-type: none"> • *nedostatek porozumění • nejednoznačnost • lidská činnost
Úroveň (Level)	Závažnost nejistoty, např.: <ul style="list-style-type: none"> • množství dostupných informací • *množství informací chybících pro určitý popis stavu a procesů <p>Podle Warmink et al. (2010) – viz barvy na obrázku 3:</p> <ul style="list-style-type: none"> • statistická (nejistota může být kvantifikována) • *nejistota scénářů (nejistota může být popsána pomocí alternativ chování systému) • kvalitativní (nejistota může být popsána) – neuvádí Walker et al. (2003) • rozpoznaná neznalost (nejistota nemůže být popsána) • naprostá neznalost (Walker et al. 2003)
Projev (Manifestation)	Místo v procesu, kde se nejistota projeví: <ul style="list-style-type: none"> • nejistota kontextu (z vnějšku modelu – co model nepostihuje – např. účel) <ul style="list-style-type: none"> ○ endogenní (z vnitřku organizace) – přírodní, technologické, ekonomické, sociální, politické ○ exogenní (z vnějšku organizace)
Umístění (Location) (Walker et al. 2003; Warmink et al. 2010)	<ul style="list-style-type: none"> • nejistota dat – vstupů (Warmink et al. 2010), pozorování <ul style="list-style-type: none"> ○ neúplnost dat (mezery v dostupných datech) ○ nepřesnost dat (nepřesnost či nespolehlivost dostupných dat) ○ *variabilita dat (různé možné alternativy) • nejistota modelu <ul style="list-style-type: none"> ○ *koncepční (zjednodušení v koncepčním modelu)

Vrstva	Popis
	<ul style="list-style-type: none"> ▪ *nejistota struktury modelu (neadekvátnost či diskrepance modelu) – celkový nedostatek porozumění <ul style="list-style-type: none"> • opomenutí procesů (řídící rovnice) • (příliš malý) rozsah modelu • geologická nejistota (Refsgaard et al. 2012) • ... ▪ nejistota parametrů modelu <ul style="list-style-type: none"> • přesné parametry – např. π (Walker et al. 2003) • fixní parametry – např. gravitační zrychlení (Walker et al. 2003) • a priori zvolené parametry – obtížné identifikovat (Walker et al. 2003) – nepodmíněná nejistota (Singh et al. 2010) • kalibrované parametry – např. transmisivita (Walker et al. 2003) – podmíněná nejistota (Singh et al. 2010) <p>Podle Singh et al. (2010):</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ nejistota kalibrace z důvodu chyb v datech ○ nejednoznačnost z důvodu necitlivosti parametrů ○ nejednoznačnost z důvodu korelace parametrů ○ technická stránka modelu (Walker et al. 2003): <ul style="list-style-type: none"> ▪ matematická čili algoritmická (zjednodušení v matematickém vyjádření) ▪ výpočetní čili numerická (zjednodušení ve výpočetní metodě) • fenomenologická nejistota (neznámé události v budoucnosti)
Vyjádření (<i>Expression</i>)	<p>Způsob jak je nejistota vyjádřena či sdělena. Může být:</p> <ul style="list-style-type: none"> • kvantitativní (měřitelná) • kvalitativní (neměřitelná).

Metodiku pro rozčlenění konkrétních zdrojů nejistot uvádí Warmink et al. (2010), jež vychází z článku (Walker et al. 2003).

Klasifikaci nejistot v modelech uvádí Singh et al. (2010) – obrázek 2.



Obrázek 2: Schéma různých typů nejistoty v modelech (Singh et al. 2010, s. 702)

Další klasifikaci nejistot (podle zdroje nejistoty) uvádí Uusitalo et al. (2015):

- Přirozená nahodilost
- Nahodilá chyba měření
- Systematická chyba měření
- Přirozená variabilita (změna v čase a prostoru)
- Nejistota modelu
- Subjektivní úsudek

S nejistotou v modelech je možno se vyrovnat pomocí metod jako je Monte Carlo, stochastických / pravděpodobnostních modelů, variantních výpočtů – alternativních scénářů (Mahmoud et al. 2009), alternativních koncepčních modelů a dalších metod. Základní dvě skupiny metod kvantifikace nejistot jsou propagace nejistot a řešení inverzního problému. Metody pro hodnocení (*evaluating*) nejistoty jsou zároveň jedním z přístupů pro vypořádání se (*coping*) s nejistotou.

Existuje mnoho metodik pro hodnocení nejistot, které uvádí Refsgaard et al. (2007):

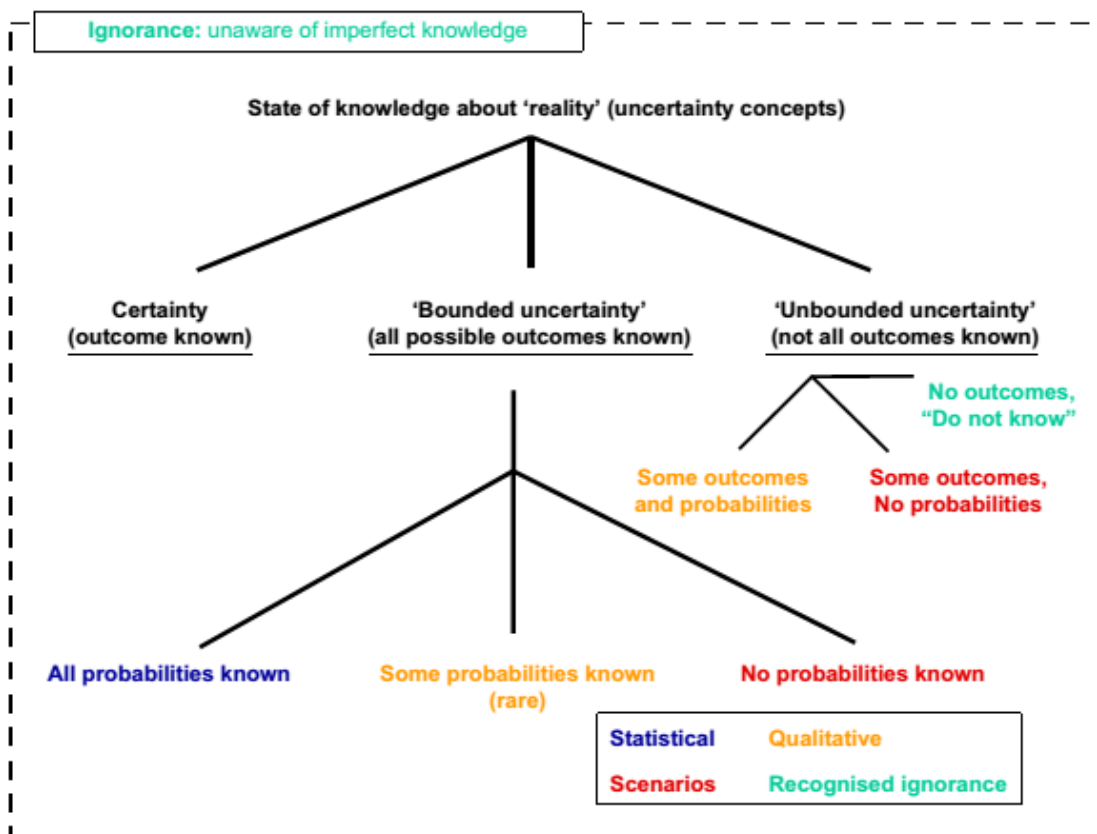
- *Data uncertainty engine (DUE)* – Brown et al. (2005)
- Rovnice propagace chyby (Mandel 1984)
- Dotazování expertů (*Expert elicitation*) – např. pomocí strukturovaného dotazníku
- Rozšířené recenzní řízení (recenze zainteresovanými subjekty)
- Inverzní modelování (odhad parametrů)
- Inverzní modelování (nejistota predikcí)
- Analýza Monte Carlo
- Simulace více modelů – modely s odlišnou strukturou
- NUSAP (van der Sluijs et al. 2005)
- Zajištění kvality (QA) – využití metodiky pro vhodnou aplikaci modelů

- Analýza scénářů – scénáře budoucího vývoje
- Analýza citlivosti
- Účast zainteresovaných subjektů (*stakeholder involvement*)
- Matice nejistot (Refsgaard et al. 2007), tabulka 3.

V případě nedostatku dat pro kalibraci a validaci modelu je třeba využívat semikvantitativní a kvalitativní hodnocení jako je NUSAP či matice rodokmenu (*pedigree matrix*) – jednodušeji řečeno matice nejistot. Hodnocení podle matice nejistot (Refsgaard et al. 2007) – tabulka 3 – vychází (podobně jako klasifikace nejistot – viz tabulka 2) taktéž z Walkera et al. (2003), ale zobrazení ve formě matice umožňuje prakticky hodnotit nejistotu. Ukazuje, že jednotlivé klasifikace nejistot se nevyklučují. Povahu (*nature*) je možno chápat jako třetí dimenzi. Pojmy jsou patrné z obrázku 3.

Tabulka 3: Matice nejistot (Refsgaard et al. 2007, s. 1548)

Source of uncertainty		Taxonomy (types of uncertainty)				Nature	
Context	Natural, technological, social, political	Statistic uncertainty	Scenario uncertainty	Qualitative uncertainty	Recognized ignorance	Epistemic uncertainty	Stochastic uncertainty
Inputs	System data						
	Driving forces						
Model	Model structure						
	Technical						
	Parameters						
Model outputs							

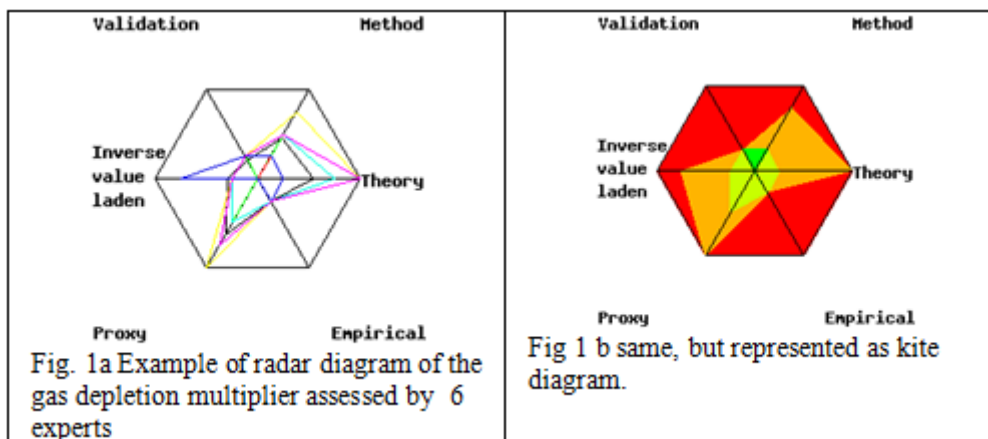


Obrázek 3: Klasifikace nedokonalého poznání. Zdroj: Brown (2004), citováno podle Refsgaard et al. (2007, s. 1547)

Příklad hodnocení podle metodiky NUSAP (van der Sluijs et al. 2005) naznačuje tabulka 4 a obrázek 4. Celková nejistota je hodnocena pomocí skóre, které je součtem dílčích skóre.

Tabulka 4: Matice rodokmenu (*pedigree matrix*) pro monitoring emisí (van der Sluijs et al. 2005)

Skóre	Reprezentativnost	Podkladová data	Metoda	Validace
4	Přesná shoda	Přímá měření na velkých vzorcích	Nejlepší dostupná metoda	Porovnáno s nezávislými měřeními stejné proměnné
3	Dobrá shoda	Přímá měření na malých vzorcích	Spolehlivá a všeobecně přijímaná metoda	Porovnáno s nezávislými měřeními úzce související proměnné
2	Dobře koreluje	Modelovaná či odvozená data	Přijímaná teorie nepovažovaná za spolehlivou	Porovnáno s nikoliv nezávislými měřeními
1	Slabě koreluje	Expertní odhad, empirická pravidla	Předběžné metody s neznámou spolehlivostí	Slabá/nepřímá validace
0	Bez jasné vazby	Čistá spekulace	Nespolehlivé metody	Bez validace



Obrázek 4: NUSAP (van der Sluijs et al. 2005)

Metodika NUSAP je velmi podobná matici rodokmenu (*pedigree*) (Refsgaard et al. 2006), o které je pojednáno níže v souvislosti s nejistotou koncepčního modelu.

Uusitalo et al. (2015) uvádí přístupy pro hodnocení nejistoty v modelech pro podporu rozhodování:

- Expertní hodnocení
- Analýza citlivosti modelu
- Emulace modelu (*Model emulation: meta-model, surrogate model, behavioral model* či *black-box model*) – nízkoúrovňová aproximace komplexnějšího modelu dávající dobré predikce i když jeho formulace není fyzikálně zcela korektní. Dobrým příkladem v hydrogeologii je přístup „*compartmental-spatial system dynamics*“ (Roach a Tidwell 2009).
- Časová či prostorová variabilita v deterministických modelech (např. extrémní měřené hodnoty použít jako hodnoty parametrů modelu)
- Více modelů
- Přístupy založené na datech (*data-based approaches*) – např. nalezení analogií

Strategie zvolená v předkládané práci v podstatě odpovídá kombinaci „emulace modelu“ a „více modelů“.

1.3 Významný zdroj nejistoty – epistemologická nejistota

Jak ukazuje tabulka 2, dělíme nejistotu podle povahy (*nature*) na stochastickou (*aleatory*) a epistemologickou (*epistemic*). Epistemologická nejistota se může týkat toho, které jevy určují chování studovaného systému (omezené porozumění komplexnosti přírodních dějů). Její důsledky proto mohou být často závažnější než důsledky stochastické nejistoty. Podle Bevena a Younga (2013) je nejistota povahy spíše epistemologické než stochastické.

Často jsou využívány statistické metody [*Level: statistical* – viz tabulka 2 (Warmink et al. 2010)] hodnocení nejistoty, které jsou vhodné pro odhad stochastické nejistoty, ale není snadné hodnotit těmito metodami epistemologickou nejistotu (Beven a Young 2013).

Beven a Westerberg (2011) se zabývají zavádějícími úseky v hydrologických časových řadách či v datech. Článek ukazuje na význam epistemologické nejistoty a na to, že statistické metody jsou pro její hodnocení nevhodné: „*These classical measures effectively assume, however, that the sources of error are essentially stochastic or aleatory in nature, whereas disinformation is a form of knowledge or epistemic error. They assume that every residual is informative in conditioning the model parameters and uncertainty.*“ (Beven a Westerberg 2011, s. 1676)

1.4 Projev epistemologické nejistoty – nejistota koncepčního modelu

Epistemologická nejistota se pak v modelu projevuje jako nejistota koncepčního modelu (*uncertainty in conceptual model*), a to konkrétně jako strukturní nejistota (nejistota ohledně struktury modelu – *structural uncertainty*). Neadekvátní struktura modelu je pro předpovědi modelu často mnohem důležitější než nepřesnost parametrů modelu (Neuman a Wierenga 2003, s. E-4 – tj. 302).

Nejistotu koncepčního modelu je možno kvantifikovat a hodnotit různými způsoby, které shrnul Refsgaard et al. (2006) v následující klasifikaci:

Jsou dostupná data pro validaci modelu?

- Existují data, která je možno přímo srovnat s výsledky modelu (interpolace):
 - Zvýšit nejistotu parametrů (kompenzace strukturní nejistoty – Statistická nejistota běžně charakterizující nepřesnost tak obsáhne další rozměry nejistoty včetně epistemologické).
 - Odhadnout strukturní člen (nejistota výstupů – nejistota vstupů = strukturní nejistota).
- Neexistují data, která je možno přímo srovnat s výsledky modelu (extrapolace):
 - Více koncepčních modelů:
 - Alespoň nějaká data (*differential split-sample test*: validační data odpovídají jiným podmínkám než data, na které byl model kalibrován)
 - Žádná data (*proxy basin case*: model je verifikován na datech z jiného povodí – lokality)
 - Názor expertů
 - Analýza rodokmenu (*pedigree*):
 - NUSAP (van der Sluijs et al. 2005) – tabulka 4 a obrázek 4
 - Matice rodokmenu (*pedigree*) (Refsgaard et al. 2006) – viz tabulka 5

Matice rodokmenu (*pedigree matrix*) Refsgaarda et al. (2006) představuje kvalitativní či semikvantitativní hodnocení nejistoty koncepčního modelu (tabulka 5). Hodnocení je využito pro případové studie (kapitola 2.7). Kvůli jisté vágnosti se zde nehovoří o nejistotě, ale o obhajitelnosti (*tenability*) – viz potvrzení koncepčního modelu v kapitole 1.1.1 (Refsgaard a Henriksen 2004). Uvedená práce navazuje na analýzu NUSAP (van der Sluijs et al. 2005), tabulka 5 je proto velmi podobná jako tabulka 4.

Tabulka 5: Matice rodokmenu (*pedigree matrix*) pro hodnocení obhajitelnosti koncepčního modelu (Refsgaard et al. 2006, s. 1593)

Skóre	Podložení empirickými důkazy		Teoretické porozumění	Reprezentace porozumění procesům	Věrohodnost	Shoda názorů odborníků
	Reprezentativnost	Kvalita a kvantita				
4	Přesně odpovídá hodnotami i významem	Řízené experimenty a přímá měření na velkých vzorcích	Prověřená teorie	Rovnice do detailu popisují mechanismus procesů	Vysoce věrohodný	Všichni kromě bláznů
3	Dobře odpovídá hodnotami i významem	Archivní/terénní data, neřízené experimenty, malé vzorky, přímá měření	Přijímaná teorie	Rovnice přijatelně popisují mechanismus procesů	Rozumně věrohodný	Všichni kromě kverulantů
2	Dobrá korelace ne úplně stejných veličin	Modelovaná či odvozená data, nepřímá měření	Přijímaná teorie nepovažovaná za spolehlivou	Metamodel s agregovanými parametry	Poněkud věrohodný	Konkurenční školy
1	Slabá korelace, ale srovnatelná veličina	Expertní odhad, empirická pravidla	Předběžná teorie	Grey box model	Málo věrohodný	Obor „v plenkách“
0	Nekorelovány a bez přímé vazby	Čistá spekulace	Čistá spekulace	Black box model	Nevěrohodný	Bez názoru

Při hodnocení nejistoty koncepčního modelu je podle Refsgaarda et al. (2006) vhodné postupovat následujícím způsobem:

Protokol pro hodnocení nejistoty koncepčního modelu

- 1) Formulovat koncepční model.
- 2) Sestavit a nakalibrovat model.
- 3) Je koncepční model dostatečný? (*Pokud ne – návrat do bodu 1*)
- 4) Provést validační test a přijmout/zamítnout modely.
- 5) Vyhodnotit obhajitelnost a úplnost koncepčních modelů.
- 6) Vypočítat predikce a vyhodnotit nejistoty.

1.5 Alternativní koncepční modely

Jako jedna z úrovní (*level*) nejistoty (tabulka 2) je uváděna úroveň scénářů (*scenario*) – nejistota nemůže být kvantifikována statisticky, ale může být vyjádřena pomocí alternativních popisů (konceptních modelů). Tato úroveň nejistoty je běžná při řešení praktických hydrogeologických úloh, jako jsou mj. předkládané případové studie (kapitola 2). Alternativní koncepční modely snižují dopady faktu, že tvorba koncepčního modelu je zatížena subjektivním vnímáním autora (Bredehoeft 2005).

Význam alternativních modelů ilustrují citáty:

„Evolutionary science suggests that any single diagnostic path along a model evolution tree can lead prematurely to a dead end (locally optimal solution), while some previously rejected branch of the tree may ultimately lead to a more satisfactory solution. Topdown investigations are therefore likely to achieve more power by maintaining several parallel lines of investigation beginning with multiple prior conceptualizations.“ (Gupta et al. 2012, s. 11)

„Equifinality may signal the end of the dead-end track of distributed modelling.“ (Savenije 2001, s. 2837)

Refsgaard et al. (2007, s. 1550) uvádí pro simulace za využití více modelů: *„The main advantages of this method are that the effects of alternative model structures can be analysed explicitly and that the robustness of the model predictions increases. An important uncertainty is that we cannot be sure whether we have adequately sampled the relevant space of plausible models and that important plausible model structures could be overlooked.“*

„We have noted earlier that there is uncertainty not only about the parameter values that should enter into a given model (as characterized by its structure), but also about the very structure (conceptual and mathematical) of the model that should represent the hydrologic system of interest. The traditional approach to model uncertainty analysis, which considers only a single deterministic model structure, fails to adequately sample the complete space of plausible hydrologic models. As such, it is prone to modeling bias and underestimation of model uncertainty.“ (Neuman a Wierenga 2003, s. E-5 – tj. 303)

Názory praktiků a zadavatelů modelů popisuje zajímavě Poeter (2007, s. 390): *„I found loud resistance to and quiet support for using multiple conceptual models in the hydrologic community. For the most part, only one conceptual model is used in projects at this time, so consideration of even just one more alternative is a good start toward better defining the full uncertainty. Once it becomes apparent that alternative models can provide acceptable fit to the field data and yet produce quite different values for predictions of interest in the decision process, appetites will be whetted for considering more alternatives. Following the lecture, some hydrologic consultants would say that regulators would not stand for such “wishy-washy” work where the system was so unknown that it is not possible to select one “best” model. Some would confide that they explored alternative conceptual models but were hesitant to present the results because they would appear to be an incompetent hydrologist due to their uncertainty. At some of the same lectures, regulators would say multiple models are exactly what is needed. They stated that they frankly did not believe the uncertainty was as small as indicated by the values typically presented to them.“*

To, že alternativní koncepční modely lépe vyjadřují nejistotu, uvádí Poeter a Anderson (2005, s. 597): *„We often find that prediction uncertainty is larger across the range of potential models than that which arises from the misfit and insensitivity of any one optimized model, even to the extent that confidence intervals on predictions from some of the models may not include the values predicted by others.“*

Bredehoeft (2005) uvádí, že mnozí autoři navrhují využití alternativních koncepčních modelů, které jsou testovány, či je z nich vybrán ten nejlepší. Uvádí však, že nikdy nezaznamenal tento

přístup uskutečněný v praxi, protože modeláři pracují s jedním koncepčním modelem, který mění až v případě, kdy jej není možné nakalibrovat.¹ Předkládaná práce naopak ukazuje, jak je možno uplatnit alternativní koncepční modely v praxi – totiž používat (alespoň v první fázi) více jednoduchých modelů. S pomocí informačního systému HgIS (kapitola 3) či jiných vhodných nástrojů je tvorba koncepčních modelů snazší, a je tak možno jich prakticky vytvořit více.

1.5.1 Volba nejlepšího modelu – průměrování modelů

Alternativní modely je možno srovnávat a hodnotit. Jedním z kvantitativních přístupů je průměrování modelů (*model averaging*). Jednou z takových metod je GLUE – *Generalized Likelihood Uncertainty Estimation* (Beven 2006). Srovnání různých metod průměrování modelů podzemní vody uvádí Singh et al. (2010).

Uusitalo et al. (2015) uvádí pojem „*ensemble modelling*“: „*While qualitative analysis of modeling results can give us an idea of the extent of uncertainty related to them, various ways have been proposed in the literature to combine several models. The term ensemble modelling is used both for running a single model multiple times with different sets of initial values (single model ensemble), and for using multiple models (multiple model ensemble). Ensemble modelling has mainly been used in two ways: to produce one “best” predictive model and to evaluate the predictive uncertainty*“. „Ensemble modeling“ v hydrologii používá například Breuer et al. (2009). Publikace, které by používaly pojem *ensemble modeling* pro modelování podzemní vody, nebyly nalezeny.

Hodnocení na základě více modelů se používá v různých oborech. Například algoritmus Náhodný les (*Random forest*) taktéž vychází z více modelů (klasifikačních stromů). Jako správná klasifikace se pak zvolí ta, která je výsledkem nejvíce stromů (hlasování).

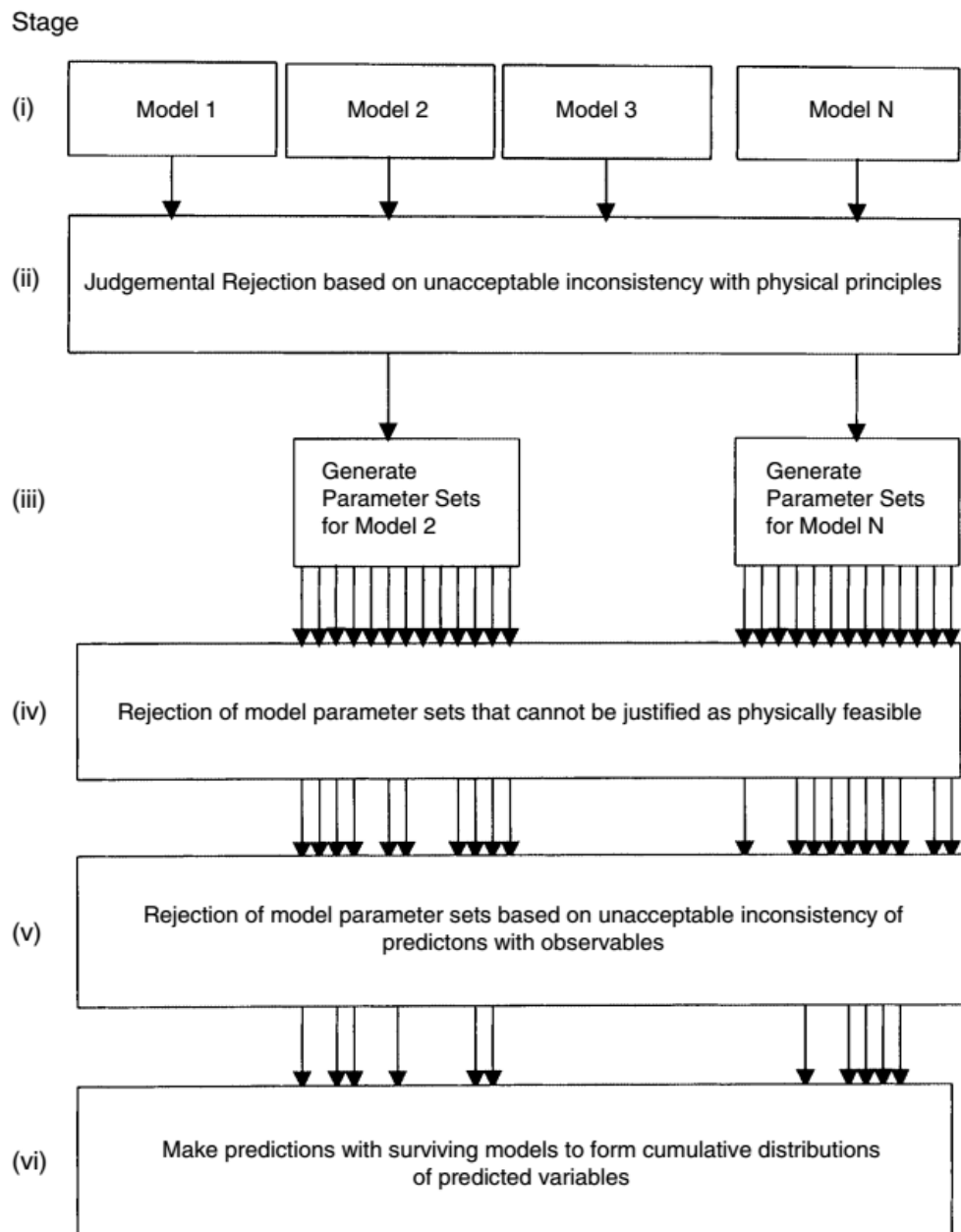
1.5.2 Volba nejlepšího modelu – testování hypotéz

Již geolog Chamberlin (1890) vyzýval k tvorbě více pracovních hypotéz jakožto strategii pro rychlý pokrok v porozumění praktickým i teoretickým problémům. Využití více modelů jako testovatelných pracovních hypotéz komentuje Clark et al. (2011).

Důležitost využití modelů jako hypotéz, jež jsou testovány, zdůrazňují Beven a Young (2013): „*We normally learn more from falsification than from (conditional) model validation. Falsification implies some improvement is required, either in the data that is being used to drive and evaluate the model or in the model structure itself. However, testing models as hypotheses in this manner is difficult in hydrology and other areas of environmental science because of the inherent epistemic nature of many sources of uncertainty.*“

Schéma na obrázku 5 ukazuje metodiku pro testování koncepčních modelů a sad parametrů (Beven 2002) – testování hypotéz. Na počátku jsou uvažovány různé modely, z nichž postupně vylučujeme ty, jež jsou fyzikálně nemožné, jež dávají nerealistické výsledky a jež jsou v příkrém rozporu s pozorováními. Se zbylými modely je možno počítat predikce. Variabilita výsledků těchto modelů ukazuje nejistotu predikce.

¹ *While the idea of formally considering more than one conceptual model is good, this author has never seen the idea put into practice. In his experience, analysts have selected what they judge to be an appropriate, single conceptual model. The parameters of the model are often changed as new data is acquired; however, there is a reluctance to abandon the conceptual model unless new data shows that the original concept can no longer fit the data. (Bredehoeft 2005, s. 43)*



Obrázek 5: Testování modelů (Beven 2002)

Testování hypotéz je nesmírně důležité, protože představuje jádro metodologie vědy. Vědecká metoda spočívá ve formulaci hypotéz, které se pokoušíme vyvrátit – falzifikovat (Popper 1997). To, že pozorování odpovídají teorii, ještě nedokazuje pravdivost teorie. Stejně tak shoda modelu s pozorováním nepotvrzuje, že předpoklady či další předpovědi modelu jsou správné. Vyvrácení chybné hypotézy je však prokazatelný výsledek. Nadneseně lze říci, že vyvrácení koncepčního modelu, vyvrácení vědecké hypotézy a změna paradigmatu – vědecká revoluce (Kuhn 1970, 2008) – jsou podobné události na různých měřítcích vědy.

Výše uvedené metody nejsou však v hydrogeologické komunitě zcela samozřejmé. Článek zabývající se modelováním podzemních vod (Bredehoeft 2005) nepracuje s pojmy jako hypotéza a jejich vyvrácení. Místo toho změnu koncepčního modelu označuje jako překvapení (*surprise*). K němu dojde podle zkušeností autora článku u 20–30 % případů. Autor se nesnaží koncepční modely vyvrátit. K jejich nahrazení dojde až ve chvíli, kdy se mu nedaří stávající koncepční model ani podpořit.

Počáteční koncepční model obsahuje strukturu a počáteční hodnoty parametrů. Při kalibraci jsou upraveny parametry. Takový model může být dále validován konfrontací s nezávislými poz-

rováními – pokud možno jiné veličiny, než na kterou byl model kalibrován. Takový postup je možno chápat jako testování hypotézy, protože ve fázi kalibrace i validace se může ukázat, že ani model s optimalizovanými parametry není schopen adekvátně reprodukovat chování systému. Je tedy možno tvrdit, že testování hypotéz je součástí standardní modelářské praxe. Autor předkládané práce se domnívá, že je to pravda jen částečně. Pokud se nesnažíme úlohu zformulovat aktivně a přímo jako testování hypotéz (spolu s jasnými kritérii), budeme samovolně směřovat k přidávání dalších parametrů do modelu tak, aby byl model nakalibrován a obhájěn – nikoliv vyvrácen. Validace je skutečně metoda aktivně navržená k testování hypotéz. Bývá však nedostatečné, pokud je jejím důsledkem další kalibrace s přidáváním parametrů bez přehodnocení struktury modelu. V praxi modely navíc často nebývají vůbec validovány. U případových studií (kapitola 2) nebyla dostupná data pro validaci.

Není třeba doplňovat data pro vyvrácení hypotéz, které byly již vyvráceny jednoduchým modelem za nedostatku dat. Je tak možno se soustředit na získání dat potřebných pro vyvrácení zbylých hypotéz.

1.5.3 Alternativní geologické modely

Důležitou součástí koncepčního distribuovaného modelu podzemní vody je jeho struktura – konkrétně geologická struktura, tedy geologický model. Alternativní geologické modely demonstrují význam geologické strukturní nejistoty modelu proudění podzemní vody.

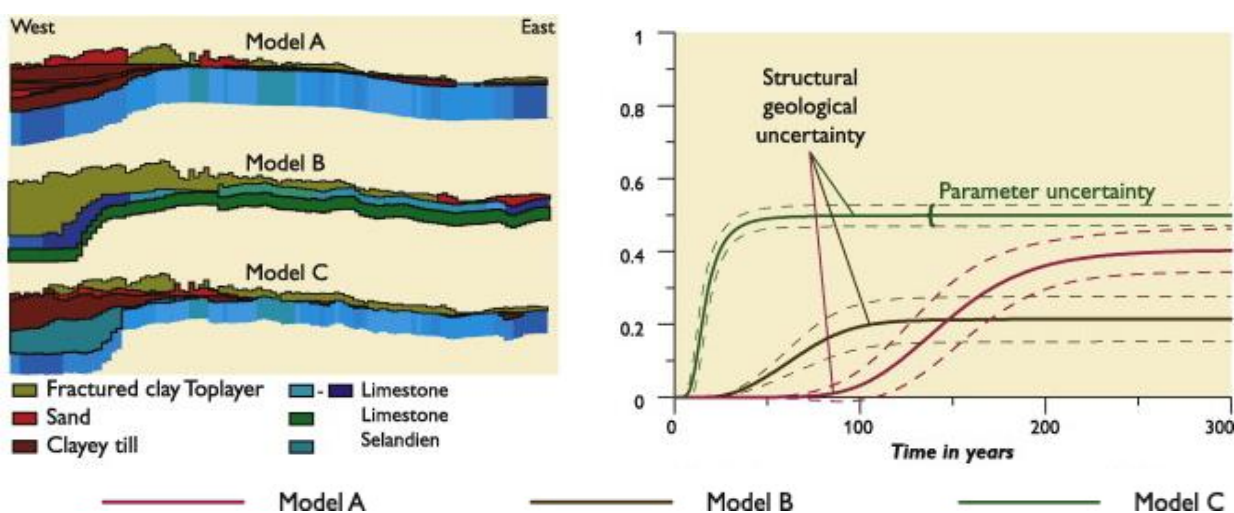
Refsgaard et al. (2012) uvádí klasifikaci metodik pro hodnocení nejistot v modelování podzemní vody:

Klasifikace metodik pro hodnocení nejistot modelů podzemní vody

- Geologické struktury (geometrie v geologických modelech).
 - Více geologických modelů (známý problém je, že zvolené koncepční modely nikdy nezahrnou celý prostor možných modelů)
 - Ruční (geologické modely jsou vytvořeny ruční interpretací)
 - Stochastická – umožňuje kombinovat subjektivní geologické znalosti a geostatistické analýzy – např. T-PROGS (Carle 1999)
- Efektivní parametry modelu (např. po částech konstantní hodnoty uvnitř strukturních elementů)
 - Analýza Monte Carlo
 - Regresní analýza
- Lokální heterogenity parametrů modelu (nepopsaná variabilita hydraulických veličin uvnitř jednotlivých geologických strukturních elementů).
 - Analýza Monte Carlo s vysokým rozlišením – představuje následující kroky:
 - 1) Generovat více náhodných sad modelových parametrů (představujících jednu či více vlastností prostředí) na jemné modelové mřížce;
 - 2) vyřešit standardní rovnice proudění a transportu a
 - 3) statisticky analyzovat výsledky modelu (predikce).
 - Regresní analýza
 - Momentová rovnice

Podle Refsgaarda et al. (2012, s. 48) je metodika více modelů uznávána jako nejslibnější strategie pro hodnocení projevů nejistoty struktury modelu (Beven 2002; Neuman a Wierenga 2003; Poeter a Anderson 2005; Refsgaard et al. 2006). Významnou slabostí tohoto přístupu je, že zvolené modely jsou jen malou podmnožinou možných geologických konceptualizací.“

Refsgaard et al. (2012) dále ukazuje, že strukturně-geologická nejistota se projeví především, když model předpovídá stav systému za podmínek odlišných od těch, na které byl model kalibrován (obrázek 6): „Our results show that the geological models are relatively less important for flow modeling, if calibration against head and discharge data is performed, and if model predictions are confined (i) to the same types of variables as the data used for calibration, and (ii) to similar situations with respect to climate, groundwater abstractions, etc. In such case the inevitable (unknown) errors in the geological interpretations can often to a large extent be compensated by biased parameter values, so that the model predictions become of the same quality or slightly less than the goodness of the calibration results. However, the geological model becomes crucial in situations, where groundwater models are used for extrapolation beyond the calibration base, e.g., for transport predictions or for predictions of the effects of future changes in abstraction or climate, when only head and discharge data for the present pumping situation or climate are available for calibration. In such situations, the geological structure uncertainty may often be the dominant source of uncertainty.” (Refsgaard et al. 2012, s. 48)



Obrázek 6: Citlivost predikcí modelu na alternativní geologické modely (Refsgaard et al. 2012) – výřez

1.5.4 Princip ekvifinality

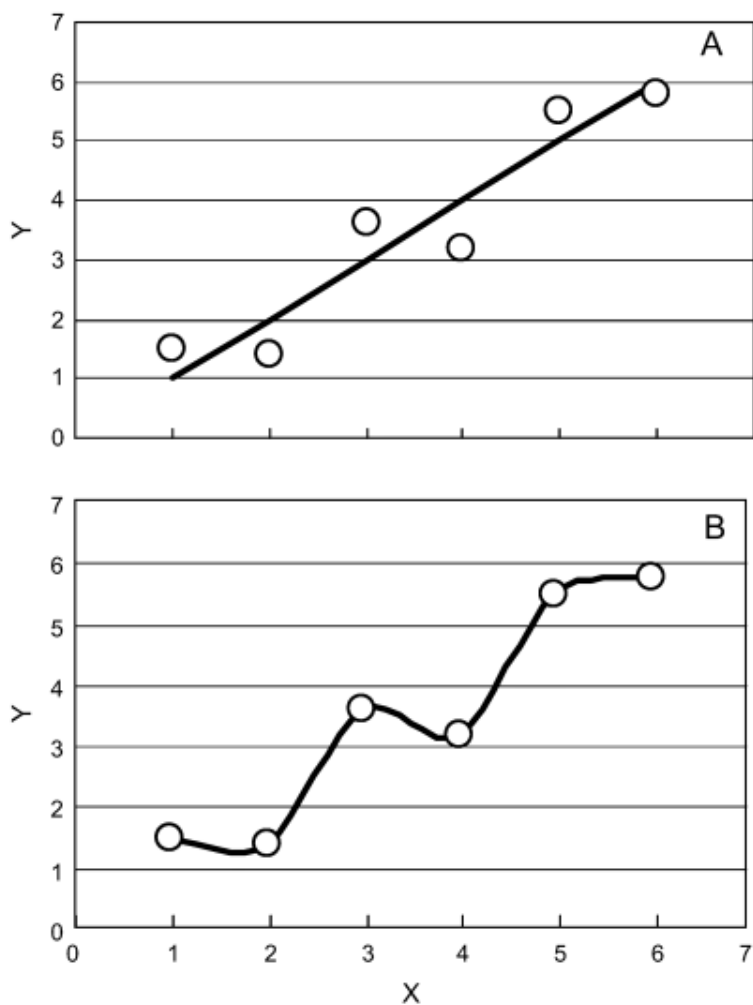
Formálnějším důvodem pro využití více modelů je princip ekvifinality (*equifinality thesis*). Princip ekvifinality říká, že v systému existuje řada rozdílných cest vedoucích k dosažení požadovaného stavu. V kontextu modelování pak více modelů (lišících se strukturou či jen parametry) simulují srovnatelně chování systému. Modelové řešení daného problému proto není jednoznačné. Princip demonstruje, že často není možné nalézt správný model, což je typické postmoderní hledisko (Beven 1993). Průkopníkem vnímání principu ekvifinality v hydrologickém modelování je prof. Keith J. Beven (Beven 1993, 1996, 2001, 2009, 2010; Beven a Freer 2001). Rozsah výsledů sady ekvifinálních modelů charakterizuje její nejistota (srov. tzv. *envelope modeling*).

1.6 Jednoduchost a komplexnost modelů podzemní vody

Současná hydrogeologie se propojuje s dalšími přírodovědnými obory. Hydrogeolog se tak setkává s fyzikálními, chemickými, mikrobiologickými a dalšími procesy a s jejich kombinací. Pokud se tyto procesy vzájemně ovlivňují, nazýváme je sdruženými procesy (*coupled processes*). Důkladná kvantifikace sdružených procesů není možná bez komplexních matematických modelů. Výsledky komplexních matematických modelů se někdy shodují s pozorováním, ač nejsou ve shodě s prvotní představou modeláře a nelze k nim dojít jednoduššími modely. To ukazuje jejich užitečnost a vede k používání stále komplexnějších a složitějších matematických modelů, obzvláště v oblasti vědy a výzkumu. Komplexní numerické modely jsou užitečným nástrojem pro porozumění a kvantifikaci přírodních jevů, zejména pak sdružených procesů. V praxi je však často účelnější použít jednodušší (např. analytické) modely. Je u nich jasnější vztah mezi předpoklady a výsledky modelu a jsou také vhodné pro testování hypotéz. Dobře umožňují získat cit pro simulované procesy a jsou pochopitelné např. pro řešitele komplexního projektu, kterému jsou výsledky určeny.

Komplexnost koncepčního modelu může vycházet z komplexnosti struktury modelu (nelineární) či parametrů (velký počet časově a prostorově proměnných parametrů) vyžadující numerické řešení. Jednoduchý model může být naopak lineární a celistvý (*lumped*) s analytickým řešením. Na rozdíl od pojetí předkládané práce Scheibe et al. (2015) spojuje komplexnost modelů podzemní vody s měřítkem – regionální modely jsou jednoduché a modely na molekulární úrovni jsou komplexní.

U komplexnějších modelů je možno dosáhnout shody s pozorováním kalibrací, čili manipulací s hodnotami parametrů díky vysokému počtu stupňů volnosti, zatímco u málo parametrizovaného modelu testujeme „čistou myšlenku“. Komplexnost modelu, která není podpořena daty ani neodpovídá pochopení probíhajícím procesům, bude mít pravděpodobně za důsledek nepřesný model (Hill 2006, s. 780). Přeparametrizovaný – tedy neadekvátně komplexní – model většinou nedává lepší předpovědi (obrázek 7).



Obrázek 7: Schematický diagram – jednoduchý model (A) a komplexnější model (B). Zdroj: Hill (2006)

Při studiu podzemní vody čelíme značné nejistotě. Podzemí je obtížně přístupné přímému pozorování a bývá navíc velice heterogenní. Tím se stává modelování často větší výzvou než v mnoha technických oborech. V terénním měřítku běžně hodnocených lokalit není v důsledku heterogenity prostředí dostupné dostatečné množství vstupních dat pro kalibraci komplexního modelu. Predikce nevhodně použitého modelu mohou být, zejména v dlouhém časovém měřítku, naprosto nespolehlivé.

Smysluplnost tradičního přístupu k modelování transportu (advektivně-disperzní rovnice bez difúze do bloků) zpochybňuje článek (Hadley a Newell 2014), který zdůrazňuje roli heterogenity prostředí a difúze do nepropustných bloků. Kontaminace se tak zpočátku může šířit velmi rychle (volná fáze, heterogenity s vysokou propustností), ale posléze je postup zastaven (difúze). To přináší nutnost uvažovat další neznámé (zastoupení jednotlivých domén, koeficient přestupu atd.). V článku je navrženo používat jednodušší nástroj Matrix Diffusion Toolkit (Farhat, et al. 2012), což je screeningový model (implementovaný v prostředí MS Excel) uvažující advekci a difúzi do málo propustných bloků. Z toho můžeme uvažovat, že pro porozumění chování kontaminace je třeba znát celou historii kontaminované lokality a zaměřit se na hodnocení a analýzy dostupných dat, nikoliv se spoléhat na prostorově distribuované modely.

Dobrym zvykem v matematickém modelování je co nejjednodušším způsobem kvantifikovat přírodní procesy a postupně přidávat komplexnost. To ilustruje shrnutí vhodných a nevhodných přístupů k modelování (tabulka 6) a několik citátů: Modely podzemí vody by měly být „tak jednoduché, jak je to jen možné, ale nikoliv jednodušší“² (Kraemer et al. 2000, s. 58).

² „Ground-water models should be as simple as possible, but not simpler.“

„Pokud používáme modely v souladu s jejich cílem, měli bychom odolat volání sirény komplexnosti a sestavovat jednodušší a méně obsažné modely“³ (Hunt a Zheng 1999, s. 29). „Freyberg (1988) si všiml, že při cvičeních modelování, která vedl, bylo chování systému lépe predikováno jednoduššími a méně kalibrovanými modely než modely, které byly kalibrovány za použití velkého počtu parametrů, aby tak bylo dosaženo dobré shody s pozorováními (jev často nazývaný jako bodová kalibrace)“⁴ (Hunt et al. 2007, s. 254). Zpracováno podle Nešetřila (2009b, 2012a). Sbíрка podobných citátů je uvedena v příloze A.

Tabulka 6: Vhodné a nevhodné využití modelů podzemní vody podle citátů v příloze A

Vhodné využití modelů podzemní vody	Nevhodné využití modelů podzemní vody
Jednoduché (Occamova břitva ⁵ , princip jednoduchosti) ⁶	Příliš komplexní (avšak začít příliš jednoduchým je v pořádku)
Silný nástroj, který uspořádává myšlenky, třídí úsudek a vybaví hydrogeologa teoreticky a vědecky podloženou intuicí	Cíl sám o sobě
Více koncepčních modelů	Příliš mnoho parametrů v jednom modelu
Zda se něco může stát (<i>proof-of-concept</i>)	Řešič problémů reálného světa
Testování hypotéz	Kvantitativní předpovědi (vhodné pokud jsou dostatečně podpořeny daty)
Počítačová podpora myšlení	Počítačová podpora předpovědí
Důležité jsou vzorce (<i>patterns</i>) chování, které jsou naznačeny čísly	Důležitá jsou čísla

Bredehoeft (2006) doporučuje použití analytických modelů v případech, kdy jsou dostačující a uvádí příklad s čerpáním podzemní vody v blízkosti vodního toku.

Haitjema (2006) ukazuje užitečnost jednoduchých modelů podzemní vody (analytických řešení). Takové jednoduché výpočty jsou užitečné pro pochopení mechanismu probíhajících procesů spíše než pro získání kvantitativního řešení problému. Autor dále zdůrazňuje potřebu využívat analytická řešení při výuce matematického modelování, protože intuice získaná pomocí využívání analytických řešení často popírá prvotní intuici nezkušeného studenta.

Peeters (2015) klade modeláři na srdce, aby samostatně myslel, využíval zkušenosti z lokality a „neschovával se“ za dávno publikované postupy a hodnoty.

³ „If models are kept in the context of their objective, we should feel comfortable resisting the siren of complexity and construct simpler, less encompassing models.“

⁴ „Freyberg (1988) noted that in a modeling class he taught, predicted system response was better simulated with more parsimonious but less well-calibrated models than with models calibrated using a large number of parameters to obtain a good fit (a phenomenon often referred to as ‘point calibration’).“

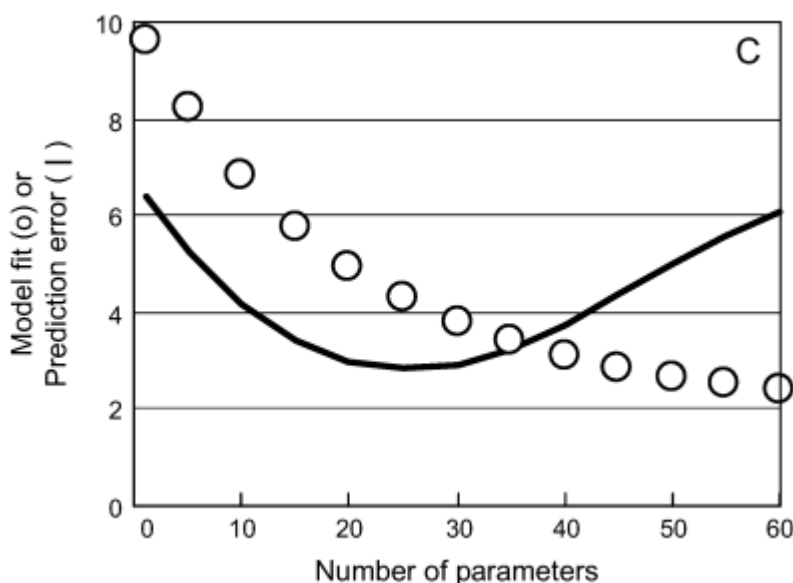
⁵ Occamova břitva: „*Numquam ponenda est pluralitas sine necessitate*“ (Ockam 1495). Výrok je možno přeložit přibližně dvěma způsoby:

- Z konkurenčních hypotéz by měla být vybrána ta nejméně komplikovaná.
- Pokud nějaká část teorie není pro dosažení výsledku nezbytná, do teorie nepatří.

⁶ Guidelines for Effective Modelling (Hill a Tiedeman 2007, s. 268): *Start simple and add complexity...*

Wainwright a Mulligan (2004, 2013) ukazují na příkladech z různých oblastí environmentálního modelování pozorovanou komplexnost probíhajících procesů a možnost a účelnost využití jednoduchých modelů.

Přes tuto vehementní chválu jednoduchých modelů autor předkládané práce samozřejmě nevrhne, že jednoduché modely jsou vždy lepší. Na alternativní jednoduché modely má v ideálním případě navázat komplexnější model. Vždyť Engelhardt et al. (2014) srovnává modely s různým počtem parametrů pomocí informačních kritérií. Jako optimální modely se ukazují ty se střední komplexností (obrázek 8).



Obrázek 8: Schematický diagram ukazující kompromis mezi shodou modelu s pozorováním a přesností předpovědi s rostoucím počtem parametrů. Zdroj: Hill (2006)

Adekvátním přístupem může být shromáždit data a ta pak zobrazit, statisticky zpracovat a interpretovat. Pro případ např. kontaminační hydrogeologie pak může být vhodné sestavit (0D) geochemický model a s jeho pomocí identifikovat klíčové řídicí procesy (např. aerobní biodegradace toluenu). Následně tyto procesy využít ve zjednodušené formě v modelu transportu v měřítku celé lokality (2D/3D).

1.7 Alternativní jednoduché modely

Na zpracování matematického modelu v praxi zpravidla bývá omezený čas, ve kterém je možno sestavit komplexní numerický model. Jiný přístup může být ten, že je věnováno více času zpracování dat a promýšlení, jak systém funguje. Takové konkrétní představy je následně možné často kvantifikovat jednoduchými (např. analytickými) modely a testovat jimi alternativní koncepční modely (hypotézy).

Použití většího množství jednodušších modelů umožňuje zadávat hodnoty vstupních parametrů tak, aby odpovídaly cíli konkrétního dílčího modelu. Vhodně využití matematické modely pomáhají navrhnout, která data je třeba doplnit, abychom model omezili daty a zmenšili nejednoznačnost.

Alternativními jednoduchými modely se teoreticky zabývá *opinion paper* (Clark et al. 2011). Jeho autoři navrhuje přístup více hypotéz, který však chápu jako *sw* či *framework*, kde alternativní modely představují stejně či různě komplexní kvantifikace procesů.

Podle Haitjema (2015) adekvátní model dává požadované odpovědi a odpovídá finančním možnostem zadavatele. Podle něj je třeba přidávat komplexnost modelu, jen dokud se výsledky neustálí. Ekvifinální modely jsou tak modely lišící se jen různou komplexností.

Jednodušší modely je snadnější testovat (*refutability*), posoudit adekvátnost jejich struktury (*transparency*) a je u nich také snadnější vyhodnotit výsledky (Oreskes 2000).

Pokud alternativní koncepční modely vznikají nezávislým zjednodušováním komplexní reality, je možné je využít pro hodnocení strukturní nejistoty modelu. Uusitalo et al. (2015, s. 28) uvádí: „*The system and model uncertainties can, to some extent, be addressed by using multiple models developed to describe the same domain. Simplifications, assumptions about dependencies between the variables, and various parameterizations are always made whenever a model is constructed. If these choices are made independently for each model, there is a possibility to use these separate models in structural uncertainty assessment.*”

Jednoduchý model (např. kapitola 2.5 „Transport chlorovaných uhlovodíků – advekční a bilanční model“) je jednodušší a proto průkaznější, v mnoha případech by však takový model neumožnil vyvrátit hypotézu, protože model musí být na straně bezpečnosti kvůli nekorektní kvantifikaci procesů. Pokud je však hypotéza zamítnuta, je toto zamítnutí průkaznější, protože u jednoduchého modelu je nižší pravděpodobnost, že obsahuje skrytou vadu či jinou „zálužnost“. To se podobá statistickému usuzování, kdy při nastavení nízké hladiny významnosti (α) se často nepodaří hypotézu zamítnout. Přitom je vhodné využívat test s největší silou ($1-\beta$).

Využití více jednoduchých modelů má paralelu také v řízení projektů. Nejprve je třeba vytvořit počáteční návrh v různých variantách. Vybraný návrh je pak detailně rozpracován (Steadman 2013).

Ve statistice je samozřejmým přístupem provádět nejprve průzkumovou analýzu dat (*exploratory data analysis*), a s její pomocí formulovat více hypotéz (modelů) od nejjednodušších ke složitějším. Předkládaná práce má proto téma, které je na jedné straně banální, avšak v hydrogeologii není zdaleka tak samozřejmé jako právě ve statistice. Fyzikální podstata problému totiž vede modeláře samovolně k využití distribuovaných modelů, které využívají matematicky korektní formulaci hydrogeologické úlohy – a to i když to není nutné či adekvátní.

1.8 Ekvifinalita – vymezení vůči dostupným publikacím

V dostupné literatuře se často diskutuje účelnost jednoduchých modelů či princip ekvifinality, ale nikoliv obé zároveň. Hellebrand et al. (2011) zmiňuje princip ekvifinality v kontextu hydrologických modelů. Srovnává málo parametrizované hydrologické modely, které kvantifikují jednotlivé mechanismy odtoku. Selroos et al. (2002) simuloval proudění podzemní vody a transport rozpuštěných látek v puklinovém prostředí za pomoci tří přístupů (stochastické kontinuum, síť diskretních puklin a síť 1D potrubí). V jiné práci (Singh et al. 2010) byly alternativní koncepční modely realizovány sadami parametrů téhož modelu. Další (Elshall a Tsai 2014; Harrar et al. 2003; Neuman a Wierenga 2003; Nilsson et al. 2007; Passadore et al. 2012; Pirot et al. 2015; Rojas et al. 2010; Seifert et al. 2008; Ye et al. 2010) použili alternativní koncepční modely (geologické, výpočet evapotranspirace atd.), které však byly implementovány v MODFLOW či v podobných programech jako třeba MIKE SHE (Seifert et al. 2012; Butts et al. 2004; Troldborg et al. 2007).

Gupta et al. (2012) se zaměřil na strukturální adekvátnost a možnost jejího hodnocení. Ta podle něj pro modely podzemní vody odpovídá 3D hydrostratigrafii, což je z pohledu autora předkládané práce pojetí zúžené na komplexnější 2D/3D modely.

Adams a Younger (2001) se zabývali různými způsoby přístupu k modelování zatápnění dolů. Různé přístupy jsou uvedeny podle vhodnosti od detailního k regionálnímu měřítku:

- 1) průlinový model proudění kombinovaný s explicitně definovanou sítí důlních děl (*pipe network*);
- 2) semidistribuovaný model, kde jsou jednoduše analyticky vyjádřené nádrže důlní vody propojeny analyticky modelovaným potrubím;
- 3) model ekvivalentního kontinua (MODFLOW).

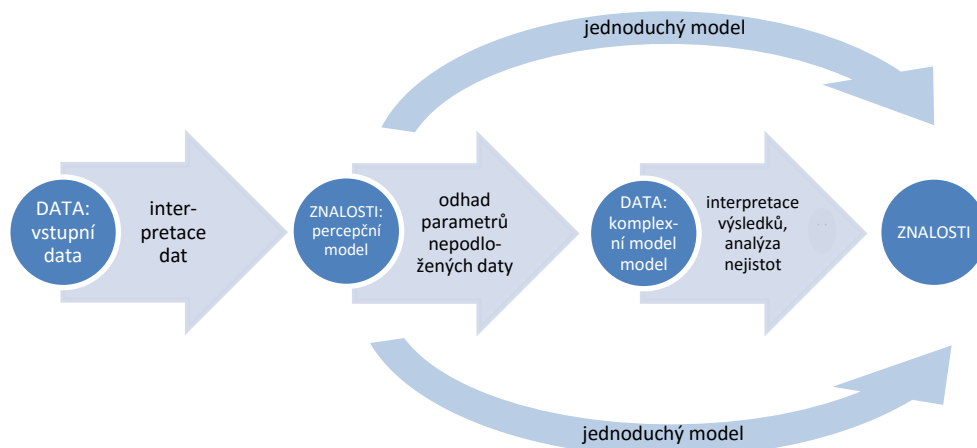
Předkládaná práce se nezabývá jen ekvifinálními modely, ale obecněji principiálně odlišnými koncepčními modely (*multiple model ensemble*).

1.9 Formulace zvoleného přístupu

Studie zmiňující princip ekvifinality v podstatě vždy využívají sadu parametrů pro jeden model. To je praktické v případě hydrologických modelů, kde jsou dostupné dlouhé časové řady významných veličin (průtok ve vodním toku je soustředěný – integrovaný – odtok z celého dílčího povodí) a mnohé parametry jsou známy se značnou přesností (např. terén). V případě podzemní vody může být epistemologická nejistota větší. Neznáme směr proudění a preferenční cesty; někdy neznáme všechna ohniska kontaminace, a zda se kontaminace šíří horninovým prostředím či například umělým drénem apod. U povrchových vod alespoň vždy víme, že vodní tok existuje a kde se nachází. V případě řešení praktických hydrogeologických úloh často nemáme dostupná dostatečná data (o časových řadách ani nemluvě).

Proto jde předkládaná práce v aplikaci principu ekvifinality ještě dál a nevytváří alternativní sady parametrů (varianty, scénáře) ani alternativní geologické modely, ale jednoduché alternativní modely, které simulují jiné procesy, používají jinou metodu či představují odlišné koncepční přístupy (jsou principiálně odlišné). Případové studie (kapitola 2) často vychází z nedostatečných vstupních dat a není účelné a často ani možné modely kvantitativně srovnávat (viz průměrování modelů jako např. GLUE). Modely tak nejsou kalibrovány ani validovány. V některých případových studiích se neuplatňuje princip ekvifinality, protože modely se doplňují (např. kapitola 2.3).

Schéma na obrázku 9 představuje dvojnásobnou transformaci dat ve znalosti. **Jednoduchý** model (šipky nahoře a dole) umožňuje tuto transformaci zjednodušit mj. tím, že nezavádí do koncepčního modelu nepodložené předpoklady (neznámé parametry), jejichž vliv na výsledek by bylo třeba vyhodnotit. Je srozumitelné, z jakých předpokladů vycházejí. Strategii je možno nadneseně vyjádřit takto: „Je lepší vytvářet jednoduché modely nad měřenými daty než komplexní modely nad vymyšlenými daty.“



Obrázek 9: Data a znalosti – jednoduchý model má o jednu transformaci méně

Alternativní jednoduché modely mohou být účelně využívány různým způsobem. Jednoduchost tvorby modelů dává větší prostor pro využití modelu rozmanitým způsobem, aby tak byl vhodným nástrojem pro podporu rozhodování, a to i v případě nedostatku dat. Navrhují **klasifikaci využití modelů** se zaměřením na jednoduché modely sestavené při nedostatku dat. Je to tedy souhrn otázek, které může zadavatel klást (zpracovateli) modelu:

- Interpretační model – Porozumění probíhajícím procesům / tvorba koncepčního modelu – pomocí modelu, který odpovídá měřením prokázat, že naše porozumění procesům odpovídá měřeným výsledkům a případně, že data jsou vnitřně konzistentní.
- Testování hypotéz – Příklad: Ani nejdůležitější fyzikálně možná kombinace parametrů modelu není schopna generovat výsledek, který odpovídá pozorování – proto je struktura modelu

chybná, a tedy procesy, na kterých je model založen, nejsou dostatečné pro simulování skutečného chování systému. Příklad využití tohoto přístupu je v kapitole 2.1 – „Ekvifinalita – interakce povrchové a podzemní vody“ a kapitole 2.5 „Transport chlorovaných uhlovodíků – advektivní a bilanční model“.

- „*Proof of concept*“ – Měřené či alespoň fyzikálně možné hodnoty modelu jsou schopny popsat vzorec (*pattern*) chování systému. Struktura modelu tak může být správná a simulované procesy mohou být schopny vysvětlit chování systému. Například: Stratifikaci jezera je možno vysvětlit působením větru a teploty, jež ovlivňuje hustotu vody.
- Hodnocení vlivu očekávaných změn:
 - Analýza citlivosti – ukazuje, které parametry výrazně ovlivňují výsledky modelu.
 - Scénáře – typové varianty budoucího vývoje.
- Předpovědi neznámé budoucnosti:
 - *Prediction* – předpokládáme konkrétní časový vývoj parametrů modelu. Příkladem je model v kapitole 2.2 „Srovnání jednoduchého a komplexního modelu – ovlivnění podzemních vod jezem“. Při nejistotě vstupních dat je možné použít variantní výpočty (scénáře): např. optimistický, pesimistický či realistický.
 - *Forecasting* – model počítá vývoj celého systému.
 - „Inverzní model“ – zjišťování parametrů modelu, které odpovídají meznímu požadovanému (nežádoucímu) stavu (např. nárůst látkového toku kontaminace v recipientu nad stanovenou hodnotu; výtopa chráněného území apod.). Výsledkem je parametr (například hydraulická vodivost), který je třeba ověřit podrobným průzkumem. Přístup je využit v kapitole 2.4 „Transport ropných uhlovodíků“.
- Analýza nejistoty – Jak spolehlivé jsou výsledky modelu.
- Analýza citlivosti – Jaká data jsou pro hodnověrnost modelu nejdůležitější? Parametry s vysokou citlivostí totiž výrazně ovlivňují výsledky modelu, a proto je třeba určit je s maximální přesností.
- Neparаметrický výpočet – Např. porovnání doby do běhu radionuklidů do recipientu pro různé lokality jaderného úložiště při stejné hodnotě hydraulické vodivosti pro všechny lokality. Je tak hodnocen vliv geometrie problému, nikoliv jeho parametrů. Jedná se o relativní srovnání lokalit.

Takováto klasifikace strategií modelování či formulování zadání, na které může model odpovědět, nebyla v literatuře nalezena – kromě neúplné klasifikace (Bredehoeft 2005). Uvedená klasifikace ukazuje, že výsledkem modelů nemusejí být předpovědi týkající se budoucnosti, byť by byl zprvu zadavatelem požadavek právě tak formulován.

Alternativní modely jsou v praxi používány, ačkoli se v tomto kontextu nemluví o ekvifinalitě. Toto téma je však natolik závažné, že stojí za hlubší rozbor, a je tak přínosem k debatě ve vědeckých časopisech, jež v současnosti intenzivně probíhá. Níže představené případové studie originálním způsobem demonstrují výše uvedené principy. Nepředstavují schematický přístup, ke kterému vede řešení problematiky za pomoci existujících softwarových balíčků pro modelování podzemní vody, ale nespoutané přemýšlení, které je ve shodě se současnou filosofií vědy – epistemologickým anarchismem (Feyerabend 1975, 2001).

2 Případové studie

Využití alternativních jednoduchých modelů je demonstrováno na případových studiích. Případové studie jsou v terénním měřítku a jsou sadou jednoduchých modelů, či srovnáním jednoduchého modelu s modelem komplexním. Případové studie byly zpracovány většinou s malým množstvím dat, a umožňují tak testovat „hloubku naší neznalosti“ – epistemologickou nejistotu. Vzhledem k tomu, že modely jsou často prediktivní a není nedostatek dat pro srovnání s výsledky modelu, jednotlivé modely nejsou mezi sebou srovnávány matematickými a statistickými metodami, ale nejistotu vyjadřují víceméně rozmezím hodnot. Modely byly většinou sestaveny pro analýzu rizika v rámci komerčních zakázek.

Předkládané případové studie řeší běžné hydrogeologické úlohy s běžným (tj. malým) množstvím dat za běžných časových podmínek pro zpracování modelu. Jedinečný je však tvůrčí přístup k řešení, který je zasazen do teoretického rámce (kapitola 1). Všechny případové studie byly zpracovány samostatně autorem předkládané práce.

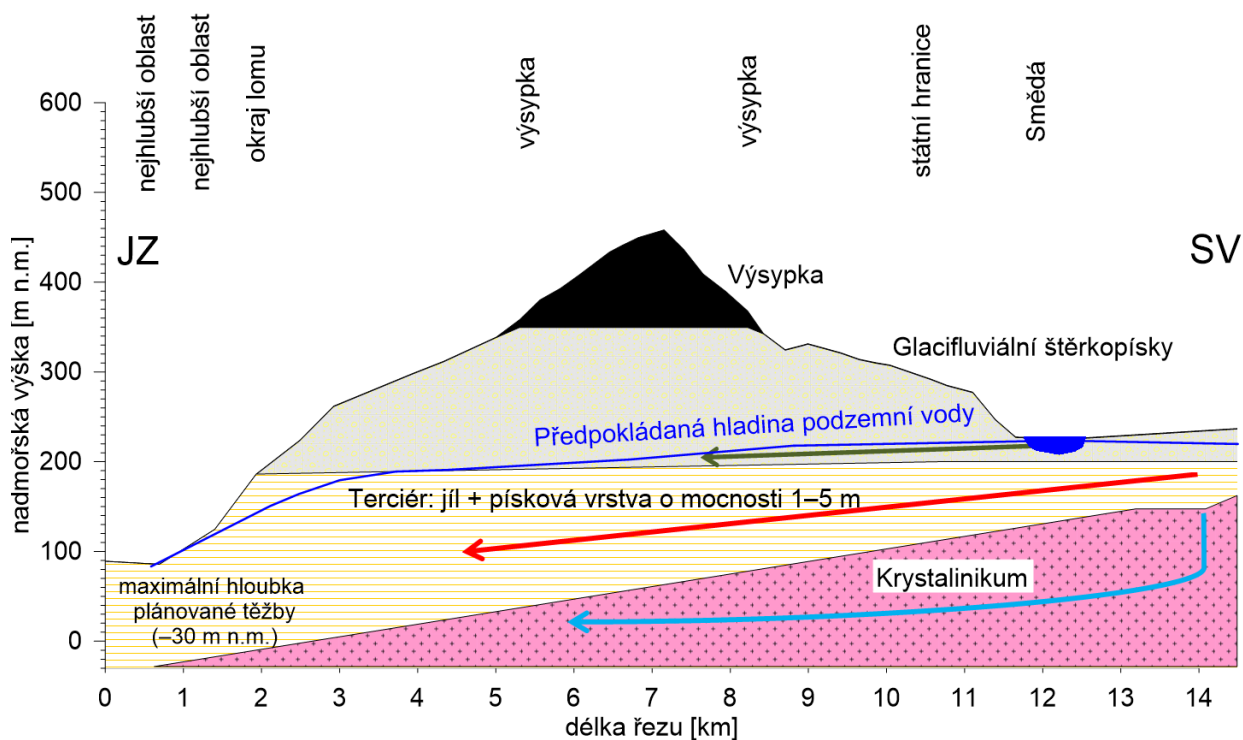
V textu této práce není vždy uváděno umístění lokalit ani konkrétní číselné výsledky. Podrobná dokumentace všech případových studií je na přiloženém CD v příloze B.

2.1 Ekvifinalita – interakce povrchové a podzemní vody

V této kapitole je prezentována pravděpodobně nejnázornější aplikace principu ekvifinality a testování hypotéz ze všech případových studií (Skořepa et al. 2009). Nejedná se totiž o predikce, ale o vysvětlení pozorovaného stavu.

V toku Smědá ve Frýdlantském výběžku dochází ke ztrátám průtoku (m^3/s). Za léta 1995–2008 byla ve 24 měsících (40 % ztrátových měsíců) ztráta statisticky významná (větší než 10 %). Mezi stanicí ČHMÚ Višňová a Předlance (tj. v mezipovodí I) se projevovала ztráta výjimečně, ale mezi stanicemi Předlance a Ostrožno (tj. v mezipovodí II) se ztráta projevovала za posledních 9 let ve 40 % sledovaných měsíců. Průměrná ztráta (pokud se projeví) je v mezipovodí II cca 240 l/s. Ztráta se projevuje zejména při nízkých průtocích. Ke ztrátě může docházet i v měsících, kdy po směru toku průtok narůstá. Hodnocení totiž nepracuje s ostatními přítoky Smědé (drobné vodoteče, povrchový a podpovrchový odtok).

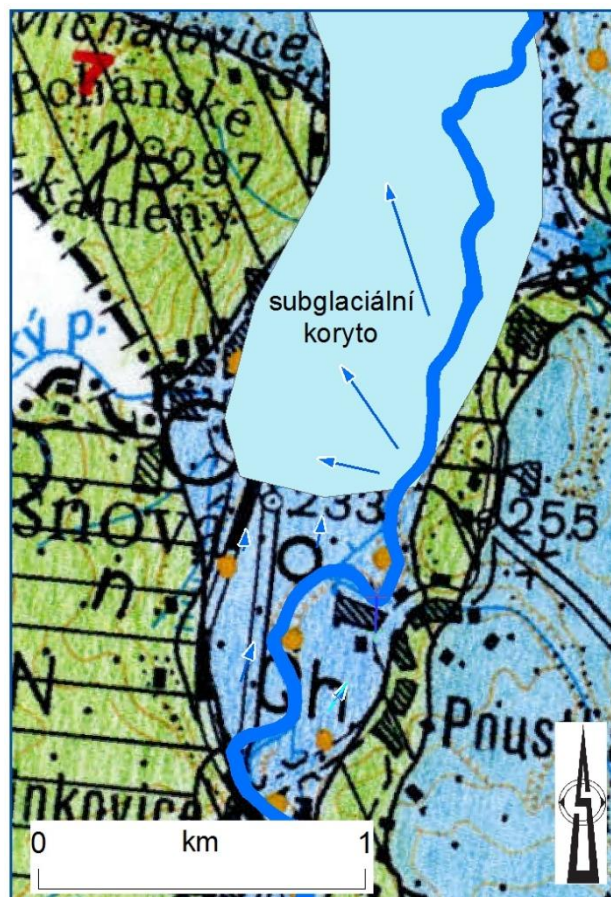
Je možno zformulovat několik hypotéz (obrázek 10), kam se voda ze Smědé ztrácí. Některé hypotézy jsou dále testovány matematickým modelem. Všechny modely byly představovány jednoduchými vzorci, které jsou založeny na Darcyho zákonu a rovnici kontinuity. Modely byly vypočítány v MS Excel.



Obrázek 10: Ideový řez zájmovým územím – koncepční model

Tři hypotézy uvažují ovlivnění činností dolu Turów a jedna uvažuje pouze přirozené příčiny. Přirozenou možností, kam se může voda ztrácet, je *subglaciální koryto* (Králík 1989) – obrázek 11. Tato hypotéza není schopna vysvětlit pokles hladin podzemní vody, částečně však vysvětluje ztráty průtoku ve Smědě. Při přirozeném gradientu Smědě proudí podzemní voda nivou paralelně s tokem. Subglaciální koryto má možná podstatně větší transmisivitu než holocénní štěrkopisky na jih od Višňové. Je totiž cca 50 m hluboké, zatímco holocénní štěrkopisky v údolní terase jsou pouze cca 5 m mocné. Ztráty povrchové vody tak dotují pořiční vodu v údolní nivě. Pokud by korytem měla proudit celá ztráta ze Smědě (240 l/s), bylo by třeba, aby hydraulická vodivost výplně glacifluviálního koryta byla $3 \cdot 10^{-3}$ m/s. To je hodnota velmi vysoká, proto ne příliš pravděpodobná, avšak rozhodně nikoli nemožná. *Hypotéza ztráty vodnosti Smědě pouze v důsledku přetoku do subglaciálního koryta tedy nebyla vyvrácena.*

Na J a Z od Filipovky se nachází podle hydrogeologické mapy 1:50 000 akumulace *glacifluviálních sedimentů*. Jejich báze není známa. Vzhledem k jejich možné propustnosti lze uvažovat, že přes ně dochází k proudění podzemní vody do dolu Turów. Pro tuto hypotézu však nemáme žádný přímý důkaz. Odtok vody z toku do dolu byl vypočten jako součin gradientu, šířky průtočného profilu a transmisivity. Z výpočtu vyplývá, že hydraulický spád mezi Smědou a dolem Turów je dostatečný, aby za předpokladu neověřených hydrogeologických podmínek způsobil prokázané ztráty průtoku ve Smědě. *Hypotéza ztráty vodnosti pouze v důsledku přetoku přes glacifluviální sedimenty tedy nebyla vyvrácena.*



Obrázek 11: Hypotéza ztráty vodnosti v důsledku přetoku do subglaciálního koryta

K přetoku podzemní vody do dolu Turów může také docházet přes *písčité polohy v terciérních sedimentech*. Polohy písku a štěrku o mocnosti 1 – 5 m byly zastiženy ve vrtech u Višňové (VA108, Viš23, Viš42), které však leží v mezipovodí I (mezi stanicemi Předlánce a Ostrožno), v němž až na výjimky ke zjevným ztrátám průtoku nedochází. Písčité polohy mohou být i v povodí II, ale archivní vrty zaznamenaly až do cca 60 m v terciéru pouze jíly. Nejvýznamnější pokles hladiny podzemní vody je pozorován ve vrtu VP2008 ve Višňové (mezipovodí I). Ač došlo k poklesu hladiny ve Višňové, byl zachován směr proudění (hydraulický gradient) z Polska do ČR. Výpočet kvantifikuje snížení přítoku z Polska do ČR v důsledku poklesu hladiny podzemní vody. Snížení přítoku vody z Polska (ΔQ) byl vypočten jako součin rozdílu současného a původního gradientu (Δi), šířky průtočného profilu (\check{S}) a transmisivity (T): $\Delta Q = \Delta i \cdot \check{S} \cdot T$. V důsledku poklesu hladiny ve vrtu o cca 40 cm došlo ke snížení přítoku podzemní vody do ČR ve Višňové nejvýše o 10 l/s. Takové množství se neprojeví výrazně na průtoku Smědé. *Hypotéza ztráty vodnosti pouze v důsledku přetoku přes písčité vložky v terciérních sedimentech tedy byla vyvrácena.*

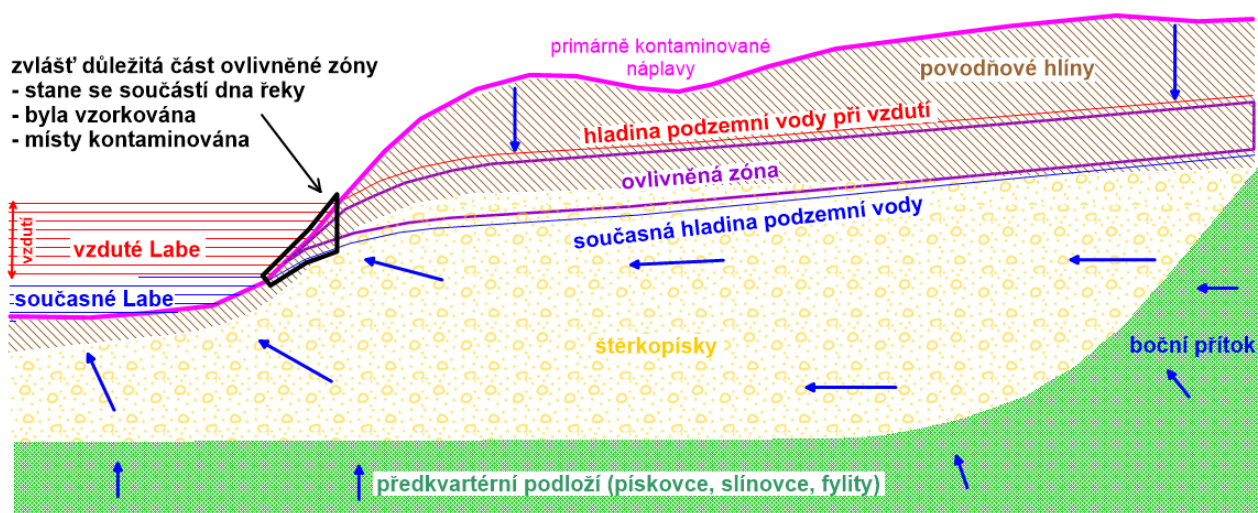
K přetoku může taktéž docházet přes tektonické poruchy. Ztráty vody vlivem poruch by vysvětlovaly, proč k poklesu hladiny podzemní vody dochází na relativně rozsáhlém území a pokles není větší. Tato hypotéza nebyla pro neexistenci relevantních dat vůbec testována matematickým modelem. *Hypotéza přetoku přes diskontinuity tedy nebyla testována a tedy ani vyvrácena.*

Problematika ovlivnění Smědé dolem Turów je velmi obtížná a dále je ztížena nedostatkem relevantních dat. Ve skutečnosti se na ztrátách průtoku Smědé pravděpodobně podílejí všechna uvedená vysvětlení. Matematické modely umožnily maximálně vytěžít existující data a testovat hypotézy o příčině ztrát vodnosti Smědé. Jedna hypotéza byla vyvrácena. U jedné hypotézy byla vypočtena mezní hodnota hydraulické vodivosti pro vyvrácení hypotézy.

2.2 Srovnání jednoduchého a komplexního modelu – ovlivnění podzemních vod jezem

Kvantitativní hodnocení transportu kontaminantů z náplavů Labe při vybudování jezu u Děčína bylo prováděno ve dvou etapách pomocí analytického modelu (Nešetřil 2008c) a 2D vertikálního numerického modelu (Nešetřil 2009a), na který navázal detailní model proudění dílčí lokality (Matula et al. 2009, 2014). Jedná se tedy o srovnání jednoduchého a komplexního modelu.

Zájmové území je tvořeno fluviálními sedimenty Labe a podložními, zejm. křídovými horninami (obrázek 12), ze kterých přitéká do kvartéru značné množství vody – cca 45 l/s/km². Cílem prací bylo vymezit možné transportní cesty kontaminantů při napouštění jezu i při jeho provozu a kvantifikovat potenciální ovlivnění kvality podzemní vody. Studie se zabývá šířením kontaminantů obsažených v náplavech Labe, které budou zatopeny v důsledku vzduť jezu.



Obrázek 12: Schematický hydrogeologický řez a koncepční model

Byl sestaven matematický model (obrázek 13) transportu kontaminantů při

- napouštění jezu (kontaminanty pronikají do šterkopískového kolektoru) a při
- návratu kontaminantů do Labe.

Jedná se tedy o transportní cesty při napouštění jezu a částečně při jeho provozu. Matematický model je odvozen z rovnice kontinuity. Nepočítá s Darcyho zákonem (neuvažuje hydraulickou vodivost). Uvažujeme tak nepříznivou variantu. Hydraulická vodivost šterkopískového kolektoru je tak vysoká (až $9 \cdot 10^{-3}$ m/s), že při zatápní jezu (min. 1 měsíc) je dost času na ustálení proudění.

Modelové řešení průniku kontaminantů do fluviálních sedimentů při zatápní jezu je odvozeno z úvahy, že objem kontaminované vody, která vnikne do kolektoru, je roven objemu suchých pórů, které jsou při zatápní zaplaveny. Takže platí:

$$L = \check{s} \cdot \frac{\Delta h}{M + \Delta h}$$

kde L je délka transportu [m], Δh je vzduť [m], \check{s} je dosah vzduť v kolektoru [m] a M je původní mocnost zvodně [m].

Dosah vzduť v kolektoru odpovídá šířce šterkopískového kolektoru (nivy). V některých úsecích je šířka nivy značná (až cca 450 m). Protože dochází k přítokům z křídly na bocích šterkopískového kolektoru, byl maximální dosah stanoven na základě hydrogeologického průřezu v Děčíně-Rozběších (Skořepa 1993) na 450 m. Jedná se o vzdálenost od řeky, ve které se současná hladina podzemní vody rovná jezem vzduť hladině v Labi.

Modelové řešení následného vytlačení kontaminantů v důsledku přirozených přítoků do fluviálních sedimentů počítá s tím, že těleso kontaminované vody je zatlačováno do Labe přítokem

z boků (svahů), infiltrací a přítokem z křídly do části kolektoru, který není kontaminován. Samostatně byla vypočítána doba návratu v důsledku infiltrace a v důsledku bočních přítoků. Vzorec pro dobu návratu z důvodu infiltrace srážkových vod byl odvozen pomocí integrace, protože délka kolektoru nezasáženého kontaminací se v průběhu výpočtu mění.

Pro dílčí doby návratu platí:

$$t_r = \frac{M + \Delta h}{r} \cdot \ln \frac{\check{s}}{\check{s} - L} \cdot n$$

kde

t_r doba návratu v důsledku infiltrace srážkových vod [s]

r infiltrace [m/s]

n pórovitost [-] a

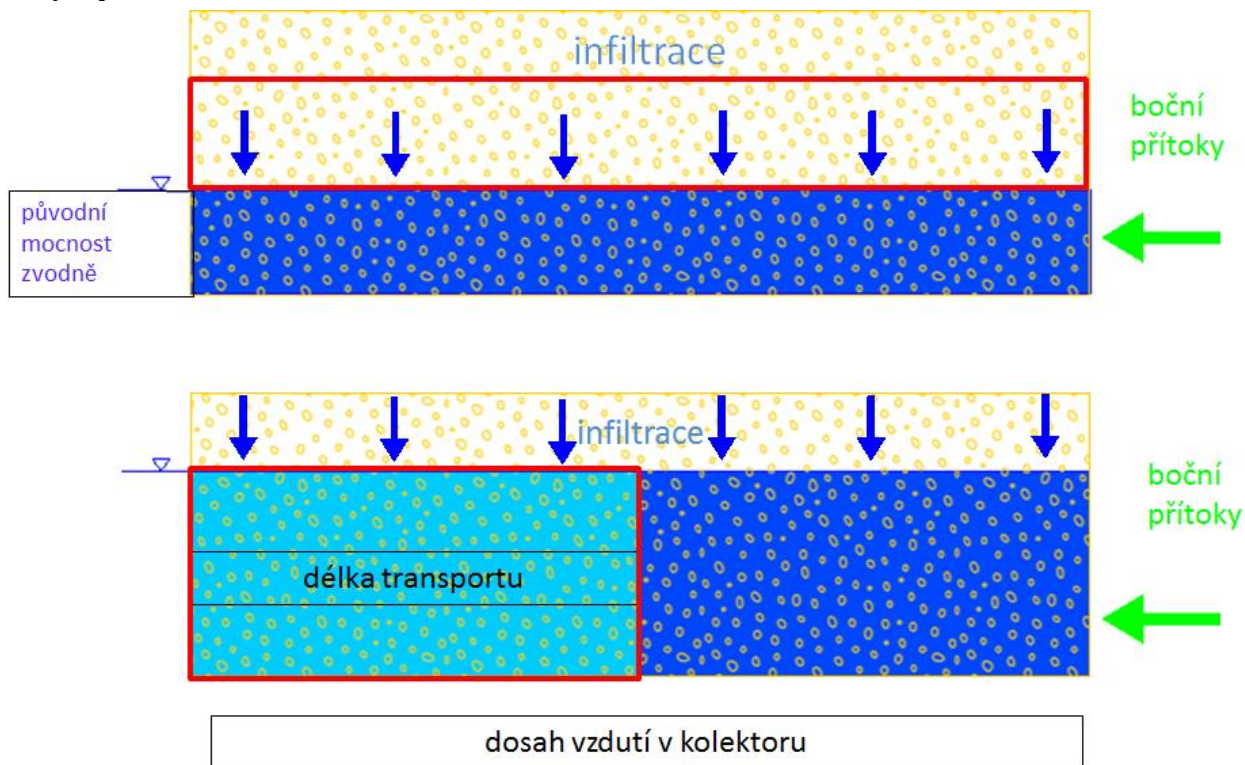
$$t_q = L \cdot \frac{M + \Delta h}{q} \cdot n$$

t_q doba návratu v důsledku bočních přítoků [s]

Celková doba návratu t [s] byla vypočtena podobně jako odpor dvou paralelně zapojených rezistorů.

$$t = \frac{t_r \cdot t_q}{t_r + t_q}$$

Zpomalení šíření kontaminantů ve štěrkopískovém kolektoru vlivem sorpce (retardace) byla zanedbána (nepříznivá varianta). Model předpokládá, že dno řeky je kontaminováno stejně jako vzorkované náplavy (nepříznivá varianta). Není uvažováno míšení vod v kolektoru. Modelové řešení bylo provedeno v tabulkovém kalkulátoru MS Excel.



Obrázek 13: Schéma bilančního výpočtu: Objem pístu vody z řeky odpovídá zvětšení zvodně

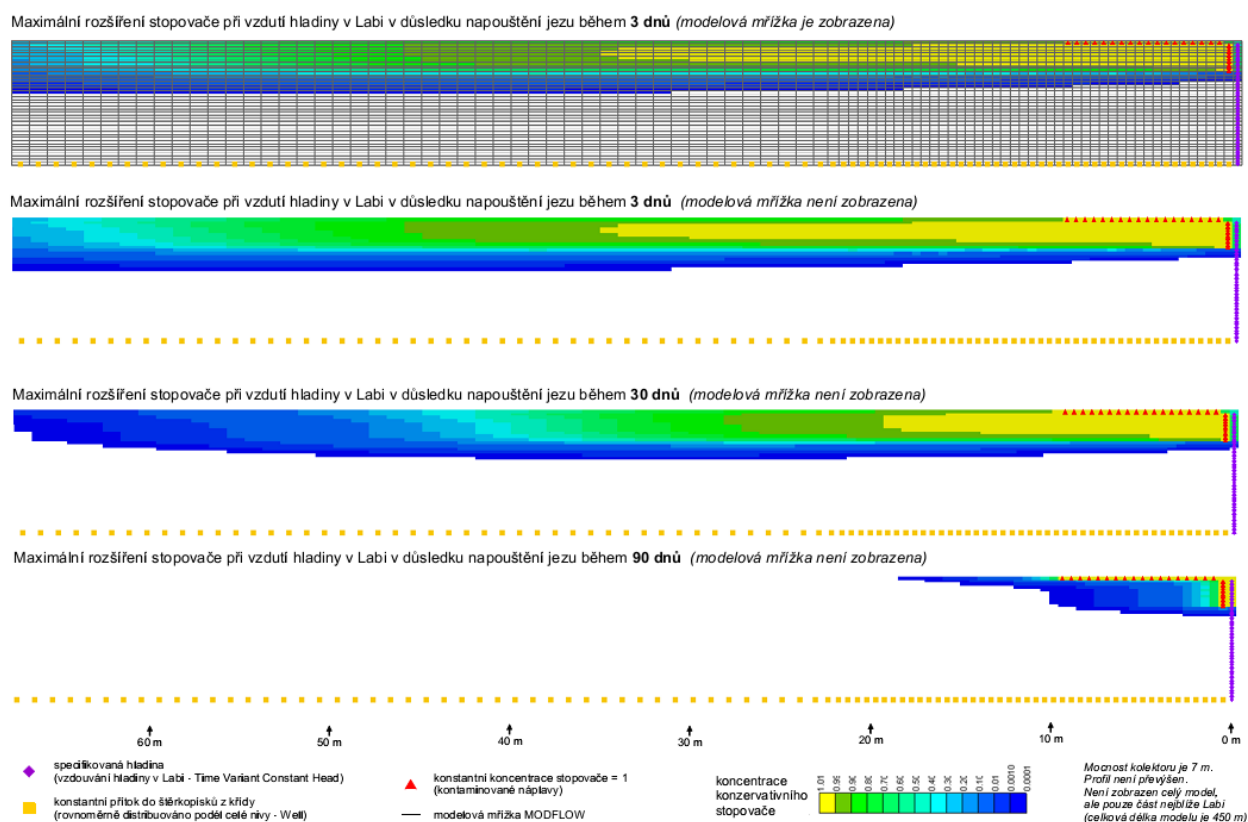
Výsledky modelu ukazují, že v extrémním případě by se kontaminace dostala cca 60 m od břehu, byla by však do cca devadesáti dní od začátku zvyšování hladiny v daném místě zatlačena zpět. Skutečnost bude však příznivější, protože model neuvažuje kolmataci dna, hydraulickou vodivost štěr-

kopísků, sorpci kontaminantů v šterkopískovém kolektoru, kinetická omezení desorpce z náplavů ani hydrodynamickou disperzi a míšení vod v kolektoru. Studie prokázala, že vybudování jezu nebude mít dlouhodobý vliv na kvalitu podzemní ani povrchové vody.

Tato případová studie je jediná, která se zabývá rozsáhlým územím, které je z hydraulického hlediska velmi dobře prozkoumané. Nicméně znalosti o kontaminaci náplavů a jejich mobilitě nejsou dostatečné pro to, aby bylo opodstatněné využití komplexnějšího modelu. Již jednoduchý model prokázal, že vybudování jezu nebude mít dlouhodobý vliv na kvalitu podzemní ani povrchové vody a tak by komplexnější model nebyl lepším podkladem pro rozhodování.

Na základě požadavku oponenta bylo v další etapě (Nešetřil 2009a) navázáno na tento jednoduchý model sadou 2D vertikálních modelů (obrázek 14) provedených v MODFLOW a MT3D-MS. Byla tak vytvořena predikce relativních koncentrací ve 2D řezech, která však nepřispěla k lepšímu pochopení procesů. Výsledky nebyly podpořeny adekvátními daty. V důsledku vysoké hydraulické vodivosti nemá její konkrétní hodnota v modelu praktický význam, protože k průniku povrchové vody dochází téměř okamžitě. Do numerického modelu bylo třeba zadat storativitu a efektivní porozitu, které nejsou známy. V analytickém modelu však stačí zadat jejich poměr. Protože zjednodušeně jsou si tyto dvě veličiny pro zvoď s volnou hladinou rovny, došlo k jejich vykrácení, a do analytického modelu se vůbec nezadávají.

Případová studie uplatňuje první bod návodu – Guidelines for effective modelling (Hill a Tiedeman 2007, s. 268) – Start simple and add complexity...



Obrázek 14: Numerický 2D vertikální model

V následujících případových studiích se nemusí nutně uplatňovat ekvifinalita, ale vhodně volená kombinace jednoduchých modelů (přístupů) pro dosažení zvoleného cíle.

2.3 Kombinace principiálně odlišných modelů – model délky kontaminačního mraku a dovoleného čerpání

Modelová studie (Nešetřil 2008a) byla zpracována pro analýzu rizik staré ekologické zátěže ropnými uhlovodíky (RU) v areálu bývalého vojenského cvičovacího prostoru. Bylo vypočítáno a hodnoceno:

- maximální rozsah oblasti zastižené v budoucnu kontaminací (na základě délky ustáleného kontaminačního mraku RU vypočítané pomocí modelu CoronaScreen) a
- dovolené čerpání v obci, které nebude přitahovat kontaminaci z potenciálně kontaminované oblasti.

Geologicky je území součástí české křídové pánve. Jsou zde dva kolektory – svrchní turonský a spodní cenomanský. Šíření kontaminace je myslitelné pouze v turonském kolektoru (déle jen „kolektor“) a to zejména v jeho svrchní části, která je přípovrchově rozpukaná, a proto propustnější.

2.3.1 Model ustálené délky kontaminačního mraku

Obecně lze říci, že se růst kontaminačního mraku vlivem biodegradace zpomalí. Po jisté době se již délka kontaminačního mraku nezvětšuje. Dojde totiž k dostatečnému promíšení vod a všechny transportované RU jsou postupně spotřebovávány biodegradními reakcemi. Látkový tok RU z ohniska se tak rovná množství RU spotřebovaných biodegradními reakcemi. Toto stádium se nazývá ustálený kontaminační mrak (*steady state plume*). Délka ustáleného kontaminačního mraku byla vypočítána pomocí programu CoronaScreen (Wilson et al. 2005). Je to soubor tří matematických modelů vyvinutých v rámci evropského projektu CORONA, na kterém se autor předkládané práce podílel. Výsledkem každého modelu je odhad délky ustáleného kontaminačního mraku. CoronaScreen počítá též čas nutný k dosažení ustáleného mraku. K tomu je třeba zadat rychlost šíření rozpuštěné látky, která se nesorbuje.

CoronaScreen obsahuje následující modely:

1. Model bilance elektronů
2. Analytický model
3. Pohyblivý 1D numerický model – využívá PHREEQC (Parkhurst a Appelo 1999)

CoronaScreen je screeningový model, který je na rozdíl od starších screeningových modelů – např. BIOSCREEN (Newell et al. 1997), BioScreen-AT (Karanovic a Neville 2014) či NAS (Widdowson et al. 2008) – zaměřen spíše na klíčové procesy ovlivňující přirozenou atenuaci než na distribuci koncentrací polutantů. CoronaScreen používá předpoklad, že ohnisko kontaminace má konstantní koncentraci a konstantní mocnost a že vstupní parametry jsou distribuovány uniformně. Na rozdíl od univerzálních numerických 3D transportních modelů – např. RT3D (Clement 1997) či MT3D-MS (Zheng 1998) – probíhá výpočet velmi rychle. Rychlost biodegradace je do značné míry určena mírou promíšení kontaminované vody a čisté vody obsahující elektronové akceptory. K míšení dochází především v reaktivní zóně na okraji mraku. Aby bylo možno modelovat šíření RU včetně biodegradace pro celou lokalitu, musí být mřížka transportního modelu dostatečně jemná, aby nedocházelo k nadhodnocení míšení kontaminované a nekontaminované vody. Nadhodnocení míšení způsobuje nadhodnocení rozkladu RU (biodegradace). CoronaScreen tento nedostatek nemá. CoronaScreen je speciální model určený pro modelování přirozené atenuace, a ve srovnání s univerzálními numerickými transportními modely je proto v mnohém účelnější.

Vstupními daty modelů CoronaScreen jsou:

- hydrogeologické charakteristiky (rychlost proudění, pórovitost, koeficient retardace),
- transportní charakteristiky (disperzivity či mocnost reaktivní zóny),

- šířka a mocnost kontaminačního mraku,
- koncentrace kontaminantů a elektronových akceptorů v pozadí a v ohnisku.

Velkou výhodou CoronaScreen ve srovnání s univerzálními 3D simulátory (např. RT3D) je, že CoronaScreen:

- dobře pracuje s disperzí (dostatečná diskretizace, pokud je vůbec potřeba),
- používá více metod,
- byl vyvinut právě pro přirozenou atenuaci.

2.3.2 Model dovoleného čerpání

Na základě modelu bylo stanoveno, jaké množství podzemní vody je možno čerpat v obci. Čerpání nemá ovlivnit přirozený směr proudění podzemní vody v oblasti maximálního možného rozšíření kontaminace. Kontaminace se tak nebude šířit do nekontaminované oblasti na sever a směrem k využívaným studnám v obci.

Dovolené čerpané množství Q bylo stanoveno tak, aby hydraulická deprese vyvolaná tímto čerpáním nedosáhla k oblasti maximálního možného rozšíření kontaminace.

Hydraulickou depresí pro tento účel rozumíme oblast, pro kterou platí současně, že se zde:

- projevuje snížení hladiny podzemní vody vyvolané čerpáním Q z využívané studny,
- veškerá podzemní voda (z části kolektoru vertikálně zastiženého využívanou studnou) je vyčerpána využívanou studnou.

Vstupní data jsou uvedena níže (tabulka 7).

Tabulka 7: Vstupní data modelu dovoleného čerpání

Parametr	Hodnota	Zdroj informací
Hydraulický gradient i	0,2% (tj. 0,002)	Přibližně maximum přímých měření
Transmisivita T	$1 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	Součin zastižené mocnosti a hydraulické vodivosti: $10 \text{ m} \cdot 1 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$
Infiltrace q	$0,5 \text{ l/s/km}^2 = 5 \cdot 10^{-10} \text{ m/s}$	Dolní mez odhadu zmenšena na polovinu z důvodu existence zastavěných ploch, kde srážková voda nemůže infiltrovat
Oblast maximálního možného rozšíření kontaminace	Polygon viz obrázek 15	Oblast šíření kontaminace stanovena na základě možného směru proudění podzemní vody a délky ustáleného kontaminačního mraku
Vzdálenost k oblasti maximálního možného rozšíření kontaminace L	Specifická hodnota pro každou využívanou studnu [m]	Přímá vzdálenost mezi využívanou studnou, pro kterou je počítáno Q , a oblastí maximálního možného rozšíření kontaminace

Dovolené čerpané množství Q je dáno součtem dílčích přítoků Q_1 a Q_2 .

Přítok Q_1 je přítok z oblasti mimo hydraulickou depresi, která byla vyvolána čerpáním Q .

$$Q_1 = T \cdot i \cdot 2L$$

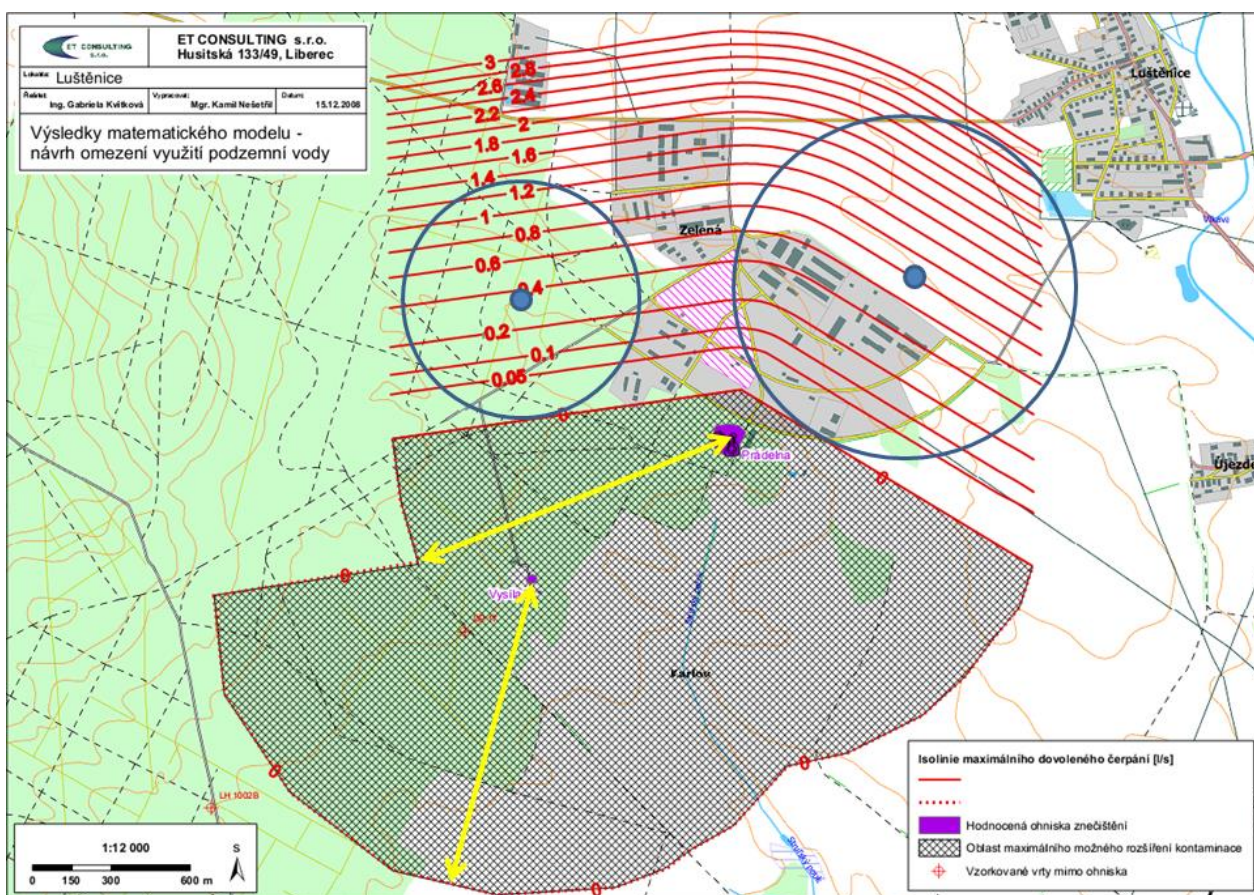
Přítok Q_2 je dán infiltrací srážkových vod do oblasti hydraulické deprese.

$$Q_2 = \pi \cdot L^2 \cdot q,$$

$$\text{a tedy } Q = Q_1 + Q_2.$$

Za zadaných podmínek je $Q_1 \ll Q_2$.

Výsledky modelů jsou zobrazeny níže (obrázek 15).



Obrázek 15: Výsledky modelu ustálené délky kontaminačního mraku (oblast max. možného rozšíření kontaminace) a modelu čerpání (isolinie). Žluté šipky představují maximální délku kontaminačního mraku. Kruhy mají poloměr L.

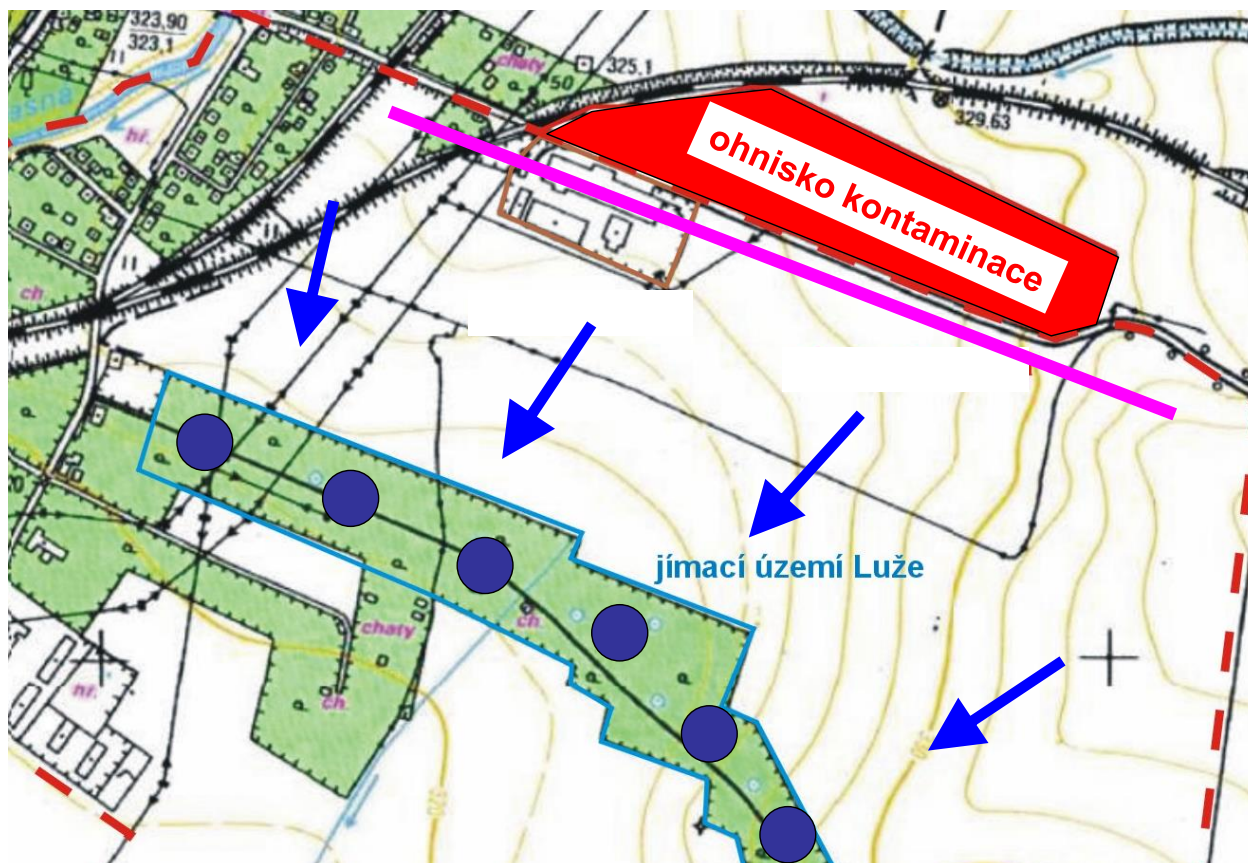
Pro specifický účel byla využita unikátní kombinace modelů, která dala praktický návrh na využívání podzemních vod v okolí kontaminovaného území. V případě modelu délky ustáleného kontaminačního mraku se uplatnil princip ekvifinality (tři metody výpočtu téhož). Ve standardním numerickém transportním modelu by docházelo k numerické disperzi, která by mohla vést k rychlejší biodegradaci kontaminantu – na druhou stranu by bylo možno zpomalovat odbourávání zahrnutím kinetiky. Model čerpání by bylo nutno realizovat jen pro explicitně zadané plánované studny.

Aktualizované analýze rizik (v rámci které vznikl prezentovaný model) předcházela analýza rizik. V rámci ní byl zpracován numerický model šíření kontaminace (MODFLOW, MT3D). Jeho využití pro předkládanou studii by nebylo účelné. Na tuto případovou studii by bylo možno navázat analytickým řešením „capture zone” – např. Zhou a Haitjema (2012).

2.4 Transport ropných uhlovodíků

Případová studie demonstruje využití většího množství relativně jednoduchých (zejm. analytických) modelů pro hodnocení přirozené atenuace ropných uhlovodíků. Jsou využity modely založené na Darcyho zákoně, vodní bilanci, látkových tocích i aplikaci simulačního softwaru. Model je podrobně dokumentován ve zprávě (Nešetřil 2008b), jež je přílohou analýzy rizika (Kubricht 2008). Výsledky byly publikovány v konferenčním sborníku (Nešetřil 2009b).

Pro potřeby aktualizované analýzy rizik (stanovení sanačních limitů) bylo hodnoceno šíření RU a jejich přirozená atenuace. Ohnisko (obrázek 16) kontaminace RU se nachází v distribučním skladu pohonných hmot (DS). Podzemní voda proudí jv směrem k vodárenskému jímacímu území (JÚ) vzdálenému 400 m, které je používáno k zásobování obyvatelstva pitnou vodou.



Obrázek 16: Schéma lokality

2.4.1 Vstupní data

V rámci průzkumu pro analýzu rizik bylo provedeno 20 sond a vrtů, geofyzikální průzkum (geoelektrické, seismické a karotážní metody), analýzy kontaminantů v podzemní vodě a v zemině a indikátorů přirozené biodegradace ve vodě. Byly vymezeny koncentrace elektronových akceptorů a produktů biodegradace v pozadí, ohnisku kontaminace a v kontaminačním mraku.

Dále byla stanovena oxidační kapacita pevné fáze pomocí

- extrakčních metod – určení obsahu mikrobiálně přístupného Fe^{3+} a Mn^{4+} podle metodiky Hero-
na et al. (1994a, 1994b) a
- elektronové mikroskopie (určení vzniku, kvantity a stechiometrického složení sekundárně
vznikajících minerálů za pomoci rastrovacího elektronového mikroskopu (SEM) a rentgenové
difraktoetrie (XRD).

Oxidační kapacita v kontaminované části lokality byla výrazně nižší než v nekontaminované. Výsledky ukazují, že nejvyšší podíl elektronových akceptorů vhodných pro mikrobiální degradaci RU je vázán v oxidech a hydroxidech železa a že jsou využívány k biodegradaci RU. Stanovení oxidační kapacity pevné fáze není standardní metoda. Vzorky je třeba odebrat a přechovávat v dusíkové atmosféře a ihned zamrazit.

Na základě zkušeností z řešení obdobných úkolů se ukazuje, že jsou data, která jsou pro predikce velmi důležitá (tabulka 8). Je jimi zejména plošné měření fyzikálně-chemických parametrů (pH, Eh) a určení hlavních indikátorů přirozené biodegradace (rozpuštěný kyslík, dusičnany, sírany, amonné ionty, dusitany). Naopak plošné stanovování všech hlavních anorganických makrokomponent („úplný chemický rozbor“) se ukazuje jako málo účelné – pro případné termodynamické modelování by však bylo nezbytné.

Tabulka 8: Vstupní data pro hodnocení přirozené atenuace

	Důležitá	Málo důležitá
Dostupná	pH, Eh, rozpuštěný kyslík, dusičnany, sírany, amonné ionty, dusitany, alkalita, koncentrace kontaminantů, ropné bakterie, hydraulický gradient, transmisivita, org. uhlík v pevné fázi; historie zdrojů, šíření kontaminace a sanačních zásahů	plošné stanovování všech hlavních anorganických makrokomponent
Obtížně dostupná	oxidační kapacita pevné fáze vertikální rozsah mraku mocnost reaktivní zóny (či vertikální disperzivita) zóny prioritního proudění	

Úbytek elektronových akceptorů, nárůst produktů biodegradace, rozbory pevné fáze a mikrobiologické rozbory prokázaly, že přirozená biodegradace probíhá. Matematický model se pak pokusil tyto procesy kvantifikovat.

2.4.2 Matematický model

2.4.2.1 Doba transportu

Byla spočítána doba potřebná pro šíření (tj. doba transportu či doba doběhu kontaminantu) RU z DS do JÚ. Ta byla vypočítána na základě retardačního koeficientu (hydrofobní sorpce podle lineární isotermy) a rychlosti šíření konzervativního stopovače, jež byla vypočtena podle:

- Darcyho zákona (na základě hydraulického gradientu, hydraulické vodivosti a pórovitosti) a
- bilančního výpočtu (na základě úvahy, že konzervativní stopovač se dostane do JÚ za dobu, kdy je vyčerpán objem vody mezi DS a JÚ).

Výsledky uvedených modelů byly pozoruhodně blízké – rozdíl odpovídal cca 13 %.

2.4.2.2 Látkové toky

Látkovými toky RU je myšleno množství RU, které proteče kontrolním profilem za jednotku času (např. kolik kg/rok RU vyteče z ohniska, přes linii monitorovacích vrtů či přiteče do recipientu).

Byl spočítán:

- látkový tok RU přes linii monitorovacích vrtů (součin koncentrace RU v jednotlivých vrtech, transmisivity kontaminované zvodně, hydraulického gradientu a délky kontrolního profilu),
- látkový tok RU do JÚ (součin čerpaného množství a průměrné koncentrace RU v čerpaných vrtech nebo ve sběrném potrubí před úpravou),
- inverzní úloha (jaká je bezpečná koncentrace RU v linii monitorovacích vrtů na okraji DS tak, aby byly v JÚ dosaženy limity upravitelnosti vody). Inverzní úloha vychází z porovnání látkového toku přes linii monitorovacích vrtů a toku do JÚ.

Látkový tok RU do JÚ se v průběhu času víceméně snižuje. Látkový tok z DS byl vždy větší než tok do JÚ. To je indikátorem probíhající přirozené atenuace. Avšak výpočet doby transportu ani látkových toků biodegradaci přímo nezahrnují.

2.4.2.3 Bilance biodegradace

Na základě koncentrací elektronových akceptorů a produktů biodegradace v pozadí a v DS byl vypočítán úbytek elektronových akceptorů při průtoku vody ohniskem. Z úbytku bylo pomocí tzv. „BTEX utilization factor“ vypočítáno množství RU, které jsou biodegradovány přímo v ohnisku.

2.4.2.4 Model ustálené délky kontaminačního mraku

Pomocí modelů CoronaScreen (kapitola 2.3.1) byla vypočítána délka ustáleného kontaminačního mraku. Byly vypočítány maximální koncentrace v JÚ při současném stavu kontaminace v DS. Byly

vypočítány koncentrace v DS tak, aby ustálený kontaminační mrak dosahoval právě k JÚ, které tak nebude ohroženo.

Výsledky modelu jsou citlivé na mocnost reaktivní zóny, již je možno zjistit z vrtů osazených víceúrovňovými vzorkovači. Na předmětné lokalitě byla mocnost reaktivní zóny vypočítána na základě vertikální disperzivity z literatury. Oxidační kapacita pevné fáze naopak tak důležitým vstupem není. Oxidační kapacita pevné fáze se uplatní obzvláště, pokud je hodnoceno šíření RU do nekontaminovaného kolektoru před dosažením ustáleného kontaminačního mraku včetně doby tohoto ustalování.

Tabulka 9: Shrnutí případové studie „Transport ropných uhlovodíků“

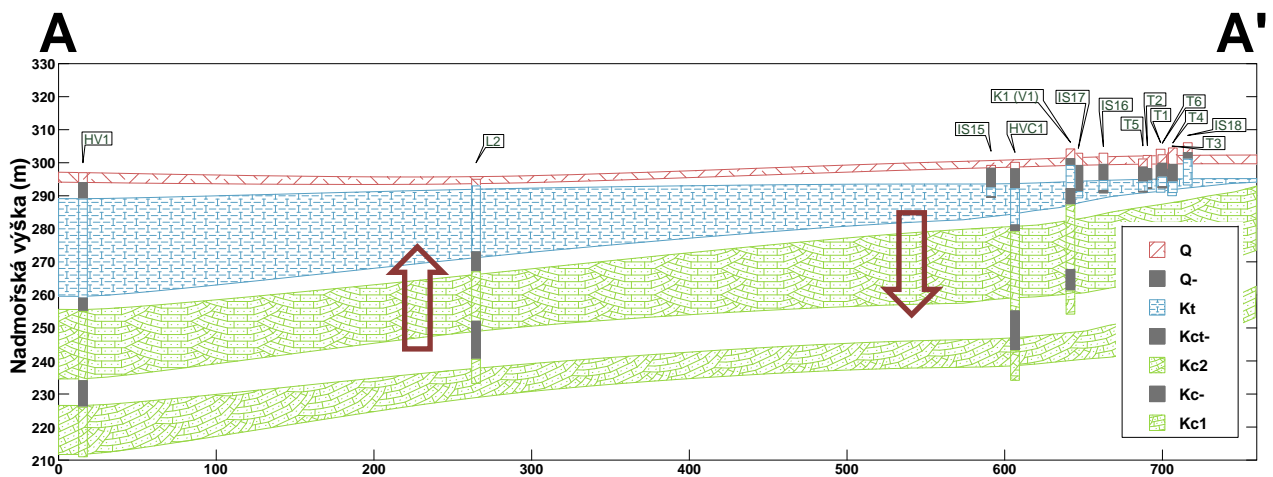
Výsledek	Způsob výpočtu
Doba transportu	Darcyho zákon
	Bilanční výpočet (konzervativní stopovač se dostane do JÚ za dobu, kdy je vyčerpán objem vody mezi zdrojem a jímacím územím)
Látkové toky kontaminantů	Ze zdroje vs. vyčerpáno vodárenskými vrtů
	Zpětná úloha (jaká je bezpečná koncentrace kontaminace ve zdroji tak, aby v jímacím území byly dosaženy limity)
Bilance biodegradace Kolik je odbouráno kontaminantu?	Pokles elektronových akceptorů při průtoku ohniskem
Ustálená délka kontaminačního mraku (Jaká může být koncentrace v ohnisku, aby kontaminační mrak nedosáhl do jímacího území?)	Model bilance elektronů (CoronaScreen)
	Analytický model (CoronaScreen)
	Pohyblivý 1D numerický model (CoronaScreen)

2.4.3 Závěr

Byly provedeny modelové výpočty od jednoduchých analytických modelů až k použití screeningového modelu CoronaScreen. Modely vycházely z různých předpokladů. Pro určení oxidační kapacity pevné fáze byla využita metodika Herona et al. (1994a, 1994b), která byla využita taktéž v článku (Topinkova et al. 2007), jehož spoluautorem je autor předkládané práce.

2.5 Transport chlorovaných uhlovodíků – advekční a bilanční model

Na lokalitě byla řešena (Nešetřil 2012b) problematika transportu chlorovaných uhlovodíků do studní pro individuální zásobení podzemní vodou a do vodárenských vrtů. Ohnisko kontaminace je v málo propustném kvartérním kolektoru (hydraulická vodivost 10^{-6} m/s), ale k čerpání ve vodárenských vrtech HV1 a L2 (obrázek 17) dochází v propustném cenomanském kolektoru (hydraulická vodivost 10^{-4} m/s). Přirozeně byly hladiny v jednotlivých kolektorech na srovnatelné úrovni, ale v důsledku čerpání je nyní hladina v cenomanu níže.



Obrázek 17: Hydrostratigrafický řez s vyznačením kvartérního (Q), turonského (Kt) a dvou cenomanských kolektorů (Kc1, Kc2) – šipky naznačují koncept bilančního modelu

2.5.1 Advektivní model – predikce

Na lokalitě jsou dva čerpané vrty L2 a HV1, které se po dvou týdnech střídají v čerpání 13 l/s. První způsob spočíval ve výpočtu doby, za kterou by se mohla kontaminace dostat kvartérním kolektorem ke studnám individuálního zásobování a cenomanským kolektorem k bližšímu (L2) ze dvou jímacích vrtů (L2 a HV1). Advektivní model je založen na Darcyho zákonu a na rovnici kontinuity.

Proudění v cenomanském kolektoru je určeno především čerpáním ve vodárenských vrtech (radiální proudění) a je proto nutno uvažovat 2D proudění. Model je založen na metodě analytických elementů (AEM), je implementován s pomocí grafického uživatelského rozhraní Visual AEM (Craig a Matott 2009) a byl implementován v simulačním kódu Bluebird / Cardinal. Byly vypočítány hydroizopie cenomanské zvodně a *particle tracking*.

Výsledkem obou advektivních modelů je odhad doby doběhu kontaminace. Nejkratší dobové doby vycházejí u cenomanského kolektoru. Koncentracemi CIU v jímacích vrtech v důsledku šíření v cenomanské zvodni se proto zabývá navazující bilanční model.

2.5.2 Bilanční model – testování hypotézy

Druhý přístup kvantifikuje přetok podzemí vody a kontaminace mezi kolektory. Bylo vypočítáno, jaká koncentrace CIU v jímacím vrtu odpovídá tomuto toku CIU.

Byl vypočítán hmotnostní tok CIU do cenomanské zvodně na základě rozdílů hladin v jednotlivých zvodních, mocnosti a propustnosti izolátorů a plochy kontaminované zvodně o dané koncentraci CIU. Byly vypočítány alternativy toku přímo z kvartérní zvodně a z turonské zvodně. Bylo uvažováno, že veškeré CIU, které přetečou do cenomanské zvodně, budou rovnoměrně naředěny ve vodě čerpané z vodárenského vrtu. Tak byla vypočítána koncentrace CIU ve vodárenském vrtu L2 – 0,032 µg/l odpovídá látkovým tokům CIU z kvartérního kolektoru a 0,025 µg/l tokům z turonu. Tyto hodnoty jsou neočekávaně nízké. Jsou výrazně menší než měřené koncentrace ve vodárenském vrtu L2 (0,83 µg/l TCE a 0,55 µg/l PCE). Když se obdobný výpočet provede pro koncentrace CIU v turonské zvodni před začátkem sanace, vyjdou koncentrace CIU ve vodárenském vrtu L2 přibližně 12krát větší (0,30 µg/l), což je však stále výrazně méně než měřené koncentrace CIU. To naznačuje, že cenomanský kolektor byl pravděpodobně kontaminován CIU v důsledku gravitačního proudění volnou fází CIU (DNAPL). Zatímco rozpuštěné CIU migrující puklinou v izolátoru difundují do bloku horniny, tak DNAPL – podobně jako koloidy (např. nanočástice) – difúzi nepodléhají, a mohou migrovat mnohem snáze než konzervativní stopovač (Cherry 2007). Model uvažuje

šíření rozpuštěných CIU advekci, nikoliv fáze DNAPL CIU. Fáze se může svise šířit i proti směru proudění podzemní vody. Šíření fáze je obtížně kvantifikovatelné a nejsou k němu pro tuto lokalitu dostupná data.

2.5.3 Diskuse a závěr

Vypočítané intenzity přetoku podzemní vody mezi kolektory jsou nerealisticky veliké. Ve výpočtu se totiž nejedná o bilancování vody pro celou lokalitu, ale o výpočet, který prokázal, že ani tak absurdně veliké toky nejsou schopny generovat měřené koncentrace CIU ve vodárenském vrtu L2. Úvaha ukazuje na to, že kontaminace se vertikálně šířila především jako DNAPL. Jedná se o myšlenkový experiment, kterým testujeme hypotézu, zda jsou měřené koncentrace rozpuštěných CIU schopny ovlivnit kvalitu vody ve vodárenských vrtech. Jedná se o nejpesimističtější myslitelný scénář.

Bylo by možno sestavit distribuovaný numerický model. Aby byl takový model smysluplný, bylo by třeba shromáždit a interpretovat data z širšího okolí ohniska kontaminace a jímacích vrtů. Celistvý analytický model umožňuje přímou interakci s uživatelem (ne-modelářem) a snadné porozumění implementaci modelovaných procesů. Je transparentní a snadno reprodukovatelný. Není přeparametrisovaný, což znamená, že se do modelu nezadávají parametry, jež nejsou pro výpočet skutečně významné. Výhodou takového jednoduchého modelu je mj. možnost snadno zpracovávat variantní výpočty, které jsou uvedeny ve zprávě na příloženém CD (Nešetřil 2012b).

Model vyvrátil implicitní hypotézu, že je rozhodující transport rozpuštěných CIU. Složitější model by pouze zamlžil vztah mezi předpoklady a důsledky. Vyskytovaly by se v něm totiž další veličiny a procesy (např. čas, disperzivita).

2.6 Přirozená biodegradace ropných uhlovodíků

V rámci práce na článku Topinkové et al. (2007) autor této práce provedl geochemické výpočty (speciace, saturační indexy a inverzní model) v programu PHREEQC (Parkhurst a Appelo 1999). Jednalo se o kombinaci jednoduchých modelů, které pomohly identifikovat probíhající procesy. Saturační indexy ukázaly, jaké srážecí reakce jsou termodynamicky možné. Inverzní bilanční model navrhl stechiometrické reakční rovnice, jimiž je možno vysvětlit změnu složení podzemní vody ve směru proudění. Jednalo se o studium přirozené atenuace ropných uhlovodíků na lokalitě Hněvice, jež byla osazena vrty s víceúrovňovými vzorkovači.

2.7 Hodnocení nejistoty koncepčního modelu podle Refsgaarda et al. 2006

Nejistota koncepčního modelu předložených případových studií byla posouzena podle metodiky (Refsgaard et al. 2006). Všechny případové studie je možno charakterizovat následně (tabulka 10):

Tabulka 10: Matice rodokmenu (*pedigree matrix*) podle Refsgaarda et al. (2006) pro prezentované případové studie

Skóre	Podložení empirickými důkazy		Teoretické porozumění	Reprezentace porozumění procesům	Věrohodnost	Shoda názorů odborníků
	Reprezentativnost	Kvalita a kvantita				
15	Bez přímé vazby (0)	Archivní/terénní data, neřízené experimenty, malé vzorky, přímá měření (3)	Prověřená teorie (4)	Jednoduchý model s agregovanými parametry (2)	Vysoce věrohodný (4)	Konkurenční školy (2)

Modely vycházejí z archivních dat, která jsou většinou doplněna terénními měřeními. Nejsou dostupné dlouhodobé časové řady. Nejsou dostupná data pro kalibraci modelu ani jeho verifikaci. Model je postaven na prověřených teoriích, jež jsou v modelu implementovány v zjednodušené formě. Jednoduchost modelu umožňuje jeho pochopení a posouzení hydrogeology ne-modeláři. Nemusí však existovat shoda mezi odborníky, zda dostupná data jsou dostatečná a zda zjednodušení modelu není příliš velké.

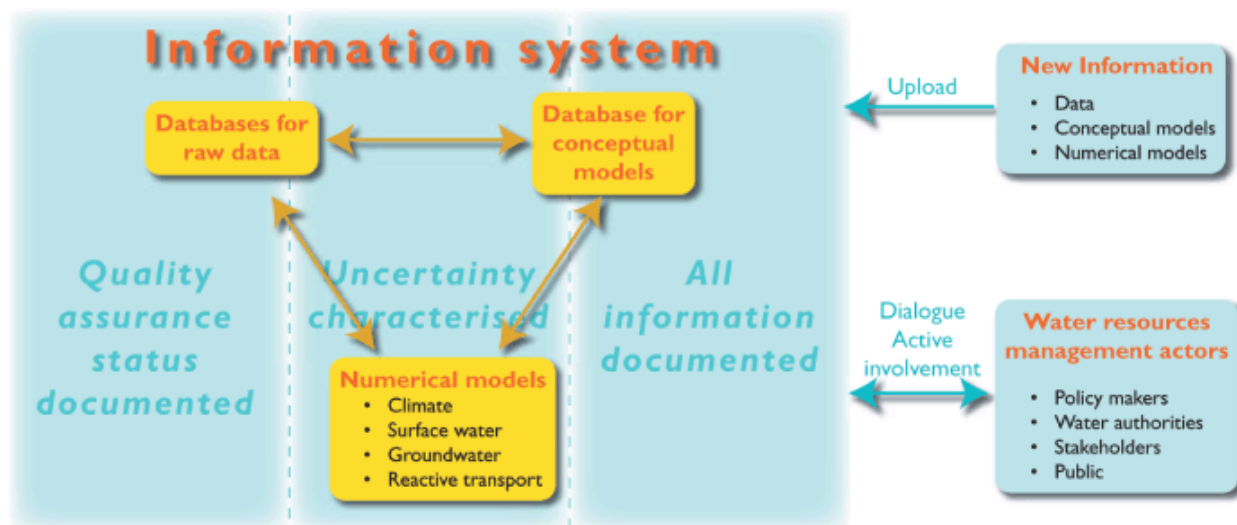
Všechny možnosti hodnot z tabulky výše (tabulka 10) uvádí tabulka 5.

3 Informační systém HgIS

Pro tvorbu alternativních jednoduchých modelů nemá smysl zpracovávat formální metodiku. Aby však bylo možno snadno vyhodnocovat data, vytvářet analýzy, formulovat koncepční modely a vytvářet sady různorodých alternativních matematických modelů, je vhodné využívat informační systém (IS), který to technicky snadno umožňuje. Je tak možno lépe se vyrovnat se strukturní nejistotou koncepčního modelu. V předkládané práci je představen informační systém HgIS, který tyto požadavky splňuje, a je tak schopen řešit většinu úloh, jež byly představeny v kapitole 2. HgIS byl vyvinut pod vedením autora předkládané práce.

Pro správu dat, jejich vizualizaci, vyhodnocení a tvorbu modelů je možno používat existující software. Na specifika mj. hydrogeologických dat se specializuje tzv. EMDS (*Environmental data management software*). Mnohé funkcionality jsou však dostupné v nástrojích business intelligence (BI). V této práci jsou proto představeny existující EDMS a prezentovaný informační systém HgIS, jenž využívá software vyvinutý pro řešení úloh BI.

HgIS vychází vstříc vizi pro IS a systémy pro podporu rozhodování (DSS) pro rok 2020 (Refsgaard et al. 2009), která navrhuje uložení nejistot dat a znalostí v databázích pro využití modely. V HgIS tento požadavek částečně naplňuje metadatová vrstva datového modelu. Refsgaard et al. (2009) dále uvádí, že je velmi pravděpodobné, že vnímaná mezera mezi sběrem dat a modelováním zmizí. Databáze s měřenými daty, databáze s modelovými daty a vlastní modely budou úzce integrovány. Monitoring a modelování tak budou chápány jako jedna integrovaná disciplína. V HgIS je možno uložit měřená data i výsledky modelu. HgIS umožňuje snadnou tvorbu a opětovné využití analýz, modelů a exportu dat do simulačního sw.



Obrázek 18: Klíčové elementy IS pro integrované vodní zdroje (Refsgaard et al. 2009)

3.1 Požadavky na systém z hlediska funkčnosti

Prezentovaný informační systém (HgIS) má splňovat mnohé požadavky na typ dat, s nimiž má pracovat, a na funkce, jež má poskytovat. HgIS má shromažďovat, uchovávat, zobrazovat a analyzovat data. Na základě výše uvedených potřeb, ale navíc i z potřeb své 5leté modelářské praxe ve firmě (AQUATEST a.s.) a potřeb projektů MARE a ZÁVOD autor předkládané práce zformuloval následující požadavky na funkce systému:

- Má se jednat o systém pro správu zejména hydrogeologických dat – bodových měření (vrty), nikoliv prostorových interpretací těchto dat (např. plošné rozložení kolektorů).
- Je určen např. pro potřeby modeláře a řešitele zakázek v odborné firmě zabývající se zejména hydrogeologií a sanační geologií, a nikoliv tedy pro potřeby správy dat ve velké veřejné organi-

zaci (např. Česká geologická služba). Potom by totiž byla důležitá větší jednoznačnost popisu dat a dodržování evropské směrnice INSPIRE pro harmonizaci a zveřejňování dat (Evropský parlament, Rada Evropské unie 2007).

- Kritické je zvládnutí sběru dat a snadná migrace historických dat ze semistrukturovaných (*semi-structured data*) datových zdrojů (např. textové soubory, ručně vytvářené tabulky v Excelu atd.). Příklady environmentálních semistrukturovaných dat uvádí mj. Shu et al. (2015, s. 106 – 107).
- Interoperabilita a snadné propojení s nástroji pro analýzu a modelování. Systém si klade za cíl efektivně využívat existující nástroje, nikoliv je všechny nahradit.

Koncový uživatel – expert – snadno ze systému získá data ve formátu pro zpracování ve specializovaných programech a může data a nástroje HgIS použít pro vědu, výzkum a odborné posouzení. Koncový uživatel – návštěvník, úředník (uživatel ze samosprávy, státní správy a dotčených organizací) – si může prohlížet interaktivní obsah, jako jsou mapové aplikace, tabulky a grafy, výsledky modelů či automaticky generované zprávy přes web či e-mail.

Konkrétní požadavky na funkce HgIS jsou následující:

- Načítání dat do datového úložiště
 - Data jsou dostupná v různých formátech. Při načítání dat je třeba provádět operace (přejmenování položek, převod jednotek, generování souvisejících záznamů atd.). Taková data pocházejí mj. ze zdrojů:
 - laboratorní informační systém (*LIMS*) Labsystém – www.labsys.cz,
 - Česká geologická služba „Geofond“,
 - gdBase (www.gdsoftware.cz) – systém pro správu geologických dat a jejich zobrazení,
 - srážky a teploty od Povodí Ohře s. p.,
 - data o chemismu od Palivového kombinátu Ústí, s. p. (PKÚ),
 - archivní vrty exportované ze systému Geobanka firmy Data-PC Sokolov.
- Publikace dat. Data uložená v databázi má být možno exportovat i přímo zobrazovat.
 - Nejjednodušší způsob, jak může běžný uživatel přistupovat k datům, je přes webové rozhraní. Mapy a související tematický obsah (např. časový průběh veličin) ve formě tabulek a grafů by měly být dostupné v jednoduchém grafickém uživatelském prostředí. Grafy a tabulky by mělo být možno uložit v běžně používaných formátech jako MS Excel, MS Word, PDF apod.)
 - HgIS má být schopen exportovat data do specializovaných softwarových nástrojů a modelů. Vzhledem k tomu, že mnohá data se týkají geologie, je pro jejich komplexní zobrazení třeba využívat specializované nástroje, které jsou schopny kombinovat zobrazení v mapě a geologickém řezu se zobrazením georeferencovaných grafů (kartodiagramů) a tabulek.
- Je třeba mít možnost vytvářet v HgIS jednoduché modely a umožňovat snadný vývoj nástrojů pro export dat ve formátech využitelných dalšími simulačními nástroji.
- HgIS má umožňovat distribuci zpráv pomocí elektronické pošty.

Ačkoliv byl systém částečně vytvářen v rámci projektu MARE a ZÁVOD, je navržen tak, aby jej bylo možno použít pro značně odlišné aplikace.

3.2 Existující EDMS, výměnné formáty a datové modely

Předkládaná práce je výsledkem důkladné rešerše a testování existujících produktů ve snaze vyhnout se, pokud možno, vývoji nového IS. Existující sw se ukázal jako nevyhovující, a proto byl vyvinut nový IS. Tato kapitola popisuje existující EDMS, datové modely, formáty pro uložení a výměnu dat, standardy a normy. Předkládaná práce se vůči těmto vymezuje a přináší řešení, jež by mělo mít výhodu oproti níže uvedeným systémům a standardům.

3.2.1 Existující EDMS

EDMS čili *Environmental data management software* (sw pro správu dat o životním prostředí) je systém, který spravuje bázi dat o životním prostředí a provádí nad ní operace specifické pro environmentální data (import, export, validace dat, QA/QC, vizualizace: reporty, grafy, vrtné profily). Nebyl nalezen zdarma dostupný EDMS. Známé EDMS jsou uvedeny níže (tabulka 11). Bylo provedeno důkladné srovnání uvedených EDMS. Z nich byly vybrány systémy EQuIS od firmy EarthSoft Inc. („světová jednička“) a Enviro Data od firmy Geotech Computer Systems, Inc., které mají zdrojový kód dostupný za podmínek dohody o mlčenlivosti a jsou zaměřeny na interoperabilitu se sw třetích stran. Tyto systémy byly otestovány. S majiteli firem, které tyto dva produkty vyvíjejí, autor vedl jednání (Geotech Computer Systems, Inc. – videokonference; EarthSoft Inc. – osobní setkání v Praze).

Kromě těchto systémů byly v literatuře nalezeny systémy, které nemají webové stránky, nejsou veřejně distribuovány, zabývají se okrajovou tematikou či jsou vyvíjeny pro vnitřní potřebu organizace. V ČR byl vyvíjen systém pro hodnocení uhelných ložisek (Schejbal 2003). V literatuře byl zmíněn DSS pro ochranu podzemních vod (Kollarits et al. 2006). Systém BoreIS (McCarthy a Graniero 2006) byl k dispozici ke stažení ze stránek autora a vyžaduje ArcScene od ESRI. Pouze puklinami na výchozech se zabývá DigiFract (Hardebol a Bertotti 2013). MGeobase od firmy Deltares již není dostupná.

V rámci projektu MARE bylo plánováno zakoupení systému EQuIS. Nákup se nepodařilo realizovat, což se ze zpětného pohledu jeví jako šťastná okolnost. Nabyté zkušenosti s uvedenými systémy byly využity pro návrh vlastního řešení, které není nepřiměřeně zatíženo autorskými právy třetích stran a plně splňuje zadané požadavky. EDMS nesmí být zaměňován s environmentálním informačním systémem organizace (*Environmental information system*), jenž v ní má zabezpečovat komunikaci, vedení záznamů a podávání zpráv o chování organizace k životnímu prostředí např. v rámci systému environmentálního managementu.

3.2.2 Existující výměnné formáty a datové modely

Databáze (datový sklad) je klíčovou komponentou HgIS, a je proto důležité navrhnout datový model (schéma databáze), který umožní efektivní uložení všech potřebných typů dat. Není žádoucí, aby se datový model měnil v celém průběhu vývoje HgIS a při vývoji navazujících produktů. I v případě nevyužití existujícího EDMS (s jeho vlastním datovým modelem) by mohlo být vhodné využít existující standardní datový model. Existují národní a mezinárodní standardy a normy i komerční datové modely EDMS (bylo by možno využít datový model, ale vyvinout vlastní EDMS). Srovnání je uvedeno v níže (tabulka 12).

Celosvětovým mezinárodním standardem pro uchovávání a výměnu geografických dat je Geography Markup Language (GML) a jeho aplikační schémata, jako je GeoSciML (Geoscience Markup Language – pro geologická data), WaterML (pro hydrologická data) či Ground Water Markup Language (GWML – pro data o podzemní vodě) – (Boisvert a Brodaric 2012). Na tyto standardy navazuje velmi důležitá evropská směrnice INSPIRE (INfrastructure for SPatial InfoRmation in Europe). Pojmenování položek definuje např. ČSN EN 14968 Sémantika pro výměnu dat o podzemní vodě (2006). Tyto standardy jsou vhodné pro velké infrastruktury velkých národních a mezinárodních

organizací, které potřebují harmonizovat data v mezinárodním měřítku. Ačkoliv jsou standardy velmi komplexní, nepředepisují, jak ukládat například informace o výstroji vrtu. Mezinárodní standardy se stále rozvíjejí, ale aplikační software pro práci s geologickými daty většinou neumožňuje načítat data z těchto standardních formátů.

Dalšími zdarma dostupnými datovými modely jsou ty od firmy ESRI. Jedná se o Arc Hydro pro hydrologická data a Arc Hydro Groundwater pro hydrogeologická data. Další jsou Open Geoscience Data Models (Borehole Index and Interpretations, Geochemistry Data Model) od Britské geologické služby. Uvedené datové modely jsou z hlediska požadovaných typů dat neúplné.

Mezinárodní standardy se v čase poměrně rychle mění, protože se teprve vytvářejí. O sjednocení standardů pro data o podzemní vodě (GWML1, GeoSciML, INSPIRE) usiluje Groundwater Interoperability Experiment 2 (OGC 2014a). Obecné informace jsou k němu uvedeny na webových stránkách projektu (OGC 2014b). Jeho výsledkem má být v červnu 2016 druhá verze Ground Water Markup Language (GWML2). Navazuje na Groundwater Interoperability Experiment 1, v němž ještě nebyli evropští zástupci (INSPIRE), nýbrž se jednalo především o výměnu dat mezi Kanadou a USA.


Další datové modely jsou uvedeny na stránkách provozovaných Britskou geologickou službou www.earthdatamodels.org.

Tabulka 11: EDMS

Původce	EDMS	Aplikační oblast, funkcionality	URL, zdroj	Technologie	Cena	Dostupnost zdrojového kódu	Interoperabilita	Hodnocení	Poznámka
EarthSoft Inc. 	EQuIS	široká	www.earthsoft.com	VB.NET (EQuIS v. 3 byl Access)		NDA	Mnohé moduly pro export po 250 či 500 USD	Vůbec nejpokročilejší EDMS	
	SiteFX	univerzální	earthfx.com	Access	2500 USD	ne	Není; zdarma dostupný datový model	Kvůli datovému modelu zdarma asi nejlepší varianta	
Geotech Computer Systems, Inc. 	Enviro Data	široká	geo-tech.com/enviro_data.htm (Rich 2002)	Access, VBA		ano	Všechny exporty, obsaženy v základním produktu: export do Excelu, EI, RockWorks, EVS, ArcGIS	Zajímavé, ale technologicky zastaralé	
konsorcium?	ESdat 	univerzální	esdat.net		od 2 275 GBP	ne	gINT, WinLog, GIS, EVS	Propracované	
ribeka GmbH (SRN) 	GW-Base@ ribeka	podzemní voda	ribeka.com/index.php/en		ne- uvedena	ne	Excel, ASCII, CSV	Komplexní balík bez potřeby interoperability, zajímavé.	Datový model (mdb) nedokumentován.
	WISKI	povrch. voda, kvalita vody	www.kisters.net	online: SOA, ODBC	ne- uvedena		OpenMI, API, WaterML, SOS, xHydro	Moderní	
	Hydstra	dtto + geologie vč. výstroje		FoxPro			Perl	Zastaralé, původně vyvíjeno Australskou firmou – akvizice	
Fugro (SRN)	GeODin	životní prostředí, geotechnika	geo-din.com/software		11 000 €	ne	Nemá export, ale zato má Portal server		
GeoSoft (USA)	Oasis-montaj	univerzální	geo-soft.com/products/oasis-montaj		neuve- dena	ne	Není – sám obsahuje potřebnou funkcionalitu; pouze import		Další produkty od téže firmy přidávající 3D geologii a geochemii do ArcGISu.
Waterloo Hydrogeologic	HydroManager	univerzální	www.novamatrixgm.com/groundwater-software	webová aplikace	50 000 USD a víc	ne	Zaměřená na interoperabilitu s jejich vlastním software		
Groundswell Technologies, Inc.	GT-Web – dříve Waiora	životní prostředí asi bez geologie	groundswell-tech.com	webová aplikace (SAAS)		ne	Web Service API		Groundswell Technologies, Inc. (2010)
ddms	Project Portal		www.ddmsinc.com/project-portal	webová ap. (SAAS)			EarthSoft EQuIS® "4 File"	dokumentace není dostupná	de maximis Data Management Solutions
Bentley	gINT	geotechnika	bentley.com/en-US/Products/gINT			ne			
Summit Environmental Solutions, Inc.	EPIPHINY	univerzální	epiphiny.com		1000 USD/rok	ne	Podporuje EQuIS, podle M. K. Bearda dále nepokračují a používají EQuIS	Spíše nástroj pro konverzi (DB má 4 tabulky)	Předchůdcem byl GEMS (gems.summite.com) založený na MS Access.
Virtual Observatory and Ecological Informatics System (VOEIS) 		bez geologie	https://voeis.msu.montana.edu	online (SOA)	zdarma	ano	CUAHSI HIS (REST interface)		Mason et al. (2014)
GD Software, spol. s r.o.	gdBase	aplikovaná geologie	gdsoftware.cz	Microsoft?		ne	RNDr. Jiří Křest'án, CSc.; dnes Bc. Jan Ambrož	Komplexní systém	Český databázový systém pro mj. zobrazování profilů vrtu, geologických řezů a vykreslování geofyzikálních měření ve vrtu
Vyvíjí adiNET s.r.o pro AQUATEST a.s.	SIS	sanační geologie		Microsoft (.NET, MS SQL Server)	není distribuováno	ne	Import Labsystém a podklady pro gdBase; textové tabelární exporty definované uživatelem	Příliš specializovaný a nestaví na standardech	Pro sanaci Spolchemie (Kvapil, Šuráň). Tabulky s chemismem denormalizované. Editace tabulek, import dbf z laboratoře, formuláře, export. Tlustý a plánovaný tenký klient.
Progeo Consulting s.r.o.	SED	hodnocení lokalit				NDA	Založeno na http://sekm.progeo-sys.cz		Systém dodaný TUL v rámci výběrového řízení
VŠB – TU Ostrava	ETRA GIS	hydrologie,	http://gis.vsb.cz/projekty-1/projekt-	webové		ne	Export do MODFLOW atd.	Z prezentace není patrné, že	Projekt TRANSCAT

Původce	EDMS	Aplikační oblast, funkcionality	URL, zdroj	Technologie	Cena	Dostupnost zdrojového kódu	Interoperabilita	Hodnocení	Poznámka
		hydrogeologie	transcat					by se zabývali geologií.	
Réseau National de Sites Hydrogéologiques	H+	hydrogeologie	http://hplus.ore.fr/en/?lang=en	webové				De Dreuzy et al (2006)	
The Australian National University	National Groundwater Information System	hydrogeologie		Iwanaga et al. (2013)	není distribuováno	ne	Zejm. australské standardy	Nedostupné na internetu, nedokumentované	Drupal, OpenLayers, GeoServer, dygraphs
Wayne Jones	GWSDAT	analýza dat		MS Excel	zdarma	ano	ESRI shapefile	http://www.claire.co.uk/index.php?option=com_content&view=article&id=728&Itemid=146	Jones et al. (2014, 2015b)
DHI	IMS – Information Management System	hydrologie	http://www.mikecuscus.com/software/ims		nezveřejněna		Zejm. produkty DHI		Základní verze, kterou upravují dle požadavků zákazníka
HydroDaVE	HydroDaVE		www.hydrodave.com	SAAS		ne		Nedostatečná dokumentace	
Seveno	DataSight	bez geologie	seveno.com			ne			
Datamine	Geological Data Management Software	důlní činnost	www.dataminesoftware.com					Bez dokumentace či screenshoty a detailů	Působí nedůvěryhodně
USGS	PINE	kvalita vody	Giffen (2002)	Access	sw není dostupný			Využíváno pro jediný projekt, nepřináší nic nového.	Název: Environmental Database For Water-Quality Data for the Penobscot River, Maine
GHS Barcelona	QUIMET	geologie, geochemie		ArcGIS	není distrib.	ne		Není dostupná dokumentace	Velasco et al. (2013, 2014)
GeoAnalysis	Visual Site Manager	podzemní voda?	geoanalysis.com nedostupné	MS Access	800 USD				Zastaralé
acQuire	GIM Suite		acquire.com.au	neuvejena					Jen stručná informace na webových stránkách
GEOVIA	GEMS	těžba n. s.	geovia.com	MS SQL Ser.	neued.	ne	Nespecifikována	Nedokumentováno	
MineRP	Enterprise integration		minerp.com	MS SQL Server				Využívá nástroje a přístupy BI, ale není to zcela EDMS	Využívá OGC standardy

Tabulka 12: Standardy pro výměnu dat a datové modely

Původce	Skupina či standard	Standard	Aplikační oblast	URL, zdroj	Poznámka	Hodnocení
Open Geospatial Consortium (OGC)	Geography Markup Language (GML)	GeoSciML (Geoscience Markup Language)	geologie (spíše interpretace než primární data)	Další datové modely pro geol. mapy jsou např. The North American Geologic Data Model (NADM) či New Mexico Bureau of Geology and Mineral Resources – viz http://www.earthdatamodels.org/designs/geologyMaps_index.html		
		WaterML	hydrologie	www.opengeospatial.org/standards/waterml		Hydrologická měření
		WaterML-WQ	kvalita vody	Cox a Simons (2014)	Definuje způsob využití ostatních standardů	
		O&M	pozorování a měření	Cox (2013)	Standard OGC a norma ISO	
		GWML (Ground Water Markup Language)	podzemní voda	Boisvert a Brodaric (2012)		
	HY_Features: a common hydrologic feature model		hydrologie	Dornblut a Atkinson (2014)	Vychází z ostatních standardů	Hydrologické objekty
CUAHSI (The Consortium of Universities for the Advancement of Hydrologic Science, Inc.)		Observations Data Model (ODM)	hydrologie	http://his.cuahsi.org/odmdatabases.html (Horsburgh et al. 2008)		
Evropská směrnice	INSPIRE (INfrastructure for SPatial InfoRmation in Europe)	D2.8.II.4 INSPIRE Data Specification on Geology – Technical Guidelines	geologie (+ hydrogeologie a geofyzika)	http://inspire.gov.cz	Např. storativita je definovaná pro kolektor, nikoliv objekt	Pro naše účely příliš složité
	 BoreholeML		německý XML standard pro výměnu dat o vrtech	http://www.infogeo.de/home/boreholeML?lang=2	Vychází z XML exportu z eEarth	Obsahuje technické provedení vrtu
	SEP3			Podporován SW ribeka a Geo-Din (je tam o formátu zmínka)	Německý výměnný formát	

Původce	Skupina či standard	Standard	Aplikační oblast	URL, zdroj	Poznámka	Hodnocení
Bundesanstalt für Gewässerkunde		XHydro	hydrologické časové řady	www.xhydro.de	Propracované včetně kódovníků	Nezmiňuje mezinárodní standardy
	ČSN EN 14968 Semantics for groundwater data interchange				Definuje např. pojmenování položek	
ESRI		Arc Hydro	hydrologie	http://support.esri.com/en/knowledgebase/techarticles/detail/40585	Vlastní datový model je public domain	
		Arc Hydro Groundwater	hydrogeologie	(Whiteaker et al. 2012; Chesnaux et al. 2011; Strassberg 2011)		
British Geological Survey	Open Geoscience data models	Borehole Index and Interpretations		http://www.bgs.ac.uk/services/dataModels/home.html		
		Geochemistry Data Model				
		Hydrogeology	hydrogeologie			Nebyl zveřejněn
Wojda	HydroCube (Belgie)	zaměřen na hydrogeolog. terénní zkoušky (čerpací a stopovací)		Wojda et al. (2010)	Je implementován v MS Access. Jeho předchůdcem byl model HYGES.	
	Hg20		hydrogeologie	Wojda a Brouyère (2013)	Vznikal paralelně s GWML, na rozdíl od něj více rozvádí terénní testy. Mělo by být integrováno do INSPIRE a GML.	
Réseau National de Sites Hydrogéologiques	H+		hydrogeologie	http://hplus.ore.fr/en	Francie	
	Basin of Mexico hydrogeological database (BMHDB)			Carrera-Hernández a Gaskin (2008) – dostupné na vyžádání	Datový model o 13 tabulkách + sw: GRASS, PostgreSQL, PostGIS, R	Nedostatečně normalizované: sloupce dle analytů
Australian Government: Bureau of Meteorology	Australian national groundwater data transfer standard	rok 1999	hydrogeologie			
	National Groundwater Information System: Data Model	verze 2.3: rok 2013	hydrogeologie	www.bom.gov.au/water/groundwater/ngis		
CSIRO and Bureau of Meteorology		Water data transfer format		http://www.bom.gov.au/water/standards/wdtf/index.shtml	Kao et al. (2011), Ranatunga et al. (2011)	Souvisí s WaterML
Wilson Engineering (USA)	Water Resources Database (WRDB)		hydrologie, nikoliv geologie	http://www.wrdb.com	Souvisí s iniciativami jako CUAHSI, HydroDesktop, MapWindow atd.	Velice zajímavé
Geological Survey of Denmark and Greenland (GEUS)		Borehole and Water Works Database	vrty, hladiny, chemie	http://www.geus.dk/jupiter/index-dk.htm	Velmi detailní	Dokumentace v dánštině
USGS	National geochemical survey database		povrchová voda	http://mrdata.usgs.gov/geochem/doc/dbdoc.htm		
Bavorský spolkový úřad pro životní prostředí		Hydrogeological Map of Bavaria	hydrogeologie	Wagner et al. (2006)		Bez dokumentace, částečně německy
BRGM	SANDRE	French Water Information System		www.sandre.eaufrance.fr	Jen ve francouzštině	
	HydrIS		hydrogeologie	Není dostupné na internetu	Oulidi et al. (2009)	
	Environmental Database Model (EnviroDB)			http://envirodb.codeplex.com	Implementován v ADO.Net – není pro všechny typy dat.	Nedůvěryhodná iniciativa, za kterou nestojí nikdo významný.

Dále se standardy pro tvorbu hydrogeologické mapy zabývá kniha v němčině (Plum 2011).

3.2.2.1 Řízené slovníky

Data jsou specifikovaná nejen na úrovni datového modelu (např. název sloupce v tabulce relační databáze), ale také na úrovni řízených slovníků (číselníky, kódovníky, tezaury; angl.: *vocabulary, dictionary, lookup tables, values, enumerations, domain*). Pro využití v českém prostředí je třeba mít české ekvivalenty. České řízené slovníky vznikají v rámci INSPIRE a navazujících iniciativ. Např. GEMET (2010) však kolektor nazývá vodonosnou vrstvou, což není termín využívaný odbornou veřejností. Asi nejvýznamnější EDMS (EQUIS) kupříkladu číselníky systematicky vyplněné nemá, jen jsou uvedena jednoduchá data pro vzorovou lokalitu. V oblasti hydrologie existuje slovník vytvářený komunitou (Horsburgh et al. 2014). Proto v rámci předkládané práce byly na základě české terminologie (Labsys-tém, karotáž AQUATEST a.s., zdroje dat atd.) vytvořeny číselník veličin, další číselníky, kódovníky a řízené slovníky, jež jsou v příloze C na přiloženém CD.

3.2.3 Software pro geologickou vizualizaci a modelování

Existují různé počítačové programy (tabulka 13) pro vizualizaci geologických dat – geologické strukturní modelování (geologické profily vrtu, geologické řezy a 3D geologické modely). Tyto systémy vizualizují data z databáze s vlastním datovým modelem. Bylo by proto možné jejich datový model využít jako základ datového modelu HgIS.

V podstatě každý relevantní EDMS je schopen alespoň částečně zobrazovat geologická data. Některé EDMS jsou však vyvíjeny jako integrované prostředí nejen pro správu dat, ale také pro jejich zobrazení a zpracování (reporty, grafy, mapy, geologické modely, analýzy). U takových systémů pak často není uvedeno, zda vůbec mají možnost exportovat data do systémů třetích stran. Takovým silným nástrojem je např. Oasis-montaj. Mnohé programy pro vizualizaci geologie a geologické modelování jsou určeny pro obory geofyzika, strukturní geologie (*solid Earth*) a těžba nerostných surovin (zejména ropy a zemního plynu). Pro takové aplikace je třeba velmi dobře rozumět komplexní geologické struktuře. Ceny těchto produktů jsou značně vysoké. Takové programy však často nezobrazují dynamická (vs. statická) environmentální data (např. časově proměnné veličiny v grafech a tabulkách lokalizovaných v mapě – tzv. kartodiagramy) nebo jsou to data týkající se specificky konkrétní oblasti (ropa a zemní plyn).

Pro běžné potřeby hydrogeologa, který vytváří koncepční model lokality, stačí jednodušší zpracování geologických dat (geologické profily vrtů a jednoduché geologické řezy). Je však třeba integrovat data o geologii s dynamickými daty o časovém průběhu např. hladin a chemických parametrů ve formě lokalizovaných tabulek, grafů (kartodiagramů) a izolinií. Takovou kombinaci přináší EnviroInsite, Rock-Works a HydroGeoAnalyst. Ostatní nástroje (podle dostupné dokumentace) se z pohledu běžné hydrogeologie místo jednoduchého integrovaného pohledu na data příliš zaměřují na 3D vizualizaci. Geologickým modelováním se částečně zabýval ve své disertační práci Sedlák (2007). Zkušenosti geologických služeb různých zemí přináší Berg et al. (2011). Kondrová (2014, 2015) navrhla datový model pro 3D modely v ČGS.

Tabulka 13: Software pro geologické modelování

Původce	Název	Aplikační oblast, funkcionality	URL, zdroj	Technologie	Cena (USD)	Hodnocení, poznámka
EI LLC	EnviroInsite	hydrogeologie	http://www.enviroinsite.com (Tonkin a Becker 2005)	.NET	525 a méně	Zvolený produkt
RockWare, Inc.	RockWorks	geologie a životní prostředí	https://www.rockware.com/product/overview.php?id=164	Delphi?	3000	V praxi hojně využíváno
Waterloo Hydrogeologic	HydroGeo-Analyst	hydrogeologie	http://www.novamatrixgm.com/environmental-data-management-software/hydro-geoanalyst		5595	Vyhovuje, se starší verzí špatné zkušenosti
Golden Software Inc.	Strater	profily vrtu, geologické řezy	http://www.goldensoftware.com/products/strater		449	Nikoliv 3D modely (Voxler)
C Tech Development Corporation	EVS-Pro	geologie a životní prostředí	http://www.ctech.com/?page=evs	Vývoj ukončen, nahrazeno Earth Volumetric Studio		EVS = Environmental visualization system
ARANZ Geo	Leapfrog Hydro	hydrogeologie	http://www.leapfrog3d.com			Rozhraní do MODFLOW + FEFLOW
BRGM (Francouzská geol. služba)	GDM	geologie a životní prostředí	http://www.brgm.eu/scientific-output/scientific-software/gdm-2014-multipurpose-software-suite-geologists	.NET	5000 €	Podpora GeoSciML
Queensland University of Technology	Groundwater Visualisation System (GVS)	geologie + grafy	https://www.qut.edu.au/research/research-projects/groundwater-systems-research (Cox et al. 2013)		na vyžádání	
Ing. Martin Kulhavý	GeProDo	geologie, geotechnika	http://www.geprodo.wz.cz	AutoCAD	od 13 000 Kč	
Česká geologická služba	Geo3D Visualization	vrtu, inklinometry, karotáž	Jelének et al. (2014)	C#, ArcObjects SDK for .NET, ArcScene	–	Bez chemie
I • GIS A/S (Dánsko)	GeoScene3D	geologie (zobrazí graf karotáže)	http://i-gis.dk/GeoScene3D/tabid/62/language/en-GB/Default.aspx		na vyžádání	
Intrepid Geophysics	GeoModeller	geologie, geofyzika	http://www.intrepid-geophysics.com/ig/index.php?page=geomodeller			
GEON	Integrated Data	geologie	http://www.geongrid.org			OpenEarth Framework

Původce	Název	Aplikační oblast, funkcionality	URL, zdroj	Technologie	Cena (USD)	Hodnocení, poznámka
	Viewer					
Gocad Research Group	Gocad	geologie	http://www.gocad.org (Ross et al. 2005; Gill et al. 2011)			Francie ...
	GWVis		Best a Lewis (2010)	OpenGL, Python		není distribuováno
Virtualis + British Geological Survey	GeoVisionary	4D vizualizace a virtuální realita	http://www.virtualis.com/geovisionary		na vyžádání	
Dynamic Graphics	EarthVision	ropa a zemní plyn	http://www.dgi.com/earthvision/evmain.html			
Maptek	Vulcan	ložiska nerost. surovin	http://www.maptek.com			
Illinois State Geological Survey	Xacto X-section	geol. řez ve 3D	[Jennifer Carrell] (2011)	ArcScene, VBA	zdarma	bez chemie
FEI	Avizo	ropa a zemní plyn	http://www.fei.com/software/avizo-3d-for-digital-rock-and-core-analysis			
Carlson Software	Carlson Geology	ložiska nerost. surovin	http://www.carlsonsw.com/solutions/mining-solutions/geology			
Datamine	různé produkty	ložiska nerost. surovin	http://www.dataminesoftware.com			
Haliburton	různé produkty	ropa a zemní plyn	https://www.landmark.solutions/			
PitneyBowes Encom	Discover PA	geologie, geofyzika	http://www.pitneybowes.com/pbencom/products/geophysics/encom-pa.html			
Jason – CGG	různé produkty	ropa a zemní plyn	http://jason.cgg.com/software			
Runge Pincock Minarco	FRAC SIS	ložiska nerost. surovin	http://www.rpmglobal.com/mining-software/data-visualisation-fracsis			
ESRI	Modelling the terrain below	geologie	www.esri.com/news/arcuser/0312/modeling-the-terrain-below.html	ArcScene		
LMKR	GeoGraphix	geofyzika, ložiska n. s.	http://www.lmkr.com/geographix			
ThreeDify	GeoModeler	ložiska nerost. surovin	http://threedify.com/geological-software			
HvM (International Services)	Geo-reka	geologie	http://www.geo-reka.com			
Baker Hughes	různé produkty	ropa a zemní plyn aj.	http://www.bakerhughes.com			
Micromine	různé produkty	ložiska nerost. surovin	http://www.micromine.com			
Hexagon Mining	MineSight	ložiska nerost. surovin	http://www.minesight.com			

Původce	Název	Aplikační oblast, funkcionality	URL, zdroj	Technologie	Cena (USD)	Hodnocení, poznámka
Midland Valley	MOVE	strukturní geologie	http://www.mve.com/software			
Schlumberger	Petrel	ropa a zemní plyn	http://www.software.slb.com/products/platform/pages/petrel-geology-modeling-software.aspx			
Promine	Promine	dobýv. nerost. surovin	http://www.promine.com	AutoCAD		
AGM AustinGeo	Recon	geologie	http://www.austingeo.com/			
Paradigm	SKUA-GOCAD	geologie, ropa a z. plyn	http://www.pdgm.com/products/skua-gocad/			
United Oil and Gas Consulting	SMART4D	geologie, ropa a z. plyn	http://uogc.com/smart4d			
INSIGHT Geologische Softwaresysteme	Subsurface Viewer	geologie	http://subsurfaceviewer.com			Předchůdci: AREAbas, GeoObject, GSI3D
SURPAC Surveying Software	SURPAC	ložiska nerostných surovin	http://www.surpac.co.za			
Dassault Systems	GEOVIA Surpac	ložiska nerost. surovin	http://www.geovia.com			
GEON	OEFView	geovědy	http://oef.geongrid.org/project/OEFView			

3.2.4 Hodnocení stávajících řešení

Existující sw, formáty pro výměnu a uložení dat a standardy se ukázaly jako nevhodné pro požadované praktické využití. Datové modely jsou často nedokonale dokumentované, což omezuje jejich využití v HgIS. Níže jsou stručně uvedeny problémy existujících řešení.

EDMS:

- Některé jsou technologicky zastaralé (např. MS Access jako běhové prostředí).
- Některé jsou uzavřené a neumožňují nezávislý rozvoj, některé dokonce pouze online (online aplikace jako služba).
- Je třeba je upravit pro české prostředí (formáty pro import a export vč. ohlašovacích povinností, lokalizace, legislativní limity atd.).

Standardy, datové modely:

- Standardů je mnoho a mění se.
- Neobsahují šíři dat. Pro vytvoření struktury pro všechny typy dat by bylo třeba zkombinovat různé standardy, a výsledek by tedy byl nestandardní. Ty relativně úplné (GML, INSPIRE) jsou nepřiměřeně komplexní a zaměřené pro jiný účel (mezinárodní výměna dat mezi velkými organizacemi).
- Jejich efektivní využití vyžaduje EDMS. Existující EDMS však většinou nepodporují mezinárodní standardy.

Všechny uvedené EDMS a standardy byly excerpovány a znalosti byly využity pro tvorbu vlastního datového modelu (kapitola 3.6.2.2). Navíc byla excerpována i data a datové formáty, s nimiž se autor setkal a jež má k dispozici.

3.3 Požadavky na systém z hlediska architektury

Stávající EDMS nesplňují následující požadavky, které jsou zároveň požadavky na HgIS:

- Zahrnutí všech dat při zachování jednoduchosti struktury datového úložiště.
- Struktura i pro doposud neznámé veličiny (*data agnostic*).
- Škálovatelnost (lokální i serverové nasazení, paralelizace transformací, *big data*).
- Otevřené, snadno rozšiřitelné, udržitelné.
- Využití open source (FOSS) či cenově dostupného sw (to však pouze tak, aby právy třetích stran nebylo zatíženo jádro systému). HgIS tak je možno nasadit bez dalších licenčních nákladů pro další účely a organizace. Specializované úlohy mohou provádět komerční programy, na nichž však jádro HgIS nesmí být závislé.
- Přenositelnost – využitelnost v rámci jiných IS, nezávislost na grafickém uživatelském prostředí (GUI).
- Nezávislost na konkrétním DBMS (*database agnostic*).
- Umožňovat (či alespoň nevhodnou architekturou IS nekomplikovat) automatizované zpracování dat včetně operací s prostorovými daty (nejen body).
- Rozvoj může provádět pokročilý zaškolený uživatel (hydrogeolog, „*power user*“).
- Snadná implementace systému včasného varování a automatických hlášení.
- Snadné propojení s nástroji pro data mining.
- Snadná tvorba exportu do specializovaného modelovacího sw či implementace speciální analýzy.

3.4 Typy informačních systémů

Volba architektury a komponent IS závisí na pojetí úlohy. Pokud budeme považovat za nejdůležitější požadavky na IS správu prostorových dat a zobrazování dat v mapách, zvolíme pravděpodobně geografický informační systém (GIS). Pokud požadavky zformulujeme jako správu dat, bude klíčovou komponentou databáze (DBMS, OLTP). Pokud chápeme jako klíčovou interakci s uživatelem, snadnou editaci a dostupnost přes internet, budeme se soustředit na vývoj GUI či online aplikace. Pokud však zadání chápeme jako načítání archivních i aktuálních dat z rozmanitých (strukturovaných i semistrukturovaných) zdrojů, které se již dále nemění; zobrazení dat v tabulkách a grafech (včetně možnosti stažení v běžně užívaných formátech – MS Word a MS Excel), analýzu dat a tvorbu modelů; tak se jedná o typické zadání pro řešení BI. Podrobně o BI pojednává kapitola 3.5 a o jeho některých komponentách kapitoly 3.6.3 (ETL) a 3.6.4 (*reporting*). Srovnání uvedených IS uvádí tabulka 14.

Tabulka 14: Typy IS souvisejících s problematikou správy dat o životním prostředí

Typ IS – zkratka, anglicky, česky			Účel
GIS	<i>Geographic information system</i>	Geografický informační systém	Prostorová data
BI	<i>Business intelligence</i>		Podpora rozhodování na základě dat o vlastní organizaci
ERP	<i>Enterprise resource planning</i>	Plánování podnikových zdrojů	Správa provozních agend organizace
EDMS	<i>Environmental data management software</i>	Software pro správu dat o životním prostředí	Sběr, správa, zobrazení dat a zajištění interoperability s aplikačním sw
LIMS	<i>Laboratory information management system</i>		Správa analýz v laboratoři
	<i>Expert system</i>	Expertní systém	Pokouší se nahradit práci experta
DSS	<i>Decision support system</i>	Systém pro podporu rozhodování	Podpora rozhodování
SDSS	<i>Spatial decision support system</i>		Podpora rozhodování s využitím prostorových dat

Klíčovou komponentou HgIS je datová pumpa (ETL) a databáze (datový sklad, OLAP). Transakční databáze (OLTP) je vhodná pro LIMS či provozní IS (úprava dat z hladinoměřů či výpočet průtoků z hladin atd.). HgIS může snadno integrovat data ze všech takových zdrojů. Rozdíl mezi OLAP a OLTP – viz tabulka 17.

HgIS kombinuje nástroje BI a GIS. HgIS pracuje především s bodovými objekty (vrty, studny) a prostorovou operací je v současnosti v podstatě pouze převod souřadnicových systémů. Využití jiných komponent GIS než online mapové aplikace je proto minimalistické. Využití komponent BI v HgIS je uvedeno níže (tabulka 15).

Tabulka 15: Běžné komponenty GIS

Komponenta	Účel	Využito v HgIS
Prostorová databáze	Úložiště	Částečně (datový model HgIS není založen na standardu prostorových dat)
Online aplikace	Lehký klient	Ano
Desktop GIS	Těžký klient	Částečně (editace dat v PostGIS)
Mapový server	Server	Částečně (jen zobrazení podkladových map)
Prostorový ETL	Načítání dat	Částečně (běžně se využije jen převod souřadnic)

Na rozdíl od běžných úloh BI pracuje HgIS s malým množstvím dat, a proto komponenty jako DSA, ODS nejsou potřeba. Databáze HgIS plní z důvodu malého množství dat funkci datového skladu i OLAP kostky. Využití komponent BI v HgIS je uvedeno níže (tabulka 16). BI podrobněji rozebírá kapitola 3.5.

Tabulka 16: Komponenty BI

Komponenta	Anglicky	Účel	Využito v HgIS
Produkční (zdrojové) systémy	OLTP, <i>legacy</i>	Zdroj dat	Geofond, Lab-systém, Geobanka
Dočasné úložiště dat	DSA: <i>Data staging area</i>	Dočasné uložení extrahovaných dat	Ne (málo dat)
Operativní úložiště dat	ODS: <i>Operational data store</i>	Operativní úložiště pro analýzy	Ne (málo dat)
Datová pumpa	ETL: <i>Extract, transform and load</i>	Integrace dat	Ano: PDI
Integrační nástroje	EAI: <i>Enterprise Application Integration</i>	Integrovat primární podnikové systémy	Ne (nevyužíváme primární systémy)
Datový sklad	DWH: <i>Data warehouse</i>	Hlavní úložiště dat	Ano: PostgreSQL
Datové tržiště	<i>Data mart</i>	Problémově orientovaný DWH	Ne
Datová kostka	OLAP cube: <i>On-line Analytical Processing Cube</i>	Uložení dat pro analýzy	V HgIS dostačuje DWH
Tiskové sestavy	<i>Reporting</i>	Jednouúčelové zobrazení dat určené k tisku	Ano: Pentaho Reporting
Pracovní panely	<i>Dashboards, scorecard</i>	Přehledné a interaktivní zobrazení dat	Zatím ne (Pentaho Business Analytics)
Dolování dat	Data mining		Weka – zatím ne
Nástroje pro zajištění kvality dat			V omezené míře při načítání dat (PDI)
Nástroje pro správu metadat			Zatím ne – rozpracováno

Česká terminologie BI vychází z dostupné literatury (Novotný et al. 2005; Pour et al. 2012).

Tabulka 17: Hlavní rozdíly mezi OLTP a OLAP. Zdroj: mj. Bouilil et al. (2014), Malinowski a Zimányi (2008)

	OLTP	DWH/OLAP
Příklad	SAP, Karát, Vema, Labsystém, STAG	BI – běžný uživatel se s nimi setká zřídka
Účel	Podpora provozních úloh	Podpora rozhodování
Uživatelé	Mnoho (zaměstnanci provozu)	Méně (analytik, manažer)
Využívání	Často a pravidelně	Nárazově
Data	Malé množství detailních a aktuálních dat	Velké množství detailních i souhrnných (agregovaných) dat včetně historických
Datový model	Normalizovaný – více tabulek, neumožňuje redundanci dat	Denormalizovaný – méně tabulek, optimalizováno pro analytické úlohy (např. <i>star</i> , <i>snowflake</i> či <i>constellation schema</i>)
Operace s daty	Všechny operace (číst, přidávat, editovat, mazat)	V podstatě jen číst a přidávat
Aktualizace dat	Okamžitě – přímo uživatelem	Periodicky – dávkově (ETL)
Dotazy	Přístup k malému množství záznamů (stovky)	Přístup k velkému množství záznamů (milióny)
Zálohování	Pravidelně	Nemusí být třeba – data je možno znovu načíst ze zdrojových systémů

3.5 Business intelligence

Problematika správy dat, vizualizace, analýz a modelování podzemní vody je v mnoha ohledech podobná business intelligence (BI). BI je soubor dovedností, znalostí, technologií, aplikací a postupů používaných v podnikání pro získání lepšího pochopení fungování obchodní společnosti pro potřeby manažerského rozhodování. Za tímto účelem provádí sběr, integraci, analýzu, interpretaci a prezentaci firemních dat. Dalšími definicemi jsou: „Sada konceptů a metod určených pro zkvalitnění rozhodování firmy.“ „Kategorie aplikací a technologií pro sběr, skladování, analyzování a zpřístupňování dat, jejichž účelem je pomoci podnikovým uživatelům dělat lepší rozhodnutí.“ „Znalosti o podniku získané za pomoci rozličných hardwarových a sw technologií, které umožňují organizaci přeměnit data na informace.“ (Novotný et al. 2005, s. 18). Běžné funkce aplikací BI zahrnují ETL, uložení všech dat v datovém skladu (*data warehouse*), OLAP (*OnLine Analytical Processing*), reporting, přehledové zobrazení (*dashboard*), analýzy a dolování dat (*data mining*) či automatizovaná hlášení (alerts). Významnou roli hraje zpracování semistrukturovaných dat. S geodaty pracuje *geospatial BI* čili GeoBI (Badard et al. 2012). Obdobné pojmy jsou *location intelligence* a *spatial intelligence*.

Cílem předkládané práce bylo získat (často semistrukturovaná) data, uložit je do jedné databáze a využít je pro reporty, analýzy a modely. Technicky se tedy jedná o podobnou úlohu, kterou řeší BI (DWH). Metodika a především nástroje jsou do jisté míry přenositelné. Naše problematika se týká prostorových dat (řešeny GeoBI) a geologických dat (BI systémy se geologií nezabývají). Nebyla nalezena práce, která by využívala nástroje BI v hydrogeologii.

Pro BI byly vytvořeny sady nástrojů (*BI tools*). Pentaho (community.pentaho.com) je aktivně vyvíjený FOSS s permissivní licencí. Odvozená verze (*fork*) těchto produktů – např. GeoKettle (Spatialytics 2013) – pracují s prostorovými daty a vyvíjí je firma Spatialytics. Platforma Pentaho obsahuje mj. datovou pumpu (ETL) Kettle (čili Pentaho Data Integration – PDI – dále v kapitole 3.6.3.1), nástroj Weka (Witten et al. 2011) pro dobývání znalostí z databází (*data mining*) a Pentaho Report

Designer (Mattio a Bernabeu 2013) pro návrh reportů, jež poté mohou být zobrazovány na aplikačním serveru PBA (Pentaho Business Analytics Platform – dříve BI Server). Na PBA lze také vytvářet a spouštět přehledová zobrazení (*dashboard*) a je možné je integrovat do dalších aplikací. Součástí PBA je aplikační server Apache Tomcat. Datový model lze při tvorbě reportů lokalizovat pomocí Pentaho Metadata Editor – vytvoří se abstraktní vrstva nad datovým modelem a zjednodušuje se tak tvorba tiskových sestav a přehledových zobrazení.

Alternativou k platformě Pentaho je například SpagoBI: <http://spagobi.org> (Cazzin a SpagoBI Core Team 2012). Na rozdíl od Pentaho se jedná o FOSS, který nemá samostatnou komerční verzi. Umožňuje mapové zobrazení. Co se týče ETL, není SpagoBI integrováno s PDI, ale s Talend Open Studio for Data Integration. SpagoBI používá pro tvorbu reportů mezi jinými i silný nástroj BIRT (eclipse.org/birt). Srovnání těchto FOSS BI reportingových nástrojů je uvedeno v diplomových pracích z VŠE (Filipčík 2013; Bednář 2013). GeoBI se zabývá diplomová práce (Sommer 2013). Nástroje pro tvorbu reportů běžně neumožňují standardně zobrazování map, ale u SpagoBI je možné zobrazování dat v mapě přímo v online prostředí v rámci vizualizace ad hoc, mj. včetně integrace služeb WMS či WFS.

Existuje samozřejmě mnoho alternativ k FOSS Pentaho a SpagoBI. Jednou z komerčních jsou například hojně užívané nástroje od firmy Microsoft.








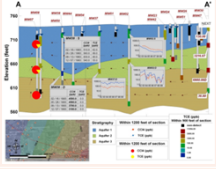

V HGIS jsou využívány některé nástroje Pentaho. Důvodem volby je:

- dobrá integrace jednotlivých komponent,
- dostatečná funkcionality již v komunitní (FOSS) verzi,
- existence verze ETL pro práci s prostorovými daty (GeoKettle) a
- uživatelská přívětivost GUI.

3.6 Návrh informačního systému HgIS

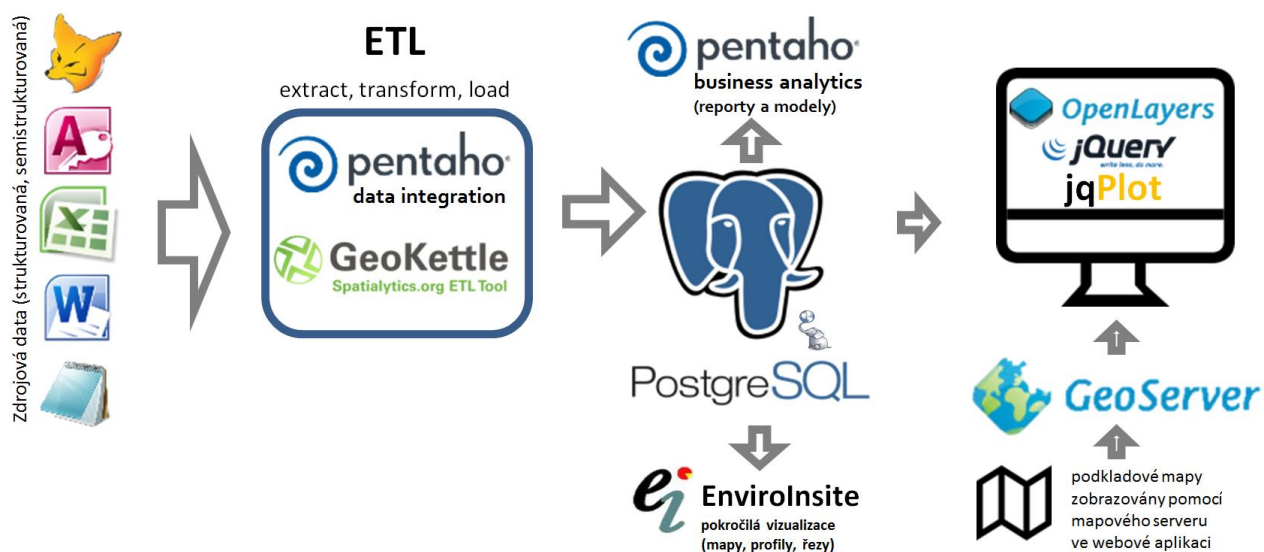
V této kapitole se podrobně rozebírá volba komponent HgIS.

Klíčovou komponentou HgIS je databáze (datový sklad), která slouží k uložení strukturovaných dat. Data jsou načítána ze zdrojových souborů pomocí datové pumpy (ETL) PDI a případně GeoKettle. Data jsou zobrazována v reportech na BI serveru (PBA) a interaktivně v mapové online aplikaci (mapy, grafy, tabulky). Mapové poklady mohou být využity mj. v online aplikaci díky mapovému serveru. Další zobrazení je možno provádět pomocí exportu do specializovaného sw (3D program pro zobrazování environmentálních dat EnviroInsite). Celkové schéma HgIS je uvedeno níže (obrázek 19 a tabulka 18).

Požadavky	Naplnění	Technické detaily
Načítání a export dat	Datová pumpa (ETL)	PDI – Kettle 
Uložení dat	Vlastní datový model	PostgreSQL  + PostGIS 
Prezentace dat	Webová aplikace	 OpenLayers + tabulky a grafy
	Podkladové mapy	Mapový server  GeoServer
	Dashboardy, reporty, výpočty, analytické modely	 pentaho Business Analytics Platform
	Specifické pro hydrogeologická data (profily, řezy, geochemické interpretační diagramy, kombinace map, tabulek a grafů)	EnviroInsite  
Prostorové analýzy	Spatial ETL	 GeoKettle Spatialytics.org ETL Tool

Tabulka 18: Komponenty HgIS

HgIS využívá především komponenty BI (platforma Pentaho) a GIS (PostGIS a GeoServer jsou produkty firmy Refrations Research).



Obrázek 19: Schéma architektury HgIS

3.6.1 Geologická vizualizace – EnviroInsite

Pro pokročilou vizualizaci hydrogeologických dat (která je velmi užitečná pro tvorbu koncepčního modelu) byl zvolen sw EnviroInsite (Jacobs 2016). Jedná se o cenově dostupný komerční program implementovaný v .NET. Export do EnviroInsite podporují EDMS EQUIS, Enviro Data a EPIPHINY. Vyvíjí jej firma EI LLC. Reálně se jedná o jednu osobu (Bruce Jacobs), která zajišťuje vývoj, podporu a částečně prodej. Software je velmi flexibilní a dokáže zobrazovat veškerá hydrogeologická data. Práce s ním je intuitivní. Jeho cílem je, aby potřebnou vizualizaci dat mohl běžně provádět sám hydrogeolog a nepotřeboval k tomu specialistu GIS. Program zobrazuje data z databáze s danou strukturou. Databáze může být implementována v programu MS Access či MS Excel. Software zobrazuje dokumentaci jednotlivých vrtů, geologické řezy, 3D vizualizaci geologie, mapy, chemické interpretační grafy (Piper, Stiff, Schoeller) umístěné na mapě nebo na samostatném listu. Obdobně zobrazuje souhrnné i detailní tabulky; grafy a tabulky časových řad. Software interpoluje data ve 2D i 3D a je možno do něj načíst běžné formáty podkladových map (ESRI SHP, DXF, DWG, DGN, rastrové obrázky – *world file*). EnviroInsite exportuje georeferencované vektory (DXF, DWG, ESRI SHP) i rastry (*world file*). Na webových stránkách www.enviroinsite.com jsou screenshoty a videotutoriály. Výstup z programu ukazuje obrázek 17 a zpráva v souboru 2_5 Transp_chlor_uhlovod_advekcni_a_bilancni.pdf v příloze B na přiloženém CD.

Alternativou by byl například HydroGeoAnalyst či RockWorks (tabulka 13), který je dražší (3000 USD) a má výhody (více funkcí, podpora puklin, zlomů) i nevýhody (méně intuitivní uživatelské prostředí). EnviroInsite může být snáze použit na uživatelských stanicích, kde může sloužit pro zcela flexibilní zobrazování hydrogeologických dat koncovým uživatelem. RockWorks má na druhou stranu funkce, jež by mohly být využity specialistou např. komplexnější geologické modelování.

3.6.2 Databáze

Datový model HgIS vychází z datového modelu programu EnviroInsite, který je proto níže stručně popsán. To umožnilo jednoduše vyvinout export dat pro zobrazení v EnviroInsite. Navíc struktura souborů pro načítání dat a celková logika dat zůstává stejná. Nejlepším alternativním datovým modelem, z něhož by bylo možno vyjít, je datový model EDMS SiteFX, který lze zdarma používat a šířit. Autor předkládané práce se o něm dozvěděl až po sestavení datového modelu založeném na EnviroInsite. Datový model SiteFX je dokumentován pouze částečně, takže zůstává rozumnou volbou pro vývojáře dalších EDMS, ale jeho nevyužití nebylo na škodu.

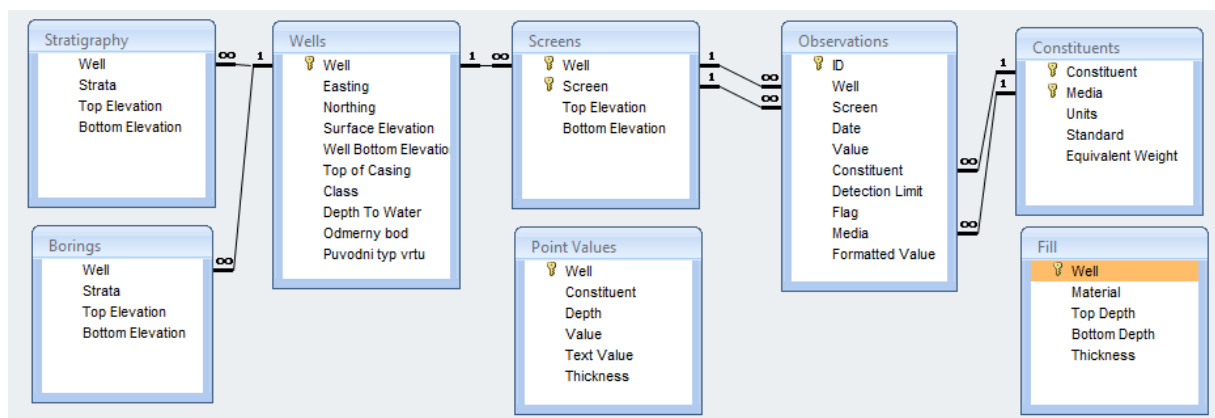
V HgIS je využíván DBMS PostgreSQL (Hsu a Obe 2012), protože má prostorové rozšíření PostGIS a jedná se o silný FOSS vyvíjený komunitou. Pro administraci databáze je používán phpPgAdmin (phpPgAdmin.sourceforge.net – webová aplikace napsaná v PHP, jež slouží ke správě databázového serveru PostgreSQL).

3.6.2.1 Datový model EnviroInsite

Datový model EnviroInsite obsahuje data o objektech (vrty, studny), a to geologický popis, stratigrafii a technické provedení vrtů. Dále obsahuje pozorování veličin (např. analytů) v hloubkových intervalech (např. perforace vrtu či interval odběru zeminy) a bodech v hloubce (např. karotáž). Databáze implementovaná v MS Excel či MS Access musí obsahovat následující strukturu odpovídající relační databázi, aby program EnviroInsite mohl uložená data zobrazovat (tabulka 19, obrázek 20). Některé sloupce nejsou povinné. EnviroInsite může zobrazovat v dokumentaci vrtu (vrtném profilu) data z uživatelem definovaných polí. EnviroInsite umožňuje, aby soubor obsahoval další tabulky a sloupce. EnviroInsite přistupuje k datům přes ODBC.

Tabulka 19: Popis tabulek původního datového modelu EnviroInsite

Tabulka	Popis
Wells	Identifikace objektů (zejm. vrtů) – jejich souřadnice a další údaje
Borings	Popis geologických vrstev
Stratigraphy	Vymezení geologických vrstev a hydrostratigrafických jednotek pro vytvoření řezů a 3D geologických modelů
Well Construction	Výstroj vrtu (např. plná a perforovaná pažnice)
Fill	Obsyp a těsnění vrtu
Screens	Vzorkovaný hloubkový interval (otevřený úsek vrtu či hloubka odběru zeminy)
Constituents	Kódovník měřených veličin (např. pH, chloridy, úhrn měsíčních srážek)
Observations	Jednotlivá měření vázaná ke vzorkovanému hloubkovému intervalu (tj. např. hodnoty hladiny podzemní vody či pH)
Point Values	Jednotlivá měření vázaná ke konkrétní hloubce ve vrtu (tj. např. karotáž)



Obrázek 20: Původní datový model EnviroInsite

3.6.2.2 Datový model HgIS

Datový model EnviroInsite definuje pole, která je třeba zadat pro zobrazení v EnviroInsite. Pro uložení všech dat, s nimiž HgIS pracuje, byl datový model EnviroInsite rozšířen tak, aby umožnil uložení popisných dat o sondách (vrty), podmínkách vzorkování podzemní vody a časových intervalech. Dále aby obsahoval zejména číselníky, kódovníky a pomocná data pro načítání dat do systému, pro převod jednotek a veličin a pro přejmenování. Datový model HgIS existuje ve dvou verzích. Jejich podrobná dokumentace je v příloze C na přiloženém CD.

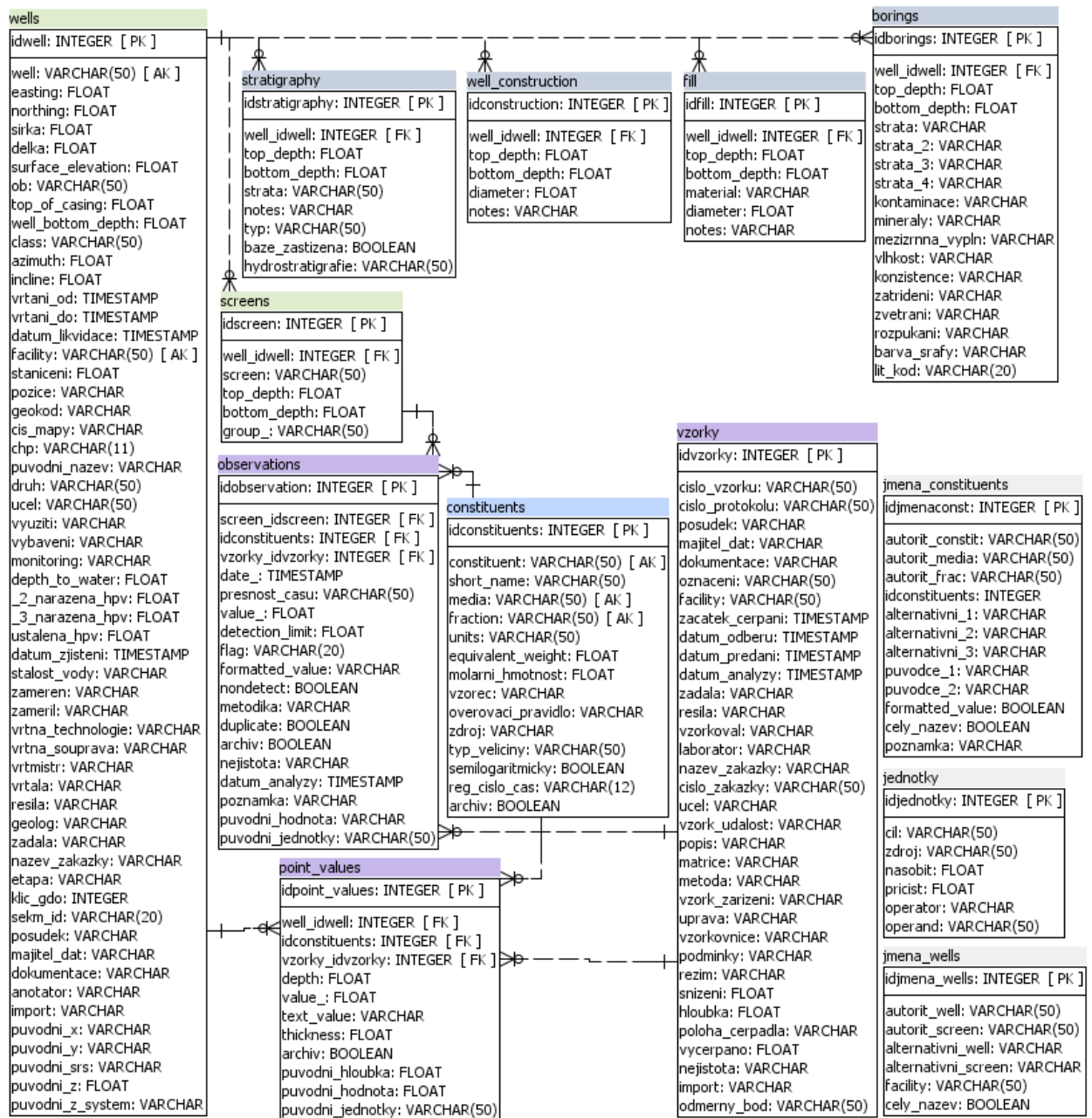
1. První verze slouží jako výměnný formát a je málo normalizovaná. Obsahuje vícepoložkové (složené) primární klíče (*composite primary keys*), které mají význam v reálném světě (název vrtu, název veličiny atd) – tzv. přirozené klíče (*natural keys*). Pro návrh byl použit MS Access z důvodu zpětné kompatibility s EnviroInsite.
2. Druhá verze slouží pro nasazení na serverové databázi a je více normalizovaná (obrázek 21, obrázek 22 a tabulka 20). Obsahuje umělé klíče (*surrogate keys, ID*), z tabulky constituents je vyčleněna tabulka standards a obsahuje číselníky kvalita a well_construction_material. Navíc obsahuje další tabulky pro data (sestavy analýz, plán vzorkování), metadata (obecná struktura pro zaznamenání interpretací k uloženým datům) a lokalizaci, které budou moci být v budoucnosti případně využity v HgIS. Pro návrh byl použit FOSS nástroj SQL Power Architect

(sqlpower.ca). Struktura databáze odpovídá do jisté míry datovému skladu ve schématu sněhové vločky (*snowflake*) či souhvězdí (*fact constellation*), kde tabulky *observations* a *point_values* hrají roli faktových tabulek a například *screens* a *constituents* roli dimenzí (*observations.date_* je pak degenerovaná dimenze). Velký počet atributů (denormalizace) např. v tabulkách *well* či vzorky a málo číselníků odpovídá běžné struktuře datových skladů. To odpovídá koncepci HgIS, protože taková struktura je vhodná pro analýzy, resp. reporting a nikoliv pro editaci dat více uživateli s udržení konzistence všech dat, jak je tomu v případě transakčních databází (OLTP).

Názvy některých tabulek a sloupců jsou anglicky z důvodu konzistence s datovým modelem *EnviroInsite* a na něm založeným výměnným formátem. Názvy týkající se hydrogeologie apod. jsou v češtině z důvodu jednoznačnosti popisu. V dokumentaci jsou uvedeny alternativní anglické názvy a terminologie využívaná mezinárodními standardy. Datový model byl vytvořen tak, aby maximálně využíval přístupy, pojmy atd. existujících standardů, EDMS a výměnných formátů a umožňoval uložení všech relevantních dat. Splňuje tak požadavky na HgIS (kapitola 3.1 a 3.3).

Tabulka 20: Popis důležitých tabulek databáze HgIS (datový sklad), jež nejsou v datovém modelu *EnviroInsite*

Tabulka	Popis
standards	Hodnoty pro srovnání (sanační limit, limit pro pitnou vodu atd.)
vzorky	Popisná data pro soubor měření (vzorek, jedno karotážní měření) – např. metodika odběru či nakládání se vzorkem.
jednotky	Pro převod jednotek při importu i exportu (přičítání konstanty, násobení konstantou, násobení molární hmotností atd.).
objekty	Orientační definice druhů pozorovacích objektů (např. sanační vrt, důlní dešť, lysimetr). Nezaručuje referenční integritu.
validace	Číselník pro popis stupně validace či chyby (např. nekonzistentní v časové řadě či v geologickém řezu, přirozená anomálie).
obdobi	Obecné časové úseky (etapy) pro časové grafy, Ganttovy diagramy atd.
metody	Popis metod (např. standardní operační postupy; subdodávka, výpočet).
prevodcc	Převod mezi jednotlivými veličinami (např. převod dusičnanového dusíku na dusičnany či hladiny pod terénem na hladinu v m n.m.).
jmena_constituents	Nahrazování textových řetězců při importu – jednoznačné názvy veličin.
jmena_wells	Nahrazování textových řetězců při importu – jednoznačné názvy objektů.



Obrázek 21: Návrh databáze HgIS (datový sklad) – vybrané tabulky

(geo)prostorové databáze, protože je určen zejména pro správu bodových dat (vč. vrtů), nikoliv např. polylinií a polygonů, jež jsou do značné míry prostorovou interpretací bodových měření.

Existují různé standardy (geo)prostorových databází. Kromě proprietárních (např. ESRI) je to mezinárodní standard vyvíjený Open Geospatial Consortium (ISO 19125-2:2004 Geographic information – Simple feature access). Norma definující jazyk SQL (ISO/IEC 9075) je doplněna normou ISO/IEC 13249 SQL Multimedia and Application Packages, jejíž třetí část obsahuje specifikace práce s prostorovými daty ISO/IEC 13249-3 (2011). Využívání těchto standardů umožňuje snadněji provádět (např. pomocí dotazu SQL) prostorové úlohy jako je například nalezení vrtů ve vzdálenosti 50 m od vodního toku s uvedením obce – kde vstupem byly souřadnice vrtů a prostorový rozsah vodního toku a obcí.

Různé SŘBD implementují uvedené normy v různém rozsahu. Z FOSS je nejstarší, nejpokročilejší a nejpodporovanější PostGIS – postgis.net (Obe a Hsu 2011) – prostorové rozšíření databáze PostgreSQL. PostGIS je také (na rozdíl od např. MySQL) podporován ArcGIS od ESRI. V HgIS je využíván PostGIS (v odděleném schématu) bez jinak striktně definovaného datového modelu. Pro tvorbu a editaci dat v prostorové databázi je možno využívat desktop GIS. Existuje velké množství FOSS GIS (Steiniger a Hunter 2013), přičemž z desktopových GIS nejlépe odpovídá potřebám HgIS asi QGIS (qgis.org).

3.6.3 Datová pumpa (ETL)

Pro načtení rozmanitých strukturovaných i semistrukturovaných dat je možno použít nástroje ETL (*Extract, Transform, Load*). *Extract* neboli extrakce znamená získání dat ze zdrojů. *Transform* (česky transformace) představuje zpracování dat, a to např. konverzi, filtrování, normalizaci, denormalizaci, matematické operace či kontrolu údajů. Třetí složkou ETL je *load*, česky naplnění. V této fázi se jedná o nahrání zpracovaných dat do cílového úložiště (soubor, databáze). (Geo)prostorový ETL čili (*geo*)spatial ETL je ETL (geo)prostorových dat. Jedná se o systémy, které umožňují pracovat systémově s prostorovými daty (geografické souřadnice) a řešit prostorové úlohy (podobně jako GIS).

3.6.3.1 Existující ETL systémy

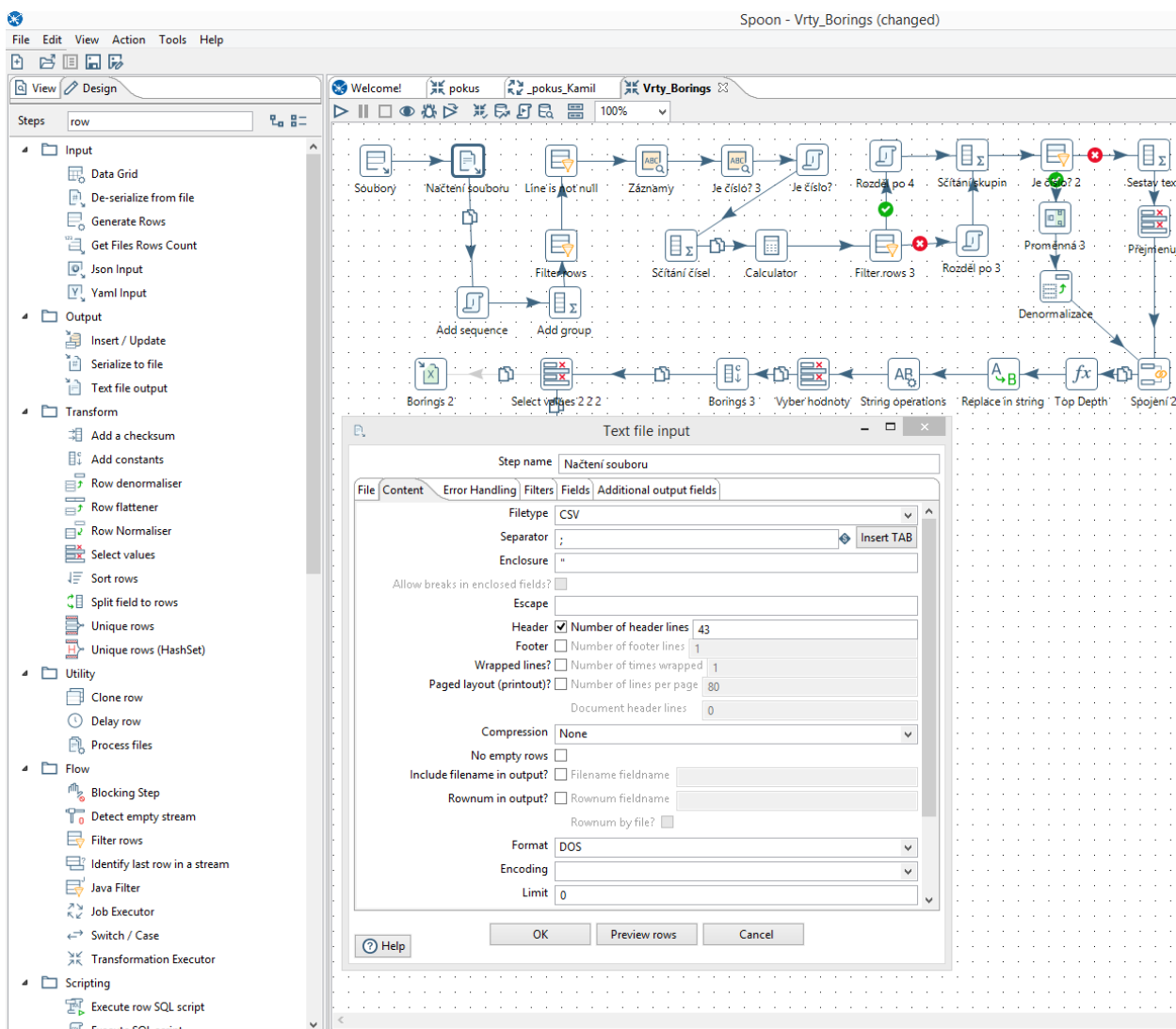
Dnes je na trhu několik desítek ETL nástrojů. Komerčním zástupcem (geo)prostorového ETL je FME od Safe Software, který je integrován do ArcGIS jako Data Interoperability. Aktuálně rozvíjenými FOSS prostorovými ETL systémy jsou aplikace od společností Pentaho a Talend (talend.com). V případě Pentaho je to produkt Pentaho Data Integration (PDI), známý též jako Kettle. Aplikace od společnosti Talend se nazývá Talend Open Studio for Data Integration. Oba nástroje mají příjemné uživatelské rozhraní, širokou uživatelskou základnu a dokumentaci. K PDI existuje verze, jež je primárně zaměřena na práci s prostorovými daty. Jedná se o nástroj GeoKettle. Aplikace Talend má ke stejným účelům volně dostupné rozšíření Spatial Data Integrator (Prunayre et al. 2014). Nejvýznamnějším rozdílem je, že PDI je interpretem procedur ETL ve XML, zatímco Talend Open Studio generuje kód v jazyce Java nebo Perl.

V HgIS je pro ETL využíván PDI kvůli přívětivějšímu uživatelskému rozhraní a modernější architektuře (Casters et al. 2010, s. xxxiii). Principy ETL a PDI velmi dobře vysvětluje kniha autora PDI (Casters et al. 2010). Dílčí specifická řešení nalezneme v knize (Pulvirenti a Roldán 2011). Další knihy od PDI nejsou pro náš účel tolik užitečné (Bouman a Dongen 2009; Roldán 2013).

V PDI existují dva typy úloh:

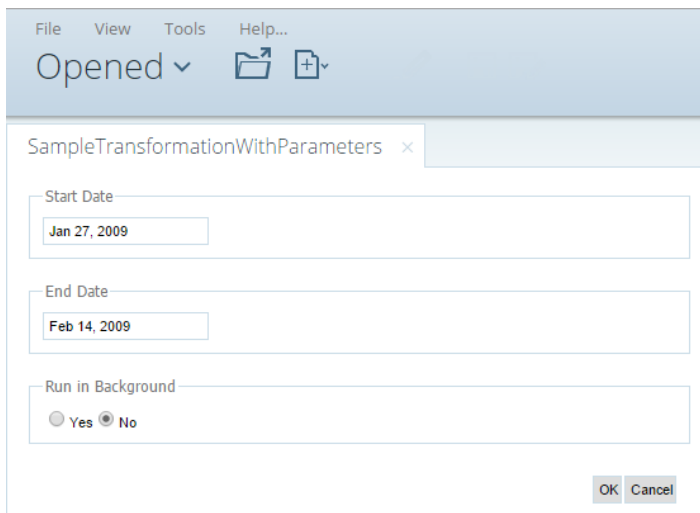
1. *transformation* (v následujícím textu transformace), představuje základní instrukce pro načtení, transformaci a uložení dat či jiný převod dat.
2. *job* je nadřazená úloha, která může obsahovat více transformací a další operace (např. odesílání e-mailů při chybě v transformaci, kopírování a kontrola souborů).

PDI obsahuje dílčí programy. Spoon (obrázek 23) je integrované prostředí pro vývoj, testování a monitorování transformací a *jobů* – využívá tzv. vizuální programování. Kitchen resp. Pan jsou určeny pro spuštění *jobů* resp. transformací z příkazové řádky (spouštění na úrovni operačního systému) a Carte je server pro spuštění *jobů* (vzdálené spuštění a paralelizace). Z hlediska praktické práce s vývojovým prostředím PDI (Spoon) hrají hlavní roli tzv. kroky, pomocí kterých se sestavují transformace. Jedná se o prvky, jež mají specifické funkce. Při tvorbě transformací uživatel využívá kroků, které spojuje šipkami (*boxes and arrows*). Ty určují směr, jakým transformace probíhá. K dispozici jsou i kroky, které umožňují použít v transformaci vlastní kód Java nebo příkaz SQL.



Obrázek 23: Uživatelské rozhraní Spoon – nabídka kroků (levý sloupec) po zadání výrazu „row“

Jádro Data Integration je obsaženo i v PBA. Uživatel PBA tak může snadno spouštět transformace či *jobs* PDI přímo či pomocí tzv. řešení (*solutions*). Řešení je sled akcí, který je definován v souboru *.xaction*. Je tak možné vytvořit například dialog pro zadání parametrů (obrázek 24), jež jsou okamžitě využity v PDI.

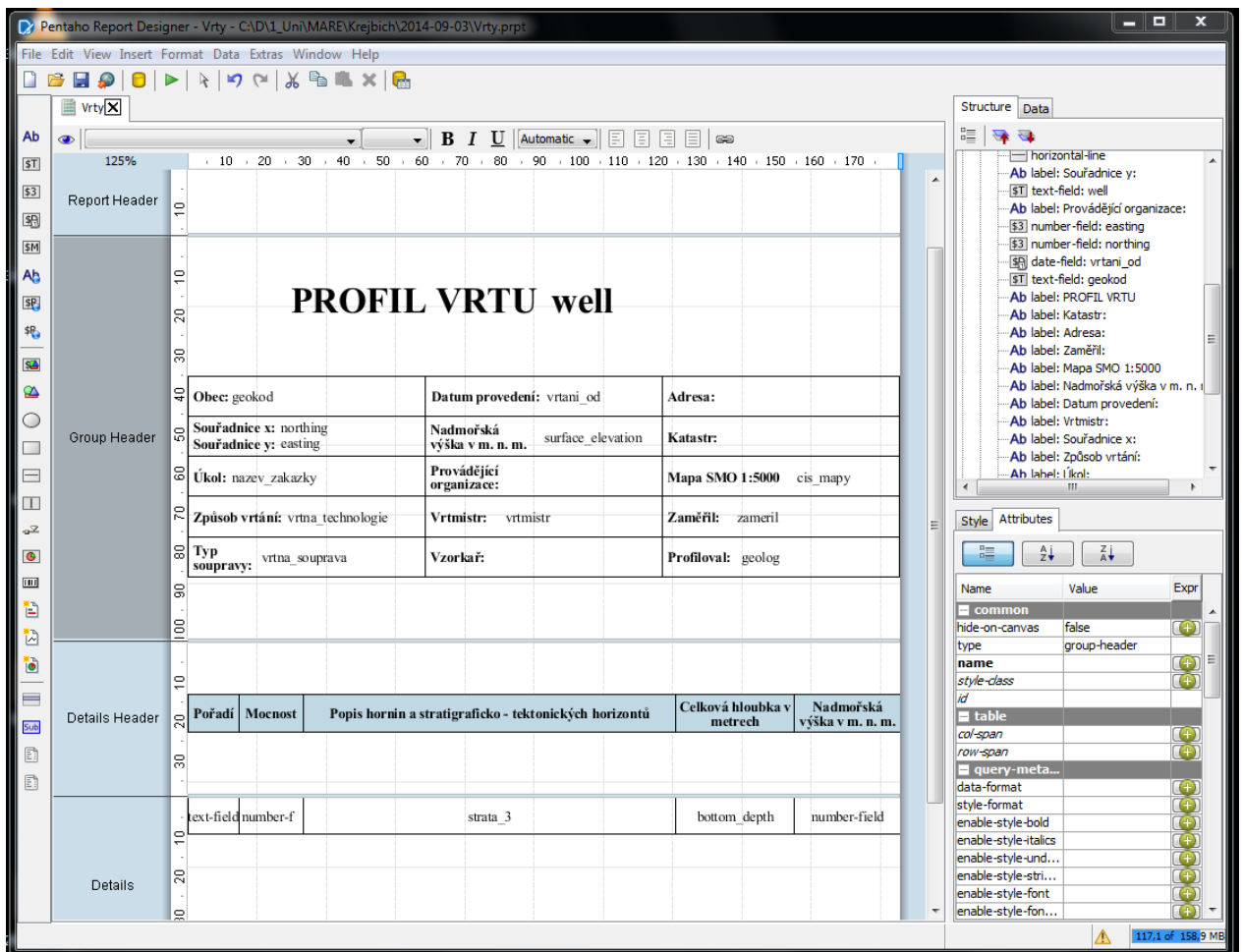


Obrázek 24: Spouštění transformací PDI v PBA za pomoci tzv. řešení

GeoKettle (Spatialytics 2013), je prostorový *fork* obecného ETL nástroje PDI (Kettle). Nevýhodou je, že aktuální verze je založena na starší verzi PDI (3.2). Další verze GeoKettle by již neměly být samostatnou aplikací, ale sadou doplňků do PDI. Využití GeoKettle je plánováno pro převody souřadnic objektů a další prostorové úlohy, které je vhodné automatizovat (např. kapitola 2.3.2). Využil jej ve svém bakalářském projektu Hadač (2014) pro převody souřadnic mezi prostorovými referenčními systémy S-JTSK a WGS 84.

3.6.4 Reporting (tiskové sestavy)

Reportingem rozumíme tiskové sestavy, analytické tabulky, grafy a přehledy realizované na základě dotazů do databází (Pour et al. 2012). Tyto sestavy je možno zobrazovat ve webovém prohlížeči i stahovat v různých formátech (PDF, RTF, MS Excel). Reporty je možno vytvářet pomocí GUI Pentaho Report Designer. Reportingové vykreslovací jádro je součástí PDI i PBA. Proto je možno zobrazovat reporty online na základě uživatelských voleb (výběr objektu, veličiny atd.) na serveru PBA a reporty v definovaných formátech je možno generovat a distribuovat pomocí PDI.



Obrázek 25: Okno Pentaho Report Designer při editaci tabulkového reportu geologického profilu vrtu

3.6.5 Mapový server

Pro publikaci prostorových dat kromě samotných bodů je možné využít mapový server. Zobrazení dat z bodových objektů (např. vrty, studny) je možné v programu EnviroInsight či ve webové aplikaci. Nejčastěji používané stabilní FOSS mapové servery jsou MapServer (také UMN MapServer, mapserver.org) a GeoServer – geoserver.org (Iacovella a Youngblood 2013). Výhodou MapServeru je, že podporuje větší množství formátů zdrojových dat a je vhodný pro začlenění do komplexnější infrastruktury. Výhodou GeoServeru je, že má GUI a že je napsán v programovacím jazyku Java, ve kterém je implementována i platforma Pentaho. V testovacím režimu byl nasazen GeoServer, který by měl být využíván i nadále.

Výstupy z mapového serveru mohou být publikovány pomocí standardizovaných služeb, jako jsou např. WMS (Web Map Service – obrázky), WFS (Web Feature Service – vektory), WCS (Web Coverage Service – rastry – málo podporován desktopovými GISy). Ty mohou být zobrazeny v desktopovém GISu, EnviroInsight či začleněny do webové aplikace. Publikace dat pomocí webových služeb je jednou z forem naplnění směrnice INSPIRE. Využití mapového serveru v HGIS je v současném stavu pouze okrajové.

3.7 Implementace

V této kapitole je popsáno konkrétní uplatnění výše uvedených nástrojů v HgIS. Vlastní implementace byla provedena částečně studenty TUL v rámci jejich školních prací, dohod a v rámci zakázek. Autor předkládané práce tyto dílčí úkoly navrhl, zadal a metodicky vedl.

3.7.1 Datová pumpa (ETL)

Byly vytvořeny transformace pro načítání dat do databáze. Transformace jsou rozděleny do tří na sebe navazujících skupin:

A – Převod dat ze zdrojových formátů do výměnného formátu. Jedná se konkrétně o:

- Laboratorní informační systém (LIMS) Labsystém (www.labsys.cz): sada 2 souborů DBF – vzorky a hodnoty (Krejlich 2013).
- Česká geologická služba (Geofond) – soubory MS Access (Krejlich 2013).
- Inklinometrie (textové soubory – strojově generované exporty od AZ Consult, spol. s r.o.).
- Data o chemismu z Palivového kombinátu Ústí, s. p. v Excelu (ručně vytvořené dokumenty).
- Archivní průzkumné vrty ve Wordu (2413 ks), pravděpodobně exportované ze systému Geobanka firmy Data-PC Sokolov.
- gdBase (www.gdsoftware.cz) – načítání některých polí.
- Srážky a teploty ve formě textového souboru na FTP serveru Povodí Ohře s. p. (Štírek 2014).
- Kontingenční tabulka – obecný formát.
- Data (v Excelu a v textových souborech) v různých formátech různých dodavatelů dat (hladiny, čerpání, srážky, průtoky vodních toků).

B – Úprava, čištění, validace, sjednocení užití terminologie, doplnění implicitních hodnot parametrů, výpočty veličin, agregace atd.

- Výpočet hydrochemického typu vody (např. Ca-Mg-HCO₃).
- Agregace dat (např. roční úhrn srážek z denních srážek, minimální měsíční průtok v roce atd.).

C – Načtení do databáze (datového skladu).

D – Export pro další analýzu v SW třetích stran (plánované exporty jsou v kapitole 3.9.1):

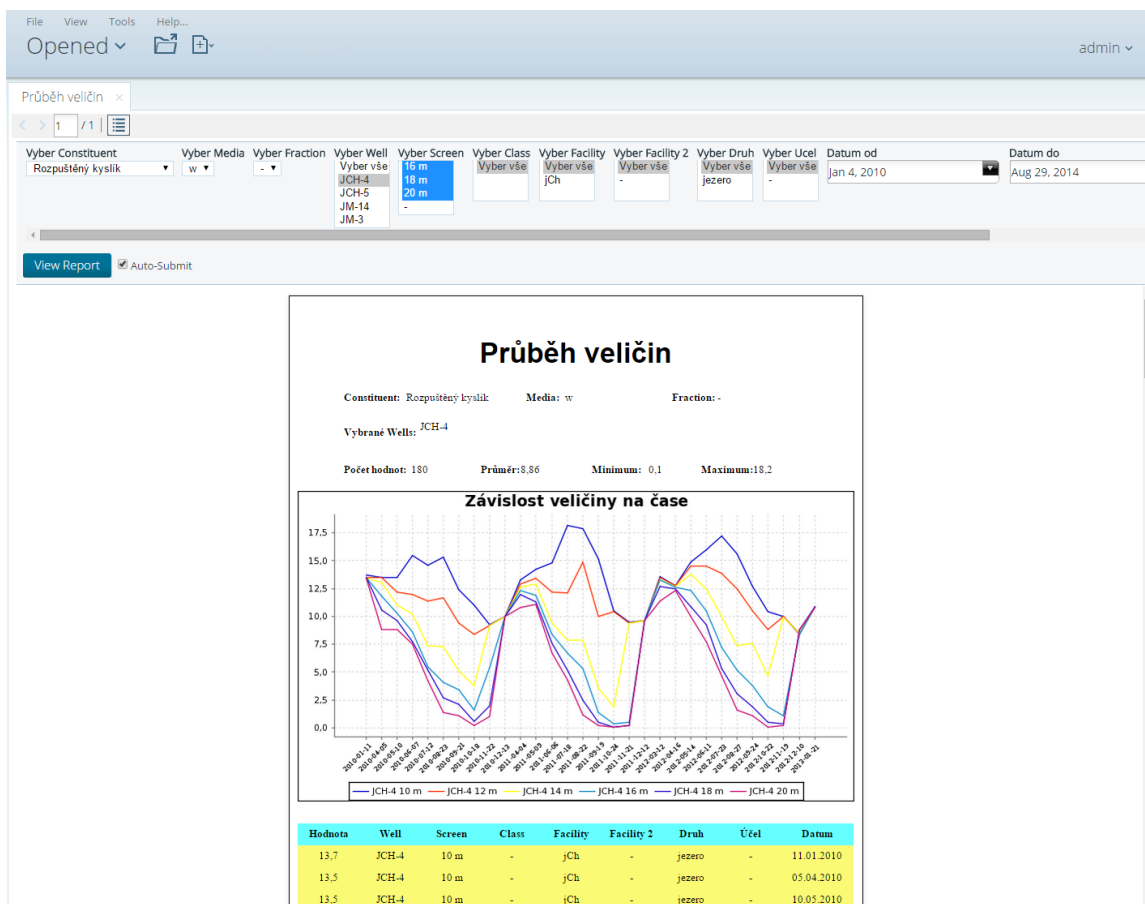
- Průměrný hydraulický gradient z hladin vybraných vrtů a z toho odhad rychlosti proudění a doby doběhu – export do sešitu MS Excel (Devlin 2003), kde je výpočet prováděn maticovými vzorci.
- Export dat do kontingenční tabulky.

Pro vizualizaci hydrogeologických dat je používán mj. EnviroInsite. Data pro něj jsou výsledkem transformace B či D.

3.7.2 Reporting (tiskové sestavy)

Pomocí Pentaho Report Designer a PDI byly vytvořeny následující analýzy a reporty:

- Graf a tabulka časového průběhu libovolných veličin v libovolných objektech a základní popisná statistika (Krejlich 2015) – obrázek 26.
- Identifikace redukčně-oxidačních podmínek a převažujících procesů ve vodách z chemického složení (Jurgens et al. 2009).
- Multikriteriální analýza hodnotící, zda dojde k eutrofizaci ve vodní nádrži (Krejlich 2015).
- Profil vrtu – report dokumentace geologicky dokumentovaných objektů (Krejlich 2015).
- Výpočet hydraulického gradientu z libovolného počtu objektů.



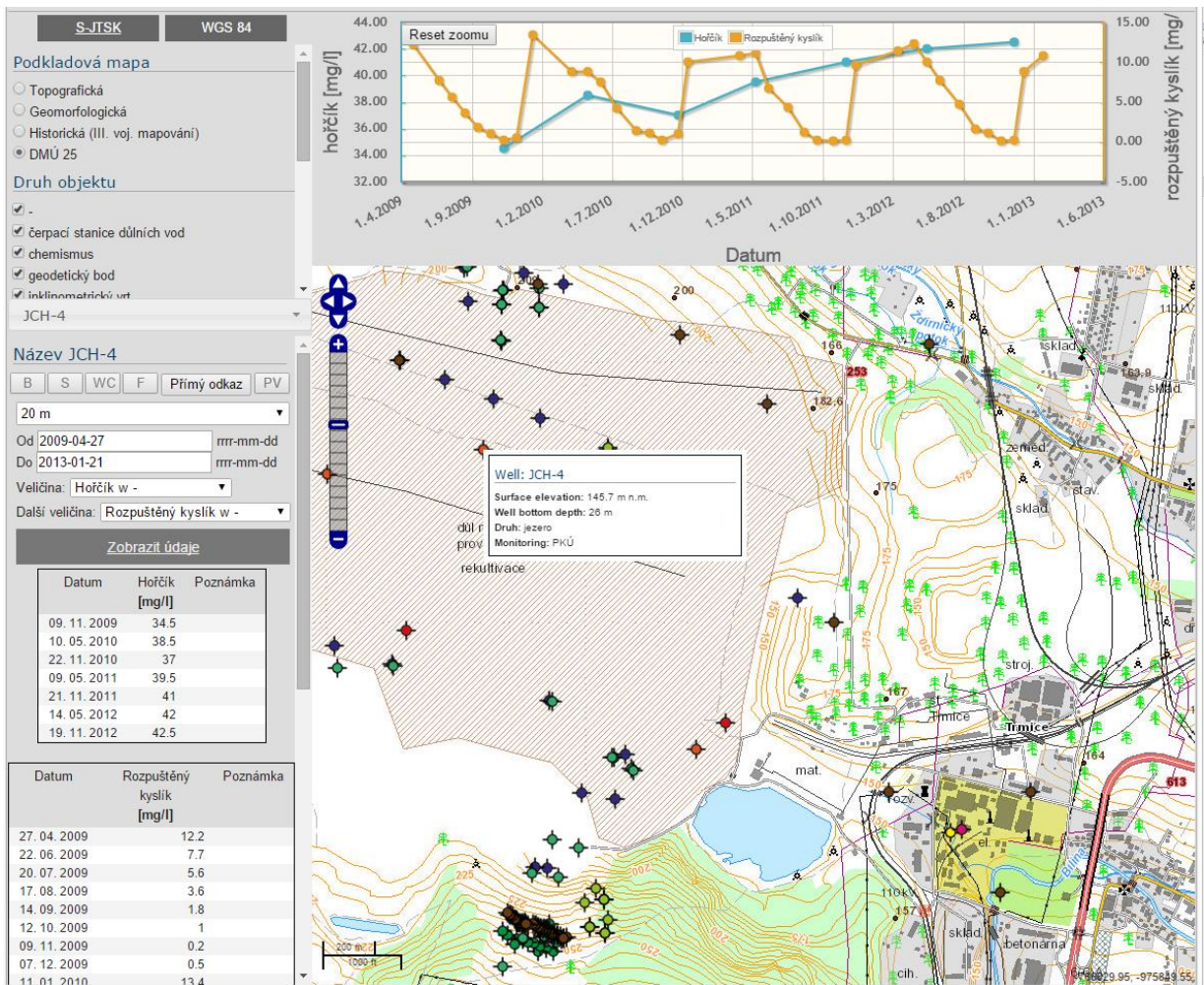
Obrázek 26: Univerzální report průběhu veličin – graf a tabulka

3.7.3 Mapová online aplikace

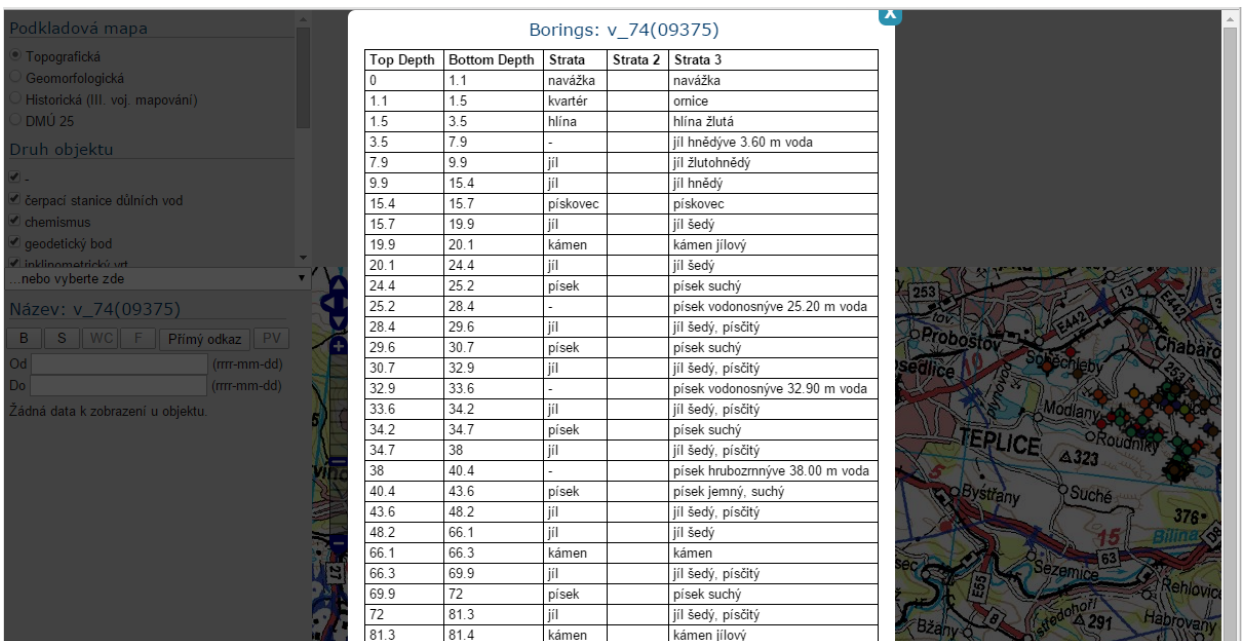
V rámci bakalářské práce byla vyvinuta online aplikace (Jodas 2014) – obrázek 27 a obrázek 28. Práci vedl a funkcionalitu kompletně navrhl autor předkládané práce. Cílem mapové aplikace je provázat mapy, tabulky a grafy do uživatelského prostředí a názorně prezentovat většinu dat HgIS. Aplikace obsahuje interaktivní podkladovou mapu s objekty. Pro jednotlivé objekty (vrty atd.) zobrazuje grafy a tabulky libovolných veličin (nejvýše dvou zároveň). Jsou to grafy časových řad (tabulka observations) či karotáže (tabulka point_values). V grafu se zobrazují i meze (sanační limity, legislativní omezení atd.) z tabulky standards. K jednotlivým objektům se zobrazí *popup* okno s informacemi o objektu z tabulky wells. Je možno nastavit různé podkladové mapy (webové služby jako WMS, WFS apod.). V jednoduché textové formě je možno zobrazovat geologii, stratigrafii a technické provedení objektů (vrtů, studen).

Webová aplikace byla vytvořena pomocí mapového frameworku OpenLayers (Hazard 2011). Jedná se o javascriptovou knihovnu pro zobrazení map. Je použita stabilní, avšak dnes již neaktuální verze 2.13.1. OpenLayers je to zdaleka nejpoužívanější mapový framework a některé další z něj vycházejí. Aplikace dále využívá PHP (z důvodu kompatibility v rámci projektů MARE a ZÁVOD), jQuery (jquery.com), AJAX a jqPlot (jqplot.com – vykresluje graf).

Pro srovnání je možno zmínit aplikaci Time Series Analyst (Jones et al. 2015a). Je to moderní online aplikace založená na CUAHSI HIS Observations Data Model a nepracuje tedy s geologickými daty – je to však FOSS (licence BSD). Tato aplikace nebyla využita. Technologie využitě pro webové aplikace týkající se vodních zdrojů shrnuje Swain et al. (2015).



Obrázek 27: Uživatelské rozhraní on-line mapové aplikace



Obrázek 28: Textové zobrazení geologického profilu vrtu v online mapové aplikaci

3.7.4 Správa nestructurovaných dat a dokumentů

Data sbíraná v rámci projektů řešených HgIS jsou v současnosti ukládána na **souborový server** dostupný přes FTP. Vybraná data jsou načítána do databáze (datového skladu). Mít některá geodata uložená jako soubory může být účelné, aplikační sw (např. EnviroInsite) je tak může zobrazovat jako podkladové mapy (SHP, DXF, DWG, XYZ).

Pro systematické uložení zejména publikací (a dokumentů) je vhodné používat bibliografickou databázi obsahující plné texty i metadata. Je tak možno publikace uchovávat, sdílet, spravovat a vytvářet citace. Vše je zadáváno včetně metadat, a knihovna je tak přehledná, i když s ní pracuje velký počet uživatelů. Je využíván open source **bibliografický manažer** Zotero (zotero.org). Byla vytvořena skupinová knihovna, na které řešitelé projektů sbírají a sdílejí bibliografické záznamy, plné texty a komentáře k nim.

3.8 Aplikace HgIS

HgIS byl doposud prakticky využit následujícím způsobem: Data, se kterými se pracuje v rámci projektů MARE a ZÁVOD, byla načtena do databáze, jsou zobrazována ve webové aplikaci a analyzována s pomocí multikriteriální analýzy (PDI a reporty v PBA). Jakub Říha nad databází naprogramoval srážko-odtokový model jezera Milada – Chabařovice (Říha a Šembera 2014). Některé komponenty HgIS jsou součástí IS MARE, který je na komerční bázi rozvíjen a nasazován na Palivovém kombinátu Ústí, s. p. Načítání dat z gdBase bylo využito pro transformace dat pro projekt Povodeň na TUL, který je financován TA ČR. Raná vývojová verze systému byla využita pro zpracování dat pro případovou studii (kapitola 2.5.) a pro vyhodnocení a modelování geochemické odezvy sanačního zásahu na lokalitě Kuřívody.

Budoucí využitelnost byla zvýšena tím, že SIS (tabulka 11) umožňuje export do výměnného formátu HgIS.

3.9 Diskuse a závěr

Byl vyvinut informační systém, který využívá nástroje BI (Pentaho) a GIS (OpenLayers atd.). Souhrnně je tak možno HgIS charakterizovat jako „*(geo)spatial business intelligence (GeoBI) tool for hydrogeology*“. Takový systém doposud neexistoval. V ESdat jsou integrovány komerční nástroje pro reporting – SSRS, Telerik, Crystal Reports (ESdat 2015). Telerik je využit také v EQuIS. Na nástrojích BI od firmy Microsoft je postaven MineRP (minerp.com), který však zpracovává data týkající se agend v souvislosti s těžbou nerostných surovin. Boulil et al. (2014) prováděli OLAP analýzu kvality povrchové vody s využitím mj. Talend a PostgreSQL.

Pro tvorbu koncepčních modelů podzemní vody je vhodné integrovaně zobrazovat data různého typu. Jedná se o geologii, technické provedení objektů, hladiny, chemismus, karotáž, a to přímo měřené hodnoty i interpolované. To umožňuje sw EnviroInsite, jehož datový model byl použit jako základ pro datový model HgIS. Logika uspořádání dat v EnviroInsite je tak pro uživatele HgIS snadno pochopitelná, což zjednodušuje využití EnviroInsite pro tvorbu koncepčních modelů. HgIS navíc umožňuje snadno vytvářet procedurální (výpočetní) modely. Jednoduché modely je možné spouštět v PBA, pro náročnější simulace je možno data snadno exportovat pomocí PDI do formátu pro načtení do specifického simulačního software. Výpočty je možno provádět v PDI například za pomoci kroků *Formula*, *Analytic query* či *Calculator*. V reportech je možno používat vzorce, jejichž syntaxe (*LibFormula*) je založena na standardu (*OpenFormula*), který využívá například LibreOffice/OpenOffice (OASIS 2011). HgIS je navržen tak, aby umožňoval vytvářet dílčí (geo)prostorové analýzy v *(geo)spatial* ETL GeoKettle či nad databází např. pomocí prostorového rozšíření jazyka SQL. Těmito vlastnostmi je HgIS unikátní (tabulka 21).

Tabulka 21: Unikátnost HgIS

Požadavek	Naplnění	Technické detaily
Snadná tvorba modelů	Využití nástrojů pro business intelligence pro tvorbu analýz, reportů, resp. exportů	Pentaho (PBA, PDI)

Zvolená kombinace nástrojů a přístupů umožnila navrhnout a částečně implementovat systém tak, aby odpovídal požadavkům z hlediska funkčnosti (kapitola 3.1) i architektury (kapitola 3.3). Požadavky na systém z hlediska architektury byly splněny (tabulka 22).

Tabulka 22: Splnění požadavků na systém z hlediska architektury

Požadavek	Způsob splnění
Zahrnutí všech dat při zachování jednoduchosti. Struktura i pro doposud neznámé veličiny (<i>data agnostic</i>).	Datový model, ve kterém jsou v podstatě všechny časové řady v jedné tabulce (<i>observations</i>). Veličiny jsou definovány pomocí záznamů v tabulce <i>constituents</i> , nikoliv samostatnými sloupci (<i>normalizace</i>). Data z karotáže jsou v tabulce <i>point_values</i> .
Škálovatelnost (lokální i serverové nasazení, paralelizace transformací, <i>big data</i>).	Využití nástrojů BI, paralelizace transformací pomocí ETL serveru Carte (součást PDI).
Otevřené, snadno rozšiřitelné, udržitelné.	Využití nástroje.
Přenositelnost – využitelnost v rámci jiných IS. Nezávislost na konkrétním DBMS (<i>database agnostic</i>), nezávislost na GIU.	Pentaho je možno integrovat do jiných IS.
Automatizované zpracování dat včetně netriviálních operací s prostorovými daty (nejen body).	Využití PDI, GeoKettle a PostGIS.
Rozvoj může provádět pokročilý zaškolený uživatel (<i>power user</i>).	Využití nástrojů BI s GUI.
Snadná implementace systému včasného varování a automatických hlášení.	Pentaho Business Analytics a PDI umožňují např. odeslání reportu e-mailem v pravidelných intervalech či při definované události (<i>.xaction</i>).
Snadné propojení s nástroji pro analýzy dat a data mining	Využití PDI (<i>steps</i> : Weka scoring, ARFF output, Tableau data extract, Execute R script).
Snadná tvorba exportu do specializovaného modelovacího sw či implementace speciální analýzy.	Využití PDI, Report Designer, PBA.

Architektura HgIS by mohla být kompaktnější – tedy nikoliv poskládaná z velkého množství existujících sw nástrojů. Při zvolení jiné architektury (*Service Oriented Architecture*) by bylo možné jednotlivé komponenty operativněji kombinovat (Klug a Knoch 2014; Knoch et al. 2015). Bylo by elegantní začít datové modelování na vyšší míře abstrakce – na konceptuální úrovni, nikoliv vyjít z výměnného formátu (relační databáze), ten rozšířit a normalizovat. Využití ontologií či objektových databází by umožňovalo využít sofistikovanější datovou strukturu. Komunitní vrze platformy Pentaho má mnohá omezení – např. neumožňuje šifrované spojení a PBA není přizpůsoben pro

zobrazení v mobilních zařízeních. Je však třeba zdůraznit, že novost předkládané práce není v oblasti informatiky, ale v představení řešení GeoBI, které vyhovuje zadaným cílům a potřebám hydrogeologa – modeláře.

Nevýhodou HgIS je, že na rozdíl od některých EDMS se nejedná o kompaktní sw, ale o soubor více modulů. HgIS jako celek nemá jednotné GUI, které by uživatel mohl ihned začít intuitivně používat. Srovnání s některými EDMS je tak může být poněkud zavádějící. Nicméně platí, že nebylo nalezeno využití BI (včetně DWH, OLAP či ETL) pro problematiku podzemní vody. V práci se blíže nerozebírají principy DWH a OLAP, protože už datový model EnviroInsight v podstatě odpovídal schématu sněhové vločky či souhvězdí (*snowflake* či *constellation*).

Použitý přístup se velmi osvědčil, jelikož umožňuje snadnou udržitelnost a rozšiřitelnost. Je plánováno využití pro další projekty na TUL. Firmy zabývající se hydrogeologií v ČR EDMS většinou nepoužívají (s výjimkou gDbase), případně využívají velmi specifický sw, který odpovídá dílčím požadavkům. HgIS má tedy dobré předpoklady, aby mohl být široce používán.

Přínosem předkládané práce je však především to, že identifikovala potřeby hydrogeologů a navrhla koncepční přístup pro práci s daty. Hydrogeologové po desetiletí běžně používají nástroje GIS, ale nikoliv BI. Tato práce představuje BI hydrogeologické komunitě. HgIS prokazuje funkčnost zvoleného přístupu a otevírá příležitosti pro využití dílčích komponent od jiných dodavatelů.

3.9.1 Plánované rozšíření

Dále je plánováno vyvíjet další analytické a simulační nástroje a exporty do speciálních nástrojů pro vyhodnocování, které naplní strategii využívání více jednoduchých modelů. Mezi takové patří např.:

- Výpočet geochemického pozadí (Nakić et al. 2007).
- Výpočet hustoty vody z chemického složení (Boehrer et al. 2010).
- Export měřených dat do CoronaScreen pro výpočet ustálené délky kontaminačního mraku.
- Vykreslení hladin na základě kombinace interpolace měřených hladin (kriging) a analytického výpočtu hladin kolem čerpaného vrtu (Karanovic et al. 2009).
- Export dat, např. do Geochemist's Workbench (GSS – Geochemist's spreadsheet) pro vizualizaci a geochemické modelování.

Dále je možno přidávat další funkcionalitu jako např.:

- Exporty dat pro plnění ohlašovací povinností, atd.

V současnosti je v rámci studentských prací vyvíjena:

- Online aplikace pro zadávání a editaci dat a metadat s využitím PHP, Nette Framework (nette.org) – z důvodu kompatibility v rámci projektů MARE a ZÁVOD. Dále je využíván jQuery (jquery.com), Bootstrap (getbootstrap.com) a DataTables (datatables.net). Bude později integrována s mapovou aplikací. Je otázkou, jak účelné by bylo tuto funkcionalitu implementovat přímo v PBA, což je další možný směr rozvoje HgIS.
- Přehledová zobrazení (*dashboard*) za pomoci CTools (webdetails.pt).
- Řešení (*solutions*) – automatizace procesů za pomoci posloupností událostí (soubory *.xaction*).
- Abstraktní vrstva nad datovým modelem pro lokalizaci a zjednodušení tvorby reportů a přehledových zobrazení koncovým uživatelem (využíván Pentaho Metadata Editor).
- Import dat z Databáze geologicky dokumentovaných objektů ČGS (XML ve formátu aplikace eEarth).

4 Shrnutí vědeckých výsledků

Práce shrnuje existující klasifikace nejistot (zejm. koncepčního modelu) a navrhuje novou klasifikaci využití modelů. Přínosem této práce je, že se zabývá ekvifinálními a alternativními jednoduchými modely podzemní vody, jež jsou založeny na principálně odlišných přístupech či předpokladech. Princip je demonstrován na původních případových studiích, které vycházejí z malého množství vstupních dat. Tím se tato práce vymezuje vůči článku, jehož autor (Bredehoeft 2005) se nasetkal v praxi s využitím alternativních koncepčních modelů. Hydrogeologové pracují s alternativními koncepčními modely zcela samozřejmě. Některé alternativní modely jsou však někdy zavrhnuty, aniž by byly vyvráceny. Jindy jsou vyvráceny, ale nejsou následně dokumentovány. Předkládaná práce demonstruje smysluplnost chápání modelů jako hypotéz, které jsou testovány a dokumentovány bez ohledu na to, zda se je podaří vyvrátit.

Pro tvorbu takových modelů byl vyvinut informační systém, jenž je založen na původním datovém modelu a využívá kombinaci typů sw (GeoBI = GIS + BI), která pro problematiku podzemní vody dosud nebyla použita. Největší vědecký přínos má práce chápaná jako celek. Práce má vědecký přínos v oblasti hydrogeologie (modelování podzemní vody), případně environmentální informatika. Nemá vědecký přínos v oblasti matematika, matematická teorie rozhodování, či informatika.

Autor zpracoval práci samostatně s využitím citované literatury a konzultací. Dílčí úlohy řešili studenti Krejbich (2013, 2015), Jodas (2013, 2014), Hadač (2014), Štírek (2014) a Láska (2011) v rámci svých projektů, bakalářských a diplomových prací, dohod o provedení práce a jsou citováni. Studenti pracovali pod vedením autora této práce. Většina práce vznikala v rámci výzkumných projektů a zakázek, z nich je však prezentována pouze ta část, již autor zpracoval samostatně.

Tematika jednoduchých ekvifinálních modelů, tj. kapitoly 1 (Úvod) a 2 (Případové studie), byla prezentována na kongresu a publikována v konferenčním sborníku (Nešetřil 2009b). Jednalo se o případovou studii Transport ropných uhlovodíků (kapitola 2.4). Další případové studie (kapitola 2.1 „Ekvifinálnita – interakce povrchové a podzemní vody“, kapitola 2.2 „Srovnání jednoduchého a komplexního modelu – ovlivnění podzemních vod jezem“ a kapitola 2.3 „Kombinace principiálně odlišných modelů – model délky kontaminačního mraku a dovoleného čerpání“) byly prezentovány na mezinárodním semináři, přičemž abstrakt byl publikován ve sborníku (Nešetřil 2012a). Výsledky kapitoly 2.6 „Přirozená biodegradace ropných uhlovodíků“ byly publikovány v časopise (Topinkova et al. 2007), který je zařazen v Science Citation Index ($IF_{2013} = 1,71$). Článek byl citován dalšími 5 články z téhož indexu. Tematika navazující na kapitolu 2.2 „Srovnání jednoduchého a komplexního modelu – ovlivnění podzemních vod jezem“ byla publikována (Matula et al. 2014) v časopise, který je zařazen v Science Citation Index Expanded (SciSearch) – $IF_{2013} = 1,68$, kde byl článek jednou citován. Tematika informačního systému byla publikována v recenzovaných sbornících konference EnviroInfo 2014 (Nešetřil a Šembera 2014) a českého hydrogeologického kongresu (Nešetřil 2014).

Shrnutí a závěr

Podzemí je obtížně přístupné přímému pozorování a bývá navíc velice heterogenní. Proto při studiu podzemní vody čelíme značné nejistotě. Práce reaguje na nejistotu ve výsledcích modelů podzemní vody. V práci je představeno shrnutí existujících klasifikací nejistot (zejm. koncepčního modelu). Je zde definována epistemologická nejistota a její projevy: nejistota koncepčního modelu a nejistota struktury modelu. Koncepční model není možné verifikovat či validovat, nýbrž je možné jej pouze potvrdit (*confirmation*) – podle Refsgaarda et al. (2006) je možné posoudit jeho obhajitelnost (*tenability*).

Pro vypořádání se s takovou nejistotou je v práci obhajována a využita strategie více jednoduchých modelů. Ta nespočívá ve vytváření alternativních sad parametrů (varianty, scénáře) ani alternativních geologických modelů, ale ve využití jednoduchých alternativních modelů, které simulují jiné procesy, používají jinou metodu či představují odlišné koncepční přístupy (jsou principiálně odlišné). Tyto jednoduché modely mohou být formulovány jako testování hypotéz a jednoznačně snižovat nejistotu porozumění fungování studovaného systému. Zvolená strategie v podstatě odpovídá podle klasifikace Uusitalo et al. (2015) kombinaci přístupů „emulace modelu“ a „více modelů“ a také odpovídá tzv. „*multiple model ensemble*“. Podle Refsgaarda et al. (2007) odpovídá kategorii „simulace více modely – modely s odlišnou strukturou“. Využití modelů pro testování hypotéz je spolu s dalšími uveden v navržené klasifikaci využití modelů. V práci je diskutováno použití principu ekvifinality a tohoto pojmu v oblasti modelování podzemní vody. Strategie je demonstrována na unikátních případových studiích, které vycházejí z malého množství vstupních dat.

Bredehoeft (2005) uvádí, že mnozí autoři navrhují využití alternativních koncepčních modelů, ale že nikdy nezaznamenal uskutečnění tohoto přístupu v praxi, protože modeláři pracují s jedním koncepčním modelem, který mění až v případě, kdy jej není možné nakalibrovat. Předkládaná práce naopak ukazuje, jak je možno uplatnit alternativní koncepční modely v praxi – totiž používat (alespoň v první fázi) více jednoduchých modelů.

V kapitole 2 je prezentováno využití alternativních jednoduchých modelů v modelování různých hydrogeologických úloh. Jedna úloha je řešena více modely, které jsou založeny na různých přístupech a předpokladech. Vysoká nejistota modelů je dána nedostatkem adekvátních vstupních dat. Prezentované případové studie srovnávají jednoduché a komplexní modely, testují alternativní hypotézy sadou jednoduchých modelů či představují alternativní prediktivní modely. Obhajitelnost modelů v případových studiích byla semikvantitativně vyhodnocena podle metodiky Refsgaarda et al. (2006).

Předkládaná práce nevytváří jen alternativní sady parametrů (varianty, scénáře) či alternativní geologické modely, ale jednoduché alternativní modely, které simulují jiné procesy, používají jinou metodu či představují odlišné koncepční přístupy (jsou principiálně odlišné). V některých případových studiích se neuplatňuje princip ekvifinality, protože modely se doplňují (např. kapitola 2.3).

Multidimenzionální environmentální data je třeba vhodným způsobem spravovat, zobrazit a analyzovat, abychom mohli snadno sestavovat adekvátní alternativní koncepční modely. K tomu je možno využít existující software pro správu dat o podzemní vodě a životním prostředí a existující nástroje pro vizualizaci a analýzu dat. Práce obsahuje důkladnou rešerši takových nástrojů. Velmi se však osvědčilo využití nástrojů, přístupů a technologií z naprosto jiné oblasti – manažerské informatiky. Úlohy řešené při zpracování dat o podzemní vodě a životním prostředí jsou do značné míry podobné úlohám business intelligence. Jedná se o:

- Načítání archivních dat z různorodých zdrojů (databáze, soubory atd.). Není ani tak důležité interaktivně editovat data, ale především je zobrazovat a analyzovat.

- Tvorba tiskových sestav, které jsou automaticky generovány, ale přitom je možno je ručně upravovat (formáty pro MS Word a MS Excel).
- Spouštění modelů a analýz nad komplexními daty.

Proto byl vyvinut informační systém HgIS (kapitola 3), který využívá nástroje, přístupy a technologie BI. Důležitým požadavkem na HgIS bylo, aby umožňoval snadné načítání rozmanitých dat a export dat pro využití v nástrojích pro speciální analýzu dat a modelování. Tuto funkcionalitu zabezpečuje tzv. datová pumpa (ETL – konkrétně PDI), která umožňuje automatizovaně importovat data z různých zdrojů a to i málo strukturovaných. Data jsou uložena v databázi s navrženým datovým modelem, který vychází z existujících standardů a produktů. V jeho návrhu se z BI uplatnily přístupy pro návrh datových skladů a OLAP. HgIS má některé komponenty a funkce GIS. Nebyla nalezena práce, která by využívala nástroje BI v hydrogeologii.

Předkládané práce identifikovala potřeby hydrogeologů a navrhla koncepční přístup pro práci s daty. Hydrogeologové po desetiletí běžně používají nástroje GIS, ale nikoliv BI. Tato práce představuje BI hydrogeologické komunitě. HgIS prokazuje funkčnost zvoleného přístupu a otevírá příležitosti pro využití dílčích komponent od jiných dodavatelů.

Nadneseně lze říci, že práce se zabývá tím, jak se správně ptát či klást požadavky: Jak klást otázky (zpracovateli) modelu (kapitola 2.9) a jak formulovat zadání pro EDMS či vývojáře (kapitola 3.4). Doufám, že tato práce bude inspirací pro dobrou praxi v modelování podzemní vody – abychom více přemýšleli a méně počítali; neřídili se šablonami, ale vytvářeli modely, jež jsou účelné, i kdyby se nebylo třeba dobrat až ke komplexnímu modelu. Tedy: ne data do modelu, ale model na data.

Použitá literatura

- ADAMS, R. a P.L. YOUNGER, 2001. A strategy for modeling ground water rebound in abandoned deep mine systems. *Ground Water*. Roč. 39, č. 2, s. 249–261. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2001.tb02306.x
- BADARD, Thierry, Matthew KADILLAK, George PERCIVALL, Steven RAMAGE, Carl REED, Michael SANDERSON, Raj SINGH, Jayant SHARMA a Luc VAILLANCOURT, 2012. *Geospatial Business Intelligence (GeoBI)*. OGC White Paper OGC 09-044r3. Open Geospatial Consortium. Dostupné z: <http://www.ogcnetwork.net/geobi>
- BAKKER, Mark, 2013. Are all models wrong? Absolutely not. *Groundwater*. Roč. 51, č. 3, s. 313. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/gwat.12037
- BEDNÁŘ, Jan, 2013. *Srovnání komerčních BI reportovacích nástrojů s nástroji Open Source*. Praha. Vysoká škola ekonomická v Praze.
- BERG, Richard C., Stephen J. MATHERS, Holger KESSLER a Donald A. KEEFER, ed., 2011. *Synopsis of current three-dimensional geological mapping and modeling in geological survey organizations*. University of Illinois Board of Trustees, Illinois State Geological Survey, British Geological Survey. Circular 578.
- BEST, Daniel M. a Robert R. LEWIS, 2010. GWVis: A tool for comparative ground-water data visualization. *Computers & Geosciences*. Roč. 36, č. 11, s. 1436–1442. ISSN 0098-3004. DOI: 10.1016/j.cageo.2010.04.006
- BEVEN, K., 1996. Equifinality and uncertainty in geomorphological modelling. In: B. L. RHOADS a C. E. THORN, ed. *27th Binghamton Symposium in Geomorphology: Scientific Nature of Geomorphology*. John Wiley & Sons, s. 289–313. ISBN 0-471-96811-0.
- BEVEN, Keith, 1993. Prophecy, reality and uncertainty in distributed hydrological modelling. *Advances in Water Resources*. Roč. 16, č. 1, s. 41–51. ISSN 0309-1708. DOI: 10.1016/0309-1708(93)90028-E
- BEVEN, Keith, 2002. Towards an alternative blueprint for a physically based digitally simulated hydrologic response modelling system. *Hydrological Processes*. Roč. 16, č. 2, s. 189–206. ISSN 1099-1085. DOI: 10.1002/hyp.343
- BEVEN, Keith, 2006. A manifesto for the equifinality thesis. *Journal of Hydrology*. Roč. 320, č. 1–2, s. 18–36. ISSN 0022-1694. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2005.07.007
- BEVEN, Keith, 2012. *Rainfall-runoff modelling: the primer*. Second Edition. Chichester, John Wiley & Sons ISBN 978-1-119-95100-1. Dostupné z: <http://doi.wiley.com/10.1002/9781119951001>
- BEVEN, Keith a Jim FREER, 2001. Equifinality, data assimilation, and uncertainty estimation in mechanistic modelling of complex environmental systems using the GLUE methodology. *Journal of Hydrology*. Roč. 249, č. 1–4, s. 11–29. ISSN 0022-1694. DOI: 10.1016/S0022-1694(01)00421-8
- BEVEN, Keith J., 2001. *Rainfall-runoff modelling: the primer*. Chichester: Wiley. ISBN 9780470866719.
- BEVEN, Keith J., 2009. *Environmental modelling : An uncertain future? : An introduction to techniques for uncertainty estimation in environmental prediction*. Routledge. ISBN 978-0-415-46302-7.
- BEVEN, Keith J., 2010. Preferential flows and travel time distributions: defining adequate hypothesis tests for hydrological process models. *Hydrological Processes*. Roč. 24, č. 12, s. 1537–1547. ISSN 0885-6087, 1099-1085. DOI: 10.1002/hyp.7718
- BEVEN, Keith a Ida WESTERBERG, 2011. On red herrings and real herrings: disinformation and information in hydrological inference. *Hydrological Processes*. Roč. 25, č. 10, s. 1676–1680. ISSN 1099-1085. DOI: 10.1002/hyp.7963

- BEVEN, Keith a Peter YOUNG, 2013. A guide to good practice in modeling semantics for authors and referees. *Water Resources Research*. Roč. 49, č. 8, s. 5092–5098. ISSN 1944-7973. DOI: 10.1002/wrcr.20393
- BOEHRER, Bertram, Peter HERZSPRUNG, Martin SCHULTZE a Frank J. MILLERO, 2010. Calculating density of water in geochemical lake stratification models. *Limnology and Oceanography: Methods*. ISSN 1541-5856.
- BOISVERT, Eric a Boyan BRODARIC, 2012. GroundWater Markup Language (GWML) – Enabling groundwater data interoperability in spatial data infrastructures. *Journal of Hydroinformatics*. Roč. 14, č. 1, s. 93–107. ISSN 1464-7141. DOI: 10.2166/hydro.2011.172
- BOULIL, Kamal, Florence LE BER, Sandro BIMONTE, Corinne GRAC a Flavie CERNESSON, 2014. Multidimensional modeling and analysis of large and complex watercourse data: an OLAP-based solution. *Ecological Informatics*. Roč. 24, s. 90–106. ISSN 1574-9541. DOI: 10.1016/j.ecoinf.2014.07.001
- BOUMAN, Roland L. a Jos van DONGEN, 2009. *Pentaho solutions: Business intelligence and data warehousing with Pentaho and MySQL*. Indianapolis: Wiley. ISBN 978-0-470-48432-6.
- BOX, George E. P. a Norman Richard DRAPER, 1987. *Empirical model-building and response surfaces*. New York: Wiley. Wiley series in probability and mathematical statistics. ISBN 978-0-471-81033-9.
- BRANGER, F., I. BRAUD, S. DEBIONNE, P. VIALLET, J. DEHOTIN, H. HENINE, Y. NEDELEC a S. ANQUETIN, 2010. Towards multi-scale integrated hydrological models using the LIQUID@ framework. Overview of the concepts and first application examples. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 25, č. 12, s. 1672–1681. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2010.06.005
- BREDEHOEFT, J., 2006. On modeling philosophies. *Ground Water*. Roč. 44, č. 4, s. 496–499. ISSN 0017-467X. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2006.00232.x
- BREDEHOEFT, John, 2005. The conceptualization model problem—surprise. *Hydrogeology Journal*. Roč. 13, č. 1, s. 37–46. DOI: 10.1007/s10040-004-0430-5
- BREDEHOEFT, John, 2010. Models and model analysis. *Ground Water*. Roč. 48, č. 3, s. 328–328. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2009.00631.x
- BREUER, L., J. A. HUISMAN, P. WILLEMS, H. BORMANN, A. BRONSTERT, B. F. W. CROKE, H. G. FREDE, T. GRÄFF, L. HUBRECHTS, A. J. JAKEMAN, G. KITE, J. LANINI, G. LEAVESLEY, D. P. LETTENMAIER, G. LINDSTRÖM, J. SEIBERT, M. SIVAPALAN a N. R. VINEY, 2009. Assessing the impact of land use change on hydrology by ensemble modeling (LUCHEM). I: Model intercomparison with current land use. *Advances in Water Resources*. Roč. 32, č. 2, s. 129–146. ISSN 0309-1708. DOI: 10.1016/j.advwatres.2008.10.003
- BROWN, James D, 2004. Knowledge, uncertainty and physical geography: towards the development of methodologies for questioning belief. *Transactions of the Institute of British Geographers*. Roč. 29, č. 3, s. 367–381. ISSN 1475–5661. DOI: 10.1111/j.0020-2754.2004.00342.x
- BROWN, J.D., G.B. HEUVELINK a J.C. REFSGAARD, 2005. An integrated methodology for recording uncertainties about environmental data. *Water Science and Technology*. Roč. 52, č. 6, s. 153–160.
- BUTTS, Michael B., Jeffrey T. PAYNE, Michael KRISTENSEN a Henrik MADSEN, 2004. An evaluation of the impact of model structure on hydrological modelling uncertainty for streamflow simulation. *Journal of Hydrology*. Roč. 298, č. 1–4, The Distributed Model Intercomparison Project (DMIP), s. 242–266. ISSN 0022-1694. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2004.03.042

- CARRERA-HERNÁNDEZ, J. J. a S. J. GASKIN, 2008. The Basin of Mexico Hydrogeological Database (BMHDB): Implementation, queries and interaction with open source software. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 23, č. 10–11, s. 1271–1279. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2008.02.012
- CASTERS, Matt R., Roland BOUMAN a Jos van DONGEN, 2010. *Pentaho Kettle solutions: building open source ETL solutions with Pentaho Data Integration*. Indianapolis: Wiley. ISBN 978-0-470-63517-9.
- CAZZIN, Grazia a SPAGOBI CORE TEAM, 2012. *Business Intelligence with SpagoBI: Developing Business Intelligence solutions using the only 100% open source BI suite*. Padua, Italy: SpagoBI Labs, Engineering Group. Dostupné z: <http://www.spagoworld.org/xwiki/bin/view/SpagoBI/Book>
- CLARK, Martyn P., Dmitri KAVETSKI a Fabrizio FENICIA, 2011. Pursuing the method of multiple working hypotheses for hydrological modeling. *Water Resources Research*. Roč. 47, č. 9, s. W09301. ISSN 1944-7973. DOI: 10.1029/2010WR009827
- CLEMENT, T. Prabhakar, 1997. *RT3D: A modular computer code for simulating reactive multi-species transport in 3-dimensional groundwater systems*. Richland: Pacific Northwest National Laboratory. Dostupné z: <http://bioprocess.pnl.gov/rt3d.htm>
- CLEMENT, T. Prabhakar, 2011. Complexities in hindcasting models—when should we say enough is enough? *Ground Water*. Roč. 49, č. 5, s. 620–629. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2010.00765.x
- COULIBALY, Paulin, François ANCTIL, Ramon ARAVENA a Bernard BOBÉE, 2001. Artificial neural network modeling of water table depth fluctuations. *Water Resources Research*. Roč. 37, č. 4, s. 885–896. ISSN 00431397. DOI: 10.1029/2000WR900368
- COX, Malcolm E., Allan JAMES, Amy HAWKE a Matthias RAIBER, 2013. Groundwater Visualisation System (GVS): A software framework for integrated display and interrogation of conceptual hydrogeological models, data and time-series animation. *Journal of Hydrology*. Roč. 491, s. 56–72. ISSN 0022-1694. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2013.03.023
- COX, Simon, 2013. *OGC Abstract Specification: Geographic information – Observations and measurements. Version: 2.0. OGC and ISO 19156:2011(E)*. OGC® Standard: Abstract Specification OGC 10-004r3. Open Geospatial Consortium. Dostupné z: <http://www.opengeospatial.org/standards/om>
- COX, Simon J. D. a Bruce A. SIMONS, 2014. *WaterML-WQ – an O&M and WaterML 2.0 profile for water quality data*. Best Practice Internal reference number: 14-003. Open Geospatial Consortium. Dostupné z: <http://docs.opengeospatial.org/bp/14-003/14-003.html>
- CRAIG, James R. a L. Shawn MATOTT, 2009. *Visual AEM* [online]. Waterloo, Canada: University of Waterloo. Dostupné z: <http://civil.uwaterloo.ca/jrcraig/VisualAEM/Main.html>
- ČSN EN 14968 (259380), 2006. *Sémantika pro výměnu dat o podzemní vodě (Semantics for groundwater data interchange)*.
- DE DREUZY, Jean-Raynald, Jacques BODIN, Herve LE GRAND, Philippe DAVY, Damien BOULANGER, Annick BATTAIS, Olivier BOUR, Philippe GOUZE a Gilles POREL, 2006. General database for ground water site information. *Ground Water*. Roč. 44, č. 5, s. 743–748. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2006.00220.x
- DEVLIN, J.F., 2003. A spreadsheet method of estimating best-fit hydraulic gradients using head data from multiple wells. *Ground Water*. Roč. 41, č. 3, s. 316–320. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2003.tb02600.x

- DOHERTY, John, 2011. Modeling: Picture perfect or abstract art? *Ground Water*. Roč. 49, č. 4, s. 455. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2011.00812.x
- DORNBLUT, Irina a Rob ATKINSON, 2014. *OGC HY_Features: a common hydrologic feature model*. Discussion Paper OGC 11-039r3. Open Geospatial Consortium. Dostupné z: <http://www.opengis.net/doc/DP/hy-features>
- EBEL, Brian A. a Keith LOAGUE, 2006. Physics-based hydrologic-response simulation: Seeing through the fog of equifinality. *Hydrological Processes*. Roč. 20, č. 13, s. 2887–2900. ISSN 1099-1085. DOI: 10.1002/hyp.6388
- ELSHALL, Ahmed S. a Frank T. -C. TSAI, 2014. Constructive epistemic modeling of groundwater flow with geological structure and boundary condition uncertainty under the Bayesian paradigm. *Journal of Hydrology*. Roč. 517, s. 105–119. ISSN 0022-1694. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2014.05.027
- ENGELHARDT, I., J.g. DE AGUINAGA, H. MIKAT, C. SCHÜTH a R. LIEDL, 2014. Complexity vs. simplicity: Groundwater model ranking using information criteria. *Groundwater*. Roč. 52, č. 4, s. 573–583. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/gwat.12080
- ESDAT, 2015. *ESdat Web Custom Reports* [online, viděno. 12. listopadu 2015]. Dostupné z: <http://www.esdat.net/ESdatWebCustomReports.aspx>
- EVROPSKÝ PARLAMENT, RADA EVROPSKÉ UNIE, 2007. *Směrnice Evropského parlamentu a Rady 2007/2/ES ze dne 14. března 2007 o zřízení Infrastruktury pro prostorové informace v Evropském společenství (INSPIRE)*. 14. březen 2007. Dostupné z: <http://eur-lex.europa.eu/legal-content/CS/NOT/?uri=CELEX%3A32007L0002>
- FARHAT, S.K., C.J. NEWELL, T.C. SALE, D.S. DANDY, J.J. WAHLBERG, M.A. SEYEDABBASI, J.M. MCDADE a N.T. MAHLER, 2012. *Matrix Diffusion Toolkit* [online]. Houston, Texas: Developed for the Environmental Security Technology Certification Program (ESTCP) by GSI Environmental Inc. Dostupné z: www.gsi-net.com
- FARRELL, D.M., B.S. MINSKER, D. TCHENG, D. SEARSMITH, J. BOHN a D. BECKMAN, 2007. Data mining to improve management and reduce costs of environmental remediation. *Journal of Hydroinformatics*. Roč. 9, č. 2, s. 107–121.
- FEYERABEND, Paul, 1975. *Against method: outline of an anarchistic theory of knowledge*. London : Atlantic Highlands: NLB; Humanities Press. ISBN 0-902308-91-2.
- FEYERABEND, Paul, 2001. *Rozprava proti metodě*. Přel. Jiří FIALA. Praha: Aurora. ISBN 80-7299-047-0.
- FILIPČÍK, Zdeněk, 2013. *Nástroje Business Intelligence jako Open Source*. Praha. Diplomová práce. VŠE. Dostupné z: <http://www.vse.cz/vskp/eid/34862>
- FREYBERG, David L., 1988. An exercise in ground-water model calibration and prediction. *Ground Water*. Roč. 26, č. 3, s. 350–360. DOI: 10.1111/j.1745-6584.1988.tb00399.x
- GEMET, 2010. *GEneral Multilingual Environmental Thesaurus* [online, viděno 25. září 2015]. Dostupné z: <http://www.eionet.europa.eu/gemet>
- GIFFEN, Sarah E., 2002. *Environmental database for water-quality data for the Penobscot river, Maine: Design documentation and user guide*. OFR-2001-485. Augusta, Maine: United States Geological Survey. Dostupné z: <http://pubs.er.usgs.gov/publication/ofr2001485>
- GILL, Bruce, Don CHERRY, Michael ADELANA, Xiang CHENG a Mark REID, 2011. Using three-dimensional geological mapping methods to inform sustainable groundwater development in a volcanic landscape, Victoria, Australia. *Hydrogeology Journal*. Roč. 19, č. 7, s. 1349–1365. ISSN 1431-2174. DOI: 10.1007/s10040-011-0757-7
- GROUNDWELL TECHNOLOGIES, INC., 2010. *Waiora* [online]. Dostupné z: GroundswellTech.com

- GUPTA, Hoshin V., Martyn P. CLARK, Jasper A. VRUGT, Gab ABRAMOWITZ a Ming YE, 2012. Towards a comprehensive assessment of model structural adequacy. *Water Resources Research*. Roč. 48, č. 8, s. W08301. DOI: 10.1029/2011WR011044
- HADAČ, Jakub, 2014. *Transformace zeměpisných souřadnic*. Liberec. Bakalářský projekt. Technická univerzita v Liberci.
- HADLEY, Paul W. a Charles NEWELL, 2014. The new potential for understanding groundwater contaminant transport. *Groundwater*. Roč. 52, č. 2, s. 174–186. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/gwat.12135
- HAITJEMA, Henk, 2006. The role of hand calculations in ground water flow modeling. *Ground Water*. Roč. 44, č. 6, s. 786–791. ISSN 0017-467X. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2006.00189.x
- HAITJEMA, Henk M., 2015. The cost of modeling. *Groundwater*. Roč. 53, č. 2, s. 179. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/gwat.12321
- HARDEBOL, N.J. a G. BERTOTTI, 2013. DigiFract: A software and data model implementation for flexible acquisition and processing of fracture data from outcrops. *Computers & Geosciences*. Roč. 54, s. 326–336. ISSN 0098-3004. DOI: 10.1016/j.cageo.2012.10.021
- HARRAR, William G., Torben Obel SONNENBORG a Hans Jørgen HENRIKSEN, 2003. Capture zone, travel time, and solute-transport predictions using inverse modeling and different geological models. *Hydrogeology Journal*. Roč. 11, č. 5, s. 536–548. ISSN 1431-2174, 1435-0157. DOI: 10.1007/s10040-003-0276-2
- HAZZARD, Erik, 2011. *OpenLayers 2.10: Beginner's guide*. Birmingham, U. K.: Packt. ISBN 978-1-84951-412-5.
- HELLEBRAND, Hugo, Christoph MÜLLER, Patrick MATGEN, Fabrizio FENICIA a Huub SAVENIJE, 2011. A process proof test for model concepts: Modelling the meso-scale. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*. Roč. 36, č. 1–4, s. 42–53. ISSN 1474-7065. DOI: 10.1016/j.pce.2010.07.019
- HERON, Gorm, Catherine CROUZET, Alain C. M. BOURG a Thomas H. CHRISTENSEN, 1994a. Speciation of Fe(II) and Fe(III) in contaminated aquifer sediments using chemical extraction techniques. *Environmental Science & Technology*. Roč. 28, č. 9, s. 1698–1705. ISSN 0013-936X. DOI: 10.1021/es00058a023
- HERON, Gorm, Thomas H. CHRISTENSEN a Jens C. TJELL, 1994b. Oxidation capacity of aquifer sediments. *Environmental Science & Technology*. Roč. 28, č. 1, s. 153–158. ISSN 0013-936X. DOI: 10.1021/es00050a021
- HILL, Mary C., 2006. The practical use of simplicity in developing ground water models. *Ground Water*. Roč. 44, č. 6, s. 775–781. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2006.00227.x
- HILL, Mary C. a Claire R. TIEDEMAN, 2007. *Effective groundwater model calibration: with analysis of data, sensitivities, predictions, and uncertainty*. Hoboken N.J.: Wiley. ISBN 978-0-471-77636-9.
- HORSBURGH, Jeffery S., David G. TARBOTON, Richard P. HOOPER a Ilya ZASLAVSKY, 2014. Managing a community shared vocabulary for hydrologic observations. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 52, s. 62–73. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2013.10.012
- HORSBURGH, Jeffery S., David G. TARBOTON, David R. MAIDMENT a Ilya ZASLAVSKY, 2008. A relational model for environmental and water resources data. *Water Resources Research*. Roč. 44, č. 5, s. W05406. ISSN 1944-7973. DOI: 10.1029/2007WR006392
- HSU, Leo S a Regina O OBE, 2012. *PostgreSQL: Up and running*. Sebastopol, CA: O'Reilly & Associates. ISBN 978-1-4493-2632-6.

- HUNT, Randall J., John DOHERTY a Matthew J. TONKIN, 2007. Are models too simple? Arguments for increased parameterization. *Ground Water*. Roč. 45, č. 3, s. 254–262. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2007.00316.x
- HUNT, R. a C. ZHENG, 1999. Debating complexity in modeling. *Eos, Transactions, American Geophysical Union*. Roč. 80, č. 3, s. 29. ISSN 0096-3941. DOI: 10.1029/99EO00025
- CHAMBERLIN, Thomas Chrowder, 1890. The method of multiple working hypotheses. *Science*. Roč. 15, č. 366, s. 92–96.
- CHERRY, John A., 2007. Role of aquitards in protection of aquifers from contamination. [Přednáška na Přírodovědecké fakultě Univerzity Karlovy]. Praha. 30. 5. 2007
- CHESNAUX, Romain, Mélanie LAMBERT, Julien WALTER, Ugo FILLASTRE, Murray HAY, Alain ROULEAU, Réal DAIGNEAULT, Annie MOISAN a Denis GERMANEAU, 2011. Building a geodatabase for mapping hydrogeological features and 3D modeling of groundwater systems: Application to the Saguenay–Lac-St-Jean region, Canada. *Computers & Geosciences*. Roč. 37, č. 11, s. 1870–1882. ISSN 0098-3004. DOI: 10.1016/j.cageo.2011.04.013
- IACOVELLA, Stefano a Brian YOUNGBLOOD, 2013. *GeoServer beginner's guide*. Birmingham, UK: Packt. ISBN 978-1-84951-668-6.
- ISO/IEC 13249-3, 2011. *Information technology – Database languages – SQL multimedia and application packages – Part 3: Spatial*. 15. duben 2011. Dostupné z: http://www.iso.org/iso/iso_catalogue/catalogue_tc/catalogue_detail.htm?csnumber=53698
- IWANAGA, Takuya, Sondoss EL SAWAH a Anthony JAKEMAN, 2013. Design and implementation of a web-based groundwater data management system. *Mathematics and Computers in Simulation*. Roč. 93, Selected Papers of the MSSANZ 19th Biennial Conference on Modelling and Simulation, Perth, Australia, 2011, s. 164–174. ISSN 0378-4754. DOI: 10.1016/j.matcom.2012.11.009
- JACOBS, Bruce, 2016. *EnviroInsite* [online]. 33 Clark Road, No. 1, Brookline, MA 02445: EI LLC. Dostupné z: www.enviroinsite.com
- JELÉNEK, Jan, David ČÍŽEK, Jan FRANĚK a Lukáš VONDROVIC, 2014. Využití 3D modelování v experimentálním projektu ve štolě Josef: Utilization of the 3D modelling for the experimental project in the Josef Gallery. *Zprávy o geologických výzkumech v roce 2013*. ČGS, Czech Geological Survey. s. 12–15. ISSN 0514-8057. ISBN 978-80-7075-867-0.
- [JENNIFER CARRELL], 2011. *Xacto: X-section: Create 2D and 3D geologic cross sections* [online]. Champaign IL: Illinois State Geological Survey. Dostupné z: <http://resources.arcgis.com/gallery/file/geoprocessing/details?entryID=C83CC388-1422-2418-7F10-B4D3DF5F1EE6>
- JODAS, Tomáš, 2013. *Webová prezentace prostorových dat*. Bakalářský projekt. Technická univerzita v Liberci.
- JODAS, Tomáš, 2014. *Webová prezentace prostorových dat*. Bakalářská práce. Technická univerzita v Liberci.
- JONES, Amber Spackman, Jeffery S. HORSBURGH, Stephanie L. REEDER, Maurier RAMÍREZ a Juan CARABALLO, 2015a. A data management and publication workflow for a large-scale, heterogeneous sensor network. *Environmental Monitoring and Assessment*. Roč. 187, č. 6, s. 1–19. ISSN 0167-6369, 1573-2959. DOI: 10.1007/s10661-015-4594-3
- JONES, Wayne R., Michael J. SPENCE a Matthijs BONTE, 2015b. Analyzing groundwater quality data and contamination plumes with GWSDAT. *Groundwater*. Roč. 53, č. 4, s. 513–514. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/gwat.12340

- JONES, Wayne R., Michael J. SPENCE, Adrian W. BOWMAN, Ludger EVERS a Daniel A. MOLINARI, 2014. A software tool for the spatiotemporal analysis and reporting of groundwater monitoring data. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 55, s. 242–249. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2014.01.020
- JURGENS, Bryant C., Peter B. MCMAHON, Francis H. CHAPELLE a Sandra M. EBERTS, 2009. *U.S. Geological Survey Open-File Report: An Excel® workbook for identifying redox processes in ground water*. 2009–1004. Dostupné z: <http://pubs.usgs.gov/of/2009/1004/>
- KAO, Spenser, Kemachandra RANATUNGA, Geoffrey SQUIRE, Andrew PRATT a Dovey DEE, 2011. Visualisation of hydrological observations in the water data transfer format. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 26, č. 12, s. 1767–1769. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2011.07.005
- KARANOVIC, Marinko, Matthew TONKIN a David WILSON, 2009. KT3D_H2O: A Program for kriging water level data using hydrologic drift terms. *Ground Water*. Roč. 47, č. 4, s. 580–586. ISSN 0017467X. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2009.00565.x
- KARANOVIC, M. a C. J. NEVILLE, 2014. *BIOSCREEN-AT* [online]. S.S. Papadopoulos & Associates, Inc. Dostupné z: <http://www.sspa.com/software/bioscreen>
- KLUG, Hermann a Alexander KMOCH, 2014. A SMART groundwater portal: An OGC web services orchestration framework for hydrology to improve data access and visualisation in New Zealand. *Computers & Geosciences*. Roč. 69, s. 78–86. ISSN 0098-3004. DOI: 10.1016/j.cageo.2014.04.016
- KMOCH, Alexander, Hermann KLUG, Alistair B. H. RITCHIE, Jochen SCHMIDT a Paul A. WHITE, 2015. A spatial data infrastructure approach for the characterization of New Zealand's groundwater systems. *Transactions in GIS*. 1.10. ISSN 1467-9671. DOI: 10.1111/tgis.12171
- KOLLARITS, Stefan, Gerhard KUSCHNIG, Miran VESELIC, Ante PAVICIC, Corrado SOCCORSO a Marina AURIGHI, 2006. Decision-support systems for groundwater protection: innovative tools for resource management. *Environmental Geology*. Roč. 49, č. 6, s. 840–848. DOI: 10.1007/s00254-006-0179-3
- KONDROVÁ, Lucie, 2014. Data model for multidimensional geological subsurface data in geographic information system. In: *14th International Multidisciplinary Scientific GeoConference SGEM 2014, June 19–25: SGEM2014 Conference Proceedings*. Strany 549–554. ISBN 978-619-7105-10-0. DOI: 10.5593/SGEM2014/B21/S8.070
- KONDROVÁ, Lucie, 2015. *Datový model pro 3D modelování geologické stavby území České republiky*. Praha. Fakulta stavební, České vysoké učení technické.
- KRAEMER, S., H. HAITJEMA a V. KELSON, 2000. *Working with WhAEM2000: Source water assessment for a glacial outwash wellfield, Vincennes, Indiana*. EPA/600/R-00/022. Washington: Office of Research and Development, US Environmental Protection Agency. Dostupné z: http://www.epa.gov/ATHENS/publications/reports/EPA_600_R00_022.pdf
- KRÁLÍK, František, 1989. Nové poznatky o kontinentálních zaledněných severních Čech. *Sborník geol. věd – Antropozoikum*. Číslo. 19, s. 9–74. ISSN 0036-5270.
- KREJBICH, David, 2013. *Automatizace konverze datových formátů pro databázový systém*. Liberec. Bakalářská práce. Technická univerzita v Liberci.
- KREJBICH, David, 2015. *Využití nástrojů business intelligence pro hodnocení kvality přírodních vod*. Liberec. Diplomová práce. Technická univerzita v Liberci.
- KREŠIĆ, Neven a Alex MIKSZEWSKI, 2012. *Hydrogeological conceptual site models: data analysis and visualization*. Boca Raton, FL: CRC Press. ISBN Print: 978-1-4398-5222-4 eBook: 978-1-4398-5228-6. Dostupné z: <http://www.crcpress.com/product/isbn/9781439852224>

- KREYE, Melanie E., Yee Mey GOH a Linda B. NEWNES, 2011. Manifestation of uncertainty – a classification. *Proceedings of the 18th International Conference on Engineering Design (ICED 11): Impacting Society Through Engineering Design, Vol 6: Design Information and Knowledge*. Roč. 6, s. 96–107. ISSN 2220-4334.
- KUBRICHT, Jiří, 2008. *Distribuční sklad PHM společnosti Benzina a.s. Lokalita Šumperk-Vikýřovice : Analýza rizik starých ekologických zátěží. Závěrečná zpráva*. České Budějovice: ENVIRO C.B. s.r.o.
- KUHN, Thomas S., 1970. *The structure of scientific revolutions*. Second Edition, enlarged. University of Chicago Press. International encyclopedia of unified science. Foundations of the unity of science. ISBN 0-226-45803-2.
- KUHN, Thomas S., 2008. *Struktura vědeckých revolucí*. 1. vyd. Přel. Tomáš JENÍČEK. Praha: OIKOYMENH. Knihovna novověké tradice a současnosti, Sv. 64. ISBN 978-80-86005-54-6.
- LÁSKA, Jakub, 2011. *Import laboratorních rozborů do databáze EnviroInsite*. Liberec. Semestrální projekt. Technická univerzita v Liberci.
- LITAOR, M. Iggy, H. BRIELMANN, O. REICHMANN a M. SHENKER, 2010. Hydrochemical analysis of groundwater using a tree-based model. *Journal of Hydrology*. Roč. 387, č. 3–4, s. 273–282. ISSN 0022-1694. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2010.04.017
- MAHMOUD, Mohammed, Yuqiong LIU, Holly HARTMANN, Steven STEWART, Thorsten WAGENER, Darius SEMMENS, Robert STEWART, Hoshin GUPTA, Damian DOMINGUEZ, Francina DOMINGUEZ, David HULSE, Rebecca LETCHER, Brenda RASHLEIGH, Court SMITH, Roger STREET, Jenifer TICEHURST, Mark TWERY, Hedwig VAN DELDEN, Ruth WALDICK, Denis WHITE a Larry WINTER, 2009. A formal framework for scenario development in support of environmental decision-making. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 24, č. 7, s. 798–808. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2008.11.010
- MALINOWSKI, Elzbieta a Esteban ZIMÁNYI, 2008. *Advanced data warehouse design from conventional to spatial and temporal applications*. Berlin: Springer. ISBN 978-3-540-74405-4.
- MANDEL, John, 1984. *The Statistical Analysis of Experimental Data*. New York: Dover Publications. ISBN 978-0-486-64666-4.
- MASON, Seth J.K., Sean B. CLEVELAND, Pol LLOVET, Clemente IZURIETA a Geoffrey C. POOLE, 2014. A centralized tool for managing, archiving, and serving point-in-time data in ecological research laboratories. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 51, s. 59–69. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2013.09.008
- MATTÍO, Mariano García a Dario R. BERNABEU, 2013. *Pentaho 5.0 Reporting by example: Beginner's guide*. Birmingham, UK: Packt. ISBN 978-1-78216-225-4.
- MATULA, S., G. B. MEKONNEN, K. BÁTKOVÁ a K. NEŠETŘIL, 2014. Simulations of groundwater-surface water interaction and particle movement due to the effect of weir construction in the sub-watershed of the river Labe in the town of Děčín. *Environmental Monitoring and Assessment*. Roč. 186, č. 11, s. 7755–7770. ISSN 0167-6369, 1573-2959. DOI: 10.1007/s10661-014-3964-6
- MATULA, Svatopluk, Getu BEKERE, Kamil NEŠETŘIL a Kamila ŠPONGROVÁ, 2009. Hydrogeological modelling of different scenarios of groundwater movement and discharge in the watershed of the River Labe in North-west Bohemia. In: Pavel KOVAR, Petr MACA a Jana REDINOVA, ed. *Water Policy 2009, Water as a Vulnerable and Exhaustible Resource. 23 – 26 June 2009: Proceedings of the Joint Conference of APLU and ICA*. Prague: CULS Prague, s. 48–51. ISBN 978-80-213-1944-8. Dostupné z: <http://www.fzp.czu.cz/waterpolicy2009/>

- MCCARTHY, James D. a Phil A. GRANIERO, 2006. A GIS-based borehole data management and 3D visualization system. *Computers & Geosciences*. Roč. 32, č. 10, s. 1699–1708. ISSN 0098-3004. DOI: 10.1016/j.cageo.2006.03.006
- MICHAEL, William J., Barbara S. MINSKER, David TCHENG, Albert J. VALOCCHI a John J. QUINN, 2005. Integrating data sources to improve hydraulic head predictions: A hierarchical machine learning approach. *Water Resources Res.* Roč. 41, č. W03020, s. 14. DOI:200510.1029/2003WR002802
- NAKIĆ, Zoran, Kristijan POSAVEC a Andrea BAČANI, 2007. A Visual Basic spreadsheet macro for geochemical background analysis. *Ground Water*. Roč. 45, č. 5, s. 642–647. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2007.00325.x
- NARASIMHAN, T. N., 2005. Hydrogeology in North America: past and future. *Hydrogeology Journal*. Roč. 13, č. 1, s. 7–24. DOI: 10.1007/s10040-004-0422-5
- NARASIMHAN, T. N., 2010. Comment on guest editorial: “Models and model analysis”. *Ground Water*. Roč. 48, č. 6, s. 785–785. ISSN 1745–6584. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2010.00731.x
- NEŠETŘIL, Kamil, 2008a. *Aktualizovaná analýza rizika na lokalitě Luštěnice: Matematický model. Závěrečná zpráva*. Liberec: ET CONSULTING s.r.o.
- NEŠETŘIL, Kamil, 2008b. *DS PHM Benzina a.s. Šumperk-Vikýřovice Matematický model. Závěrečná zpráva*. Praha: AQUATEST a.s.
- NEŠETŘIL, Kamil, 2008c. *Jez u Děčína: Šíření kontaminace z náplavů: Kvantitativní hodnocení. Závěrečná zpráva 253070498000*. Praha: AQUATEST a.s.
- NEŠETŘIL, Kamil, 2009a. *Jez u Děčína: Šíření kontaminace z náplavů: Matematický model. Závěrečná zpráva 253090036000*. Praha: AQUATEST a.s.
- NEŠETŘIL, Kamil, 2009b. Modelování šíření a přirozené atenuace ropných uhlovodíků – praktická aplikace. In: Nad'a RAPANTOVÁ a Arnošt GRMELA, ed. *Voda – strategická surovina pro 21. století: Sborník 10. Česko-Slovenského mezinárodního hydrogeologického kongresu: 31. 8. – 3. 9. 2009*. Ostrava: VŠB – Technická univerzita, Esmedia DTP s.r.o., s. 163–166. ISBN 978-80-248-2026-2.
- NEŠETŘIL, Kamil, 2012a. Einfache und umfassende Modelle des Grundwassers: Jednoduché a komplexní modely podzemní vody. In: *Fachseminar „Wissenschaft & Praxis“: Odborný seminář „Věda a praxe“ 2009–2012*. Zittau: Hochschule Zittau/Görlitz, s. 49. ISBN 978-3-9812655-7-6.
- NEŠETŘIL, Kamil, 2012b. *Matematický model podzemní vody: areál firmy KAR-BOX s.r.o. Hořice. Závěrečná zpráva*. Liberec: Technická univerzita v Liberci.
- NEŠETŘIL, Kamil, 2014. Informační systém pro správu hydrogeologických dat. In: Josef V. DATEL, Jan NOVOTNÝ a Jindřiška HAUEROVÁ, ed. *Sborník příspěvků XIV. hydrogeologického kongresu Průzkum, využívání a ochrana podzemní vody: nové úkoly a výzvy. Sborník příspěvků II. inženýrskogeologického kongresu Role inženýrského geologa v současnosti*. Liberec: TUL, ČAH, ČAIG, s. USB: 3 strany, abstrakt na s. 83. ISBN 978-80-903635-4-0.
- NEŠETŘIL, Kamil a Jan ŠEMBERA, 2014. Groundwater data management system. In: Jorge Marx GÓMEZ, Michael SONNENSCHNEIN, Ute VOGEL, Andreas WINTER, Barbara RAPP a Nils GIESEN, ed. *EnviroInfo 2014 – ICT for Energy Efficiency: Proceedings of the 28th International conference on informatics for environmental protection. September 10–12, 2014, Oldenburg, Germany*. Oldenburg: BIS-Verlag, Carl von Ossietzky University Oldenburg, s. 301–306. ISBN 978-3-8142-2317-9. Dostupné z: enviroinfo2014.org, <http://oops.uni-oldenburg.de/id/eprint/1919>, <http://www.iai.kit.edu/ictensure/site?mod=litdb&subject=art&pid=X13287035&action=detail>

- NEUMAN, S. P. a P. J. WIERENGA, 2003. *A comprehensive strategy of hydrogeologic modeling and uncertainty analysis for nuclear facilities and sites*. NUREG/CR-6805. Tucson: University of Arizona. Dostupné z: <http://www.nrc.gov/reading-rm/doc-collections/nuregs/contract/cr6805/>
- NEWELL, Charles J., R. Kevin MCLEOD a James R. GONZALES, 1997. *BIOSCREEN, Natural Attenuation Decision Support System* [online]. US EPA. Dostupné z: www.epa.gov/water-research/bioscreen-natural-attenuation-decision-support-system
- NILSSON, B., A. L. HOJBERG, J. C. REFSGAARD a L. TROLDBORG, 2007. Uncertainty in geological and hydrogeological data. *Hydrology and Earth System Sciences*. Roč. 11, č. 5, s. 1551–1561. ISSN 1027-5606.
- NOVOTNÝ, Ota, Jan POUR a David SLÁNSKÝ, 2005. *Business intelligence: jak využít bohatství ve vašich datech*. Praha: Grada. Management v informační společnosti. ISBN 80-247-1094-3.
- OASIS, 2011. *Open Document Format for Office Applications (OpenDocument) Version 1.2 Part 2: Recalculated Formula (OpenFormula) Format*. OASIS Standard. Dostupné z: <http://docs.oasis-open.org/office/v1.2/os/OpenDocument-v1.2-os-part2.html>
- OBE, Regina a Leo HSU, 2011. *PostGIS in action*. Greenwich, Conn.: London: Manning; Pearson Education [distributor]. ISBN 978-1-935182-26-9.
- OCKAM, Guilielmus, 1495. *Quaestiones et decisiones in quattuor libros Sententiarum Petri Lombardi: Centilogium theologicum*. Lyon: Johannes Trechsel.
- OGC, 2014a. *Groundwater Interoperability Experiment 2 (GW2IE)* [online, vid. 22. června 2014]. Dostupné z: http://external.opengeospatial.org/twiki_public/HydrologyDWG/GroundwaterInteroperabilityExperiment2
- OGC, 2014b. *HDWG Groundwater 2 IE* [online, vid. 22. června 2014]. Dostupné z: <http://www.opengeospatial.org/projects/initiatives/gw2ie>
- ORESQUES, Naomi, 2000. Why believe a computer? Models, measures, and meaning in the natural world. In: Jill SCHNEIDERMAN, ed. *The earth around us: Maintaining a livable planet*. New York: W.H. Freeman, s. 70–82. ISBN 978-1-4668-1443-1.
- OULIDI, Hassane Jarar, Ralf LÖWNER, Lahcen BENAABIDATE a Joachim WÄCHTER, 2009. HydrIS: An open source GIS decision support system for groundwater management (Morocco). *Geo-Spatial Information Science*. Roč. 12, č. 3, s. 212–216. DOI: 10.1007/s11806-009-0048-9
- PARKHURST, David L. a C.A.J. APPELO, 1999. *User's guide to PHREEQC (version 2) — A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations*. Water-Resources Investigations Report 99-4259. Denver, Colorado: U.S. Department of the Interior, USGS. Dostupné z: http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc
- PASSADORE, Giulia, Martina MONEGO, Lorenzo ALTISSIMO, Andrea SOTTANI, Mario PUTTI a Andrea RINALDO, 2012. Alternative conceptual models and the robustness of groundwater management scenarios in the multi-aquifer system of the Central Veneto Basin, Italy. *Hydrogeology Journal*. Roč. 20, č. 3, s. 419–433. ISSN 1431-2174, 1435-0157. DOI: 10.1007/s10040-011-0818-y
- PEETERS, Luk J. M., 2015. Editor's Message: Stand on the shoulders of giants, don't hide behind them. *Hydrogeology Journal*. Str. 1–2. ISSN 1431-2174, 1435-0157. DOI: 10.1007/s10040-015-1247-0
- PERLIS, Alan J., 1982. Epigrams on programming. *SIGPLAN Notices*. Roč. 17, č. 9, s. 7–13. ISSN 0362-1340. DOI: 10.1145/947955.1083808

- PIROT, Guillaume, Philippe RENARD, Emanuel HUBER, Julien STRAUBHAAR a Peter HUGGENBERGER, 2015. Influence of conceptual model uncertainty on contaminant transport forecasting in braided river aquifers. *Journal of Hydrology*. Roč. 531, Part 1, Groundwater flow and transport in aquifers: Insights from modeling and characterization at the field scale, s. 124–141. ISSN 0022-1694. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2015.07.036
- PLUM, Hans, 2011. *Fachinformationssystem Hydrogeologie: Standards für ein digitales Kartenwerk – Ergänzung zur Hydrogeologischen Kartieranleitung mit 7 Anlagen [Hydrogeology Information System: Standards for a digital hydrogeological map. Supplement to the hydrogeologic mapping instructions]*. Stuttgart: Schweizerbart. Geologisches Jahrbuch Reihe G. ISBN 978-3-510-95990-7. Dostupné z: <http://www.schweizerbart.de/publications/detail/artno/189001300>
- POETER, Eileen, 2007. All models are wrong, how do we know which are useful? *Ground Water*. Roč. 45, č. 4, s. 390–391. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2007.00350.x
- POETER, Eileen a David ANDERSON, 2005. Multimodel ranking and inference in ground water modeling. *Ground Water*. Roč. 43, č. 4, s. 597–605. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2005.0061.x
- POPPER, Karl, 1997. *Logika vědeckého bádání*. 1. vyd. Přel. Jiří FIALA. Praha: OIKOYMENH. Oikúmené. ISBN 978-80-86005-45-4.
- POUR, Jan, Miloš MARYŠKA a Ota NOVOTNÝ, 2012. *Business intelligence v podnikové praxi*. Praha: Professional Publishing. ISBN 978-80-7431-065-2.
- PRUNAYRE, François-Xavier, Benjamin CHARTIER, Mathieu COUDERT, Yves JACOLIN, Jesse EICHAR a Eric LEMOINE, 2014. *Spatial extension for Talend: Opensource geospatial ETL SETL* [online, vid. 11. června 2014]. Dostupné z: <http://talend-spatial.github.io>
- PULVIRENTI, Adrián Sergio a María Carina ROLDÁN, 2011. *Pentaho Data Integration 4 cookbook: Over 70 recipes to solve ETL problems using Pentaho Kettle*. Packt. ISBN 978-1-84951-525-2.
- RANATUNGA, Kemachandra, Gavin WALKER a Paul A. SHEAHAN, 2011. Implementation of groundwater observations in the Water Data Transfer Format. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 26, č. 4, s. 549–550. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2010.10.005
- RAPANTOVÁ, Nad'a, Światosław KRZESZOWSKI, Arnošt GRMELA a Christian WOLKERSDORFER, 2012. Quantitative assessment of mine water sources based on the general mixing equation and multivariate statistics. *Mine Water and the Environment*. Roč. 31, č. 4, s. 252–265. ISSN 1025-9112, 1616-1068. DOI: 10.1007/s10230-012-0192-6
- REFSGAARD, Jens Christian a Hans Jørgen HENRIKSEN, 2004. Modelling guidelines – terminology and guiding principles. *Advances in Water Resources*. Roč. 27, č. 1, s. 71–82. ISSN 0309-1708. DOI: 10.1016/j.advwatres.2003.08.006
- REFSGAARD, Jens Christian, Anker Lajer HØJBERG, Ingelise MØLLER, Martin HANSEN a Verner SØNDERGAARD, 2009. Groundwater modeling in integrated water resources management – visions for 2020. *Ground Water*. Roč. 48, č. 5, s. 633–648. ISSN 0017467X. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2009.00634.x
- REFSGAARD, Jens Christian, Steen CHRISTENSEN, Torben O. SONNENBORG, Dorte SEIFERT, Anker Lajer HØJBERG a Lars TROLDBORG, 2012. Review of strategies for handling geological uncertainty in groundwater flow and transport modeling. *Advances in Water Resources*. Roč. 36, Special Issue on Uncertainty Quantification and Risk Assessment, s. 36–50. ISSN 0309-1708. DOI: 10.1016/j.advwatres.2011.04.006
- REFSGAARD, Jens Christian, Jeroen P. VAN DER SLUIJS, James BROWN a Peter VAN DER KEUR, 2006. A framework for dealing with uncertainty due to model structure error. *Advances in*

- Water Resources*. Roč. 29, č. 11, s. 1586–1597. ISSN 0309-1708. DOI: 10.1016/j.advwatres.2005.11.013
- REFSGAARD, Jens Christian, Jeroen P. VAN DER SLUIJS, Anker Lajer HØJBERG a Peter A. VANROLLE-GHEM, 2007. Uncertainty in the environmental modelling process – A framework and guidance. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 22, č. 11, s. 1543–1556. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2007.02.004
- RICH, David W., 2002. *Relational management and display of site environmental data*. Boca Raton, Florida: Lewis Publishers. ISBN 978-1-56670-591-2.
- ROACH, Jesse a Vince TIDWELL, 2009. A compartmental-spatial system dynamics approach to ground water modeling. *Ground Water*. Roč. 47, č. 5, s. 686–698. ISSN 0017-467X. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2009.00580.x
- ROJAS, Rodrigo, Samalie KAHUNDE, Luk PEETERS, Okke BATELAAN, Luc FEYEN a Alain DASSARGUES, 2010. Application of a multimodel approach to account for conceptual model and scenario uncertainties in groundwater modelling. *Journal of Hydrology*. Roč. 394, č. 3–4, s. 416–435. ISSN 0022-1694. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2010.09.016
- ROLDÁN, María Carina, 2013. *Pentaho Data Integration beginner's guide*. Second Edition. Birmingham: Packt. ISBN 978-1-78216-504-0. Dostupné z: <https://www.packtpub.com/hardware-and-creative/pentaho-data-integration-beginners-guide-second-edition>
- ROSS, Martin, Michel PARENT a René LEFEBVRE, 2005. 3D geologic framework models for regional hydrogeology and land-use management: a case study from a Quaternary basin of southwestern Quebec, Canada. *Hydrogeology Journal*. Roč. 13, č. 5, s. 690–707. ISSN 1431-2174. DOI: 10.1007/s10040-004-0365-x
- ŘÍHA, Jakub a Jan ŠEMBERA, 2014. Model vodní bilance jezera Chabařovice (Milada). In: Josef V. DATEL, Jan NOVOTNÝ a Jindřiška HAUEROVÁ, ed. *Sborník příspěvků XIV. hydrogeologického kongresu Průzkum, využívání a ochrana podzemní vody: nové úkoly a výzvy. Sborník příspěvků II. inženýrskogeologického kongresu Role inženýrského geologa v současnosti*. Liberec: TUL, ČAH, ČAIG. ISBN 978-80-903635-4-0.
- SAVENIJE, Hubert H. G., 2001. Equifinality, a blessing in disguise? *Hydrological Processes*. Roč. 15, č. 14, s. 2835–2838. ISSN 1099-1085. DOI: 10.1002/hyp.494
- SEDLÁK, Pavel, 2007. *Využití technologie GIS při rekonstrukci podloží severní části Hornomoravského úvalu* Doktorská disertační práce. Masarykova univerzita v Brně. http://is.muni.cz/th/44145/prif_d/
- SEIFERT, Dorte, Torben O. SONNENBORG, Jens Christian REFSGAARD, Anker L. HØJBERG a Lars TROLDBORG, 2012. Assessment of hydrological model predictive ability given multiple conceptual geological models. *Water Resources Research*. Roč. 48, č. 6, s. W06503. ISSN 1944-7973. DOI: 10.1029/2011WR011149
- SEIFERT, Dorte, Torben O. SONNENBORG, Peter SCHARLING a Klaus HINSBY, 2008. Use of alternative conceptual models to assess the impact of a buried valley on groundwater vulnerability. *Hydrogeology Journal*. Roč. 16, č. 4, s. 659–674. ISSN 1431-2174, 1435-0157. DOI: 10.1007/s10040-007-0252-3
- SELROOS, Jan-Olof, Douglas D. WALKER, Anders STRÖM, Björn GYLLING a Sven FOLLIN, 2002. Comparison of alternative modelling approaches for groundwater flow in fractured rock. *Journal of Hydrology*. Roč. 257, č.1–4, s. 174–188. ISSN 0022-1694. DOI: 10.1016/S0022-1694(01)00551-0
- SHU, Yanfeng, David RATCLIFFE, Michael COMPTON, Geoffrey SQUIRE a Kerry TAYLOR, 2015. A semantic approach to data translation: A case study of environmental observations data.

- SCHEIBE, Timothy D., Ellyn M. MURPHY, Xingyuan CHEN, Amy K. RICE, Kenneth C. CARROLL, Bruce J. PALMER, Alexandre M. TARTAKOVSKY, Ilenia BATTIATO a Brian D. WOOD, 2015. An analysis platform for multiscale hydrogeologic modeling with emphasis on hybrid multiscale methods. *Ground Water*. Roč. 53, č. 1, s. 38–56. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/gwat.12179
- SCHEJBAL, Ctirad, 2003. *Automatizovaný systém pro rychlé hodnocení uhelných ložisek s použitím univerzálního systému zobrazení hornin, přechodných hornin a uhlí*. 1. vyd. Ostrava: Vysoká škola báňská – Technická univerzita. Sborník vědeckých prací Vysoké školy báňské – Technické univerzity Ostrava: Řada hornicko-geologická. ISBN 978-80-248-0401-9.
- SINGH, Abhishek, Srikanta MISHRA a Greg RUSKAUFF, 2010. Model averaging techniques for quantifying conceptual model uncertainty. *Ground Water*. Roč. 48, č. 5, s. 701–715. ISSN 0017467X. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2009.00642.x
- SKOŘEPA, Jaroslav, 1993. *Děčín Rozbělesy. Závěrečná zpráva*. AQUATEST, Stavební geologie a.s. Praha.
- SKOŘEPA, Jaroslav, Petr CHARVÁT, Markéta HRKALOVÁ, Zdeněk JEZERSKÝ, Lucia LENCSESOVÁ, Kamil NEŠETRIL, Ondřej NOL, Aleš PACL, Věra PĚKNÁ, Ivan PERGLER a Tomáš VRÁNEK, 2009. *Hydrogeologický monitoring a posouzení pohybu podzemních vod na hranicích Polské, Německé a České republiky v povodí toků Horní Ploučnice, Nisy a Smědé, závěrečná zpráva 2008/2009*. Číslo úkolu: J241080220000. Praha: AQUATEST a.s.
- SOMMER, Ondřej, 2013. *Integrace prostorových dat do podnikových informačních systémů*. Univerzita Pardubice. Diplomová práce. Fakulta ekonomicko-správní: Ústav systémového inženýrství a informatiky. Dostupné z: <http://hdl.handle.net/10195/53691>
- SPATIALYTICS, 2013. *GeoKettle* [online]. Québec, Kanada: Spatialytics solutions inc. Dostupné z: <http://www.spatialytics.org/projects/geokettle/>
- STEADMAN, Sally, 2013. *Engineering Design*. 2013. University of Wyoming. [online, vid. 28. září 2015]. Dostupné z: http://www.uwyo.edu/ceas/current-students/classes/es1000ref/design_methodology/designmethodology1.ppt
- STEINIGER, Stefan a Andrew J.S. HUNTER, 2013. The 2012 free and open source GIS software map – A guide to facilitate research, development, and adoption. *Computers, Environment and Urban Systems*. Roč. 39, s. 136–150. ISSN 0198-9715. DOI: 10.1016/j.compenvurbsys.2012.10.003
- STRASSBERG, Gil, 2011. *Arc Hydro Groundwater: GIS for hydrogeology* [online]. Redlands, Calif: ESRI Press. ISBN 978-1-58948-198-5. Dostupné z: <http://esripress.esri.com/display/index.cfm?fuseaction=display&websiteID=192&moduleID=0>
- SWAIN, Nathan R., Kilisimasi LATU, Scott D. CHRISTENSEN, Norman L. JONES, E. James NELSON, Daniel P. AMES a Gustavious P. WILLIAMS, 2015. A review of open source software solutions for developing water resources web applications. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 67, s. 108–117. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2015.01.014
- ŠTÍREK, Pavel, 2014. *Automatizace transformací dat*. Liberec. Ročníkový projekt – PRJ2. Technická univerzita v Liberci.
- TALEB, Nassim Nicholas, 2011. *Černá labuť: následky vysoce nepravděpodobných událostí*. Přel. Jan HOŘÍNEK. Praha; Litomyšl: Paseka. ISBN 978-80-7432-128-3.
- TONKIN, M. a M. BECKER, 2005. Environmental Insite: A software package for ground water data visualization. *Ground Water*. Roč. 43, č. 4, s. 466–470. ISSN 1745-6584.
- TOPINKOVA, Barbora, Kamil NESETRIL, Josef DATEL, Ondřej NOL a Petr HOSL, 2007. Geochemical heterogeneity and isotope geochemistry of natural attenuation processes in a gasoline-

- contaminated aquifer at the Hnevice site, Czech Republic. *Hydrogeology Journal*. Roč. 15, č. 5, s. 961–976. DOI: 10.1007/s10040-007-0179-8
- TROLDBORG, Lars, Jens Christian REFSGAARD, Karsten Høgh JENSEN a Peter ENGESGAARD, 2007. The importance of alternative conceptual models for simulation of concentrations in a multi-aquifer system. *Hydrogeology Journal*. Roč. 15, č. 5, s. 843–860. ISSN 1431-2174, 1435-0157. DOI: 10.1007/s10040-007-0192-y
- UUSITALO, Laura, Annukka LEHIKONEN, Inari HELLE a Kai MYRBERG, 2015. An overview of methods to evaluate uncertainty of deterministic models in decision support. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 63, s. 24–31. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2014.09.017
- VAN DER SLUIJS, Jeroen P., Matthieu CRAYE, Silvio FUNTOWICZ, Penny KLOPROGGE, Jerry RAVETZ a James RISBEY, 2005. Combining quantitative and qualitative measures of uncertainty in model-based environmental assessment: the NUSAP system. *Risk Analysis*. Roč. 25, č. 2, s. 481–492. ISSN 1539-6924. DOI: 10.1111/j.1539-6924.2005.00604.x
- VELASCO, V., R. GOGU, E. VÁZQUEZ-SUÑÈ, A. GARRIGA, E. RAMOS, J. RIERA a M. ALCARAZ, 2013. The use of GIS-based 3D geological tools to improve hydrogeological models of sedimentary media in an urban environment. *Environmental Earth Sciences*. Roč. 68, č. 8, s. 2145–2162. ISSN 1866-6280, 1866-6299. DOI: 10.1007/s12665-012-1898-2
- VELASCO, V., I. TUBAU, E. VÁZQUEZ-SUÑÈ, R. GOGU, D. GAITANARU, M. ALCARAZ, A. SERRANO-JUAN, D. FERNÁNDEZ-GARCIA, T. GARRIDO, J. FRAILE a X. SANCHEZ-VILA, 2014. GIS-based hydrogeochemical analysis tools (QUIMET). *Computers & Geosciences*. Roč. 70, s. 164–180. ISSN 0098-3004. DOI: 10.1016/j.cageo.2014.04.013
- VON ASMUTH, Jos R., Kees MAAS, Martin KNOTTERS, Marc F.P. BIERKENS, Mark BAKKER, Theo N. OLSTHOORN, D. Gijsbert CIRKEL, Inke LEUNK, Frans SCHAARS a Daniel C. VON ASMUTH, 2012. Software for hydrogeologic time series analysis, interfacing data with physical insight. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 38, s. 178–190. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2012.06.003
- VOSS, Clifford I., 2005. The future of hydrogeology. *Hydrogeology Journal*. Roč. 13, č. 1, s. 1–6. ISSN 1431-2174, 1435-0157. DOI: 10.1007/s10040-005-0435-8
- VOSS, Clifford I., 2011a. Editor's message: Groundwater modeling fantasies —part 1, adrift in the details. *Hydrogeology Journal*. Roč. 19, č. 7, s. 1281–1284. ISSN 1431-2174, 1435-0157. DOI: 10.1007/s10040-011-0789-z
- VOSS, Clifford I., 2011b. Editor's message: Groundwater modeling fantasies—part 2, down to earth. *Hydrogeology Journal*. Roč. 19, č. 8, s. 1455–1458. ISSN 1431-2174, 1435-0157. DOI: 10.1007/s10040-011-0790-6
- WAGNER, Dr Bernhard, Birte SCHÄFER, Christian STROBL, Dr Christian MIKULLA, Dr Timo SPÖRLEIN, Dr Andreas BARTH a Manja SIESTE, 2006. Flächendatenbank für die hydrogeologische Karte im bayerischen Bodeninformationssystem [Spatial database for a hydrogeological map within the Bavarian Soil Information System]. *Grundwasser*. Roč. 11, č. 2, s. 89–98. ISSN 1430-483X, 1432-1165. DOI: 10.1007/s00767-006-0130-2
- WAINWRIGHT, John a Mark MULLIGAN, ed., 2004. *Environmental modelling : finding simplicity in complexity*. Chichester, West Sussex, England; Hoboken, NJ: Wiley. ISBN 0-471-49617-0.
- WAINWRIGHT, John a Mark MULLIGAN, ed., 2013. *Environmental modelling : finding simplicity in complexity*. 2nd edition. Oxford: Wiley-Blackwell. ISBN 978-0-470-74911-1. Dostupné z: <http://www.environmentalmodelling.net>
- WALKER, W.E., P. HARREMOËS, J. ROTMANS, J.P. VAN DER SLUIJS, M.B.A. VAN ASSELT, P. JANSSEN a M.P. KRAYER VON KRAUSS, 2003. Defining uncertainty: a conceptual basis for uncertainty

- management in model-based decision support. *Integrated Assessment*. Roč. 4, č. 1, s. 5–17. ISSN 1389-5176. DOI: 10.1076/iaij.4.1.5.16466
- WARMINK, J. J., J. A. E. B. JANSSEN, M. J. BOOIJ a M. S. KROL, 2010. Identification and classification of uncertainties in the application of environmental models. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 25, č. 12, s. 1518–1527. ISSN 1364–8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2010.04.011
- WHITEAKER, Timothy L., Norm JONES, Gil STRASSBERG, Alan LEMON a Doug GALLUP, 2012. GIS-based data model and tools for creating and managing two-dimensional cross sections. *Computers & Geosciences*. Roč. 39, s. 42–49. ISSN 0098-3004. DOI: 10.1016/j.cageo.2011.06.008
- WIDDOWSON, Mark A., Eduardo III MENDEZ, Steven BRAUNER, Francis H. CHAPELLE a Clifton C. CASEY, 2008. *Natural Attenuation Software (NAS)* [online]. VirginiaTech, USGS, NAVFAC. Dostupné z: <http://www.nas.cee.vt.edu>
- WIKIPEDIA CONTRIBUTORS, 2015. *A New Kind of Science* [online, vid. 7. října 2015]. Dostupné z: https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=A_New_Kind_of_Science&oldid=667402006
- WILSON, R.D., S.F. THORNTON a A. HUETTMANN, 2005. *CoronaScreen: Process-based models for natural attenuation assessment guidance for the application of na assessment screening models* [online]. Dostupné z: <http://www.corona.group.shef.ac.uk/downloads/coronascreenguidancenotes.pdf>
- WITTEN, I. H, Eibe FRANK a Mark A HALL, 2011. *Data mining: practical machine learning tools and techniques*. Burlington, MA: Morgan Kaufmann. ISBN 978-0-12-374856-0.
- WOJDA, Piotr a Serge BROUYÈRE, 2013. An object-oriented hydrogeological data model for groundwater projects. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 43, s. 109–123. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/j.envsoft.2013.01.015
- WOJDA, Piotr, Serge BROUYÈRE, Johan DEROUANE a Alain DASSARGUES, 2010. HydroCube: An entity-relationship hydrogeological data model. *Hydrogeology Journal*. Roč. 18, č. 8, s. 1953–1962. ISSN 1431-2174. DOI: 10.1007/s10040-010-0653-6
- YE, Ming, Karl F. POHLMANN, Jenny B. CHAPMAN, Greg M. POHLL a Donald M. REEVES, 2010. A model-averaging method for assessing groundwater conceptual model uncertainty. *Ground Water*. Roč. 48, č. 5, s. 716–728. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2009.00633.x
- YOUNG, Peter, 1998. Data-based mechanistic modelling of environmental, ecological, economic and engineering systems. *Environmental Modelling & Software*. Roč. 13, č. 2, s. 105–122. ISSN 1364-8152. DOI: 10.1016/S1364-8152(98)00011-5
- ZHENG, Chunmiao, 1998. *MT3DMS: A Modular 3-D Multi-Species Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion, and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems*. University of Alabama. Dostupné z: <http://hydro.geo.ua.edu/mt3d>
- ZHOU, Yangxiao a Henk HAITJEMA, 2012. Approximate solutions for radial travel time and capture zone in unconfined aquifers. *Ground Water*. Roč. 50, č. 5, s. 799–803. ISSN 1745-6584. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2011.00883.x

A. Příklady citátů z odborné literatury týkající se jednoduchosti a komplexnosti modelů a dobré praxe v modelování

“Jamieson (2000) pointed out that scientists live in a highly competitive environment where funding for research is limited. Involvement in policy-modeling projects helps scientists present themselves as real-world problem solvers, which helps secure funding for their scientific pursuits.” (Clement 2011, s. 626)

“The simulation results can be used to construct reasonable qualitative arguments as to why certain processes or events can or cannot occur. However, it is important that we understand the limits of these tools and recognize that they are better viewed as computer-aided thinking tools rather than computer-aided prediction tools.” (Clement 2011, s. 627)

“In summary, ‘hydrogeologic science’ is not well suited to quantitative prediction and is best suited to providing hydrogeologists with theoretical and science-based intuition that they can apply when suggesting solutions to complex practical problems. Hydrogeologists are faced with being primarily descriptive scientists rather than quantitative scientists, and can employ quantification only to the extent they ‘believe’ is meaningful and useful. Some hydrogeologic problems cannot be solved – they are too complex. This must be admitted and efforts should rather be applied to solvable problems. It should be a major role of hydrogeologists to help managers define the practical questions that are possible to answer.” (Voss 2005, s. 6)

“There is a direct correlation between the power of personal computers (PCs) and the complexity of models. The question is: Has the added complexity increased the level of groundwater understanding?” (Bredehoeft 2010, s. 328)

“Oreskes (2003) noted that we tend to have more intuitive faith in complex models because they allow us to simulate more processes. However, as we add more processes (and parameters) to a model, the overall certainty of its predictions might decrease. Ironically, the “truer” the model, the more difficult it is to show that it is “true.” (Clement 2011, s. 625)

“Freyberg (1988) noted that in a modeling class he taught, predicted system response was better simulated with more parsimonious but less well-calibrated models than with models calibrated using a large number of parameters to obtain a good fit (a phenomenon often referred to as ‘point calibration’).” (Hunt et al. 2007, s. 254)

“Victor Baker, the former President of the Geological Society of America, said ‘allowing the public to believe that a problem can be resolved ... through elegantly formulated ... models is the moral equivalent of a lie’ (Pilkey and Jarvis 2007, p. 188).” (Clement 2011, s. 627)

“Models lie and liars model.”

“During the 1960s, when the first numerical models appeared, there was great anticipation about their ability to solve a large number of practical problems in hydrogeology. This excitement has since undergone moderation. It is now recognized that numerical models can only be valuable in providing insights into the potential behavior of complex hydrogeological systems, and to test alternate hypotheses to better understand observed phenomena. Considering the inaccessibility of the Earth’s subsurface, the pervasive heterogeneity on many spatial scales, the strong interactions among fluid flow, deformation, heat flow, and chemical interactions, and lack of knowledge of future forcing functions, it will not be prudent to assume that numerical models will predict the future with confidence, even with the availability of the most powerful computing machines.” (Narasimhan 2005, s. 18)

“Bredehoeft’s statement, ‘For me the model is not an end in itself, but rather a powerful tool that organizes my thinking and my engineering judgment,’ is insightful. When we generate model results to very complex systems, the numbers are not as important as the patterns of behavior the numbers suggest. Often, the challenge is to assure ourselves that the results are credible. We meet this challenge by invoking our experience and intuition.” (Narasimhan 2010; Bredehoeft 2010, s. 328)

“*[Groundwater models]* ... are tools that are of great value in helping us test alternate hypotheses and behavioral possibilities. If the possibilities are well constrained with data, we treat them as predictions [...] The real value of the models is that they give a quantitative form to what we know qualitatively. In some cases, model output may reveal certain patterns we did not expect a priori. These “anomalies” occasionally help us comprehend the existence of unusual phenomena.” (Narasimhan 2010)

“Leavesley et al. (2002) proposed a new modelling paradigm: ‘this concept requires that we change the question of ‘which model is most appropriate for a specific set of criteria?’ to ‘what combination of process conceptualisations is most appropriate?’” (Branger et al. 2010, s. 1673)

“Wolfram feels that science is far too ad hoc, in part because the models used are too complicated and/or unnecessarily organized around the limited primitives of traditional mathematics. Wolfram advocates using models whose variations are enumerable and whose consequences are straightforward to compute and analyze.” (Wikipedia contributors 2015)

“Booch et al. defined a model: ‘simplification of reality created to better understand the system being created’.”

“Modeling should constitute a scientific expression of our ignorance rather than a claim to knowledge that we do not possess.” (Doherty 2011, s. 455)

“So why do we not embrace models as tools for encapsulating our knowledge and quantifying our ignorance? One reason is that human beings have always wanted to ‘see’ the future as if the veil of time were lifted. In pursuing his time-honored endeavor, complex models are the current prophetic tool of choice.” (Doherty 2011, s. 455)

“Simple models, on the other hand, are fast and stable—and they can dance.” (Doherty 2011, s. 455)

“However, all too often complexity wins the day—often for no other reason than to preemptively circumvent criticism that the model does not ‘look like’ what we imagine reality to look like.” (Doherty 2011, s. 455)

“Fools ignore complexity. Pragmatists suffer it. Some can avoid it. Geniuses remove it. ...Simplicity does not precede complexity, but follows it. ... In seeking the unattainable, simplicity only gets in the way. ... You can’t communicate complexity, only an awareness of it.” (Perlis 1982) – částečně citováno v hydrogeologickém kontextu: (Voss 2011a, s. 1281)

“Il semble que la perfection soit atteinte non quand il n’y a plus rien a ajouter, mais quand il n’y a plus rien a retrancher. (It seems that perfection is reached not when there is nothing more to add, but when nothing more can be removed.) (Terre des Hommes [Land of People] by Antoine de Saint Exupéry, a writer, poet and aviator; Saint Exupéry 1939)” (Voss 2011a, s. 1458)

“Simplicity is the final achievement. After one has played a vast quantity of notes and more notes, it is simplicity that emerges as the crowning reward of art. (Frédéric Chopin, a musician and composer, quoted in *If Not God, Then What?* by Fost 2007)” (Voss 2011b, s. 1455)

“Managers need to be educated regarding what model analysis can and cannot provide. The model should generally not be what is contracted as a product, as is most often the case today; rather, an improvement of understanding of the system in question should be contracted, and par-

ticular advice sought from the analyst, who may or may not choose to employ groundwater modeling toward achieving this goal. Managers should buy advice from a competent hydrogeologist; they should not buy a groundwater model.” (Voss 2011b, s. 1457)

“The methods of science depend on our attempts to describe the world with simple theories. Theories that are complex become unstable, even if they happen to be true. Science may be described as the art of over-simplification: the art of discerning what we may with advantage omit.” (Popper 1982) Citováno podle (Hill a Tiedeman 2007, s. 268)

“If you can't reduce a difficult engineering problem to just one 81×11-inch sheet of paper, you will probably never understand it. (Ralph Brazelton Peck, a soil mechanics engineer, quoted in DiBiagio and Flaate 2000).” (Voss 2011a, s. 1284)

“Models are to be used, not to be believed in! Dooge (1972)” Citováno podle Ebel a Loague (2006, s. 2887)

“Our models should be designed expressly to maximize the possibility of discovering that of which we are ignorant. Beck (2002)” Citováno podle: (Ebel a Loague 2006, s. 2887)

“Kirkby (1996): Models are thought experiments which help refine our understanding of the dominant processes acting ... While most simulation models may be used in a forecasting mode, the most important role of models is as a qualitative thought experiment, testing whether we have a sufficient and consistent theoretical explanation of physical processes. The best model can only provide a possible explanation which is more consistent with known data than its current rivals. Every field observation, and especially the more qualitative or anecdotal ones, provides an opportunity to refute, or in some cases overturn, existing models and the theories which lie behind them.” (Ebel a Loague 2006, s. 2895)

“... application of distributed hydrological models is more an exercise in prophecy than prediction.” (Beven 1993, s. 41)

“... looking for more hydrological understanding through detailed distributed modelling is a dead-end track ...” (Savenije 2001, s. 2835)

“The fact that *[the model]* is an approximation does not necessarily detract from its usefulness because models are approximations. All models are wrong, but some are useful.” (Box a Draper 1987, s. 424) – citováno podle Bakker (2013, s. 313).

B. Dokumentace případových studií

Dokumentace případových studií je na přiloženém CD ve složce „B 2 Pripadove studie“:

2_1 Ekvifinalita_Interakce_povrch_a_podzem_vody.pdf	21 stran
2_2 Srovn_jednoduch_a_kompl_md1 Jez 2008.pdf	35 stran
2_2 Srovn_jednoduch_a_kompl_md1 Jez 2008_model.xls	1 list MS Excel
2_2 Srovn_jednoduch_a_kompl_md1 Jez 2009.pdf	26 stran
2_3 Komb_princip_odlis_modl Delka_kont_mraku_a_dovol_cerpani.pdf	17 stran
2_4 Transp_rop_uhlovod.pdf	41 stran
2_5 Transp_chlor_uhlovod_advekcni_a_bilancni.pdf	25 stran

C. Dokumentace HgIS

Dokumentace datového modelu a obsah některých tabulek je na přiloženém CD ve složce „C 3 HgIS“.

Datový model je ve dvou základních verzích:

- Výměnný formát (dokumentace v PDF).
- Datový model pro serverovou databázi v plnohodnotné verzi pro nasazení na server i zjednodušené verzi pro snadnější pochopení struktury (schéma v PDF a dokumentace tabulek v HTML).

Sešit obsah_tabulek.xlsx obsahuje číselník veličin, obsah pomocných tabulek pro převod jednotek a pro náhradu textových řetězců (přejmenování), další číselníky a kódovnik klasifikace objektů. Formát tabulek odpovídá výměnnému formátu.