
**BOUNDARY FIELD PROBLEMS AND
COMPUTER SIMULATION**

**DATORMODELĒŠANA UN
ROBEŽPROBLĒMAS****ADAPTION OF PROGRAM REMO USED FOR MODELLING HYDROGEOLOGICAL
PROBLEMS****HIDROĢEOLOĢIJAS PROBLĒMU MODELĒŠANAS PROGRAMMAS REMO
ADAPTĀCIJA**

Romans Janbickis, Mg. sc. ing., researcher

Kaspars Krauklis, Mg. sc. ing., researcher

Inta Lace, Mg. sc. ing., leading researcher

Riga Technical University, Faculty of Computer Science and Information Technology
Environment Modelling Centre,
Address: 1/4 Meza str., Riga, LV-1048, Latvia
Phone: +371 67089511
E-mail: emc@cs.rtu.lv

Atslēgas vārdi: hidroģeoloģiskie modeļi, datu interpolācija, digitālās kartes, Fortran, programmatūras adaptācija

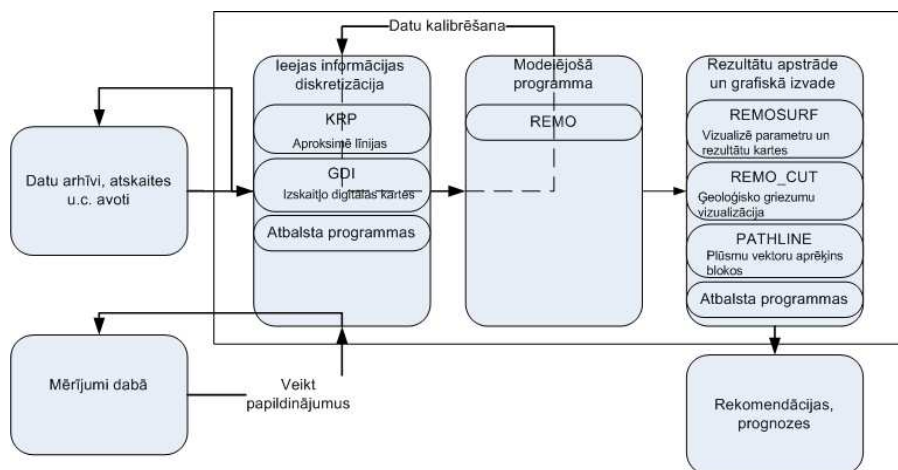
Ievads

Vides modelēšanas centra (VMC) ilggadējie pētījumi un iestrādes lauku teorijas robežuzdevumu risināšanas jomā ar skaitliskām metodēm (uz CSM M220A, ES 1022) veicināja datormodelēšanas programmu kompleksa izstrādi. Sākotnēji VMC izstrādātā modelējošā programma OMEN bija universāla un tika izmantota dažādu robežproblēmu risināšanai, piemēram, naftas ieguves režīmu optimizācijai, integrālo shēmu modelēšanai un projektēšanai, ievērojot siltuma efektu utt.

Modelējošā programma REMO sāka veidot 1991. gadā, būvējot datorizēto reģionālo hidroģeoloģisko modeli (REMO) "Lielā Rīga" Latvijas centrālajai daļai [1, 2]. Programma ir paredzēta hidroģeoloģijas problēmu risināšanai un tika izveidota uz programmas OMEN bāzes, papildinot to ar moduļiem, kas nodrošināja ieejas datu interpolāciju (piemēram, ūdens ņemšanas aku debītu sadalījumu uz modeļa režģa punktiem utt.), ļāva izveidot poligonu ūdens plūsmu balansa aprēķināšanai, modelēt drenāžas sistēmu elementus, utt. Kopš 1996. gada, izmantojot programmu REMO, ir izveidoti daudzi hidroģeoloģiskie modeļi (HM) gan ūdensgūtvēm, gan piesārņojuma migrācijas pētīšanai pazemes ūdeņos.

HM veidošanas procesu var iedalīt trijos etapos (1. att.):

1. datu sagatavošana par modeļa vidi un robežnosacījumiem, informācijas diskretizācija, digitālo karšu sagatavošana;
2. datormodelēšana;
3. pēcaprāde un vizualizācija (grafiski attēlo modelēšanas rezultātus ar SURFER [8]).



1. att. Hidroģeoloģisko modeļu veidošanas shēma

Fig. 1. Scheme of creating hydrogeological models

Ar katru gadu arvien aktuālākas kļūva problēmas, kas saistītas ar novecojušo programmas izstrādes vidi (MS DOS) un FORTRAN-77 translatora SVS C³ ierobežojumiem. Ierobežojumi uz izmantojamās atmiņas izmēriem liedza veidot lielākus vai detalizētākus HM. Datu sagatavošanas etapa un programmas digitālo karšu iegūšanai (KRP, GDI, GRD) modernizācija (pāreja uz FORTRAN 90 standartu) un adaptācija WINDOWS XP videi veikta 2007. gadā un aprakstīta [3].

Programma REMO veic uzdevumus, kuru izpildei pēdējos gados ir pieejama alternatīva – komercprogramma GROUNDWATER VISTAS [4]. Abas tiek pielietotas hidroģeoloģijas problēmu risināšanai. Problēmas rodas HM ģeoloģisko datu skaņošanas un kalibrācijas procesā, jo nav detalizēta skaidrojuma kādā veidā programma GROUNDWATER VISTAS interpretē ievadītos datus un nevar piekļūt programmā izmantotajiem ģeoloģiskajiem datiem tieši. Piemēram, dokumentācijā nav aprakstīts kā modelī tiek iestrādāts hidrogrāfiskais tīkls un kā regulēt tā piesaisti. Programmā REMO modeļa uzstādījuma un ģeoloģiskie dati glabājas ārējos failos, kas ir viegli maināmi un, atsākot darbu ar modeli, nav atkārtoti jāievada modeļa uzstādījuma dati [5]. Programmas REMO datu plūsmas shēma dota 2. att. REMO programmā bija realizēts interaktīvais režīms, kad modelēšanas laikā ar iteratīvo ligzdu faktorizācijas metodi (Nested Factorisation Conjugate Gradient (NFCG)) risina algebrisko vienādojumu sistēmu, varēja uz ekrāna sekot līdž iterāciju procesa norisei (skat. 3. att.). Šī iespēja ievērojami atviegloja modeļa kalibrāciju [6].

Pašreiz VMC datormodelēšanai aktīvi izmanto programmu GROUNDWATER VISTAS, jo datoru operatīvā atmiņa un ātrdarbība ļauj strādāt ar liela izmēra HM, kas neapšaubāmi dod precīzākus rezultātus, ja modelim ir pietiekoši daudz un saskaņoti ģeoloģiskie dati. Kamēr varēja strādāt ar ierobežota izmēra modeļiem skaņošanai un kalibrācijai tika izmantota programma REMO, kas ievērojami samazināja modeļu kalibrēšanas laiku, jo parasti ģeoloģiskie dati ir ne tikai nepilnīgi, bet pat pretrunīgi. Tāpēc VMC 2007. gada beigās tika pieņemts lēmums par programmas REMO atjaunošanu un modernizāciju, lai to izmantotu HM kalibrēšanas procesa atvieglošanai.

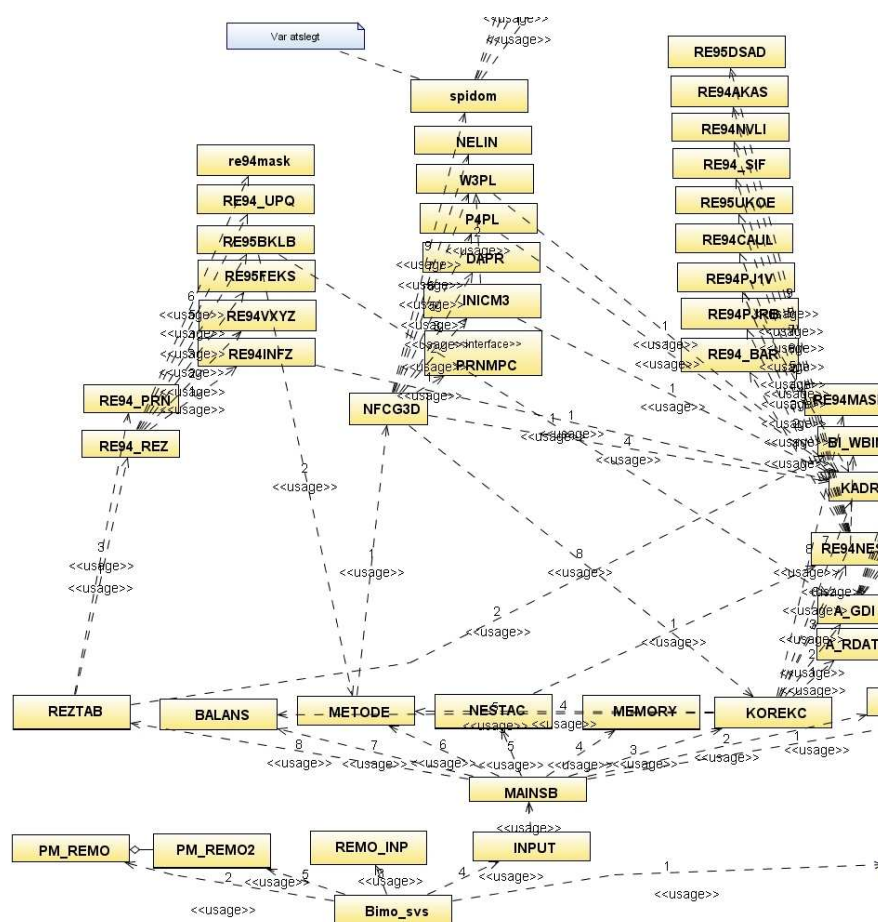
Iemesli, kāpēc nepieciešama programmas REMO modernizācija:

1. HM izmēru ierobežojumi, kurus nosaka izmantotā SVS C³ FORTRAN-77 kompilatora direktīvas, kas liedz adresēt lielākus masīvus (HM režģa plaknē ne vairāk kā 10^4 mezglu);
2. MS DOS operacionālās sistēmas uzdotie atmiņas ierobežojumi;
3. programmas iekšējais ierobežojums uz HM plakņu skaitu (≤ 9);
4. apgrūtināta rezultātu grafiskā izvade, ko nosaka realizācija MS DOS vidē.

Programmas REMO atjaunošanas gaita

Atjaunošanas process tika uzsākts ar mēģinājumu izveidot izpildāmo failu programmai REMO. Problēmas, saistītās ar MS DOS vides un SVS C³ FORTRAN-77 kompilatora izmantošanu, risinājums aprakstīts [3]. Līdz ar to par kompilatoru, kas kalpos iepriekš izmantotā SVS C³ FORTRAN-77 kompilatora vietā, tika izmantots Intel Visual Fortran Compiler 10.0 [7]. Uz atjaunošanas sākumu nebija zināms un nav zināms joprojām pilns programmas REMO izmantoto moduļu skaits un klāsts. Līdz ar to jau pirmajās kompilācijas reizēs izmantotā izstrādes vide uzrādīja ap 40 dažādu procedūru un funkciju, kuru izsaukumi nav nosegti, jo trūkst izmantotās standartprogrammu (Application Programming Interface (API)) bibliotēkas vai arī procedūru pirmtekstu. Problēmas risināšanai bija nepieciešams izprast trūkstāmo moduļu funkcijas kopējās programmas struktūrā, kā arī atdalīt neesošās VMC izstrādātās procedūras no API bibliotēku procedūrām. Tāpēc tika izstrādāts REMO programmas moduļu savstarpējās atkarības grafs, kas redzams 4. att.

Grafā tika identificēti moduļi, kuriem nav pieejams pirmteksts un noteikta to nozīme programmas ietvaros. Analīzes rezultātā tika atklāts, ka trūkst vismaz 15 VMC izstrādāto moduļu, no kuriem vairums nodrošina lietotāja interfeisu t.i. grafisko izvadi. Ievērojot patreizējās prasības pielietojamo HM izmēriem un pie sasniegtās datoru ātrdarbības, lietotāja interfeiss (vizuālā kontrole modelēšanas procesā) nav iespējama. Tāpēc tika pieņemts lēmums sākotnējā programmas versijā neiekļaut grafisko izvadi, kā arī veikts mēģinājums sameklēt atsevišķu aprēķinos izmantoto moduļu pirmtekstus. Neesošo bibliotēku API izsaukumi tika atslēgti, iepriekš apkopojot API lietotāja dokumentācijā atrodamo informāciju par tiem. Rezultātā tika realizēta programmas REMO pirmā versija Windows operētājsistēmu saimei.



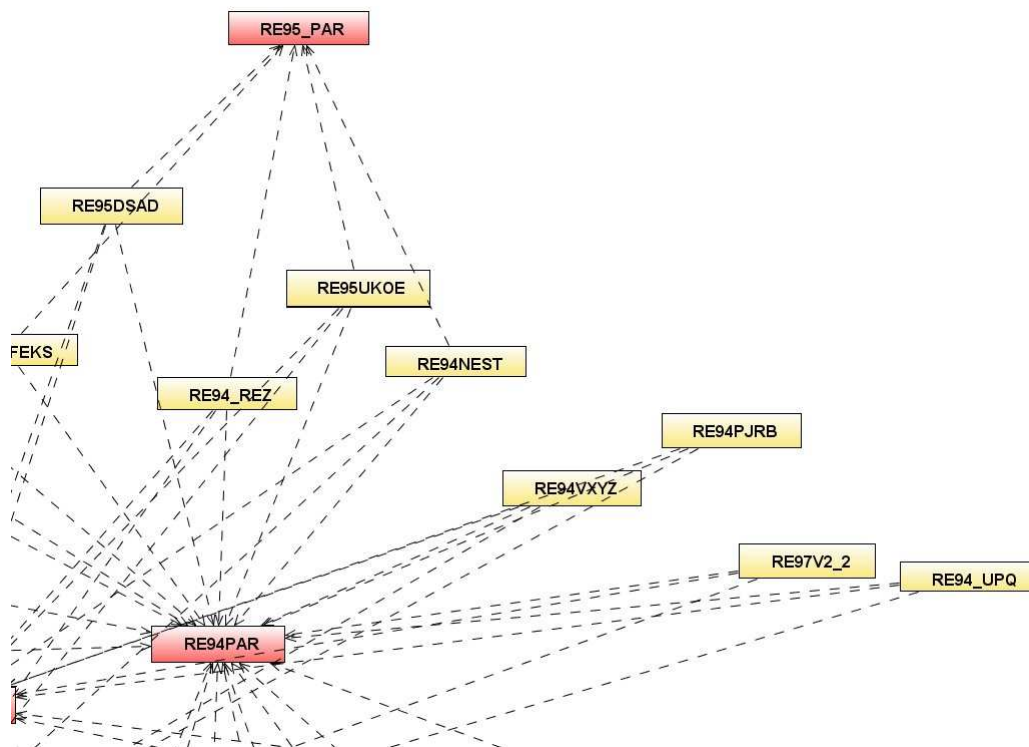
4. att. Programmas REMO moduļu savstarpējās atkarības grafa fragments
Fig. 4. Fragment of module interconnection graph for REMO program

Pieļaujamo modeļa izmēru palielināšana

Programma REMO sākotnējā versijā DOS operētājsistēmai izmantoja maksimāli pieļaujamo atmiņas izmēru (100×100 mezglu HM plaknē). Atmiņas izmēra ierobežojumi tiešā veidā attiecināmi uz izmantojamo datu struktūru izmēriem. Hidroģeoloģiskā modeļa dati tiek apstrādāti, izmantojot vairākus programmas viendimensiju masīvus. Līdz ar to, lai palielinātu modeļa izmēru, nepieciešams palielināt modelim pakārtoto masīvu, kā arī citu atbalsta datu struktūru izmērus. Process realizēts, realizējot sekojošus secīgus soļus:

1. masīvu, kas atbildīgi par modeļa datu glabāšanu, identificēšana;
2. datu struktūru atkarību grafa izveide;
3. masīvu izmēru formulu noskaidrošana vai ieguve;
4. masīvu izmēru palielināšana līdz maksimāli pieejamam.

Masīvu, kas atbildīgi par modeļa datu glabāšanu, identificēšana tika realizēta, apzinot procedūru ietvaros izmantotās koplietojamās datu struktūras un kopīgi ar programmas izstrādātājiem veicot analīzi visiem iekļautajiem mainīgajiem, parametriem. Šeit būtu jāatzīmē programmas REMO datu apstrādes specifika. Programma saņem datus no ieejas un konfigurācijas failiem un iesūta atbilstošos mainīgos kopīgi izmantojamās datu blokos (common block). Modeļa datu plūsmas shēma redzama 2. att.



5. att. Koplietojamo datu bloku izmantošanas grafa fragments programmai REMO

Fig.5. Fragment of common data application graph for REMO program

Lai nošķirtu datu struktūras to izmantojuma ziņā, programmas REMO ietvaros tika izstrādāts kopīgi izmantojamo struktūru atkarību grafs. Grafā attēlotas saites starp ikvienu REMO moduli ar datnēm, kas glabā koplietojamo datu struktūru aprakstu. Izstrādātais grafs pamatoja neizmantoto datņu atšķelšanu, kā arī precizēja pirmā soļa rezultātus.

Datu struktūru, kas tiek izmantotas aprēķinu veikšanai hidroģeoloģiskam modelim, izmēri ir atkarīgi no:

1. modeļa horizontu skaita, plaknes X, Y izmēriem;
2. noteikta veida funkcionālas atkarības;

3. kompilatora ierobežojumiem uz aizņemtās atmiņas izmēru.

Lai būtu iespējams pielāgot mainīgo un parametru vērtības maksimālās izmantojamās atmiņas ierobežojumam, tika meklēta funkcionālā atkarība no visiem augšminētiem elementiem. Tika apzināta programmas dokumentācija, programmas pirmteksti, kā arī iegūta informācija no programmas izstrādātājiem. Precīzi mainīgo izmēri tika noteikti un ieviesti eksperimentālā ceļā. Iepriekš minēto darbību rezultātā ir iegūts programmas REMO izpildmodulis, kas strādā WINDOWS XP vidē ar pieļaujamiem plaknes (horizonta) izmēriem 989×989 mezglu punkti, bet ar ierobežotu plakņu skaitu ≤ 9 .

Secinājumi

Programmas „REMO” atjaunošanas un modernizācijas process tiek turpināts. Realizēta jauna programmas versija darbam WINDOWS XP operētājsistēmas vidē. Līdz ar to ir atvieglots programmas darbs kopā ar citiem, moderniem rīkiem, kas tiek izmantoti modelēšanas procesā. Atjaunošanas gaitā programmas pašreizējā versija ir zaudējusi lietotāja grafisko interfeisu, kas ir saistīts ar daudzu programmā iekļauto moduļu pirmtekstu neesamību. Tika palielināti modeļa plakņu izmēri līdz 10 reizēm. Līdz ar to programma atvieglos darbu ar lielākiem modeļiem, kā arī būs iespējams iegūt precīzākus modelēšanas rezultātus. Līdz šim nav atrisināts jautājums par konstanta plakņu skaita ierobežojuma noņemšanu, kas iestrādāts pārāk dziļi programmas moduļos. Turpmākais atjaunošanas un modernizācijas process ir atkarīgs ne vien no programmas REMO atjaunošanas rezultātiem, bet arī no programmu apkalpojošo programmu atjaunošanas, kas kopīgi ar modelējošo programmu realizē ceļu no sākotnējiem risināmās problēmas ieejas datiem līdz vizuālam 3D modelim.

Literatūras saraksts

1. Computer based hydrogeological model „LARGE RIGA” / Atruskievics J., Janbickis R., Krutofal T., Lace I., Levina N., Slangens J., Spalvins A., Viksne Z. // Proceedings of Latvian-Danish seminar on Groundwater and Geothermal Energy” 1994, April 13-14, Jurmala, Scientific proceedings of RTU, series Boundary field problems and computers (35-th issue), 1994.-203.-224.p.
2. Spalviņš A. „Lielās Rīgas” hidroģeoloģiskā modeļa II kārtas elementu izstrāde un lāgošana / Zinātniski pētnieciskā darba atskaite, tēma 5971/93, RTU, Rīga, 1993. – 83 lpp.
3. Spalviņš A., Šlangens J., Krauklis K. Ģeoloģisko datu interpolācijas programmu modernizācija // Rīgas Tehniskās universitātes zinātniskie raksti. 5. sēr., Datorzinātne. Datormodelēšana un robežproblēmas. 33.(49)sēj. (2007) 118. – 129. lpp.
4. Guide to using Groundwater Vistas, 2004, Version 4, Environment simulations Inc.
5. Janbickis R., Lace I. Software arrangements of the regional hydrogeological model REMO.// Scientific proceedings of RTU, series Boundary field problems and computers, Environment Modelling (39-th issue) / Riga: RTU, 1996.- 50-58.p.
6. Spalvins A., Janbickis R. Algorithms for calibrating regional hydrogeological model „LARGE RIGA” // Proceedings of international seminar on Environment Modelling, 1995, October 9-12, Jurmala, Scientific proceedings of RTU, series Boundary field problems and computers (36-th issue), 1995. -217.- 226.p.
7. Intel Visual Fortran Compiler 10.0, Professional and Standard Editions, for Windows* - Intel Software Network, <http://www.intel.com/cd/software/products/asmo-na/eng/compilers/278834.htm>
8. Golden Software, Inc. (2002) SURFER-8. User's Guide:

Janbickis R., Krauklis K., Lāce I. Hidroģeoloģijas problēmu modelēšanas programmas REMO adaptācija

Rakstā dots RTU Vides Modelēšanas Centra izstrādātās modelējošās programmas REMO īss pielietojuma skaidrojums un tās salīdzinājums ar atbilstošo komercprogrammu GROUNDWATER VISTAS. Apzinātas programmas REMO priekšrocības hidroģeoloģisko modeļu kalibrēšanas procesā.

Modelējošā programma REMO sāka veidot 1991. gadā, būvējot datorizēto reģionālo hidroģeoloģisko modeli (REMO) "Lielā Rīgā" Latvijas centrālajai daļai. Programma ir paredzēta hidroģeoloģijas problēmu risināšanai un tika izveidota uz universālas modelējošās programmas OMEN bāzes, kas arī bija izstrādāta VMC, papildinot to ar moduļiem, kas nodrošināja hidroģeoloģijas problēmu modelēšanas specifiku. Kopš 1996. gada, izmantojot programmu REMO, ir izveidoti daudzi hidroģeoloģiskie modeļi gan ūdensgūtvēm, gan piesārņojuma migrācijas pētīšanai pazemes ūdeņos Latvijā un arī ārzemēs. Eksploatācijas gaitā programma REMO daudzkārt modernizēta un papildināta ar jaunām funkcionālām iespējām: ūdens ņemšanas aku debetu sadalījuma interpolācijas metodes režģa punktiem, ūdens plūsmu balansa aprēķināšana poligonos, drenāžas sistēmas elementu modelēšanu. Tā kā šīs programmas izstrāde bija uzsākta 90. gadu sākumā, tas noteica sākotnējo programmēšanas līdzekļu izvēli: DOS vide, FORTRAN 77. Lai izmantotu tās iespējas, ko sniedz mūsdienu programmatūra un aparatūras resursi, veikta programmas modernizācija un adaptācija. Veikta programmas REMO atjaunošanas process, kura gaitā izveidota jauna programmas versija. Veikta pāreja uz valodas FORTRAN 90 standartu, un iegūts programmas REMO izpildmodulis WINDOWS XP vidē. Modeļa plakņu izmēri palielināti 100 reizes, bet ar ierobežotu plakņu skaitu ≤ 9 . Nav iekļauts lietotāja grafiskais interfeiss, jo trūkst vairāk kā 15 programmas moduļu pirmtekstu.

Janbickis R., Krauklis K., Lace I. Adaption of program REMO used for modelling hydrogeological problems

In the publication, the recent adaption of the modelling program REMO is considered. It was developed by the Environment Modelling Centre (EMC) of the Riga Technical University. The program is compared with the licensed system GROUNDWATER VISTAS. The REMO program is handy for calibration of hydrogeological models. The program was originated in 1990 when the regional hydrogeological model (REMO) for the central part of Latvia has to be created. REMO modelled hydrogeological processes. It was based on the more universal software OMEN (also developed by EMC). To account for hydrogeological processes, some specific modules were included. Since 1996, many hydrogeological models have been developed for Latvia and abroad by using REMO. The models considered problems of well fields supplying drinking water and migration of contaminants in groundwater. During its exploitation, REMO was updated and many special applications were introduced: interpolation of well rates on the model grid, computing of groundwater balance for polygon areas, modelling elements of drainage systems. Because REMO was originated in 1991, the DOS environment and FORTRAN 77 were applied to create REMO. In order to apply resources of modern software and hardware, partial updating and adaption of REMO has been accomplished: the FORTRAN 90 has been applied in the WINDOWS XP environment; the former maximal grid plane size of 100×100 nodes has been enlarged to 989×989 . However, the graphical interface of software module has not been recovered yet, because about 15 its original programme texts are not found. The number of grid planes remains limited $n \leq 9$.

Янбицкий Р., Крауклис К., Лаце И. Адаптирование программы моделирования гидрогеологических проблем REMO

В статье дано краткое описание программы REMO, её применение, а также сравнение с аналогичной коммерческой программой GROUNDWATER VISTAS. Отмечены преимущества программы REMO в процессе калибровки гидрогеологических моделей.

Разработка моделирующей программы REMO начата в 1991 году при создании гидрогеологической модели „Lielā Rīga” для центральной части Латвии. Программа, предназначенная для решения гидрогеологических проблем, была создана на базе универсальной моделирующей программы OMEN, которая также является разработкой Центра моделирования окружающей среды, дополнив последнюю модулями, обеспечивающими специфику моделирования гидрогеологических проблем. Начиная с 1996 года, при использовании программы REMO было создано множество гидрогеологических моделей для моделирования систем водоснабжения, а также для исследования миграции загрязнения в подземных водах Латвии и других стран. При эксплуатации программа REMO многократно модернизирована, добавлена новая функциональность, например, распределение дебита скважин водоснабжения по точкам сетки блока, вычисление баланса потоков воды в полигонах, моделирование элементов дренажных систем. Время создания программы моделирования обусловило выбор среды реализации: операционная система ДОС, язык программирования FORTRAN-77. Чтобы использовать возможности, предоставляемые современными программными и аппаратными средствами, произведена модернизация и адаптация программы. Произведён переход на стандарт FORTRAN-90, создан исполняемый модуль для операционной системы WINDOWS XP. Размеры плоскостей модели увеличены в 100 раз. Произведён процесс обновления программы REMO, однако программа, не содержит графически пользовательский интерфейс. Причиной тому утрата исходных текстов для более 15 модулей.