

CHIBANAL: ΜΙΑ ΒΑΣΗ ΑΡΧΕΙΟΘΕΤΗΣΗΣ, ΕΛΕΓΧΟΥ ΑΞΙΟΠΙΣΤΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑΣ ΥΔΡΟΧΗΜΙΚΩΝ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ

Κ. Παπαδόπουλος*

ΣΥΝΟΨΗ

Η πρόσφατη βελτίωση της τεχνολογίας που αφορά στους Προσωπικούς Υπολογιστές (PC) και τα περιφερειακά τους συνέβαλε πολύ στην ανάπτυξη προγραμμάτων για τη διαχείριση, τον έλεγχο και την επεξεργασία των υδροχημικών δεδομένων. Προγράμματα που στόχο έχουν να αντιλήσουν τα μέγιστα από την υφιστάμενη πληροφορία.

Στην εργασία αυτή παρουσιάζεται ένα πακέτο προγραμμάτων (CHIBANAL) που δημιουργήθηκε από το συγγραφέα με στόχο τη λειτουργική αρχειοθέτηση, τον έλεγχο της αξιοπιστίας, την επεξεργασία και την ανάλυση υδροχημικών δεδομένων.

RESUME

Le progress, fait ces dernieres annees dans le domaine de la technologie concernant les ordinateurs personnels et leur periferiques, a beaucoup aide le developpement de logiciels crees pour la gestion, le control de fiabilite et le traitement des donnees hydrochiques pour avoir le maximum de l'information hydrogeologique.

Il est presente dans ce travail, un ensemble de programmes (sous le noms de CHIBANAL) visant a la mise en fichier fonctionnelle des donnees hydrochimiques, leur control de fiabilite, leur traitement et leur analyse.

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η πληθώρα των υδροχημικών δεδομένων που συλλέγονται από τις διάφορες υπηρεσίες, η μέτρια ποιότητά τους και η αναγκαιότητα ταχείας και σε βάθος ανάλυσής τους έχει από πολλού θέσει το θέμα της δημιουργίας ενός λογισμικού που θα αντιμετωπίσει τα προβλήματα λειτουργικής αρχειοθέτησης, ελέγχου της αξιοπιστίας, επεξεργασίας και ανάλυσής τους.

Το πακέτο προγραμμάτων που παρουσιάζεται έχει καταρτιστεί με στόχο την επίλυση των προβλημάτων αυτών. Απαρτίζεται από μία σειρά εκτελέσιμων προγραμμάτων των οποίων ο πηγαίος κώδικας έχει γραφεί σε γλώσσα προγραμματισμού Quick Basic.

2. Η ΔΟΜΗ ΤΗΣ ΒΑΣΗΣ ΑΡΧΕΙΟΘΕΤΗΣΗΣ

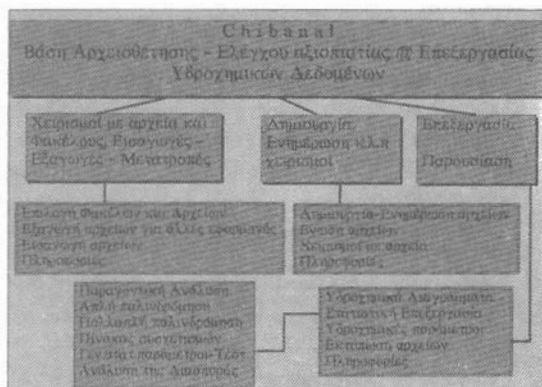
Η αρχειοθέτηση των δεδομένων με το πακέτο των προγραμμάτων CHIBANAL γίνεται κατά υδατικό διαμέρισμα. Υπάρχει ένας φάκελος (DIR) για κάθε ένα από τα 14 υδατικά διαμερίσματα της χώρας.

Τα αρχεία που δημιουργούνται είναι μορφής ASCII. Η δημιουργία του CHIBANAL άρχισε σε μία εποχή όπου τα μαγνητικά μέσα αποθήκευσης είχαν

τεράστια ανάπτυξη και κατά συνέπεια δεν δόθηκε μεγάλη βαρύτητα στην επιλογή μορφής αρχείων που θα επέτρεπαν την εξοικονόμηση χώρου.

Πέραν των φακέλων των υδατικών διαμερισμάτων έχουν προβλεφθεί: α. ένας φάκελος εργασίας όπου μπορούν να μεταφερθούν αρχεία διαφορετικών υδατικών διαμερισμάτων για να υποστούν από κοινού μια επεξεργασία. β. η δυνατότητα εργασίας σε περιβάλλον που ο χρήστης θα ορίσει (δισκέτες ή άλλοι φάκελοι).

Για εργασίες που επιβάλλουν τη χρήση ειδικών αρχείων δίδεται η δυνατότητα δημιουργίας τους και μετατροπής τους στα αντίστοιχα γενικής χρήσης. Αυτά αποθηκεύονται στο περιβάλλον που ο χρήστης θα ορίσει (φάκελοι υδατικών διαμερισμάτων ή άλλα περιφερειακά όπως δισκέτες). Γενικότερα όλα τα δεδομένα που εισάγονται από το πληκτρολόγιο με κάθε εφαρμογή, καταχωρούνται σε αρχεία του μαγνητικού μέσου φύλαξης και μπορούν να επαναχρησιμοποιηθούν.



Εικ. 1: Οργανόγραμμα του πακέτου Chibanal

μετατροπές αρχείων. γ. Παρουσίαση και επεξεργασία των δεδομένων.

Οι δυνατότητες που προσφέρει ο κάθε κατάλογος και που περιγράφονται επιγραμματικά στα αντίστοιχα κλισέ της εικ. 1 θα αναπτυχθούν παρακάτω.

Ειδική μέριμνα έχει ληφθεί για τη συνεχή ενημέρωση του χρήστη επί των δυνατοτήτων της κάθε επιλογής. Υπάρχουν σε κάθε κύριο κατάλογο εργασιών επιλογές με τις οποίες λαμβάνονται γενικές πληροφορίες για τις δυνατότητες που αυτός προσφέρει. Επίσης σε όλους τους υποκαταλόγους εργασιών κάθε επιπέδου (μέχρι πέντε επίπεδα) και σε κάθε επιλογή δίνεται βοηθητικό κείμενο που αναφέρεται στις δυνατότητες της επιλογής.

4. ΧΕΙΡΙΣΜΟΙ ΜΕ ΑΡΧΕΙΑ ΚΑΙ ΦΑΚΕΛΟΥΣ

Από τον πρώτο κατάλογο εργασιών παρέχονται οι δυνατότητες :

α. Επιλογής του περιβάλλοντος εργασίας, και των αρχείων που θα χρησιμοποιηθούν. Ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να προβεί σε διάφορους χειρισμούς με τα αρχεία κάθε φακέλου όπως να επιθεωρήσει θεματικά τα αρχεία του, να αντιγράψει, να απαλείψει και να επιλέξει αρχεία. Κατά την επιλογή ή την επιθεώρηση των αρχείων ο χρήστης λαμβάνει πληροφορίες για τον αριθμό μεταβλητών και παρατηρήσεων που περιέχονται στο αρχείο, τον τύπο και της μονάδες του αλλά και την πλήρη περιγραφή που δίδεται κατά τη δημιουργία του.

β. Δημιουργίας αρχείων που μπορούν να χρησιμοποιηθούν τόσο από άλλα πακέτα προγραμμάτων όσο και από άλλες εφαρμογές του CHIBANAL.

Τα αρχεία που απευθύνονται σε άλλα προγράμματα έχουν τη μορφή πινάκων και μπορούν να είναι τριών τύπων (ASCII Standard, comma delimited, " and comma delimited). Τα περισσότερα προγράμματα δέχονται έναν από τους τύπους αυτούς.

Τα αρχεία που δημιουργούνται για τις εφαρμογές του CHIBANAL περιέχουν

3. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΩΝ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΩΝ ΤΟΥ ΠΑΚΕΤΟΥ

Η γενική οργάνωση του CHIBANAL παρουσιάζεται στην εικ. 1. Τρεις κύριοι κατάλογοι εργασιών δίνουν δυνατότητες για :

α. Διαχείριση των φακέλων και αρχείων.

β. Δημιουργία, ενημέρωση και

παρουσίαση των δεδομένων.

δεδομένα που απαιτούνται από τις εφαρμογές για τις οποίες προορίζονται και στην μορφή που αυτές το απαιτούν. Έτσι π.χ τα αρχεία για τον υπολογισμό των ιοντικών σχέσεων και των ισορροπιών του ανθρακοασβεστιτικού συστήματος περιέχουν τις απαιτούμενες από αυτό μεταβλητές ενώ για τις ανάγκες στατιστικών επεξεργασιών μπορούν να δημιουργηθούν αρχεία της ίδιας μεταβλητής διαφορετικών αρχείων.

Πέραν των αρχείων για διάφορα Λογισμικά φύλλα δημιουργούνται και ειδικά αρχεία για πακέτα που δε δέχονται τέτοιου τύπου αρχεία (βγαίνουν αρχεία για το Hydrocom και το STAT-ITCF).

Δημιουργούνται επίσης αρχεία δεδομένων και γραφικών παραστάσεων για το πακέτο γραφικών Grapher (for DOS ή for Windows) με τα οποία επιτυγχάνονται οι πλέον συνήθεις υδροχημικές απεικονίσεις στις οποίες θα αναφερθούμε στην περιγραφή του μενού επεξεργασίας δεδομένων.

γ. Εισαγωγής δεδομένων από αρχεία άλλων προγραμμάτων εφόσον αυτά βρίσκονται σε μορφή πινάκων και ενός από του τύπου ASCII που αναφέρθηκαν παραπάνω. Όλες σχεδόν οι εφαρμογές τύπου Λογισμικών Φύλλων ή Στατιστικών πακέτων έχουν τη δυνατότητα εξαγωγής τέτοιων αρχείων. Γενικά εισάγονται όλοι οι τύποι αρχείων που μπορούν να εξαχθούν.

5. ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑ ΕΝΗΜΕΡΩΣΗ ΑΡΧΕΙΩΝ ΚΑΙ ΛΟΙΠΟΙ ΧΕΙΡΙΣΜΟΙ

Ο δεύτερος αυτός κατάλογος εργασιών επιτρέπει :

α. Να δημιουργηθούν και να ενημερωθούν αρχεία. Η βάση δεδομένων περιέχει 38 μεταβλητές μεταξύ των οποίων επιλέγονται αυτές των χημικών αναλύσεων που θα εισαχθούν. Εάν υπάρχουν μεταβλητές που δεν περιέχονται στη βάση μπορούν να προστεθούν ορίζοντας απλώς το όνομά τους. Κατά την ενημέρωση των αρχείων η καταχώριση είναι ταυτόχρονη και είναι δυνατό να γίνουν πολλοί χειρισμοί τόσο με τις παρατηρήσεις όσο και με τις μεταβλητές ώστε να δημιουργηθούν αρχεία (επιλογή μέρους, πρόσθεση μεταβλητών, επιλογές με βάση τις τιμές μιας μεταβλητής κ.λ.π).

β. Να ενωθούν αρχεία που έχουν τόσο τον ίδιο αριθμό παρατηρήσεων και διαφορετικές μεταβλητές όσο και τον ίδιες μεταβλητές. Στη δεύτερη αυτή περίπτωση οι παρατηρήσεις του δεύτερου αρχείου τοποθετούνται στο τέλος του πρώτου.

γ. Να γίνουν διάφοροι χειρισμοί με τα δημιουργημένα αρχεία. Με τις επιλογές του μενού αυτού μπορούν να δημιουργηθούν νέες μεταβλητές από τις υπάρχουσες με διάφορες μαθηματικές πράξεις. Μπορούμε επίσης να αναδιατάξουμε τις παρατηρήσεις και να μεταθέσουμε το αρχείο μας τοποθετώντας τις μεταβλητές στη θέση των παρατηρήσεων αλλά και να ανασκευάσουμε τις τιμές του. Στα πλαίσια αυτά μια από τις σημαντικές μετατροπές είναι και η μετατροπή μονάδων των τιμών των αρχείων μεταξύ των p.p.m , mg/l και mmol/l. Οι μετατροπές αυτές μαζί με μια σειρά άλλες μας διευκολύνουν όταν θέλουμε να επεξεργαστούμε τα δεδομένα του αρχείου ή ορισμένα από αυτά με συγκεκριμένο τρόπο.

6. ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑ ΚΑΙ ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ

Η δομή του πακέτου αυτού είναι τέτοια που επιτρέπει την ανάπτυξη μιας σειράς προγραμμάτων που θα αξιοποιούν τα δεδομένα των αρχείων που έχουν δημιουργηθεί και ενημερωθεί.

Ο έλεγχος αξιοπιστίας των δεδομένων που έχουν εισαχθεί γίνεται κατά την επεξεργασία τους και επισημαίνεται η ύπαρξη σφαλμάτων στο χρήστη.

Πέρα από τον έλεγχο της αξιοπιστίας, ο κατάλογος εργασιών αυτός επιτρέπει την στατιστική επεξεργασία των δεδομένων, τον υπολογισμό σειράς υδροχημικών παραμέτρων και την παρουσίαση δεδομένων και αποτελεσμάτων. Οι εργασίες που εκτελούνται θα αναπτυχθούν παρακάτω. Λόγω οικονομίας χώρου δε θα δοθούν

πολλά παραδείγματα των εφαρμογών. Για τον ίδιο λόγο αλλά και διότι δεν αποτελεί αντικείμενο αυτής της εργασίας δεν θα προβούμε σε αξιολόγηση των αποτελεσμάτων.

Να σημειωθεί ότι σε όλες τις εφαρμογές δίνεται η δυνατότητα επεξεργασίας μέρους των δεδομένων. Σε κάθε αρχείο που τοποθετείται στη μνήμη υπάρχει δυνατότητα απάλειψης των παρατηρήσεων ή των μεταβλητών που δεν επιθυμούμε να υποστούν την επεξεργασία.

Προκειμένου να εξαχθούν υδρογεωλογικά συμπεράσματα η λογική του πακέτου κατά την επεξεργασία ακολουθεί τα εξής βήματα: α. Ειδικές γραφικές παραστάσεις. β. Υπολογισμός υδροχημικών παραμέτρων. γ. Στατιστική ανάλυση.

6.1 Ειδικές γραφικές παραστάσεις (υδροχημικά διαγράμματα).

Όπως προαναφέρθηκε από την επιλογή του πρώτου μενού "εξαγωγή αρχείων για άλλες εφαρμογές" είναι δυνατή η δημιουργία αρχείου το οποίο να χρησιμεύει για τη γραφική απεικόνιση των χημικών αναλύσεων κατά τα πρότυπα που έχουν προτείνει διάφοροι ερευνητές για το σκοπό αυτό (HEM., 1970., LLOYD J.W & HEATHCOTE, 1985).

Τα αρχεία αυτά περιέχουν όλες τις πληροφορίες που χρησιμοποιούνται από πρότυπα γραφικών παραστάσεων (Templates) που δημιούργησε ο συγγραφέας στο πακέτο γραφικών παραστάσεων Grapher (για DOS και για Windows). Υπάρχουν δηλαδή τόσο οι ανασκευασμένες (σύμφωνα με τον τύπο του γραφήματος) τιμές όσο και οι περιγραφές των εικόνων, των δειγμάτων και στοιχείων που βοηθούν στην ανάγνωση και ερμηνεία του γραφήματος.

Με τον τρόπο αυτό δημιουργούνται οι ακόλουθες γραφικές απεικονίσεις υδροχημικών δεδομένων.

- Διαγράμματα DUROV (εκτεταμένο)
- Διαγράμματα PIPER
- Διαγράμματα STIF
- Διαγράμματα WATERLOT
- Διαγράμματα S.A.R

Τα διαγράμματα αυτά μπορούν να δημιουργηθούν και μέσω του ίδιου του προγράμματος που αφού δημιουργήσει τα αρχεία γραφικών παραστάσεων που δέχεται το πακέτο GrapherTM, τρέχει το πρόγραμμα αυτό για την εμφάνισή των γραφημάτων στην οθόνη και την ενδεχόμενη εκτύπωσή τους.

Στις εικ. 2-6 δίδονται παραδείγματα των παραπάνω διαγραμμάτων.

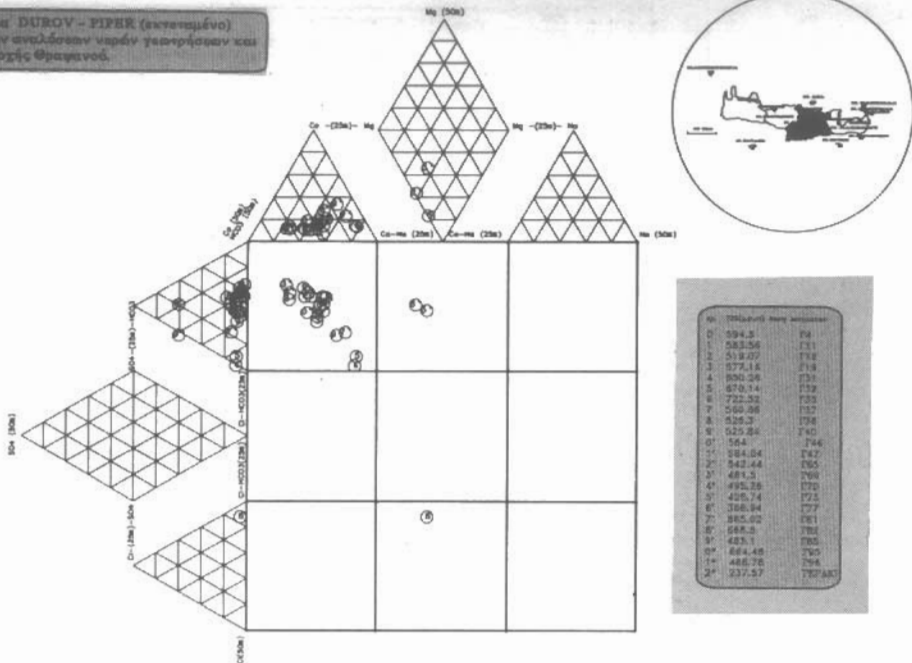
6.2 Υπολογισμός υδροχημικών παραμέτρων

Με το πρόγραμμα αυτό υπολογίζονται μια σειρά υδροχημικές παράμετροι που βοηθούν στην αξιολόγηση των αποτελεσμάτων χημικών αναλύσεων. Από τη επεξεργασία λαμβάνουμε

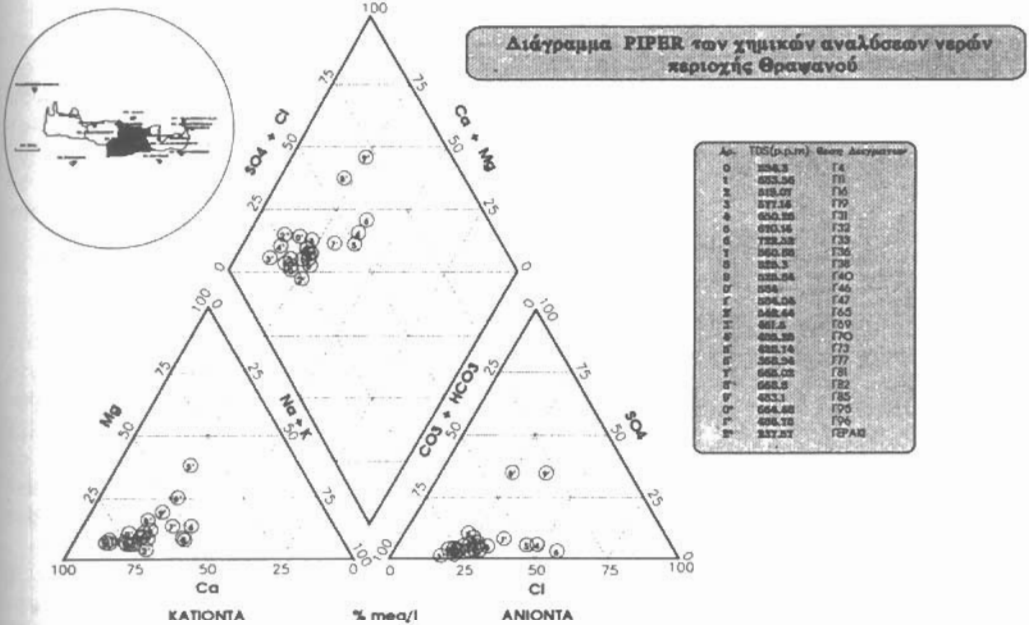
- Τις μεταβλητές εισόδου σε meq/l και σε p.p.m (είναι οι συγκεντρώσεις των στοιχείων των αναλύσεων) όπως και την ποσοστιαία αναλογία
- Το σφάλμα στο ιοντικό ισοζύγιο
- Τα χαρακτηριστικά του CO₂-H₂O-Ανθρακικά συστήματος (Olive Ph. a,b)
- ◇ pH Ισορροπίας ασβεστίτη
- ◇ Δείκτης κορεσμού δολομίτη
- ◇ Δείκτης κορεσμού Αραγωνίτη
- ◇ Μερική πίεση του CO₂ (%)
- ◇ Μόνιμη και παροδική σκληρότητα σε °F
- Τις σχέσεις (Mg⁺⁺/Ca⁺⁺), (Cl⁻/HCO₃⁻), ((Cl⁻)-(Na⁺))/Cl⁻, (Mg⁺⁺)+(Ca⁺⁺)/Na⁺, (SO₄⁻/Cl⁻), (SO₄⁻/HCO₃⁻), (B/Cl⁻), (Sr⁺⁺/Cl⁻), (Br⁻/Cl⁻), (K⁺/Cl⁻), (I⁻/Cl⁻), (Sr⁺⁺/I⁻), (Ca⁺⁺/Sr⁺⁺) (SCHOELLER. H)
- Τις συντεταγμένες PIPER και DUROV το S.A.R, το συντελεστή Revelle, το δείκτη Ryznar, τον βαθμό αλκαλίωσης.

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη "Θεόφραστος" - Τμήμα Γεωλογίας. Α.Π.Θ.

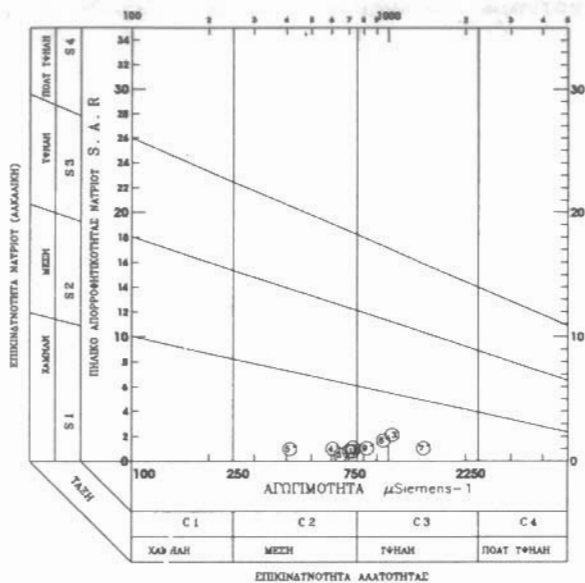
Διάγραμμα DUROV - PIPER (εκτεταμένο)
των χημικών αναλύσεων νερών γεωτρήσεων και
πηγών περιοχής Θρασανού.



Εικ. 2: Διάγραμμα DUROV - PIPER (εκτεταμένο) που δημιουργήθηκε μέσω του Grapher Fw

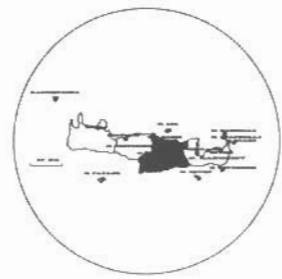


Εικ. 3: Διάγραμμα Piper που δημιουργήθηκε από το πρόγραμμα μέσω του Grapher Fw



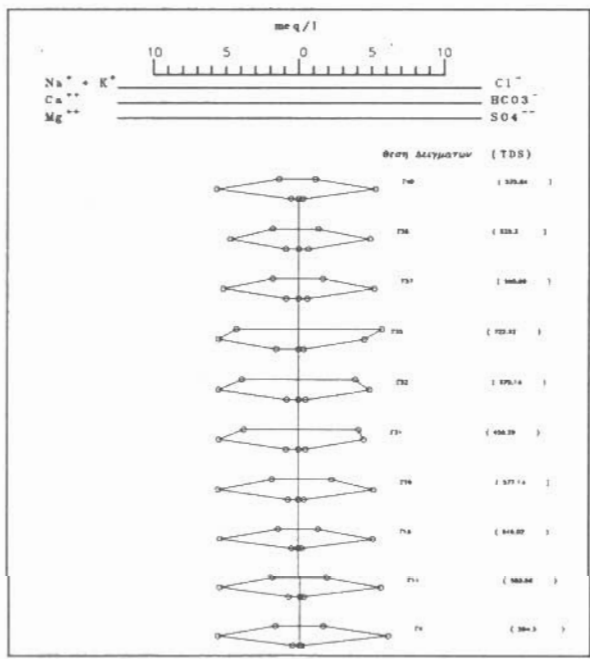
Διάγραμμα αρδευτικής καταλληλότητας (S.A.R.) χημικές αναλύσεις νερόν γεωερέσεων και πηγών περιοχής Θραναού.

Αρ.	Σ.Α.Α.	Βαθ.Αλατ.	Σελ./% θεση αεργασιων	
1	319.07	15.42	29.12	Γ16
3	850.26	37.22	31.49	Γ31
7	635.1	14.44	27.8	Γ38
8	325.84	18.18	30.81	Γ40
3	495.26	13.07	30.81	Γ70
4	428.24	25.36	23.55	Γ75
5	398.84	22.2	19.3	Γ77
6	695.02	31.3	34.06	Γ81
7	688.3	21.5	38.55	Γ82
9	664.66	22.97	32.29	Γ85

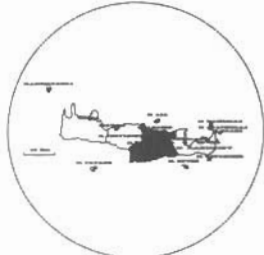
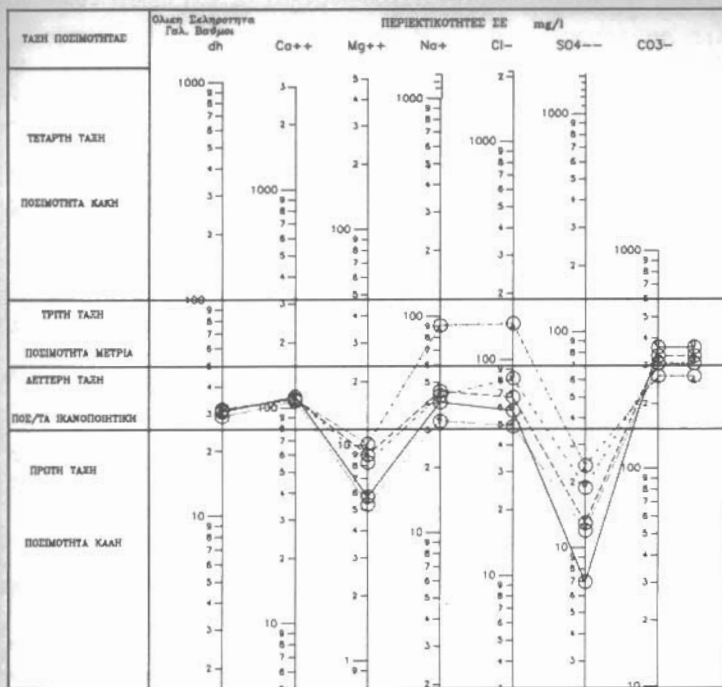


Εικ. 4: Διάγραμμα αρδευτικής καταλληλότητας (S.A.R.) που δημιουργήθηκε από το πρόγραμμα μέσω του Grapher Fw

Πολυγωνικά διαγράμματα παρουσίσεως χημικών αναλύσεων νερόν γεωερέσεων και πηγών περιοχής Θραναού.



Εικ.5: Πολυγωνικά διαγράμματα παρουσίσεως χημικών αναλύσεων που δημιουργήθηκαν από το πρόγραμμα μέσω του Grapher Fw



Αρ.	Τύπος (μ.μ.μ.)	Θεση	Δεξαμενή
0	594.5	74	
1	583.56	71	
2	519.07	76	
3	577.14	79	
4	656.26	73	

Εικ. 6: Διάγραμμα ποσιμότητας νερού κατά Waterlot που δημιουργήθηκαν από το πρόγραμμα μέσω του Grapher Fw

Στον πίνακα 1 δίδεται ένα παράδειγμα των εκτυπωμένων αποτελεσμάτων της εφαρμογής αυτής.

Τα αποτελέσματα της επεξεργασίας αρχείων με πολλές χημικές αναλύσεις μπορούν, αντί της εκτύπωσης, να καταχωρηθούν σε αρχείο ώστε να εκτυπωθεί το μέρος από αυτά που ενδιαφέρει το χρήστη. Στην περίπτωση αυτή, πέραν των τύπων των αρχείων που αναφέρθηκαν παραπάνω, δίδεται η δυνατότητα να καταχωρηθούν σε αρχεία όμοια με αυτά της βάσης των δεδομένων. Είναι έτσι δυνατή η επεξεργασία των αποτελεσμάτων.

6.3 Στατιστική ανάλυση

Η στατιστική ανάλυση του πακέτου περιλαμβάνει:

- τον υπολογισμό των περιγραφικών στατιστικών παραμέτρων όπως: Αριθμητικό, γεωμετρικό, αρμονικό και τετραγωνικό μέσο όρο, τυπική απόκλιση και διασπορά, μέγιστη, ελάχιστη, πιθανότερη και διάμεση τιμή, τους συντελεστές ασυμμετρίας, ασυμ. του Pearson, επιπεδότητας, την ανηγμένη μεταβλητή $z(i) = (\chi(i) - M.O) / \chi(i)$, την τυπική απόκλιση και τη διασπορά. Οι παράμετροι υπολογίζονται τόσο για το σύνολο των μεταβλητών όσο και κατά μεμονωμένες μεταβλητές. Στη δεύτερη αυτή περίπτωση είναι δυνατός ο υπολογισμός για το δείγμα τιμών όπως και για τον πληθυσμό του οποίου αποτελεί μέρος.

- τον υπολογισμό των συντελεστών συσχετισμού μεταξύ όλων των μεταβλητών. Οι συντελεστές αυτοί όπως και οι περιγραφικές παράμετροι που προαναφέρθηκαν υπολογίζονται, παρουσιάζονται στην οθόνη και είναι δυνατό να καταχωρηθούν σε αρχεία τα οποία τυπώνονται ή λαμβάνονται με επεξεργαστές κειμένου ώστε να ενσωματωθούν σε κείμενα.

- τον υπολογισμό των πειραματικών συχνοτήτων μετά από χωρισμό σε τάξεις

Πίν. 1: Χαρακτηριστικές τιμές του ανθρακασβεστίτικού συστήματος και άλλων υδροχημικών παραμέτρων.

ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΓΕΩΛΟΓΙΚΩΝ ΚΑΙ ΜΕΤΑΛΛΕΥΤΙΚΩΝ ΕΡΕΥΝΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΥΔΡΟΓΕΩΛΟΓΙΑΣ
Αθήνα Β. Ελλάδα

ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ

ΣΗΜΕΙΟ ΥΛΑΤΟΣ : Γ37			ΘΕΣΗ ή ΚΟΙΝΟΤΗΤΑ : ΘΡΑΚΙΑΝΟΥ			ΠΕΡΙΟΧΗ : ΘΡΑΚΙΑΝΟΥ			ΝΟΜΟΣ : ΗΡΑΚΛΕΙΟΥ		
ΥΨΟΜΕΤΡΟ : μ.			ΓΕΩΓΡ. ΠΛΑΤΟΣ :			Γ. ΜΕΚΟΣ :			ΗΜ. ΔΕΙΓ/ΨΙΑΣ : 19-1-93		
ΒΑΘΟΣ ΔΕΙΓ/ΨΙΑΣ : 125 μ. μ.			ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΕΙΣ : Αεγματοληψία μετά απο άντληση 3 ώρων								
ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΕΙΣ ΥΔΑΤΟΡΟΥ											
ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑ : 673 μSiemens/cm			ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑ : 19.4 °C			pH : 7.05			Eh : -99 millivolts		
ΑΤΙΑΑ. O2 : -99 mgr/l			ΑΤΙΑΑ. CO2 : 0 mgr/l			H2S : 0 mgr/l					
ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟΥ											
pHεργ. : 7.05			ΟΛΙΚΗ ΣΚΑΗΡΟΤΗΤΑ : 22.5 °F			ΑΔΚΑΛΙΚΟΤΗΤΑ : 21.3 °F			TDS= 421.8538		
ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ											
ΚΥΡΙΑ ΙΟΝΤΑ ! ppm ! meq/l ! αναλογία% ! ppm ! meq/l ! αναλογία% ! ΙΟΝΤΙΚΕΣ ΣΧΕΣΕΙΣ (σε meq/l) !											
Ca++	103.6000!	5.16964!	17.85 !	SO4--	29.0000!	0.60378!	5.00 !	Ca++/Mg++	5.95 !		
Mg++	10.5600!	0.86867!	1.82 !	Cl-	59.0000!	1.66439!	10.17 !	(Ca+Mg)/(Na+K)	3.38 !		
Na+	40.4000!	1.75740!	6.96 !	NO3-	1.5000!	0.02420!	0.26 !	SO4--/Cl-	0.36 !		
K+	1.1000!	0.02813!	0.19 !	NO2-	0.0030!	0.00300!	0.00 !	Na+/Cl-	1.06 !		
HCO3-	317.0000!	5.19563!	54.62 !	NH4+	0.3780!	0.01194!	0.07 !	SO4--/HCO3-	0.12 !		
CO3--	0.0000!	0.00000!	0.00 !	PO4--	-99.0000!	-99.00000!	-99.00 !	Ca++/Sr++	323486.63 !		
ΔΕΥΤΕΡ. ΙΟΝΤΑ ! ppm ! meq/l ! αναλογία% ! ppm ! meq/l ! αναλογία% ! I-/Cl- -99.00 !											
B	0.0009!	0.00090!	0.00 !	F-	-99.0000!	-99.00000!	-99.00 !	Li+/Cl-	0.00 !		
SiO2	17.8000!	7.80000!	3.07 !	I-	-99.0000!	-99.00000!	-99.00 !	Sr++/Cl-	0.00 !		
	0.0000!	0.00000!	0.00 !	Br-	0.0007!	0.00008!	0.00 !	B/Cl-	0.00 !		
ΙΧΝΟΣΤΟΙΧΕΙΑ ! ppm ! meq/l ! αναλογία% ! ppm ! meq/l ! αναλογία% ! Na+/K+ 62.48 !											
Li+	0.0003!	0.00001!	0.00 !	Fe++	0.0050!	0.00018!	0.00 !	Ca++/Cl-	3.11 !		
Sr++	0.0007!	0.00002!	0.00 !	Mn++	0.0006!	0.00002!	0.00 !	Sr++/I-	-99.00 !		
Ba++	0.0005!	0.00005!	0.00 !	Pb	0.0008!	0.00003!	0.00 !	Cl-/Br-	190063.95 !		
Al+++	0.0030!	0.00043!	0.00 !	Cu++	0.0003!	0.00030!	0.00 !	ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ REVELLE	0.32 !		
ΑΝΑΛΟΓΙΕΣ ! PIPER ! DUROV ! ! PIPER ! DUROV ! ΔΕΙΚΤΗΣ ΚΟΡΕΣΜΟΥ ΑΡΑΓΩΝΙΤΗ (ISA) ! ΔΕΙΚΤΗΣ ΚΟΡΕΣΜΟΥ ΔΟΛΟΜΙΤΗ (ISd) !											
Ca++	66.1 !	33.0 !	Cl-	22.3 !	11.1 !	ΜΕΡΙΚΗ ΠΙΕΣΗ ΤΟΥ CO2 (%)	1.59 !	AEATA pH	-0.03 !		
Mg++	11.1 !	5.6 !	SO4--	8.1 !	4.0 !	ΠΑΡΟΛΙΚΗ ΣΚΑΗΡΟΤΗΤΑ (°F)	26.00 !	ΔΕΙΚΤΗΣ Ryznar	7.11 !		
(Na+K)	22.8 !	11.4 !	HCO3+CO3	69.6 !	34.8 !	ΜΟΝΙΜΗ ΣΚΑΗΡΟΤΗΤΑ (°F)	4.32 !	pH Ισορροπίας(αοβ.)	7.08 !		
ΣΥΝΤΕΛΕΜΕΝΟΣ DUROV : X= 18.80 Y= 82.44 S.A.R.= 1.01 ΒΑΘ. ΑΛΚΑΛΙΣΤΕΣ : 22.82 ΣΦΑΛΜΑ ΑΝΑΛΥΣΗΣ : 2.4 (%) !											

-99= δεν υπάρχουν στοιχεία ή πολύ μεγάλος αριθμός για τις ιοντικές σχέσεις και εφόσον ο διαιρέτης=0

ίσων πιθανοτήτων ή ίσων διαστημάτων τιμών με τον οποίο μπορούμε να λάβουμε τις συχνότητες σε % επί του συνόλου όσο και σε αριθμούς τιμών κατά τάξη. Το πρόγραμμα δίνει τη δυνατότητα δημιουργίας αρχείων με τα αποτελέσματα των υπολογισμών αυτών.

· στατιστικές δοκιμές (τεστ) όπως (BOBBE ,1978):

· à δοκιμή προσαρμογής της κανονικής και της λογοκανονικής κατανομής στα

δεδομένα μεταβλητών. Εφαρμόζεται η δοκιμή χ^2 και είναι δυνατό να δημιουργηθούν αρχεία $x-y$ με τα οποία μπορεί να πιστοποιηθεί και γραφικά με τη δοκιμή Kolmogorov-Smirnov.

- ◊ δοκιμή ισότητας των μέσων όρων των τιμών δύο μεταβλητών (t -test) και η δοκιμή ισότητας των διασπορών των τιμών δύο μεταβλητών (F -test).
 - Ανάλυση της διασποράς (ένα κριτήριο) με (BOBBE, 1978):
 - ◊ δοκιμή ισότητας των μέσων όρων των τιμών όλων των μεταβλητών.
 - ◊ δοκιμή ισότητας των διασπορών των τιμών όλων των μεταβλητών (test Bartlett)
 - ◊ σύγκριση των μέσων όρων των τιμών ορισμένων μεταβλητών μεταξύ τους ή μιας μεταβλητής με το μέσο όρο των τιμών συνόλου άλλων (test Scheffe).
 - το συσχετισμό και την παλινδρόμηση μεταξύ των μεταβλητών ενός αρχείου με δυνατότητες (DRAPER et al., 1981):
 - ◊ απλής γραμμικής με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Τα μοντέλα που εφαρμόζονται είναι τεσσάρων τύπων :
- α. για την ευθεία.
 - β. για λογαριθμική καμπύλη όπου η ευθυγράμμιση επιτυγχάνεται με τη μετατροπή $x = \log(x)$.
 - γ. για καμπύλη δύναμης όπου η ευθυγράμμιση επιτυγχάνεται με τη μετατροπή $Y = \log(Y)$ και $x = \log(x)$.
 - δ. για εκθετική καμπύλη δύναμης όπου η ευθυγράμμιση επιτυγχάνεται με τη μετατροπή $Y = \log(Y)$.

Κατά τον υπολογισμό των συντελεστών της εξίσωσης παλινδρόμησης γίνεται πλήρης ανάλυση της διασποράς.

Δίδεται πάντοτε η δυνατότητα γραφικής απεικόνισης των δεδομένων σε καρτεσιανούς άξονες προκειμένου να κρίνει ο χρήστης την ποιότητα της προσαρμογής της εξίσωσης στα ζεύγη των τιμών.

- ◊ πολλαπλής παλινδρόμησης μεταξύ μιας εξαρτημένης μεταβλητής και ενός συνόλου (μέχρι 8) ανεξάρτητων. Το μοντέλο που χρησιμοποιείται είναι το $Z = \beta + \dots + \beta * \text{μεταβ} + \dots + \beta * \text{μεταβ}$ και μαζί με τους συντελεστές της εξίσωσης υπολογίζονται οι συντελεστές συσχετισμού r^2 , r^2 διορθωμένο και DURBIN-WATSON ενώ γίνεται πλήρης ανάλυση της διασποράς.

Και στις δύο περιπτώσεις παλινδρομήσεων δίδεται η δυνατότητα υπολογισμού ενδιάμεσων και εξωτερικών τιμών και η δημιουργία αρχείων ASCII με τα δεδομένα των μεταβλητών που χρησιμοποιήθηκαν και τα αποτελέσματα προκειμένου να υπάρξει γραφική παράσταση ή να ενσωματωθούν σε κείμενο με επεξεργαστές κειμένου.

- Πολυδιάστατη ανάλυση (Ανάλυση σε Κύριες Συνιστώσες) (BOUROCHE et SAPORTA., 1983).

Με το πρόγραμμα αυτό υπολογίζονται πέραν των απαιτούμενων πινάκων συσχετισμού και συνδιασποράς όλοι οι παράγοντες που έχουν ζητηθεί με τη συμβολή του καθενός στην ολική αδράνεια. Για κάθε μεταβλητή υπολογίζονται τόσο οι συντεταγμένες των κύριων συνιστωσών όσο και οι συσχετισμοί τους. Παρόμοιοι υπολογισμοί γίνονται για τις παρατηρήσεις (συντεταγμένες και συνημίτονα τετράγωνα). Επίσης εκτυπώνονται οι κύκλοι συσχετισμών των μεταβλητών και των παρατηρήσεων.

Κατά την επεξεργασία, και συγχρόνως με την εκτύπωση, όλα τα αποτελέσματα καταχωρούνται σε αρχεία ASCII text τα οποία μπορούν να ενσωματωθούν σε κείμενα που γράφονται με επεξεργαστές κειμένου που δέχονται τέτοιου τύπου

αρχεία (σχεδόν όλοι οι επεξεργαστές). Τα ίδια αρχεία είναι δυνατό να χρησιμοποιηθούν με πακέτα γραφικών ώστε τα αποτελέσματα να αποδοθούν γραφικά.

Στους πίνακες 2 έως 4 δίδονται τα αποτελέσματα της ανάλυσης των δεδομένων του αρχείου χημικών αναλύσεων γεωτρήσεων και πηγών της περιοχής Θραψανού (Κρήτη) έτσι όπως έχουν ληφθεί από αρχεία που δημιουργούνται κατά την επεξεργασία (επιλέχθηκαν τρεις κύριοι άξονες που αποδίδουν το 80% περίπου της ολικής αδράνειας). Οι εικόνες 7 και 8 αποδίδουν γραφικά τα αποτελέσματα αυτά.

Πίν. 2: Συντελεστές συσχετισμού των μεταβλητών του αρχείου Θραψανού.

t	1.0									
Mg	.08	1.0								
Ca	.5879	.3599	1.0							
Na	.3541	.3473	.3589	1.0						
K	.4545	.1128	.4980	.5591	1.0					
HCO3	.7956	.1966	.7892	.1835	.5194	1.0				
Cl	.2900	.3416	.3399	.9310	.5624	.1317	1.0			
SO4	.3156	.4860	.0462	.1396	.0719	.1409	.0418	1.0		
NO3	.4704	.2989	.4525	.3230	.1446	.3178	.3928	.3218	1.0	
NH4	.1459	.5758	.0153	.2177	.0383	.0136	.1073	.8461	.2758	1.0
NO2	.1210	.1809	.0858	.0993	.2352	.0628	.0973	.1028	.0975	.0954
Μετ. t		Mg	Ca	Na	K	HCO3	Cl	SO4	NO3	NH4

Πίν. 3: Κύριες συνιστώσες των μεταβλητών και συσχετισμοί τους με τους άξονες.

ΣΥΝΤΕΤΑΓΜΕΝΕΣ			
Μεταβλητές	Άξων 1	Άξων 2	Άξων 3
"t"	.8302299	.100904	-4.5884E-02
"Mg"	-.2222084	.8073725	-2.9552E-02
"Ca"	.8708663	9.14E-03	1.5324E-02
"Na"	.5549436	-.6330438	-.3129641
"K"	.6881153	-.2977044	.1123576
"HCO3"	.8428342	.1012314	.2356398
"Cl"	.5298866	-.5779054	-.2086877
"SO4"	-.2281023	-.7363098	9.7828E-02
"NO3"	.5874932	.1798903	.1475719
"NH4"	-.1335808	-.7970253	.2266885
"NO2"	.1126287	.2095288	-.1528491
"pH"	-.1423998	1.4654E-02	-.9083799
"pCO2"	.4732116	1.3535E-02	.859731
"B.I."	.3093657	2.2652E-02	-.5797896
"dρH"	.7539898	.1205446	-.4604568
"ΣΥΣΧΕΤΙΣΜΟΙ"			
Μεταβλητές	"Άξων 1"	"Άξων 2"	"Άξων 3"
"t"	.6892816	1.0182E-02	2.105414E-03
"Mg"	4.937657E-02	.6518503	8.733261E-04
"Ca"	.7584081	8.3625E-05	2.348435E-04
"Na"	.3079624	.4007444	9.795403E-02
"K"	.4735027	8.8627E-02	1.262423E-02
"HCO3"	.7103695	.0102478	5.552613E-02
"Cl"	.2807798	.3339747	4.355055E-02
"SO4"	5.203065E-02	.5421522	9.570412E-03
"NO3"	.3451483	3.2360E-02	2.177746E-02

Ψηφιακή Βιβλιοθήκη "Θεόφραστos" - Τμήμα Γεωλογίας, Α.Π.Θ.

Πίν. 3: (συνέχεια)

"NH ₄ "	1.784384E-02	.63523	5.138766E-02
"NO ₂ "	1.268523E-02	4.3902E-02	2.336285E-02
"pH"	.0202777	2.1477E-04	.8251541
"pCO ₂ "	.2239292	1.831E-04	.7391374
"B. I."	9.570715E-02	5.1313E-04	.336156
"dpH"	.5685006	1.4530E-02	.2120205

Πίν. 4: Στατιστικές μονάδες. Συντεταγμένες και συσχετισμοί (Cos2) με τους άξονες.

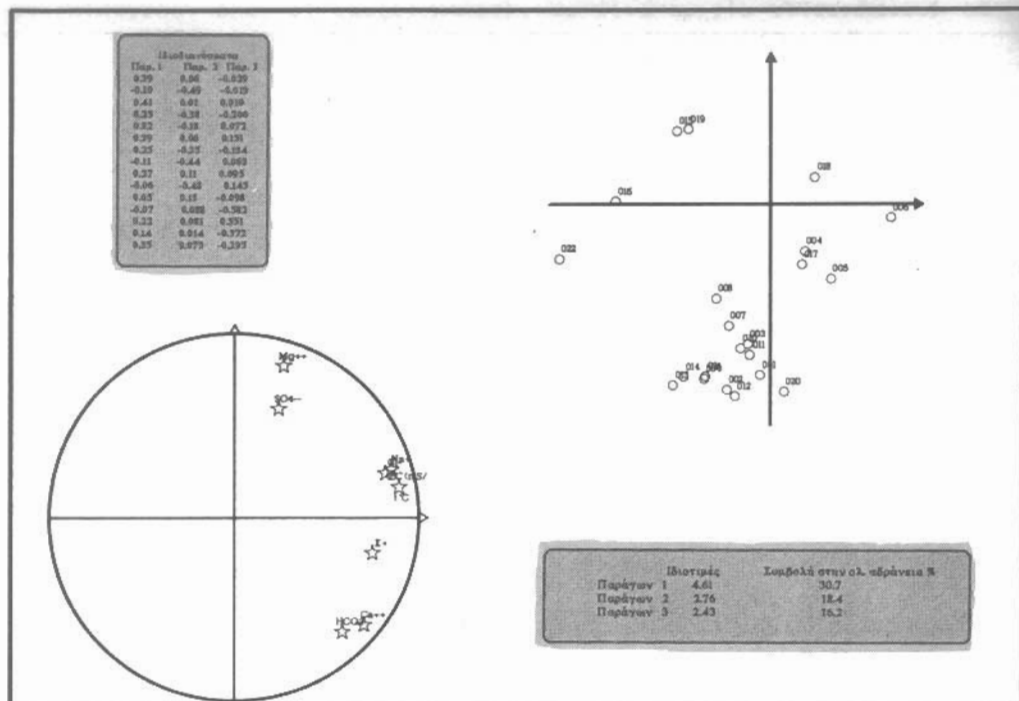
Παρατ.	Άξονας 1		Άξονας 2		Άξονας 3	
	Συντετ.	Cos2	Συντετ.	Cos2	Συντετ.	Cos2
"01"	1.571	.3368	1.328	.2406	.49	3.27E-02
"02"	1.326	.458	.161	6.7 E-03	.704	.129
"03"	.983	3.70E-02	1.704	.111	-.977	3.65E-02
"04"	.3749	.1041	.1460	1.58E-02	-.1365	1.38E-02
"05"	1.370	.1653	-1.145	.1155	-1.977	.345
"06"	2.578	.3656	-1.416	.1103	.2258	2.80E-03
"07"	2.342	.2069	-2.865	.3094	-1.269	.060
"08"	.4386	3.31E-02	.1339	3.08E-03	-1.581	.430
"09"	-.1327	8.44E-03	.4609	.101	-.7630	.278
"10"	.3522	2.38E-02	1.456	.407	-.6947	9.26E-02
"11"	1.417	.2499	.8089	8.14E-02	.8275	.085
"12"	1.294	.4514	.7808	.164	-.8706	.204
"13"	.9320	.1601	.9354	.161	-3.32E-02	2.04E-04
"14"	-.3938	2.88E-02	2.119	.836	.5778	6.21E-02
"15"	1.8E-02	5.56E-05	1.863	.549	-.1756	4.88E-03
"16"	-3.151	.4113	-1.789	.132	1.276	6.73E-02
"17"	-3.818	.6214	.3403	4.93E-03	-.8928	3.39E-02
"18"	.6915	3.12E-02	-1.715	.192	-2.930	.561
"19"	-.8688	2.02E-02	-4.403	.520	2.269	.138
"20"	-3.902	.653	-2.094	.187	-.4847	1.00E-02
"21"	2.20	.142	.1233	4.46-04	5.095	.760
"22"	.3419	2.08E-02	1.271	.289	.7686	.105
"23"	-5.963	.7883	1.795	7.14E-02	.5528	6.77E-03

7. ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ

Η βάση αρχειοθέτησης δεδομένων που διαθέτει το πακέτο προγραμμάτων μπορεί να θεωρηθεί ευέλικτη και λειτουργική διότι:

- μπορεί να δημιουργεί αρχεία διαφορετικών μεταβλητών. Η κατά υδατικό διαμέρισμα και κατά παράμετρο αρχειοθέτηση των δεδομένων και η συνεχής ενημέρωση με βοηθητικά παράθυρα βοηθάει στον εύκολο εντοπισμό τους, την επιλογή και την επεξεργασία τους.
- παρέχει δυνατότητες ελέγχου αξιοπιστίας των δεδομένων.
- επικοινωνεί με άλλα προγράμματα που δημιουργούν και δέχονται αρχεία μορφής ASCII.

Στο πακέτο συμπεριλαμβάνονται προγράμματα επεξεργασίας δεδομένων όλων των συνηθέστερα χρησιμοποιούμενων στατιστικών και γραφικών μεθόδων και υπολογισμού των πολλών χαρακτηριστικών παραμέτρων που αξιοποιούν σε μεγάλο βαθμό την υφιστάμενη υδροχημική πληροφορία. Τα προγράμματα αυτά υποστηρίζονται



Εικ. 7: Παρουσίαση μεταβλητών στο επίπεδο των παραγόντων 1 και 2

Εικ. 8: Παρουσίαση των παρατηρήσεων στο επίπεδο των παραγόντων 1 και 2

από γραφικές παραστάσεις στην οθόνη για τη λήψη άμεσων αποφάσεων κατά την επεξεργασία.

Η παρουσίαση των δεδομένων και των αποτελεσμάτων σε πίνακες και γραφικές παραστάσεις γίνεται τόσο μέσω προγραμμάτων του πακέτου όσο και με τη χρησιμοποίηση εξειδικευμένων πακέτων γραφικών που χρησιμοποιούν αρχεία που βγάζει το CHIBANAL. Τα αρχεία αυτά απευθύνονται σε όλα τα προγράμματα γραφικών παραστάσεων που δέχονται αρχεία μορφής ASCII αλλά και σε συγκεκριμένα προγράμματα στα οποία έχουν δημιουργηθεί πρότυπα γραφικών παραστάσεων (Templates). Ο συγγραφέας έχει δημιουργήσει τέτοια πρότυπα για το πακέτο γραφικών παραστάσεων Grapher (για DOS και για Windows).

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- BOBBE, B. Elements de Statistiques (1978). Rapport LHM/79/rd/28. Centre informatique geologique. 77305 Fontainebleau.
- BOUROCHE, J-M et SAPORTA, G. (1983). L' Analyse des donnees (2eme edition). Serie Que sais-je. Presse Universitaire de France.
- DRAPER, N.R and SMITH, H. (1981). Applied Regression Analysis (2nd edition). John Wiley & Sons, Inc. 709 p.
- HEM, J.D (1970). Study and Interpretation of the chemical characteristics of natural waters. U.S.geological Survey water supply. Pap. 1473
- LLOYD, J.W. and HEATHCOTE, J.A. (1985). Natural inorganic hydrochemistry in relation to groundwater. Clarendon Press. Oxford
- OLIVE, PH. (1976a). Analyses chimiques d'eaux et Thermodynamique. Memento

- pratique. Universite de Pierre et Marie Curie. Paris VI.
- OLIVE, PH. (1976b). Le systeme CO₂/H₂O/CaCO₃. Memento pratique. Universite de Pierre et Marie Curie. Paris VI.
- SCHOELLER, H. (1962). Les Eaux Souterraines. Masson & Cie, Editeurs. Paris.
- SPIEGEL, R.M. (1981). Probabilites et Statistiques - Cours et Problemes - Serie Schaum . McGraw-Hill, Paris pp . 115-159