

LES LOGICIELS DE TRAITEMENT DES DONNEES UTILISES AU LABORATOIRE D'ANALYSES DE NOUMEA

J.A. PETARD (ORSTOM-Nouméa)

Le traitement des résultats d'analyses a toujours été contraignant; la copie (ou la recopie) manuelle des informations est source d'erreur et consommatrice de temps.

L'apparition sur le marché d'appareils de mesures partiellement ou totalement informatisés, le coût abordable des micro-ordinateurs et des périphériques ont tenté plus d'un d'entre nous à se lancer dans l'aventure de l'informatique.

Nous sommes soit chimistes, soit informaticiens et il nous est difficile d'être performants dans les deux disciplines. Très rapidement nous sommes confrontés à la multitude des systèmes informatiques (micro-ordinateurs, appareils d'analyses, systèmes de traitements, logiciels etc...) et nous mesurons nos capacités à exploiter ces moyens.

Le laboratoire de Nouméa a depuis 1985 renouvelé l'ensemble des équipements analytiques; les nouveaux appareils offrant les possibilités de saisie informatique, nous avons cherché à les exploiter au maximum.

Dans un premier temps nous avons corrigé et complété le logiciel de calcul des données spectrométriques (écrit en Basic) qui nous avait été transmis par M. Chanut (Laboratoire de Dakar). Puis la découverte des tableurs nous a incité à approfondir notre démarche. Nous avons alors créé des feuilles de calcul et d'édition pour les analyses totales des sols et pour les analyses d'eaux. Le logiciel de pilotage et de traitement des données livré avec le spectrophotomètre Varian (AA 300) permettant la sauvegarde des résultats selon un format ASCII, il était facile de transférer ces résultats dans les feuilles de calcul. Nous parvenions enfin à exploiter des données sans retranscription manuelle. Le système de gestion des données (GTPC) de l'auto-analyseur Technicon II acquis plus tard permet la même procédure de transfert.

Toutefois ces fichiers contiennent des informations inutiles qui n'autorisent pas un traitement par lot. Chaque fichier doit donc être corrigé et mis dans un format standard par l'intermédiaire d'un logiciel de traitement de texte.

Les résultats n'étaient plus retranscrits manuellement mais le responsable du laboratoire passait de plus en plus de temps à mettre en forme les fichiers pour pouvoir les exploiter. Le bilan n'était pas encore positif. D'où la nécessité de recourir à un informaticien pour mettre en place les procédures de restructuration des informations issues d'appareils de mesures, pour élaborer et créer un système de gestion de l'ensemble des données de laboratoire.

La Mission Technique des Equipements et Infrastructures Scientifiques a affecté au laboratoire de Nouméa un VAT informaticien (M. H. Charvieux) qui a été chargé de créer le système de gestion dont nous avions besoin.

Le logiciel LOLA est le fruit d'une étroite collaboration entre l'informaticien et le chimiste. Compte tenu des délais impartis (la durée du séjour d'un VAT est de 14 mois), LOLA a été développé à partir du SGBD PARADOX 3 (Borland). En l'absence d'expérience dans le domaine des SGBD, M. Charvieux a choisi PARADOX 3 en se référant aux études lues dans la presse spécialisée, favorables à ce Système de Gestion de Base de Données, le plus performant semble-t-il.

LOLA (LOGiciel de Laboratoire d'Analyses) reprend l'ensemble des besoins d'un laboratoire de service et s'adresse à tout type de laboratoire, chacun ayant la possibilité de programmer une fiche d'édition personnalisée.

Ce logiciel permet:

- la saisie des demandes d'analyse.
- la saisie manuelle ou l'importation de fichiers de résultats analytiques: un seul élément ou plusieurs (Ca, Mg, K et Na) ou (Fe, Mn, Ni, Cr et Co), en prenant en compte la prise d'échantillon, le volume de la solution d'extraction, le(s) facteur(s) de dilution, le facteur d'humidité.
- la correction et la vérification d'une variable.
- la conversion d'unité.
- les opérations (+, -, *, /, log, exp.) et des calculs statistiques (moyenne, médiane, maxi, mini) sur une variable, pour l'ensemble des échantillons d'un dossier.
- les calculs intervariables (ex. C/N).
- l'impression des résultats analytiques.
- l'exportation des résultats selon un format au choix (ASCII, Lotus 123, dBase III etc...).
- la sauvegarde (par dossier) des résultats analytiques.
- l'exportation des numéros d'échantillons (utilisée pour LADA).
- la gestion des dossiers:
 - * établissements d'un devis.
 - * suivi de dossiers (analyses faites, à faire, dossiers terminés).
 - * établissement d'une facture.
- la gestion des comptes clients:
 - * balance: facturation des commandes - facturation des dossiers.
- la gestion du laboratoire:
 - * gestion des crédits.
 - * gestion de l'activité.
 - * gestion des échantillons témoins (stockage des résultats, calcul de la moyenne et de la variance pour chaque détermination).
- la gestion des stocks de produits chimiques (inventaire, entrées-sorties, préparation des commandes). Pour chaque analyse, il est possible d'introduire les quantités de réactifs nécessaires à l'analyse d'un échantillon, pour chaque produit, il est possible d'entrer une valeur limite du stock. LOLA peut ainsi renseigner, lors de la saisie d'un dossier, si la quantité d'un produit est suffisante à l'exécution d'une analyse. De même, dans la procédure de gestion des commandes, LOLA fera apparaître automatiquement les produits dont le stock est égal ou inférieur au seuil limite.

Pour compléter la panoplie des outils informatiques, nous avons procédé à la connexion d'une balance et d'un titrimètre à un micro-ordinateur. Plus de 90 % des pesées ainsi que toutes les mesures titrimétriques sont saisies directement dans des fichiers informatiques. Un logiciel LADA (Logiciel d'Acquisition de Données Analytiques), écrit en Pascal, permet de gérer ces données et d'effectuer de nombreux calculs sur une variable ou entre les variables (ex. le calcul des pF, de l'humidité (donc des facteurs d'humidité), des fractions granulométriques, de la capacité d'échange, du phosphore total par gravimétrie, des pertes au feu et résidus, des cendre silice et chlorure dans les végétaux, du carbone, de l'azote, du rapport C/N et de la matière organique etc ...). Toutes ces données sont stockées dans des fichiers qui peuvent être importés dans LOLA. Actuellement seules les mesures de pH, de conductivité et les prises d'échantillons de sol tamisé à 2 mm sont saisies manuellement (la pesée du sol "tamisé à 2 mm" nécessitant un échantillonnage générateur de poussières impose la réalisation de ce travail dans une pièce réservée à cette opération).

La documentation de ces logiciels est en cours d'impression et devrait être disponible en mars 1991. Un exemplaire de LADA (manuel et logiciel) sera adressé à chaque laboratoire. Quelques corrections sont en cours sur LOLA, ce dernier peut être obtenu sur demande après acceptation des clauses qui nous lient à Borland (se renseigner auprès du laboratoire d'analyses de Nouméa)