

Д.Д. Охримчук, Т.Г. Ємел'яненко

РОЗРОБЛЕННЯ ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦІЇ РОЗРАХУНКІВ ПІД ЧАС АНАЛІЗУ ГІДРОГЕОХІМІЧНИХ ДАНИХ

Анотація. У статті описано створення програмного застосунку для автоматизації розрахунків на основі гідрогеохімічних даних та формування звітів, що є актуальним у зв'язку з необхідністю підвищення зручності обробки інформації та формування звітів. Ручна обробка може призводити до можливих помилок і зниження продуктивності. Метою дослідження є розробка застосунку за допомогою технологій C# та MySQL для спрощення зберігання та структуризації даних. Результати показують підвищення швидкості і зручності формування звітності. Застосунок має перспективи для подальших вдосконалень і розширення функціоналу в майбутніх дослідженнях.

Ключові слова: гідрогеохімічний моніторинг, гідрогеохімія, програмне забезпечення, програмний застосунок, база даних, діаграма класів, C#, MySQL, звітність.

Постановка проблеми. Гідрогеохімія, як важлива галузь наукових досліджень, стає все більш актуальною в умовах зростаючих глобальних екологічних викликів [1]. Ця інтердисциплінарна наука об'єднує принципи геології та хімії для аналізу хімічного складу підземних вод та їх взаємодії з геологічним середовищем. Основне завдання гідрогеохімії полягає у вивченні процесів, таких як розчинення мінералів, іонний обмін та інші хімічні реакції, які відбуваються в підземних водах. Ці процеси мають вирішальне значення для розуміння екологічного стану водних басейнів, а також для забезпечення якості питної води та її придатності для сільськогосподарських потреб.

Традиційні підходи до гідрогеохімічних досліджень часто вимагають ручної обробки великих масивів даних, що може призвести до помилок та неефективності. У світлі стрімкого розвитку інформаційних технологій виникає необхідність адаптації цієї галузі до сучасних вимог цифровізації. Впровадження сучасних технологічних рішень, таких як автоматизація збору та обробки даних, машинне навчання та штучний інтелект, може значно оптимізувати процеси аналізу гідрогеохімічних показників. Це не тільки сприяє підвищенню точності та швидкості досліджень, але й відкриває нові перспективи для виявлення та розуміння складних геохімічних процесів, що впливають на якість водних ресурсів.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Сучасні дослідження в галузі гідрогеохімії активно зосереджуються на використанні технологій для аналізу та прогнозування якості води. Одним із прикладів є дослідження [2], яке оцінювало ризики забруднення арсеном у підземних водах Вехарі, Пакистан, використовуючи штучні нейронні мережі для прогно-

зування рівнів арсену. Інше дослідження [3] присвячено оцінці якості підземних вод у Бангладеші на основі індексу якості води. Активно проводяться дослідження про антропогенний та кліматичний вплив на підземні води [4].

Ці та інші дослідження підкреслюють зростаючу потребу в автоматизації обробки великих обсягів даних та впровадженні передових методів аналізу для точної оцінки якості води.

Програмний застосунок, який спрощує збір та аналіз гідрогеохімічних даних, має потенціал для розвитку і застосування, особливо у контексті використання зібраних даних для прогнозування майбутнього стану води в джерелах.

В світі вже існують застосунки, які активно використовуються для досліджень води в гідрогеохімії. Найчастіше для розв'язання задач аналізу гідрогеохімічних даних використовується AQUACHEM [5] - програмний інструментарій для гідрогеохімічних досліджень. Але ця система є великим корпоративним продуктом, який не є безкоштовним, і його використання маленькими лабораторіями і дослідниками може бути недоцільним з точки зору використання коштів.

Мета дослідження. Основною метою роботи є розробка програмного застосунку з акцентом на автоматизацію обробки даних і прискорення розрахунків гідрогеохімічних показників та формування звітності.

Викладення основного матеріалу дослідження. Структура програмного застосунку складається з 5 частин (див. рис. 1).

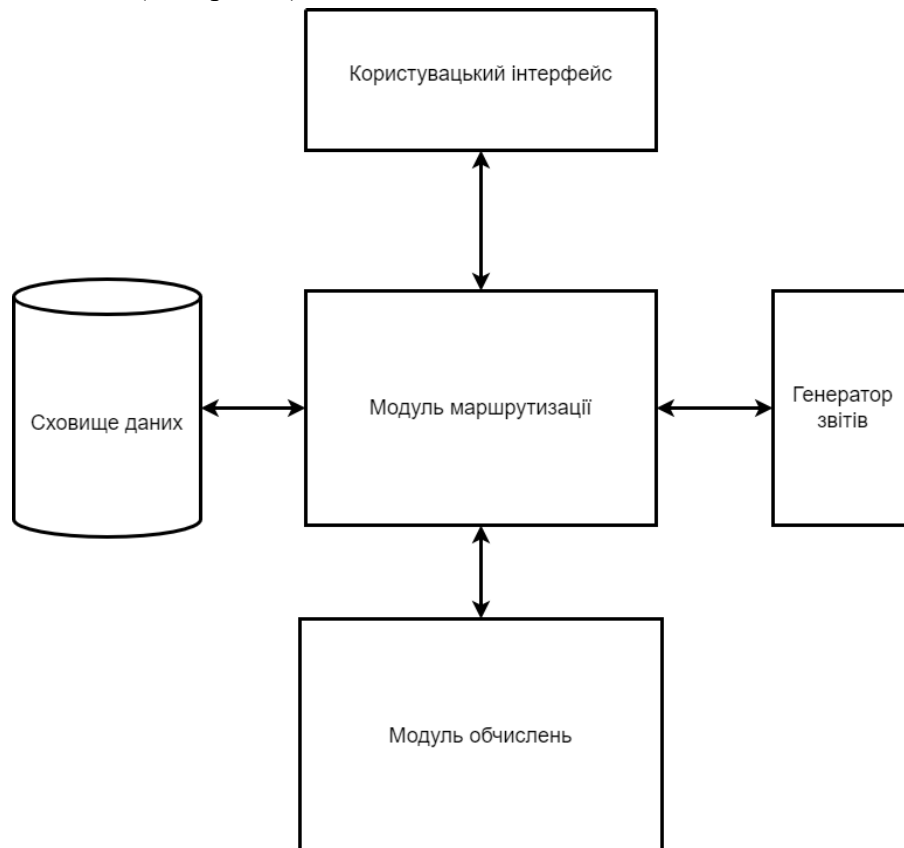


Рисунок 1 - Структура технічного доробку

Була побудована діаграма класів що відповідає структурі програмного застосунку (див. рис. 2).

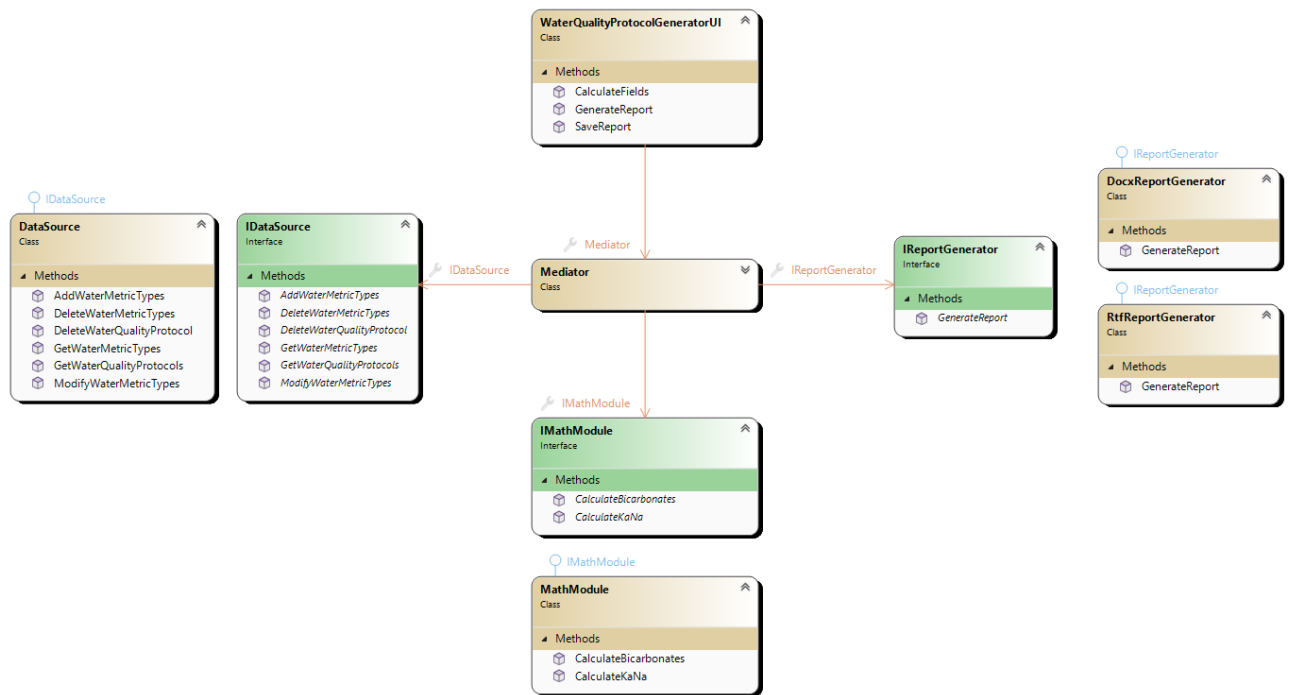


Рисунок 2 - Діаграма класів застосунку

– DataSource. Клас, який визначає джерело даних. Він має методи для додавання, видалення, отримання та модифікації типів метрик води, а також для роботи з протоколами якості води.

– IDataSource. Інтерфейс, що визначає контракт для класу DataSource, з переліком методів, які повинен реалізувати будь—який клас, що працює як джерело даних.

– WaterQualityProtocolGeneratorUI. Клас інтерфейсу користувача, який використовується для генерації звітів про якість води. Він містить методи для розрахунку певних полів, генерації звіту та збереження звіту.

– Mediator. Клас, який слугує посередником, щоб забезпечити взаємодію між різними компонентами системи.

– IMathModule. Інтерфейс, який визначає математичні методи.

– MathModule. Клас, що реалізує інтерфейс IMathModule.

– IReportGenerator. Інтерфейс для генерації звітів, має метод GenerateReport.

– DocxReportGenerator та RtfReportGenerator. Класи, що реалізують інтерфейс IReportGenerator для створення звітів у форматах DOCX та RTF відповідно.

На схемі видно зв'язок між класом Mediator та іншими компонентами системи, що дозволяє зменшити залежність між компонентами та полегшити їх взаємодію.

Важливо зауважити, що це не повна діаграма класів, а лише її частина. Є ще інші класи, які відсутні на діаграмі, такі як моделі звітів, класи для водних метрик, інші модулі тощо. Однак представлені на діаграмі елементи є основою застосунку і визначають його основну функціональність.

Далі детальніше описано кожен модуль окремо.

Модуль маршрутизації. Даний модуль виступає посередником між іншими частинами системи, що дозволяє додавати різні модулі незалежно один від одного і розширювати систему за відповідними запитами від гідрогеохіміків в необхідну сторону, додавати модулі із окремим функціоналом. Наприклад, *Генератор звітів*.

Генератор звітів. Модуль відповідає за генерацію звітів за шаблоном. Він отримує запит із даними на створення звіту із модуля маршрутизації і зберігає звіт в зазначене місце на диску.

Сховище даних. Модуль зберігає дані про попередні вимірювання, що дозволяє за необхідністю сформувавши звіт ще раз за збереженими місцем та датою. Також це дозволяє в рамках програмного застосунку розробляти нові модулі для прогнозування та аналізу статистичних даних вимірів, підключати їх до системи через модуль маршрутизації (див. рис. 3).

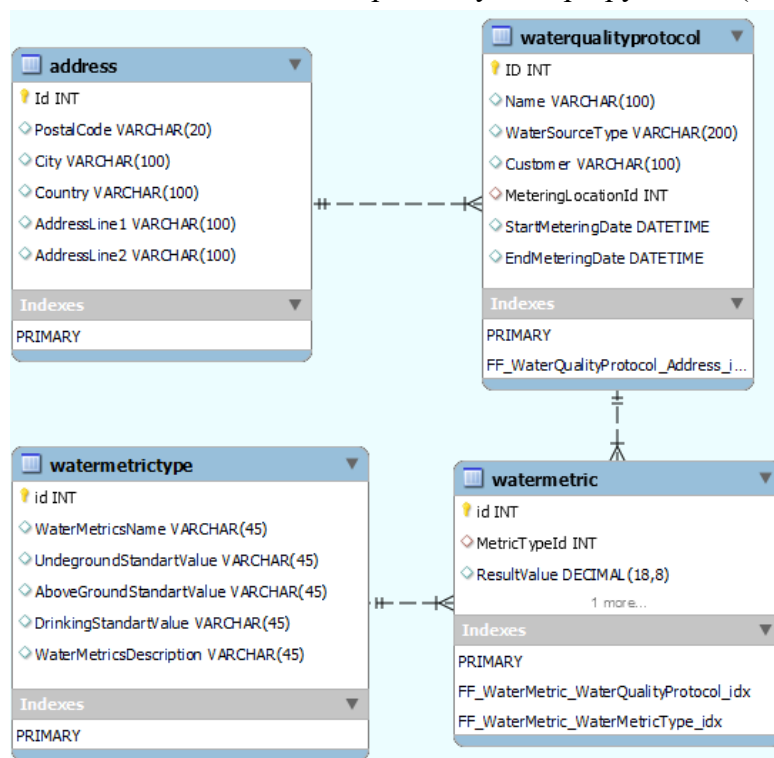


Рисунок 3 - Схема сховища даних

На зображенні ви можете побачити схему бази даних, яка складається з чотирьох таблиць: **address**, **waterqualityprotocol**, **watermetric**, і **watermetrictype**. Ця схема бази даних використовується для управління даними про водоміри та якість води.

Таблиця **address**. Зберігає інформацію про адреси місць замірів гідрогеохімічних показників.

- **Id**. Унікальний ідентифікатор адреси.
- **PostalCode**. Поштовий індекс місця замірів. Приймає текстові значення до 20 символів.
- **City**. Місто місця замірів. Приймає текстові значення до 100 символів.
- **Country**. Країна місця замірів. Приймає текстові значення до 100 символів.

- Address.line1. Перша частина адреси місця замірів. Приймає текстові значення до 100 символів.
- Address.line2. Друга частина адреси місця замірів. Приймає текстові значення до 100 символів.

Таблиця waterqualityprotocol зберігає протоколи якості води. Ця таблиця може використовуватися для збереження звітів про якість води, зібрані за певний період часу, з полями для імені, типу джерела води, замовника, ідентифікатора місця замірів показників та дат початку та кінця вимірювань.

- ID. Унікальний ідентифікатор протоколу.
- Name. Назва протоколу якості води. Приймає текстові значення до 100 символів.
- WaterSourceType. Тип джерела води. Приймає текстові значення до 200 символів.
- Customer. Замовник або клієнт, для якого ведеться протокол. Приймає текстові значення до 100 символів.
- MeteringLocationID. Ідентифікатор місця замірів. Приймає числові значення, що відповідають одному з ID в таблиці address.
- StartMeteringDate. Дата початку періоду замірів. Приймає значення дати.
- EndMeteringDate. Дата кінця періоду замірів. Приймає значення дати.

Таблиця watermetric використовується для зберігання індивідуальних показників, зібраних водомірами, з полями для ідентифікатора метрики, результату вимірювання і зв'язку з протоколом якості води.

- id. Унікальний ідентифікатор метрики.
- MetricTypeId. Ідентифікатор типу метрики. Ідентифікатор типу метрики. Приймає числові значення, що відповідають одному з ID в таблиці watermetrictype.
- ResultValue. Значення результату вимірювання. Приймає числові значення з плаваючою точкою.

Таблиця watermetrictype містить типи водометричних показників, які можуть включати стандартні значення для підземних і поверхневих вод, а також стандарт для питної води.

- id. Унікальний ідентифікатор типу метрики.
- WaterMetricsName. Назва водометричного показника. Приймає текстові значення до 45 символів.
- UndergroundStandardValue. Стандартне значення для підземних вод. Приймає текстові значення до 45 символів.
- AboveGroundStandardValue. Стандартне значення для надземних вод. Приймає текстові значення до 45 символів.
- DrinkingStandardValue. Стандартне значення для питної води. Приймає текстові значення до 45 символів.
- WaterMetricsDescription. Опис водометричних показників. Приймає текстові значення до 45 символів.

Зв'язки між таблицями:

- Таблиця waterqualityprotocol має зв'язок з таблицею address, що свідчить про те, що кожен протокол якості води пов'язаний з конкретною адресою.

– Таблиці watermetric та watermetrictype пов'язані, що свідчить про те, що кожен водометричний показник має тип, зазначений в watermetrictype.

– Таблиця watermetric також пов'язана з waterqualityprotocol, показуючи, що кожен показник є частиною певного протоколу якості води.

Індекси в таблицях використовуються для покращення продуктивності запитів, особливо при пошуку, сортуванні та з'єднаннях таблиць. Наприклад, індекс FF_WaterMetric_WaterQualityProtocol_idx вказує на індекс, створений на основі зовнішнього ключа між watermetric та waterqualityprotocol, що дозволяє швидше знаходити записи в цих двох таблицях, коли вони зв'язані за WaterQualityProtocolID.

Модуль обчислень. Цей модуль дозволяє проводити додаткові обчислення, зберігає всередині себе математичні формули які можуть використовуватись для обчислень параметрів по результатах вимірів.

Користувацький інтерфейс. Користувацький інтерфейс використовується для заповнення таблиці результатами вимірів, а також він автоматично надсилає запити в модуль маршрутизації про отримання додаткових обчислень, генерації звіту, збереження обчислень в базу даних (див. рис. 4). Також в окремому вікні користувацького інтерфейсу можна завантажити дані в базу даних із вже наявних звітів (див. рис. 5).

Water Metric Type Id	Metric Type	Result Value
1	Кольоровість, (градус)	7.5
2	Запах, бали	1
3	Каламутність, мг/дм3	0.12
4	Водневий показник (од. рН)	7.24
5	Лужність загальна, мг-екв НСО3-/дм3	12
6	Бікарбонати (НСО3-) мг/дм3	631.396
7	Сухий залишок(розчинені речовини),мг/дм3	1930
8	Жорсткість, мг-екв/дм3	19.99
9	Тимчасова жорсткість, мг-екв/дм3	12
10	Постійна жорсткість, мг-екв/дм3	7.99
11	Кальцій (Са2+), мг/дм3	188.59
12	Магній (Mg2+), мг/дм3	128.74
13	Натрій и калій (Na+ і K+), мг/дм3	215.283
14	Залізо (Fe2+, Fe3+), мг/дм3	0
15	Марганець (Mn2+), мг/дм3	0.71
16	Хлориди (Cl-), мг/дм3	177.26
17	Сульфати (SO42-), мг/дм3	526.36
18	Нітрати (NO3-) мг/дм3	86.77
19	Фосфати (PO43-) мг/дм3	0.08
20	Перманганатна окислюваність, мгО/дм3	4.98
21	Біхроматна окислюваність мгО/дм3	
22	Нітрити (NO2-), мг/дм3	1
23	Амоній (азот амонійний, аміак), мг/дм3	0.3
24	Мідь (Cu2+), мг/дм3	0.11
25	Свинець (Pb2+), мг/дм3	0.006
26	Цинк. (Zn2+), мг/дм3	0.14
27	Сірководень	
28	Силікати	

Рисунок 4 - Вікно для генерації звітів та здійснення додаткових обчислень

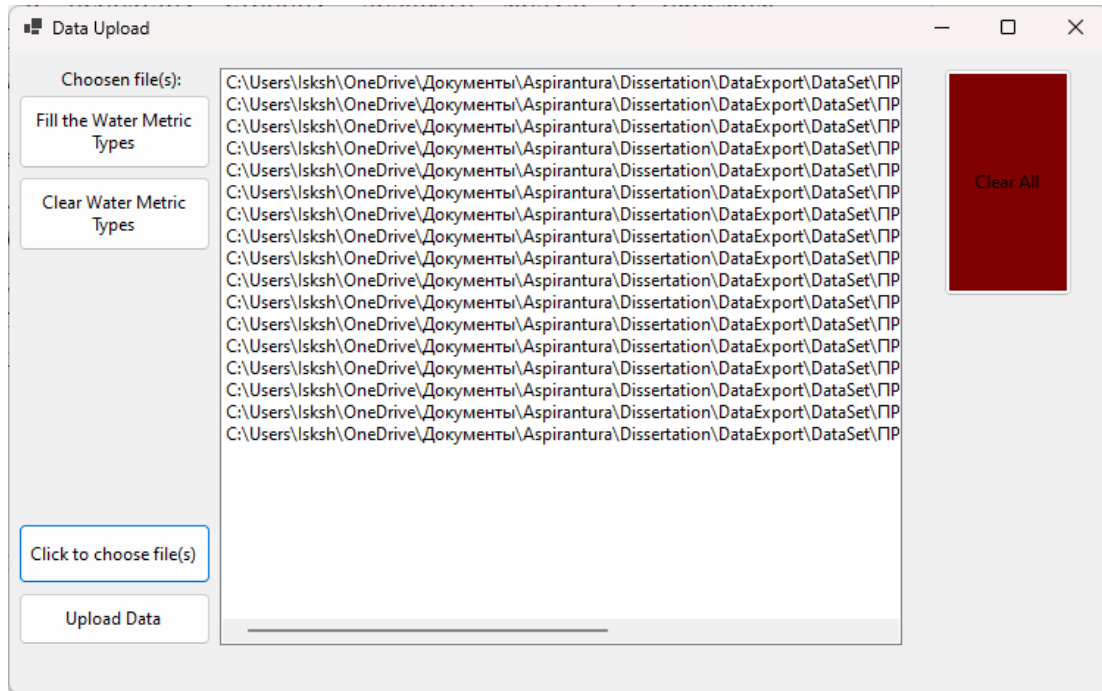


Рисунок 5 - Вікно для завантаження звітів в базу даних

Основний акцент цього рішення зроблено на автоматизованому зборі та збереженні великого обсягу даних. Фокус зроблено на обробці цієї інформації та автоматизації генерації гідрогеохімічних звітів. Інтегрований калькулятор забезпечує розрахунок гідрогеохімічних показників, оптимізуючи процес. Це дозволяє зробити висновки на основі точних розрахунків гідрогеохімічних показників.

Прикладом формули, яку було закладено в програмний застосунок, може бути формула вирахування натрію та калію за іншими показниками(1).

equiv(CaNa)

$$= equiv(equiv(CL^-) + equiv(SO_4^{2-}) + equiv(NO_3^-) + equiv(PO_4^{3-}) + equiv(HCO_3^-)) - equiv(equiv(Ca^{2+}) + equiv(Mg^{2+}) + equiv(Fe^+) + equiv(Mn^{2+})) \quad (1)$$

Адаптивний дизайн інтерфейсу додатку забезпечує інтуїтивність використання, дозволяючи користувачам ефективно користуватись застосунком та адаптувати звітність до своїх потреб.

Автоматизовані розрахунки не лише підвищують швидкість обробки, але і забезпечують точність результатів і відсутність людського фактору.

Програмний застосунок є відображенням сучасних тенденцій в області інформаційних технологій та їх застосування в гідрогеохімії. Він демонструє, як технологічний розвиток може стати ефективним інструментом для наукових досліджень, розширюючи можливості аналізу. Загалом він торкається наступних сфер застосування:

– Автоматизований збір даних. Ця система дозволяє ефективно інтегрувати інформацію з різних джерел, таких як документи у файловому форматі. Цей підхід робить процес

менш витратним часом і знижує ймовірність появи помилок, пов'язаних з ручним введенням даних.

– Ефективна генерація звітів. Система включає інтегрований калькулятор для розрахунків гідрогеохімічних показників. Завдяки автоматизованому процесу формування, дослідники можуть ефективно представляти результати своєї роботи.

– Точність розрахунків. У світі, де точність є ключовим фактором успіху, автоматизовані розрахунки системи підтримують високий стандарт наукової точності. Це забезпечує надійність даних та допомагає уникнути потенційних помилок, пов'язаних з ручними розрахунками.

– Економія часу. Прискорення робочих процесів завдяки автоматизації збору даних, аналізу та звітності дозволяє дослідникам витратити менше часу на рутинні завдання і більше часу на власне наукове дослідження.

Перспективними напрямками для покращень цього технічного застосування та збільшення сфер використання є додавання таких модулів, як:

– Розширення можливостей прогнозування. Шляхом інтеграції математичних алгоритмів, алгоритмів машинного навчання та штучного інтелекту, програма може аналізувати історичні дані та робити прогнози щодо майбутнього стану води. Це може включати прогнозування ризиків забруднення, змін у хімічному складі та інших екологічних параметрів.

– Розвиток модулів глибокого навчання. Впровадження спеціалізованих модулів глибокого навчання дозволить обробляти складні набори даних, виявляючи неочевидні взаємозв'язки та закономірності.

– Глибокий аналіз даних. З використанням сучасних алгоритмів та методів аналізу, таких як кластерний аналіз, система зможе забезпечити змогу дослідникам виявляти складні закономірності та кореляції між різними наборами даних. Це посприятиме більш глибокому розумінню гідрогеохімічних процесів та їх впливу на навколишнє середовище.

Висновки. Розроблений програмний застосунок пришвидшує роботу із гідрогеохімічною звітністю, надає змогу вводити дані в зручному для використання інтерфейсі. Також він є достатньо гнучким для застосування і майбутніх покращень за рахунок модульної архітектури застосування. На додачу до цього, звітність з належним форматуванням можна проаналізувати і зберегти дані в сховище даних для майбутнього використання.

Розроблений інструмент створює основу для оптимізації роботи з гідрогеохімічними даними. Хоча його первинна мета полягає в автоматизації рутинних завдань та забезпеченні більшої спрощеності обробки даних, він також створює платформу для майбутнього глибокого аналізу. Завдяки зручності зберігання та обробки інформації, науковці зможуть в майбутньому легше та ефективніше працювати з цими даними, виявляти нові тенденції та проводити комплексний аналіз.

З урахуванням постійного розвитку технологій та зростання потреб дослідницької спільноти, потенціал розширення та адаптації цього інструменту для інших областей є очевидним. Інноваційні рішення такого роду сприяють підвищенню ефективності наукової діяльності та стимулюють розвиток галузі гідрогеохімії.

ЛІТЕРАТУРА

1. Осика В. Ф., Кравченко М. С. Якість вимірювань складу та властивостей об'єктів довкілля та джерел їх забруднення: монографія //Київ: Наука. — 2001.
2. Iqbal J. et al. Hydrogeochemistry and prediction of arsenic contamination in groundwater of Vehari, Pakistan: comparison of artificial neural network, random forest and logistic regression models //Environmental Geochemistry and Health. — 2024. — Т. 46. — №. 1. — С. 1—25.
3. Uddin M. G. et al. Assessment of hydrogeochemistry in groundwater using water quality index model and indices approaches //Heliyon. — 2023. — Т. 9. — №. 9.
4. Bashir, E., et al. Shallow Groundwater Quality Assessment and Its Suitability Analysis for Drinking and Irrigation Purposes // Water. — 2021. — Т. 13. — №. 23.
5. AQUACHEM. [Електронний ресурс]. — Режим доступу: <https://www.aquachemme.com/>

REFERENCES

1. Osika V. F., Kravchenko M. S. Quality of measurements of the composition and properties of environmental objects and their sources of pollution: monograph // Kyiv: auka. — 2001.
2. Iqbal J. et al. Hydrogeochemistry and prediction of arsenic contamination in groundwater of Vehari, Pakistan: comparison of artificial neural network, random forest and logistic regression models // Environmental Geochemistry and Health. — 2024. — Vol. 46. — No. 1. — P. 1—25.
3. Uddin M. G. et al. Assessment of hydrogeochemistry in groundwater using water quality index model and indices approaches // Heliyon. — 2023. — Vol. 9. — No. 9.
4. Bashir, E., et al. Shallow Groundwater Quality Assessment and Its Suitability Analysis for Drinking and Irrigation Purposes // Water. — 2021. — Vol. 13. — No. 23.
5. AQUACHEM. [Electronic resource]. — Access mode: <https://www.aquachemme.com/>

Received 10.06.2024.
Accepted 20.06.2024.

Development of software for automating calculations during the analysis of hydrogeochemical data

Analysis of recent research and publications. Modern research in the field of hydrogeochemistry is actively focused on using the latest technologies for analyzing and predicting water quality. One study[2] assessed the risks of arsenic contamination in groundwater in Vehari, Pakistan, using mathematic calculations to predict arsenic levels. Another study[3] dealt with assessing groundwater quality in Bangladesh using the water quality index. These and other studies highlight the growing need for automating data processing and implementing active use of software applications for calculations, reporting, and storing results for further groundwater analysis. Modern approaches to hydrogeochemical research include using software tools such as AQUACHEM[5] to facilitate data collection and analysis. However, such tools are often large corporate products that are not free, and their use by small laboratories and researchers may be impractical from a cost perspective.

Research purpose. The primary purpose of this article is to develop a software application for automating the processing of hydrogeochemical data and increasing calculations speed and time-spending efficiency during report preparation, as well as creating a flexible data storage system with extensive modification capabilities.

Presentation of the main research material. The developed software application consists of several key components:

- *DataSource*. A class that defines the data source and provides methods for adding, deleting, retrieving, and modifying types of water metrics, as well as working with water quality protocols.
- *IDataSource*. An interface that defines the contract for the *DataSource* class, listing the methods that any class working as a data source must implement.
- *WaterQualityProtocolGeneratorUI*. A user interface class used to generate water quality reports. It contains methods for calculating certain fields, generating reports, and saving reports.
- *Mediator*. A class that acts as a mediator to ensure interaction between different system components.
- *IMathModule*. An interface that defines mathematical methods such as calculating bicarbonates and the calcium to sodium ratio.
- *MathModule*. A class that implements the *IMathModule* interface and contains the specified mathematical methods.
- *IReportGenerator*. An interface for generating reports with the *GenerateReport* method.
- *DocxReportGenerator* and *RtfReportGenerator*. Classes that implement the *IReportGenerator* interface for creating reports in *DOCX* and *RTF* formats, respectively.

The application supports modularity, allowing for the addition of new modules to extend functionality. For example, the report generator module is responsible for creating reports based on templates and saving them to the specified location on the disk. The data storage module manages historical measurements, enabling the generation of reports as needed and the development of new modules for data analysis and prediction.

Conclusions: The developed software application speeds up work with hydrogeochemical reporting, allowing data to be entered in a user-friendly interface. It is also flexible for application and future improvements thanks to its modular architecture. The formatted reports can be analyzed and stored in the database for further use.

The tool lays the foundation for optimizing work with hydrogeochemical data. Its primary goal is to automate routine tasks and simplify data processing, but it also creates a platform for in-depth analysis in the future. With the convenience of storing and processing information, scientists will be able to work more efficiently with the data, identify new trends, and conduct comprehensive analysis.

Given the constant development of technology and the growing needs of the research community, the potential for expanding and adapting this tool for other fields is quite high. Innovative solutions contribute to increasing the efficiency of scientific activities and stimulate the development of hydrogeochemistry.

Охримчук Денис Дмитрович - аспірант кафедри математичного забезпечення електронних обчислювальних машин (МЗ ЕОМ) Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара.

Ємел'яненко Тетяна Георгіївна - кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри математичного забезпечення електронних обчислювальних машин (МЗ ЕОМ) Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара.

Okhrymchuk Denys Dmytrovych - Postgraduate student of the Department of Mathematical Support of Electronic Computing Machines (MS ECM) at Oles Honchar Dnipro National University.

Yemelianenko Tetiana Heorhiivna - Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of Mathematical Support of Electronic Computing Machines (MS ECM) at Oles Honchar Dnipro National University.