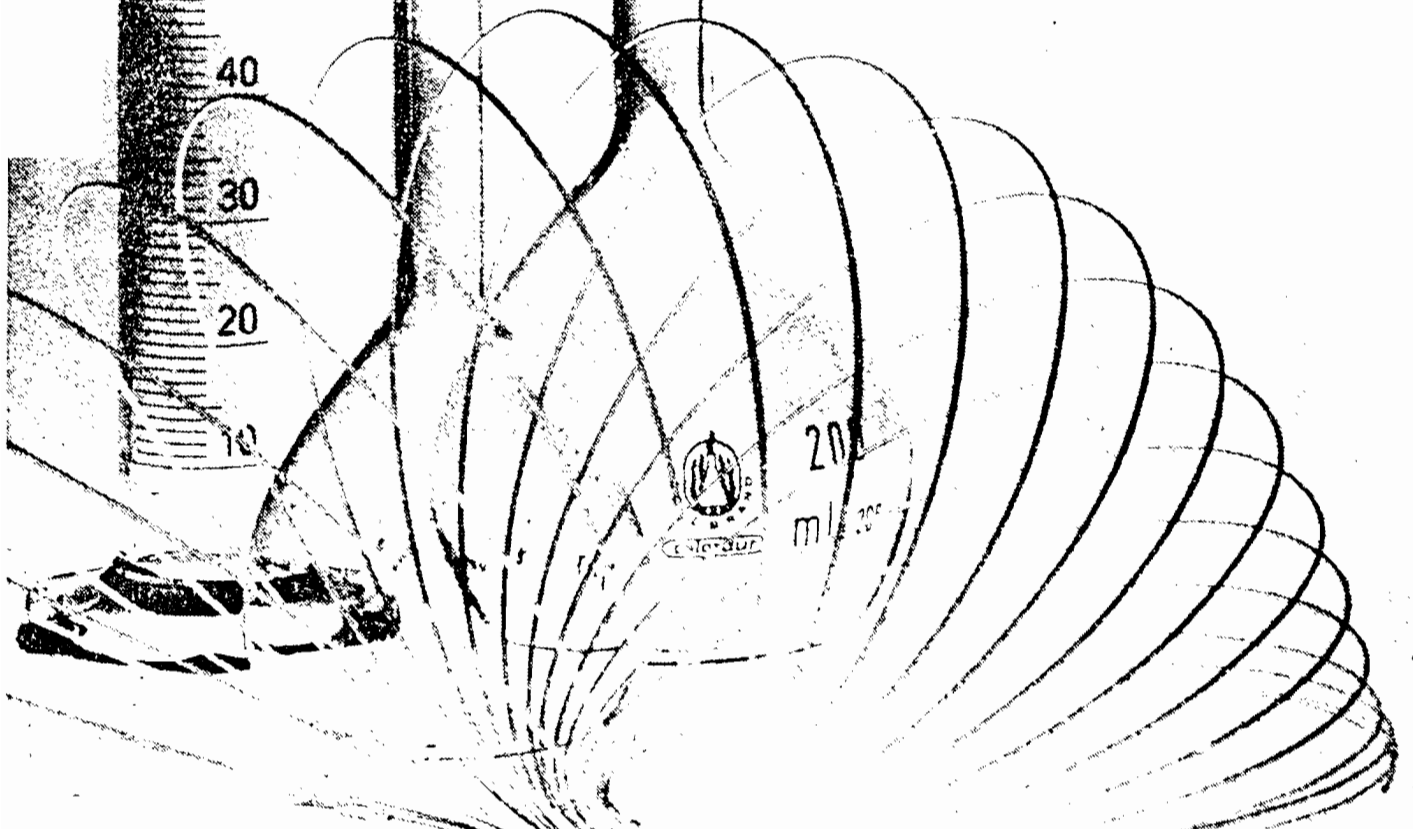


# SPCLAS:

Un logiciel basic pour le calcul,  
le classement, la gestion des résultats  
d'un laboratoire d'analyses  
physico - chimiques

Marc Pansu



SPCLAS  
UN LOGICIEL BASIC POUR LE CALCUL,  
LE CLASSEMENT ET LA GESTION DES RESULTATS  
D'UN LABORATOIRE D'ANALYSES PHYSICO-CHIMIQUES.

MARC PANSU

ORSTOM-BONDY

OCTOBRE 1983

"La loi du 11 mars 1957 n'autorisant, aux termes des alinéas 2 et 3 de l'article 41, d'une part, que les "copies ou reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective" et, d'autre part, que les analyses et les courtes citations dans un but d'exemple et d'illustration, "toute représentation ou reproduction intégrale, ou partielle, faite sans le consentement de l'auteur ou de ses ayants droit ou ayant cause, est illicite" (alinéa 1er de l'article 40.).

"Cette représentation ou reproduction, par quelque procédé que ce soit, constituerait donc une contrefaçon sanctionnée par les articles 425 et suivants du Code Pénal".

.....

.....

REMERCIEMENTS.

*Je remercie le personnel du Service Informatique de Bondy, particulièrement Monsieur MULLON pour ses conseils et Monsieur DESJARDIN pour m'avoir fait profiter de son expérience en matière de gestion de fichiers.*

*Je remercie également tous mes collègues chimistes pour leurs suggestions et tous ceux qui m'ont aidé à la mise en forme de ce document.*

TABLE DES MATIERES.

REMERCIEMENTS.

AVANT-PROPOS.

DESCRIPTION DU LOGICIEL.

I. EVOLUTION ET BESOINS DES LABORATOIRES .....	11
II. MATERIEL NECESSAIRE .....	12
III. DESCRIPTION DU LOGICIEL .....	13
IV. LES DIVERS MODULES .....	15
1. Modules de dépouillement des résultats bruts .....	15
1.1. Etalonnage .....	15
1.2. Calculs des teneurs .....	18
1.3. Données transférées, autres modules de calcul .....	18
2. Modules de classement des résultats pour un dosage .....	19
2.1. Description .....	19
2.2. Choix de travail et utilisation .....	19
2.3. Données transférées, intervalles de variation .....	20
3. Stockage des résultats en dossiers d'analyse .....	22
3.1. Les dossiers d'analyse et le module SPECAT .....	22
3.2. Le module SPCRST .....	22
3.3. Le module SPRAST .....	22
3.4. Données transférées .....	23
3.5. Remarque .....	24
4. Lecture et corrections des fichiers .....	24
4.1. Corrections .....	24
4.2. Lecture et impression des tableaux d'analyse .....	24
V. CONCLUSION - PERSPECTIVES .....	25

UTILISATION DU LOGICIEL.

I. MENUS ET QUESTIONS .....	29
1. Module principal .....	29
2. Module de calcul des résultats bruts : SPCALC .....	30

3. Modules de classement des résultats .....	33
4. Modules de stockage .....	38
5. Lecture de fichier .....	40
6. Correction de fichiers .....	41
<b>2. EXEMPLE D'APPLICATION .....</b>	<b>44</b>
1. $\text{H}_2\text{O}^-$ .....	44
2. $\text{H}_2\text{O}^+$ .....	46
3. $\text{SiO}_2$ .....	47
4. Autres dosages .....	53
5. Lecture du fichier .....	55
6. Correction de fichier .....	56

## AVANT-PROPOS.

L'importance de l'Informatique dans l'avancement des sciences est maintenant bien établie et la chimie ne manquera pas d'en profiter.

Plus récemment, la chimie analytique, les méthodes physiques d'analyses ont découvert l'impact de l'informatique dans ce domaine particulier des sciences physiques. D'ailleurs, les promoteurs et concepteurs de l'instrumentation de laboratoires, ont largement fait appel à l'informatique depuis quelques années dans la modernisation des appareils de mesure qui nous sont, aujourd'hui, proposés.

Cependant, le chimiste analyste peut et doit aussi profiter du développement de l'informatique. Du signal de mesure à l'obtention du résultat définitif, en tenant compte des sources d'erreur à la fois de précision et de justesse, la conception d'un logiciel de traitement et de gestion des données s'imposait.

Marc PANSU, chimiste de formation, sans prétendre se substituer à l'informaticien de métier, nous propose un logiciel interactif modulaire et évolutif qui, incontestablement, facilitera le travail de l'analyste tout en améliorant la qualité des résultats.

Maurice PINTA  
Directeur de Recherche.





DESCRIPTION DU LOGICIEL SPCLAS.



## I - EVOLUTION ET BESOINS DES LABORATOIRES.

Les progrès de la chimie analytique conduisent à l'obtention d'analyses de plus en plus sensibles et précises sur un nombre d'échantillons de plus en plus grand.

Ces progrès doivent donc être accompagnés de logiciels de dépouillement et de gestion des données bien adaptés au mode de travail d'un laboratoire permettant :

- de calculer des résultats bruts d'après des mesures physiques,
- de classer les résultats d'un dosage (moyennes corrigées, intervalles de variations, références...),
- de stocker ces données en fichiers homogènes et d'avoir accès à tout moment aux dossiers d'analyses pour comparer, compléter, corriger ces dossiers,
- de lire et d'imprimer rapidement des bulletins d'analyses,
- de disposer de tableaux de résultats stockés permettant sans entrer manuellement les données d'appliquer des programmes statistiques d'analyses de ces données. L'information fournie par de tels programmes augmente avec les possibilités nouvelles de dosages et leur amélioration qualitative. Du point de vue strict du chimiste, ils peuvent servir à tester des méthodes et appareils (analyses de distribution, analyses de variances, tests de comparaison de moyennes et de variances, régression linéaires multiples...) et à deceler des échantillons anormaux (écarts par

rapport aux distributions, influence sur les corrélations...) qui devront être vérifiés.

En outre, les logiciels de dépouillement et de gestion des données doivent permettre aux analystes d'effectuer un travail plus agréable et plus rapide, de conserver et d'avoir accès très rapidement à tous leurs résultats sur disquettes utilisant la micro informatique. D'autre part les programmes de calcul de résultats bruts peuvent être aisément adaptés à un couplage direct avec les appareils de mesure.

Le logiciel présenté ici est modulaire. Il est possible de généraliser son emploi au laboratoire en rajoutant éventuellement des modules de dépouillement pour des analyses particulières et des modules pour la gestion des fichiers, ainsi que le traitement des données. Enfin, ce logiciel est écrit par un chimiste. Que les spécialistes de l'informatique veuillent bien pardonner toutes les imperfections.

## II - MATERIEL NECESSAIRE.

Le langage utilisé est le Basic du micro-ordinateur HP 9845. Il peut être aisément traduit par les possesseurs d'autres micro-ordinateurs programmables en Basic à condition de disposer d'une mémoire de 64 Koctets, de deux lecteurs de disquettes ou d'un lecteur de disquettes et d'un lecteur de cassettes ou même d'un seul lecteur si l'on stocke programmes et données sur la même cartouche, d'un écran alphanumérique et d'un écran graphique, d'une imprimante permettant de préférence, l'impression simultanée de graphiques et de résultats. Il est souhaitable également de disposer des fonctions matricielles (transpositions, multiplications, inversions de matrices, calculs de déterminants). A moins d'écrire les sous-programmes nécessaires.

Enfin, la vitesse d'exécution est grandement améliorée si l'on dispose d'un système de stockage binaire des programmes type STORE-LOAD du HP 9845.

### III - DESCRIPTION DU LOGICIEL.

Le logiciel dans sa forme actuelle constitue un premier ensemble cohérent permettant le travail d'un laboratoire. Son caractère interactif rend son utilisation possible à toute personne non initiée à l'informatique, qui répondra aux questions posées par l'écran. Il comprend un type défini de fichier permettant de gérer des tableaux de résultats d'analyses.

Son caractère modulaire lui procure une souplesse d'évolution en fonction des besoins, tant pour le calcul de résultats bruts pour des mesures particulières que pour la gestion des tableaux de données. Il comprend actuellement 10 modules :

- Un module SPCALC de calcul des résultats bruts, 3 modules CLDON, CLDON 2 et SPDOCO pour le classement et le calcul des résultats définitifs d'un dosage, 3 modules SPECAT, SPCRST et SPRAST pour le stockage des dosages en fichiers, un module SPELEC de lecture et impression de fichiers, un module SPCOR pour la correction des fichiers, un module principal de liaison SPCLAS.

La figure 1 illustre le fonctionnement du système avec les liaisons entre modules. Dans cette figure, les flèches en gros trait représentent le chemin le plus logique de travail depuis une mesure jusqu'à son stockage, les flèches doubles indiquant le sens le plus logique de ce travail. Les pointillés représentent des modules qui peuvent être rajoutés au logiciel.

Le module principal SPCLAS assure la liaison avec la plupart des autres modules. Cependant, les modules sont indépendants et lors du travail, pour gagner du temps, il n'est pas nécessaire de revenir au module principal pour obtenir le rappel du suivant dans l'ordre le plus logique.

Une simple pression sur la touche CONT assure le rappel de celui-ci lors des questionnaires de sortie. Lorsque l'on repasse par le module principal on peut choisir son programme de travail ou simplement presser la touche CONT pour obtenir également le module suivant dans l'ordre le plus logique. Si par mégarde, on se trouve dans un module inapproprié, il suffit de demander le chargement du bon module (LOAD). Les données courantes sont toujours conservées et l'exécution peut continuer. Il en est de même si l'on veut par exemple lire un fichier

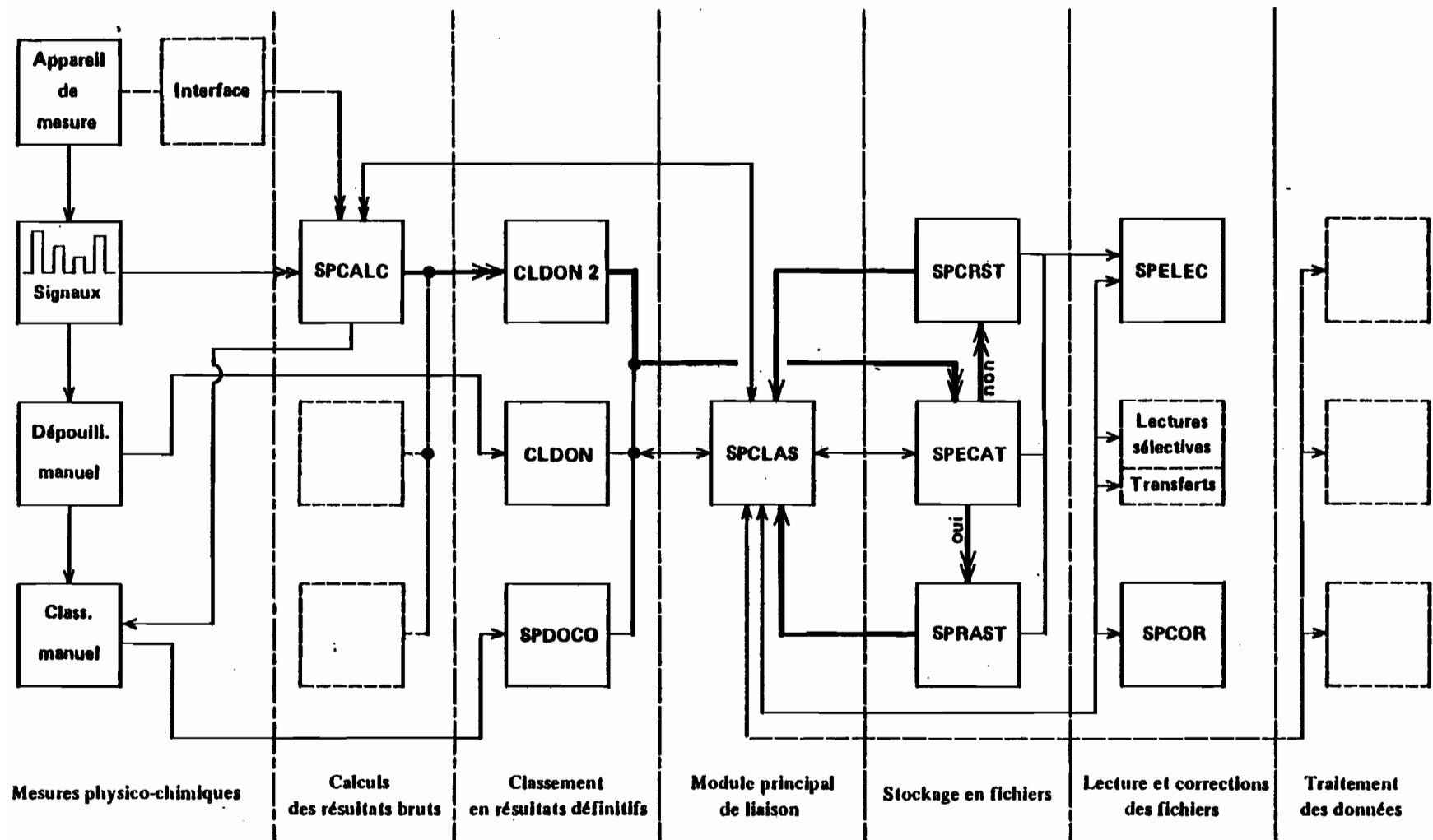


Figure 1 : Tableau synoptique du fonctionnement du logiciel en liaison avec les mesures physico-chimiques

avant de continuer une exécution de stockage.

Comme le montre la figure 1, l'utilisateur dispose de choix pour son travail. Par exemple, il peut choisir de ne pas stocker ses données et d'utiliser uniquement le module de calcul SPCALC ou le module de classement CLDON. Il peut aussi exécuter une partie du travail manuellement (calcul ou classement) et stocker ses données ensuite.

#### IV - LES DIVERS MODULES.

##### 1. Modules de dépouillement des résultats bruts.

###### 1.1. Etalonnage.

###### 1.1.1. Modèle d'ajustement.

Chaque technique d'analyses physico-chimiques fournit en général, des signaux électriques qu'il s'agit de faire correspondre avec des teneurs ou quantités.

Le plus souvent on travaille par comparaison avec des étalons de teneurs connues. Ainsi après divers traitements des signaux (identification, stabilité, bruit de fond, mesure de surfaces, de hauteurs...) on obtient des mesures qui sont comparées avec les mesures d'étalons. Il s'agit donc de trouver des modèles donnant de bonnes approximations des courbes d'étalonnages.

Dans la plupart des cas, on utilise le modèle de régression polynomiale d'ajustement à une courbe de la forme  $Y = A_0 + A_1x^1 + A_2x^2 + \dots + A_nx^n$  par la méthode des moindres carrés. Ce modèle est bien adapté à beaucoup d'analyses quantitatives physico-chimiques.

Très souvent en effet, dans un certain domaine de concentration, les courbes d'étalonnage (densités optiques en spectrographie d'absorptions atomique et moléculaire, intensités d'émissions en spectro d'arc et plasma, surfaces de pics en chromatographie, surfaces corrigées en activation neutronique...) les courbes d'étalonnage sont des droites plus ou moins incurvées vers les fortes teneurs et qui peuvent également s'incurver vers les faibles teneurs à l'approche de la limite de détection.

Beaucoup d'appareils modernes sont maintenant équipés de systèmes utilisant ce modèle pour l'étalonnage et donnant des mesures directement en concentration.

Les équipements sont pourtant souvent insuffisants pour une bonne précision. Le programme SPCALC présenté ici permet des choix

de travail pour améliorer la précision.

### 1.1.2. Choix du degré d'ajustement.

La figure 2 illustre l'importance de ce choix :

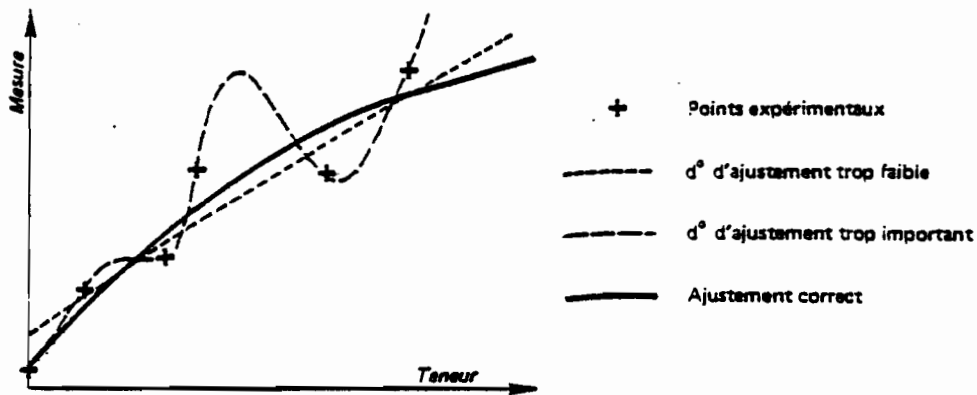


Figure 2 : Choix du degré d'ajustement

L'ajustement doit être suffisant pour passer au mieux par tous les points mais ne doit pas être trop précis. Il faut tenir compte de l'erreur dans les teneurs étalons.

SPCALC choisit lui-même lors du premier étalonnage l'ajustement le plus approprié. Ce choix est basé sur la valeur du coefficient d'ajustement  $R^2$  (carré du coefficient de corrélation.)

Il calcule successivement les coefficients  $A_0, A_1, \dots, A_7$ , et  $R^2$  pour, le degré 1, le degré 2... le degré 7 et s'arrête lorsque  $R^2$  devient supérieur à 0,999 (valeur toujours suffisante dans la pratique). Lorsque la valeur absolue de  $(1-R^2)$  d'un ajustement diminue de moins de 1/10 de la valeur précédente, SPCALC revient à l'ajustement précédent.

Ce choix automatique suffit dans la plupart des cas. En outre l'utilisateur dispose de la possibilité de choisir lui-même ensuite d'autres degrés d'ajustement et d'observer à l'écran les diverses courbes. Il peut également revoir ses étalons pour modifications.

Lors du travail en étalonnages successifs, les étalonnages suivant le premier sont systématiquement ajustés au même degré que celui-ci.



### 1.1.3. Choix du mode d'ajustement.

Lorsque l'on connaît la loi qui régit une courbe d'étalonnage il est parfois commode de transformer les données en entrée pour ajuster selon cette loi.

Ainsi en spectrographie d'absorption, la transmission du rayonnement suit en général la loi de Lambert-Beer.

$$T = e^{-KC}$$

T = transmission

K = cte

C = teneur

L'utilisateur peut choisir un ajustement quelconque ou un ajustement selon cette loi. Dans ce cas pour des mesures de transmission, la valeur du signal T est transformée à l'entrée des données en Log T.

L'absorbance est définie par  $A = A_{100} - T$  avec  $A_{100}$  = valeur du signal pour 100 % d'absorbance. On peut choisir aussi la loi de Beer pour des mesures d'absorbance. Dans ce cas, il faut entrer au début la valeur de  $A_{100}$ . Le signal est alors transformé en Log ( $A_{100}-A$ ). Il est facile de rajouter quelques lignes de programme à l'entrée des données pour ajuster selon d'autres lois.

### 1.1.4. Choix du mode d'étalonnage.

Un problème qui affecte beaucoup la précision des analyses physico-chimiques est la dérive des appareils de mesures. Cette dérive peut affecter en proportion plus ou moins grande la ligne de base ou des mesures d'échantillons.

Certains appareils sont équipés de corrections automatiques de dérives. Mais cette correction est discontinue et les mesures les plus précises sont celles qui se situent près des étalonnages.

Dans les dépouillements manuels, on estime la dérive pour chaque échantillon situé entre deux étalonnages. SPCALC permet de respecter au mieux cette démarche. Ainsi l'utilisateur peut choisir de faire ses calculs par rapport à une courbe d'étalonnage globale moyenne ou bien de travailler en étalonnages successifs. Ainsi pour un étalonnage de degré n d'équation : 
$$Y_1 = \sum_0^n a_{i1} x^i.$$

et l'étalonnage suivant d'équation :  $Y_2 = \sum_0^n a_{i2} x^i$ .

l'utilisateur peut choisir de calculer ses échantillons entre ces deux étalons selon la courbe moyenne :  $Y = \sum_0^n \frac{a_{i1} + a_{i2}}{2} x^i$

Mais il est plus précis lorsque les mesures sont effectuées à intervalles réguliers d'entrer le nombre d'échantillons N entre étalonnages. Alors chaque échantillon est calculé selon la courbe :

$$Y = \sum_0^n (a_{i1} + (a_{i2} - a_{i1}) \text{Num}/N) x^i$$

avec Num = Numéro de la mesure.

La correction de dérive est ainsi linéaire selon la position de l'échantillon et tient compte de sa teneur.

En outre, l'utilisateur peut choisir de supprimer un étalonnage défectueux.

### 1.2. Calcul des teneurs.

Pour une valeur du signal  $Y_0$  d'un échantillon quelconque le calcul de sa correspondance en valeur de mesure consiste à chercher la racine de l'équation  $F(x) - Y_0 = 0$ ,  $F(x)$  étant l'équation de l'étalonnage pour cet échantillon, avec ou sans correction de dérive. Dans notre cas pour des degrés d'ajustement quelconques diverses méthodes d'approximation sont applicables.

Nous avons choisi la méthode des sécantes qui donne une convergence assez rapide. Diverses précautions doivent être observées : choix des bornes selon les signes des dérivées premières et secondes, présence d'un point d'inflexion, précision. Pour chaque racine  $x_0$  trouvée, la valeur de  $Y_0$  est recalculée et imprimée par comparaison avec la valeur initiale. Dans le domaine de travail, l'étalonnage doit évidemment fournir une courbe donnant une seule racine.

### 1.3. Données transférées, autres modules de calcul.

Tous les tableaux nécessaires sont dimensionnés en début de programme. Ils peuvent être redimensionnés par l'utilisateur mais il pourra être nécessaire d'ajouter une mémoire vive supplémentaire au calculateur. Il faudra adapter les tableaux pour avoir un moyen de reconnaissance des étalons dans le cas d'un travail en couplage direct

avec un appareil de mesure. Dans ce cas, pour utiliser la correction de dérive, il faudra également rajouter un tableau pour le stockage des signaux entre deux étalonnages.

Les données à transférer aux autres programmes sont : une clé indiquant au calculateur que le programme de calcul vient d'être exécuté, un tableau de 7 variables alphanumériques (maximum 200 caractères) pour l'identification du dosage, deux entiers indiquant respectivement le nombre de décimales et le nombre de mesures, et le tableau des résultats calculés dimensionné ici à 300 échantillons avec 3 colonnes, les deux premières étant respectivement un rappel du n° d'échantillon et de la valeur du signal, la troisième étant la teneur calculée. Les deux premières colonnes sont transférées uniquement pour faciliter le travail de l'utilisateur pour la reconnaissance de ses échantillons lors du programme de classement. Elles peuvent être supprimées. De même le nombre d'échantillons peut être changé. Mais attention à la mémoire disponible. L'utilisateur peut écrire d'autres modules de calcul pour des méthodes d'analyses particulières. Simplement, il faudra veiller à transférer les même variables, tableaux et données.

## 2. Modules de classement des résultats pour un dosage.

### 2.1. Description.

Une partie du travail du technicien en chimie analytique consiste à classer ses résultats bruts en apportant les corrections nécessaires pour obtenir une valeur définitive de dosage correspondant au substrat initial.

Les programmes CLDON sont destinés à rendre ce travail beaucoup plus rapide et agréable.

Ils fournissent pour un dosage, un tableau d'analyse complet avec l'identification du dossier, les vraies références des échantillons, les teneurs moyennes corrigées avec éventuellement les écarts-types et le nombre d'essais pour chaque échantillon. Les modules CLDON et CLDON2 fonctionnent de manière identique, CLDON demandant l'entrée manuelle des résultats bruts alors que CLDON2 utilise les résultats bruts transférés par SPCALC.

### 2.2. Choix de travail et utilisation.

Un premier questionnaire de ce programme permet de classer les

échantillons selon la référence initiale (6 caractères alphanumériques maxi). Lorsque des répétitions des mêmes références se suivent, il suffit de presser la touche CONT.

Pour éliminer un essai défectueux, taper le signe +. Pour revenir en arrière d'un échantillon en cas d'erreur, taper le signe -. Pour aller plus vite lorsqu'il n'y a pas de répétition et si l'on désire garder comme référence les numéros d'échantillons, taper Idem ou I.

Pour recommencer le classement au début en cas d'erreur sans détruire les données, taper Erreur ou E.

Lorsque l'essai est un blanc, taper Blanc ou B. Les Blancs sont comptabilisés à part et la moyenne des blancs est calculée.

Avec un peu d'habitude on voit que cette procédure est très rapide. Les références ne sont tapées qu'une seule fois, travail qu'il faut de toute façon faire après classement dans un travail manuel.

Lorsque l'on tape une référence qui a déjà été classée, le calculateur demande si c'est la même. Si oui, il comptabilise la mesure avec la première. Si non, il faut changer de référence.

Lorsque toutes les références sont classées apparaît un deuxième questionnaire qui concerne les corrections de facteur d'échantillons. En général, lors d'une analyse, il y a 2 facteurs multiplicatifs, un facteur de dilution et un facteur prise d'essai. L'opérateur peut aussi avoir calculé un facteur global. Le questionnaire permet le choix des solutions. Pour aller plus vite on peut même introduire un ou deux facteurs constants et changer ensuite les facteurs pour quelques échantillons particuliers.

Lorsque l'on veut diviser par un facteur, par exemple si le facteur prise d'essai est une masse, il faut introduire 1/facteur.

Après ces corrections le tableau est listé à l'écran, les moyennes et écarts types étant corrigés par les facteurs, la valeur moyenne du blanc étant déduite avec le facteur global ou prise d'essai mais après correction du facteur de dilution.

Un troisième questionnaire permet d'apporter de façon facultative 14 possibilités de corrections particulières au tableau et d'imprimer le bulletin définitif d'analyses pour un dosage.

### 2.3. Données transférées, intervalles de variation.

A l'entrée le programme CLDON2 fonctionne avec les données trans-

férées par SPCALC.

Lors d'utilisations de CLDON pour plusieurs classements successifs, ces données sont de même gardées à chaque fois et il ne sera pas nécessaire par exemple de retaper toute l'entête du dosage.

En sortie, le programme calcule un coefficient de variation sur l'échantillon qui a été répété le plus de fois. Il calcule le nombre de répétitions moyen pour les autres échantillons. L'opérateur peut changer ces valeurs s'il a effectué par ailleurs une meilleure détermination du coefficient de variation.

Les données transférées vers les programmes de stockage sont donc un tableau pour les moyennes des résultats dimensionné ici à 200 échantillons, ainsi qu'un tableau de même dimension pour les références, une valeur Precis du coefficient de variation, deux entiers N<sub>precis</sub> et N<sub>moyen</sub> respectivement pour le nombre d'essais lors de la détermination du coefficient de variation et le nombre d'essais moyens par échantillons.

Ces valeurs doivent être stockées pour permettre par la suite de déterminer l'intervalle de variation de chaque mesure soit :

$$\pm St / \sqrt{N_{moyen}}$$

avec :

$$S = \text{écart - type} = \text{Precis} \times \frac{\text{Moyenne}}{100}$$

t = valeur donnée par les tables de student pour (N<sub>precis</sub>-1) degrés de liberté au niveau de confiance choisi.

Cette procédure correspond au mode de travail le plus souvent utilisé. On détermine la variance sur un des échantillons avec beaucoup de répétitions puis on passe tous les échantillons avec un même nombre d'essais pour chacun plus faible. L'échantillon qui sert à la détermination du coefficient de variation doit avoir une valeur de mesure moyenne par rapport aux autres échantillons. Le coefficient de variation peut varier avec la valeur de la mesure.

Par ailleurs, les autres données transférées vers le stockage sont toujours le tableau d'identification, le nombre de décimales ainsi qu'une clé indiquant le programme de classement vient d'être exécuté. Le Module SPDOCO transfère les mêmes données vers le stockage. Il permet de travailler plus rapidement lorsqu'on veut stocker des dosages classés manuellement.

### 3. Stockage des résultats en dossiers d'analyse.

#### 3.1. Les dossiers d'analyse et le module SPECAT.

Le stockage est basé sur l'identification d'une référence de dossier à 6 caractères alphanumériques. L'expérimentateur devra définir son dossier et quelles en sont les limites en fonction des études futures qu'il voudra faire sur ses données. Par exemple pour des essais de cultures si des dosages sont effectués simultanément sur les plantes et sur les sols, faudra-t-il créer un dossier sols et un dossier plantes ou un seul dossier en jouant sur les références de dosage. Ce choix sera en relation avec les variables dont on veut mettre en évidence une comparaison et la configuration des programmes de traitements de données en sortie.

Après l'exécution des modules d'entrée et de classement des données d'un dosage, le module SPECAT recherche sur les disquettes l'existence ou la non existence du dossier. Lorsque l'expérimentateur a un doute sur la référence de dossier qu'il a choisie, il peut consulter à sa convenance des en-têtes de dossiers figurant au catalogue des disquettes. Il peut alors changer son numéro de référence ou le numéro de référence d'un dossier stocké pour y ajouter son dosage.

En sortie de ce module, une clé oriente le stockage soit vers le module SPCRST soit vers le module SPRAST.

#### 3.2. Le module SPCRST.

Ce module permet la création des fichiers et le stockage du premier dosage. Il pose à l'utilisateur deux questions très importantes qui concernent la taille maximum des fichiers. Cette taille ne pourra plus être changée par la suite.

Après création du fichier, le module stocke alors les résultats du dosage en cours. Une procédure de vérification est prévue pour la conformité du stockage de chaque valeur.

#### 3.3. Le module SPRAST.

Ce module permet le stockage d'un dosage à la suite d'un fichier existant après harmonisation des données courantes avec celles du fichier. Il est divisé en 4 parties :

- harmonisation des références de dossier  
Plusieurs choix sont possibles permettant un travail rapide : choix de l'une ou l'autre référence, ajout des 2 références, changement de référence.
- Rajout des identifiants du dosage en cours avec possibilité de les modifier au dernier moment.
- Harmonisation des échantillons. C'est la partie la plus délicate. En effet pour des travaux partiels où à des périodes éloignées, un dosage d'un même fichier peut comporter plus ou moins d'échantillons que le fichier. Ces échantillons peuvent ne pas être dans le même ordre. En outre, il peut y avoir des erreurs de références d'échantillons

En principe cette harmonisation se fait de manière entièrement automatique. L'opérateur doit surveiller l'écran où s'impriment les références du dossier par comparaison avec les références d'échantillons et leurs valeurs de mesures. Au questionnaire il appuie sur la touche CONT puis répond aux questions éventuelles (référence à remplacer ou touche CONT pour rajout). Cette opération doit être répétée jusqu'à ce que l'écran ne pose plus de questions et que toutes les références soient dans le même ordre.

Lorsqu'un échantillon n'existe pas dans le dosage courant et s'il n'y a pas d'erreur de référence, SPRAST rajoute cet échantillon en stockant - 1 pour sa valeur de mesure. Il n'y a jamais de valeur négative et cette indication sert de repère de non détermination de ce dosage pour cet échantillon. De même si un échantillon existe au dosage courant mais pas au fichier, la référence est rajoutée au fichier avec - 1 pour tous les dosages présents.

Un sous programme de correction manuelle peut être appelé en dernier recours. Ce n'est pas nécessaire en général.

Lorsque l'harmonisation est terminée, l'opérateur appelle la dernière partie qui effectue le stockage définitif et ajoute son dosage au dossier.

#### 3.4. Données transférées.

Toutes les données du dosage courant sont retransférées en sortie des modules de stockage. Il est possible ainsi de stocker un dosage

dans plusieurs fichiers. Si l'on passe à un autre dosage, du même fichier, il ne sera pas nécessaire de retaper l'entête.

### 3.5. Remarque .

Nous avons déjà vu qu'il était important de bien définir le contenu d'un fichier. De même, il est important de bien définir ce qu'est un échantillon et ce que représente une mesure. Dans les modules suivants, les dosages seront les colonnes d'un tableau et les échantillons les lignes. Les comparaisons visuelles ou statistiques seront parlantes entre les colonnes.

Par exemple, si on effectue un dosage de cuivre sur différentes parties de plants de blés, une mauvaise solution consiste à faire une colonne cuivre et à différencier les échantillons (Racine 1, tige 2... épi 1...). Il faut plutôt numéroter chaque plant et stocker les colonnes cuivre racines, cuivre tiges... Ceci peut paraître évident, mais on gagnera beaucoup à adopter cette solution dès le début des opérations de mesures et d'utilisations de SPCALC. Les variances pourront être déterminées plus précisément pour chaque partie surtout si les teneurs sont assez différentes.

## 4. Lecture et corrections des fichiers.

### 4.1. Corrections.

SPCOR est un module de corrections pour nos fichiers.

Il permet de corriger :

- l'entête du fichier
- les identifiants de dosage
- les références des échantillons et les teneurs.

Il permet également de rajouter ou supprimer un/des échantillons au fichier.

### 4.2. Lecture et impression des tableaux d'analyse.

SPELEC permet de lire et d'imprimer les fichiers dans un tableau de 80 caractères. Pour la clarté du tableau, les données de l'entête fichier sont lues à l'écran mais peuvent être tronquées dans le tableau.



50 caractères sont réservés pour la/les dates,  
28 caractères pour origine/s ou demandeur/s,  
28 caractères pour méthode/s ou opérateur/s,  
68 caractères pour le substrat.

Les échantillons sont imprimés en colonnes de 9, 6 ou 14 caractères avec le nombre de décimales stockées pour chaque dosage (on peut changer ce nombre avec SPCOR). Il y a donc 7, 10 ou 5 colonnes de dosages par page. Après chaque page, les tableaux sont imprimés à la suite sans l'entête.

#### V - CONCLUSION - PERSPECTIVES.

Ce travail présente encore de nombreuses perspectives de développement. Outre les modules qui restent à écrire, on peut encore apporter des modifications qualitatives au logiciel existant.

La démarche qui a poussé à l'écriture de ce logiciel est une démarche de chimiste. Nous avons essayé de respecter au mieux le processus de travail dans un laboratoire d'analyses physico-chimiques. Ce logiciel a été testé. Les 10 modules existants constituent déjà un ensemble cohérent de calcul de classement et de gestion des résultats en fichiers utilisable par tout laboratoire.

Nous espérons écrire d'autres modules et avoir des échanges avec les intéressés qui en écriront. Ils peuvent nous contacter pour tous renseignements complémentaires.



UTILISATION DU LOGICIEL SPCLAS.



## UTILISATION DU LOGICIEL.

### 1. MENUS ET QUESTIONS.

Les principaux questionnaires de chaque module sont reproduits ci-dessous, tels qu'ils apparaissent à l'écran et dans le même ordre.

#### 1. MODULE PRINCIPAL.

Reference du fichier courant=

Voulez-vous:

- 1-Calculer des résultats bruts avec des courbes d'étalonnage
- 2-Classer les résultats bruts du dosage qui vient d'être calculé
- 3-Classer des résultats bruts en les entrant manuellement
- 4-Entrer les résultats corrigés pour un dosage
- 5-Stocker sur disquette les résultats finaux d'un dosage
- 6-Lire ou imprimer un fichier
- 7-Corriger un fichier sur la disquette
- CONT-Me laisser choisir le programme à effectuer à la suite

Les choix 1, 2, 3, 4, 5, 6 et 7 appellent respectivement les modules SPCALC, CLDON2, CLDON, SPDOCO, SPECAT (ou SPCRST ou SPRAST si SPECAT vient d'être appelé), SPELEC, SPCOR.

CONT appelle CLDON2 si SPCALC vient d'être utilisé, SPECAT si CLDON2 vient d'être utilisé, SPCRST ou SPRAST si SPECAT vient d'être utilisé. Si cet ordre d'utilisation n'a pas été suivi, la touche CONT n'a aucun effet.

## 2. MODULE DE CALCUL DES RESULTATS BRUTS : SPCALC.

### 2.1. Références du dosage.

```

*****ELEMENTS D'IDENTIFICATION DE VOS ECHANTILLONS*****
-Entrez les références demandées
-CONT=Référence inchangée
-0=Sortie
Dossier: V2000
Date   : 18/10/83
Origine ou demandeur: Nouvelle Calédonie
Methode ou opérateur: Spectrographie (Abs at/Em flamme/ICP/Technicon)
Substrat : Roches volcaniques (Basaltes)
Dosage   : Fer
Unité finale :ng/mg

```

Le fait que les références du dosage précédent soient conservées en mémoire, rend le travail plus rapide pour un même dossier.

### 2.2. Unité.

```

-Unité finale dans le substrat= ng/mg
  "Unité choisie pour la solution ou CONT=Inchangée?"

```

La réponse à cette question est facultative. Elle sert à la clarté intermédiaire des résultats lorsque le substrat de dosage n'est pas le substrat initial. Par défaut, l'unité est la même que celle du substrat initial.

### 2.3. Nombre de décimales pour les résultats.

```

-Nombre de décimales
-Par défaut:CONT=4 décimales
-Attention:un nombre de décimales trop grand peut augmenter la précision
  mais aussi le temps de calcul des racines

```

### 2.4. Choix du mode d'ajustement.

```

-Choix de votre mode d'ajustement :
  -CONT-Ajustement polynomial quelconque
  -1-Ajustement selon la loi de Lambert-Beer

```

#### 2.4. bis Choix de mesure transmission ou absorbance.

Cette question n'est posée que si l'on a répondu 1 à la question 4.

Ajustements selon la loi de BEER :

- 0-Mesures de la transmission
- Valeur du signal pour 100% d'absorbance =  
Largeur de l'enregistrement graphique s'il est étalonné

#### 2.5. Nombre d'étalonnages.

Choix de travail :

- 1-Valeur moyenne de tous les étalonnages
- Nombre d'étalonnages--->Correction de dérive
- Remarque:  
-Pas plus de 20 étalonnages

#### 2.6. Nombre d'étalons de chaque étalonnage.

Nombre d'étalons de l'étalonnage 2

- Remarques:  
-0- -->Elimination de cet étalonnage  
- Pas plus de 100 étalons par étalonnage

Lorsqu'on a rentré un nombre d'étalonnages trop grand, ou lorsqu'un étalonnage apparaît defectueux, on peut l'éliminer à cette question. Les échantillons suivants sont alors calculés sur la base de l'étalonnage précédent.

#### 2.7. Valeur des étalons.

Etal numero 2 Pic numero 1 CONT=Valeur inchangée  
Teneur:Fer(ng/mg) Ancienne valeur= 0 ?  
Signal:Fer Ancienne valeur= 0 ?

Lors d'étalonnages successifs, il est pratique de ne pas avoir à réintroduire des valeurs qui ne changent pas.

#### 2.7. bis Corrections ponctuelles sur les étalons.

En fin d'introduction, le tableau des valeurs de l'étalonnage est listé à l'écran en impression formatée pour faciliter éventuellement des corrections ponctuelles

Valeurs etalons C et H

* N°	* Teneur:Fe*	* Signal:Fe*
* 1 *	0.0000 *	0.0 *
* 2 *	1.0000 *	10.0 *
* 3 *	2.0000 *	20.0 *
* 4 *	4.0000 *	40.0 *
* 5 *	8.0000 *	90.0 *
* 6 *	4.0000 *	41.0 *

"Correction eventuelle:CONT ou numero pic a corriger"

2.8. Calcul facultatif d'un signal à partir d'une teneur.

Vérification facultative: valeur de Teneur:Fe(ng/mg)

Cette question peut permettre de vérifier la justesse de son étalonnage.

2.9. Correction ponctuelle d'étalons après tracé de la courbe d'étalonnage.

"Voulez-vous revoir vos étalons ?/Oui=1 Non=CONT"

2.10. Degré d'ajustement imposé.

Voulez-vous imposer un autre d° d'ajustement: D° ou 0

Cette question est posée uniquement lors du premier étalonnage. Elle permet le choix d'un autre ajustement sans entrer à nouveau les étalons.

2.11. Choix de travail pour les calculs de teneurs.

CHOIX DE VOTRE MODE DE TRAVAIL  
 -CORRECTION DE DERIVE :Entrez le nombre de pics entre les 2 etalons  
 -VALEURS MOYENNES DES 2 ETALONAGES :Entrez 0  
 -ELIMINATION DU DERNIER ETALONAGE :Entrez chiffre négatif

Lors du troisième choix et comme à la question 9, la dernière courbe est effacée sur l'écran avant la poursuite de l'exécution.



## 2.12. Calcul des teneurs.

```
*****CALCUL DES TENEURS*****
ENTREZ LES HAUTEURS DE PIC DANS L'ORDRE
ENTREZ UN CHIFFRE NEGATIF POUR SORTIR DE LA BOUCLE
VOUS CORRIGEREZ LES ERREURS A LA FIN
```

Tant pour la correction de dérive que pour le transfert des résultats aux autres modules, il est impératif de respecter l'ordre d'introduction des signaux.

Une question 12 bis permet de recalculer ponctuellement des échantillons à la fin.

## 2.13. Sortie de calcul.

```
"Y-a-t-il encore des étalonnages?/Oui=1 Non=CONT"
```

Cette question n'est posée que si l'on a répondu 0 à la question 6. Sinon, la sortie est automatique.

## 2.14. Sortie du module.

```
Voulez-vous :
-CONT-Classer et stocker vos échantillons
-STOP-RUN-Recalculer un dosage
-0-Retourner au programme principal de choix de travail
-Remarque:
  -si vous ne classez pas vos teneurs de suite
  vous devrez les entrer manuellement ensuite
```

## 3. MODULES DE CLASSEMENT DES RESULTATS.

### 3.1. CLDON

```
*****Entrez les valeurs des teneurs*****
Vous classerez avec les références ensuite
```

Cette boucle d'introduction des données brutes (avec possibilité de correction ponctuelle) est la seule question qui diffère de CLDON2.

### 3.2. CLDON et CLDON2.

#### 3.2.1. Menu de classement.

\*\*\*\*\*CLASSEMENT\*\*\*\*\*

\* Pour classer vos valeurs, entrez:

- N° de référence de l'échantillon ou bien:
  - touche CONT pour référence inchangée
  - Blanc ou B ou BI si l'échantillon est un blanc
  - signe + pour sauter un échantillon
  - signe - pour revenir en arrière d'un échantillon
  - Erreur ou Er pour recommencer au début
- Idem ou I ou Id si les références sont les N° d'échantillons

Reference précédente=

Pour chaque échantillon à classer s'imprime son N°, sa teneur et pour CLDON2 la valeur de son signal de départ. A chaque fois qu'une référence est classée, elle s'imprime en ligne à la suite sous le questionnaire (référence précédente).

### 3.2.1. bis Contrôle de référence.

Référence PLANT1 déjà rentrée/CONT=Même ref 0=Erreur de ref

Cette question est nécessaire lorsqu'une référence a déjà été classée. CONT entraîne la comptabilisation de cette référence avec la première. 0 entraîne la question suivante

"Entrez la bonne référence/CONT?"

La touche CONT réentraîne la première question.

### 3.2.1. ter Références identiques.

La dernière possibilité du menu de classement permet d'accélérer le travail lorsqu'il n'y a pas de répétition d'échantillons et que l'on conserve les numéros d'échantillons comme référence. Dans ce cas, la question suivante est alors posée

"N° DU BLANC DANS LE TABLEAU ?(OU 0)"

La question se répète jusqu'à ce que tous les blancs aient été rentrés. La valeur 0 entraîne la suite de l'exécution.

### 3.2.2. Facteurs d'échantillon.

```
*****CORRECTION FACTEUR D'ECHANTILLON *****
-0-PAS DE FACTEUR de Correction
-1-FACTEUR Multiplicatif constant
-2--Facteur multiplicatif global variable
  -ou facteur multiplicatif prise d'essai variable
-3-Facteur multiplicatif de dilution variable
-Remarque 1:-PAR LA SUITE:
  -Facteur entré=0 --->Sortie
  -CONT --->Facteur=Facteur précédent
-Remarque 2:-Deduction du blanc:
  -Avant le facteur global ou prise d'essai
  -Après le facteur de dilution
-Remarque 3:-Pour diviser par un facteur ,introduire 1/Facteur
```

On peut répéter les questions plusieurs fois. Par exemple : introduire des facteurs constants puis, au moyen de 2 et 3, changer les facteurs pour quelques échantillons.

Lors des questions qui suivent, les facteurs de chaque échantillon sont rappelés avec leur référence et leur teneur. On choisit alors de changer ou non le facteur.

En fin d'introduction du tableau, la réponse 0 effectue les corrections sur les échantillons et le tableau d'analyse s'imprime à l'écran.

### 3.2.3. Correction du tableau.

```
MODIFICATIONS DU TABLEAU *****
CORRIGEZ CE QUE VOUS VOULEZ :
-1-Recommencer le classement
-2-Modifier des references
-3-Changer le nombre de décimales
-4-Corriger des facteurs d'échantillon
-5-Recalculer un échantillon
-6-Changer la valeur du blanc
-7-Supprimer un échantillon
-8-Rajouter un échantillon
-9-Ne pas imprimer variances ,Nbe d'essais et facteurs
-10-Réimprimer toutes ces valeurs
-11-Classer les teneurs en ordre croissant
-12-Reclasser les échantillons selon votre ordre
-13-Retrouver le classement initial
-14-Modifier l'en-tête du tableau
-15-Impression après une correction
-CONT-Fin de correction
```

Pour chaque choix du menu, des questions sont posées lorsque c'est nécessaire. Elles sont suffisamment claires pour l'utilisateur et nous ne les reproduisons pas ici. En cas d'erreur de choix de correction, en général une simple pression de la touche CONT, à la première question du sous-programme concerné, nous ramène au tableau et au menu. L'utilisateur averti pourra accélérer son travail en utilisant au mieux des combinaisons de possibilités entre menus. Par exemple : si au menu 3.2.1. il choisit Idem, il pourra utiliser la possibilité 2 pour introduire ses références lors du menu 3.2.3.

### 3.2.4. Sélection de l'intervalle de variation.

En sortie du menu corrections, les valeurs et questions suivantes sont imprimées dans l'ordre

```
*****Coefficient de variation choisi= 4.65 %-->(Ec-type/Moy *100)
Nombre de répétitions pour sa détermination= 15
ATTENTION:Ce coefficient est déterminé pour une teneur de 1.54 ng/mg
```

"Si vous avez une meilleure valeur du coeff de var:Entrez-la/CONT

"Nbe de repet. pour la détermination de votrecoeff?"

Cette dernière question n'est posée qu'en cas de changement du coefficient de variation.

```
**Nombre moyen de mesures par échantillon= 2
Sans l'échantillon de mesure du coeff de variation
*ATTENTION:ce nombre peut être trop élevé (nombres de mesures très inégales)
```

"Choisissez-vous un autre nombre moyen de mesures?/Nombre ou CONT"

### 3.2.5. Sortie des modules CLDON.

Voulez-vous:

- 4-Retourner au programme principal
- 3-Revoir votre tableau
- 2-Rechoisir un coefficient de variation
- 1-Classer un autre échantillon
- 0-Recommencer le classement de cet échantillon
- CONT-Stocker les valeurs

\*\*\*ATTENTION:Cas1-->Les données actuelles seront perdues

### 3.3. SPDOCO.

Les questions de ce modules permettent de créer ou compléter rapidement un fichier avec des données corrigées de dosage.

Il peut être utilisé uniquement pour un travail de secrétariat de mise en forme des tableaux.

#### 3.3.1. Choix du fichier.

Ce premier menu permet de vérifier le bon choix du fichier.

SPELE	PROG	30	256	46/29
TARTAM	DATA	31	210	21/10
PAMPAM	DATA	21	110	5/07
ESSAS	DATA	161	210	49/03

Fichier courant:

\*\*\*Voulez-vous:

- CONT-Stocker dans le fichier courant
- 1-Dans quel fichier?
- 2-Changer de disquette
- 3-Fin d'introduction
- 4-Imprimer le catalogue

### 3.3.2. Choix d'introduction / correction.

Voulez-vous:

- 1-Introduire ou corriger l'en-tête fichier
- 2-Introduire ou corriger les références échantillon
- 3-Introduire ou corriger les valeurs échantillons
- CONT-Fin de correction

### 3.3.3. Introduction ou correction d'en-tête.

Même questionnaire que 2.1. et correction n° 14 de 3.2.3.

### 3.3.4. Introduction/correction de références d'échantillons.

Nombre d'échantillons: 2  
 "Nouveau nombre?/CONT",Nref  
 Echantillon: "Référence?/CONT=Inchangée 0=Sortie"  
 Echantillon: "Référence?/CONT=Inchangée 0=Sortie"

### 3.3.5. Introduction/correction de valeurs d'échantillons.

Valeurs échantillons  
 Echantillon:N1 Teneur= 0  
 "Teneur ?/CONT=Inchangée -1=Non Determinée"  
 Echantillon:N2 Teneur= 0  
 "Teneur ?/CONT=Inchangée -1=Non Determinée"

En sortie des 3 menus 3.3.3., 3.3.4. et 3.3.5., le menu de choix 3.3.2. est réaffiché. La touche CONT provoque alors l'affichage du menu 3.3.1. qui peut commander les questions 3.3.6.

### 3.3.6. Décimales et intervalle de variation.

Nombre de décimales: 0  
 "Nombre de décimales?/CONT=Inchangé"  
 Valeur du coeff de variation: 0  
 "Valeur du coefficient de variation?/CONT=Inchangée 0=Inconnue"  
 Nombre de mesures pour le coeff de variations: 0  
 "Valeur du nombre de mesures?/CONT=Inchangé 0=inconnu"  
 Nombre d'essais moyen par échantillon 0  
 "Nombre d'essais moyen par échantillon?/CONT=Inchangé 0=Inconnu"

### 3.3.7. Sortie du module.

Voulez-vous:

- 1-Imprimer les valeurs de ce dosage
- 2-Corriger Decimales,Coeff,Nbes essais/Revoir donnees
- 3-Corriger les données
- CONT-Stocker ce dosage sur disquette

#### 4. MODULES DE STOCKAGE.

##### 4.1. Recherche de l'existence du fichier : SPECAT.

###### 4.1.1. Impression pour modifications éventuelles du catalogue et du menu du fichier courant.

SPRAS	PROG	51	256	44/10
SPCRS	PROG	27	256	46/01
SPELE	PROG	30	256	46/20
TARTAM	DATA	31	210	21/10
PAMPAM	DATA	21	110	5/07
ESSAS	DATA	161	210	49/03

Reference à stocker:

Voulez-vous:

- CONT-Passer à la suite
- 1-Consulter l'en-tete d'une référence du catalogue
- 2-Changer la référence à stocker
- 3-Changer une référence du catalogue
- 4-Rechercher sur une autre disquette
- 5-Imprimer le catalogue

###### 4.1.2. Fin de recherche d'existence.

Le dossier: existe sur la disquette

\*\*\*\*\*Voulez-vous:

- CONT-Continuer le stockage
- 1-Vérifier encore l'existence/la conformité des dossiers

###### 4.1.3. Sortie du module.

Voulez-vous:

- 1-Retourner au programme principal
- 2-Lire ce fichier
- 3-Vérifier encore l'existence du fichier
- CONT-Continuer le stockage

##### 4.2. Création de fichier et stockage : SPCRST.

Par défaut----->Fichiers de 50 échantillons

"Combien y aura-t-il d'échantillons au maximum dans ce fichier?"

Par défaut (CONT) ,50 dosages au maximum par échantillon

Minimum-----> 7 Dosages

"Combien y aura-t-il de dosages au maximum par échantillon?"

#### 4.3. Rappel de fichier, harmonisation et stockage : SPRAST.

##### 4.3.1. Harmonisation des en-têtes.

```

N°<----> En-tete fichier<----->En-tete à stocker
1 Dossier: V5000<----->V5000
2 Date: 25/7/83<----->18/5
3 Origine: Nouvelle calédonie<----->AZER
4 Methode: Spectrographie<Abs at<----->QSD
5 Substrat: Basaltes volcaniques<----->WXCV
6 Max ech: 31 <-----> 31
7 Max dos: 160 <-----> 160
8 Nbe ech: 9 <-----> 9
9 Nbe dos: 10 <-----> 10
"Quel N° d'en-tete voulez-vous modifier/CONT=Sortie";
Voulez-vous:
-CONT-Verifier les modifications et suite
-1-Modifier dans l'en-tete à stocker
-2-Modifier dans l'en-tete du fichier
-3-Adopter la valeur en-tete fichier
-4-Adopter la valeur en-tete courante
-5-Ajouter les 2 en-tetes

```

##### 4.3.2. Stockage des identifiants de dosage.

```

Identifiant à Stocker(ATTENTION 6 Caractères):Mn
Enregistrement: 6
Nombre de dosages= 10
Dosages présents dans le fichier:SodiumLithiuCalciumFerStrontManganCuiivreZincAlu

```

"Changez l'identifiant à stocker/ou CONT"

"Vérification du stockage ?/Oui=Chiffre+/Non=CONT"

Ces deux questions se répètent successivement pour le dosage, l'unité, le nombre de décimales, le coefficient de variation, le nombre d'essais pour ce coefficient, le nombre d'essais moyen par échantillon.

##### 4.3.3. Harmonisation des échantillons.

```

N°Ech<->Ref ech fichier<----->Ref ech à stocker<-->Teneur
1 <->S2<----->S2<--> 20
2 <->N3<----->N3<--> 30
3 <->N4<----->N4<--> 40
4 <->N5<----->N5<--> 50
5 <->N6<----->N6<-->-1
6 <->N8<----->N8<-->-1
7 <->N9<----->N9<-->-1
8 <->N1<----->N1<--> 10
9 <->N7<----->N7<-->-1

```

"Voulez-vous imprimer la comparaison des références?OUI=1,N/CONT"

---Les échantillons sont-ils identiques et dans le même ordre

---Voulez-vous:

- 2-Passer au stockage définitif
- CONT-Reharmoniser automatiquement les échantillons
- 3-Corriger manuellement des références
- STOP-RUN-Recommencer le stockage des memes données
- 0-Relire la comparaison de fichiers

Remarques:-Harmonisez automatiquement plusieurs fois si nécessaire

-N'utilisez la correction manuelle qu'en dernier recours

-Corr manuelle:Vous pouvez corriger:

-Une reference /ou CONT=Pas de correction

-Sa Teneur/ou CONT=Pas de correction

-Chiffre<0 pour teneur non déterminée

Lors de l'harmonisation, d'autres questions concernant le changement ou l'ajout de références sont éventuellement posées. Ces questions sont suffisamment simples pour ne pas être reproduites.

La touche CONT d'harmonisation automatique doit être utilisée autant de fois qu'il est nécessaire pour avoir toutes les références dans le même ordre.

En cas d'erreur (par exemple rajout d'une référence au lieu de remplacement), recommencer le classement au début (STOP - RUN). L'ensemble des procédures d'harmonisation est suffisamment rapide pour que ceci ne soit pas un inconvénient. Ne presser la touche 2 qu'en étant sûr de l'harmonisation. A ce moment, on ne peut plus revenir en arrière.

## 5. LECTURE DE FICHER.

### 5.1. Choix du fichier à lire.

SPCRS	PROG	27	256	46/01
SPELE	PROG	30	256	46/28
TARTAM	DATA	31	210	21/10
PAMPAM	DATA	21	110	5/07
ESSAS	DATA	161	210	49/03

Reference courante=V5000

Max enregistrements= 31 -----Max octets/enregistrement 160

-----Voulez-vous:-----!

- CONT-Lire le fichier courant
- 1-Lire un autre fichier
- 2-Voir une autre disquette
- 3-Imprimer le fichier courant
- 4-Fin de lecture

### 5.2. Lecture de l'en-tête à l'écran et tronquage éventuel du tableau.

-----References du dossier V5000-----

Dossier=V5000

Date=18/5/25/7/83

Origine ou demandeur:Nouvelle calédonie

Methode ou operateur=Spectrographie<Abs at

Substrat=Basaltes volcaniques

Nbe maximum d'échant= 20

Nbe maximum de dosages= 15

9 Echantillons

11 Dosages

Nombre de dosages(colonnes)= 11

"Changez le nombre de colonnes à lire/ou CONT"



Cette question permet d'éliminer l'impression de dosages en fin de tableau.

### 5.3. Format d'impression du tableau.

Cette question est posée après l'impression formatée de l'en-tête. Trois formats d'impression sont possibles pour les données.

"Nombre de colonnes pour l'impression:5,7ou10 /CONT=7 ?"

### 5.4. Impression ou non-impression des valeurs de l'intervalle de variation.

Cette question est posée au moment du besoin de l'impression de ces valeurs dans le tableau, après la ligne d'impression d'unité des dosages.

### 5.5. Sortie.

En fin de lecture, le tableau reste sur l'écran, la touche CONT nous ramène au menu 5.1. Une réponse 4 à ce menu nous ramène au module principal de choix de travail.

## 6. CORRECTION DE FICHIERS.

### 6.1. Choix du fichier à corriger.

SPRAS	PROG	51	256	44/10
SPCRS	PROG	27	256	46/01
SPELE	PROG	30	256	46/28
TARTAM	DATA	31	210	21/10
PAMPAM	DATA	21	110	5/07
ESSAS	DATA	161	210	49/03

\*\*\*\*\*Fichier courantV5000

Voulez-vous:

- CONT:Corriger le fichier courant
- 1-Corriger un autre fichier
- 2-Voir une autre disquette
- 3-Imprimer le catalogue
- 4-Fin de correction

## 6.2. Choix de correction.

Voulez-vous:

- 1-Corriger l'en-tete du fichier
  - 2-Corriger des identifiants de dosage
  - 3-Corriger des valeurs d'échantillons
  - 4-Rajouter un échantillon
  - 5-Supprimer un échantillon
  - CONT-Fin de corrections
- Remarque: Pour rajouter un dosage, utilisez les autres programmes  
Taper -1 pour une valeur de dosage inexistante

## 6.3. Correction en-tête.

- 1 -V5000
  - 2 -18/5:25/7/83
  - 3 -Nouvelle calédonie
  - 4 -Spectrographie(Abs at
  - 5 -Basaltes volcaniques
- "Numéro à changer?/ou 0"

Ancienne valeur 2 =18/5:25/7/83

"Nouvelle valeur (ATT:200 Caractères maxi)?"

## 6.4. Correction ponctuelle identifiants.

Voulez-vous corriger:

- 1-Des identifiants de dosage
- 2-Des identifiants d'unités
- 3-Des décimales
- 4-Des coeff de variation
- 5-Des nombres d'essais variation
- 6-Des nombres d'essais moyens
- CONT-Fin de correction

## 6.5. Correction ponctuelle références et valeurs d'échantillons.

Voulez-vous corriger:

- 1-Des références d'échantillons
- 2-Des valeurs d'échantillons
- CONT-Fin de correction

Remarque: Pour éliminer un échantillon, mettre la valeur -1

#### 6.6. Suppression d'un/des échantillons.

Les références présentes sont listées en ligne à l'écran, avec un numéro d'identification. Il suffit alors de taper le numéro à supprimer.

#### 6.7. Rajout d'un/des échantillons.

Le questionnaire demande la référence puis les valeurs pour chaque dosage. Introduire -1 pour un dosage non déterminé.

#### 6.8. Sortie du module.

En sortie des questionnaires 6.3, 6.4, 6.5, 6.6 et 6.7, on retourne au questionnaire 6.2 de choix de correction. En fin de sortie de 6.2, on retourne au questionnaire 6.1 de choix de fichier. La touche 4 appelle alors la sortie du module.

#### 6.9. Sortie du module.

Voulez-vous:

- 1-Re-corriger encore
- 2-Passer au programme principal
- CONT-Lire ce fichier corrigé

## 2. EXEMPLE D'APPLICATION.

Sur une série de 34 échantillons de roches volcaniques on a dosé les teneurs en eau par gravimétrie et les éléments majeurs par colorimétrie d'absorption automatique, émission de flamme, absorption atomique.

On dispose, selon les dosages, d'un ensemble d'enregistrements de signaux de mesures, de résultats bruts et de résultats définitifs.

Il s'agit alors de dépouiller cet ensemble pour obtenir, stocké sur disquette, un tableau d'analyses définitif.

L'opérateur choisit de classer ses dosages dans l'ordre suivant =  $H_2O^+$  (perte à  $105^\circ$ ),  $H_2O^-$  (perte entre  $105^\circ$  et  $1000^\circ$ ),  $SiO_2$ ,  $Al_2O_3$ ,  $Fe_2O_3$ ,  $FeO$ ,  $MgO$ ,  $K_2O$ ,  $CaO$ ,  $Na_2O$ ,  $TiO_2$ ,  $MnO$ ,  $P_2O_5$ .

### 1. $H_2O^-$ .

Les valeurs définitives des teneurs en eau ont été calculées, par ailleurs, d'après les mesures gravimétriques.

On appelle la réponse 4 au menu 1 (SPDOCO). On répond alors aux questions comme suit :

- Menu 3.3.1. : Choix 1 : Choix du fichier.  
Choix CONT.
- Menu 3.3.2. : -1- puis on introduit l'en-tête  
-2- on introduit les références  
-3- on introduit les valeurs des échantillons  
CONT.
- Menu 3.3.1. : -3-

On introduit alors le nombre de décimales retenu, la valeur de la variance, le nombre d'essais pour sa détermination, le nombre d'essais moyens par échantillon. On introduit 0 à chacune de ces valeurs si on ne les connaît pas.

- Menu 3.3.7. : -1- on imprime les résultats de ce dosage.

Fichier courant:S2295  
Dossier:S2295  
Date:Janvier 1983  
Origine ou demandeur:Barszczus  
Methode ou opérateur:Technicon/Abs at  
Substrat:Basaltes volcaniques  
Dosage:H2O-  
Unité:%  
Nombre de décimales: 2  
Valeur du coeff de variation: 5  
Nombre de mesures pour le coeff de variations: 15  
Nombre d'essais moyen par échantillon 1  
N1 = .45  
N2 = .49  
N3 = .3  
N4 = .65  
N5 = .41  
N6 = .82  
N7 = .55  
N8 = .72  
N9 = .37  
N10 = 2.36  
N11 = .96  
N12 = .82  
N13 = .48  
N14 = .89  
N15 = 1.86  
N16 = .98  
N17 = .59  
N18 = 2.11  
N19 = .72  
N20 = .71  
N21 = .57  
N22 = .52  
N23 = .75  
N24 = 5.92  
N25 = .69  
N26 = 1.28  
N27 = .82  
N28 = 21.5  
N29 = 2.68  
N30 = 9.92  
N31 = .3  
N32 = 2.36  
N33 = .72

- Menu 3.3.7. : Aucune correction n'étant nécessaire, on frappe CONT et on attend le menu de recherche de fichier de SPECAT.
- Menu 4.1.1. : On ne désire pas consulter d'autres disquettes, ni lire des en-têtes de fichier : CONT.
- Menu 4.1.2. : CONT.
- Menu 4.1.3. : CONT. Le fichier étant inexistant sur cette disquette, on attend les questions de création du fichier de SPCRST.

Questions 4.2. : Afin de prévoir des possibilités ultérieures d'extension de l'étude, ou choisir de créer un fichier de 50 échantillons de 50 dosages, on appuie alors deux fois sur la touche CONT aux questions et on attend la fin du stockage et le menu de choix pour le dosage suivant.

2.  $H_2O^+$ .

- Menu 1 : Choix 4.

- Menu 3.3.1. : CONT.

- Menu 3.3.2. : -1- on change uniquement  $H_2O^-$  par  $H_2O^+$   
 -2- on change uniquement le nombre d'échantillons et on introduit, à la fin, la référence N34  
 -3- on introduit les nouvelles valeurs pour les échantillons

CONT.

- Menu 3.3.1. : -3-

Les valeurs des décimales et de l'intervalle de variation étant les mêmes, on presse plusieurs fois la touche CONT.

- Menu 3.3.7. : CONT.

- Menus 4.1.1., 4.1.2. et 4.1.3. : touche CONT à chaque fois. On attend alors les menus d'harmonisation pour les fichiers.

- Menu 4.3.1. : Les paramètres de l'en-tête étant inchangés : touche CONT.

Questions 4.3.1. : On ne désire ni modifier les paramètres, ni vérifier le stockage : touche CONT à chaque fois.

- Menu 4.3.3. : On imprime la comparaison de fichier.

N°Ech	<->Ref	ech fichier	<----->	Ref ech à stocker	<-->	Teneur
1	<->	N1	<----->	N1	<-->	.07
2	<->	N2	<----->	N2	<-->	.72
3	<->	N3	<----->	N3	<-->	.27
4	<->	N4	<----->	N4	<-->	.45
5	<->	N5	<----->	N5	<-->	.59
6	<->	N6	<----->	N6	<-->	4.93
7	<->	N7	<----->	N7	<-->	1.97
8	<->	N8	<----->	N8	<-->	2.08
9	<->	N9	<----->	N9	<-->	1.02
10	<->	N10	<----->	N10	<-->	7.5
11	<->	N11	<----->	N11	<-->	2.94
12	<->	N12	<----->	N12	<-->	-.49
13	<->	N13	<----->	N13	<-->	1.08
14	<->	N14	<----->	N14	<-->	2.7
15	<->	N15	<----->	N15	<-->	1.36
16	<->	N16	<----->	N16	<-->	1.26
17	<->	N17	<----->	N17	<-->	1.12
18	<->	N18	<----->	N18	<-->	2.51
19	<->	N19	<----->	N19	<-->	2.23
20	<->	N20	<----->	N20	<-->	.93
21	<->	N21	<----->	N21	<-->	1.74
22	<->	N22	<----->	N22	<-->	4.3
23	<->	N23	<----->	N23	<-->	.93
24	<->	N24	<----->	N24	<-->	12.01
25	<->	N25	<----->	N25	<-->	1.65
26	<->	N26	<----->	N26	<-->	9.17
27	<->	N27	<----->	N27	<-->	26.5
28	<->	N28	<----->	N28	<-->	21.5
29	<->	N29	<----->	N29	<-->	16.79
30	<->	N30	<----->	N30	<-->	26.73
31	<->	N31	<----->	N31	<-->	.27
32	<->	N32	<----->	N32	<-->	7.5
33	<->	N33	<----->	N33	<-->	2.23
34	<->	Inexistant au Fichier	<----->	N34		

A la question d'harmonisation automatique "Voulez-vous garder la référence N34", la réponse CONT rajoute cette référence au fichier et la comparaison affichée est alors correcte.

- Menu 4.3.3. : Le choix -2- provoque alors le stockage du dosage et le retour au menu principal 1.

3. SiO<sub>2</sub>.

- Menu 1. : -1-

Question 2.1. : On change uniquement H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> par SiO<sub>2</sub>.

Question 2.2. : mmg/ml.

Question 2.3. : 2

Question 2.4. : 1

Question 2.4. bis : 0

Question 2.5. : 2

Question 2.6. : 10

Question 2.7. : Valeur des étalons de l'étalonnage 1

Question 2.7. bis : 0.

Dossier: S2295<----->Date: Janvier 1983  
 \*\*\* ETALONAGE N° 1 : Valeur des étalons\*\*\*

* N°	* Teneur:SiO*	* Signal:SiO*
* 1	* 30.0000	* 46.0
* 2	* 25.0000	* 52.5
* 3	* 20.0000	* 59.0
* 4	* 15.0000	* 67.0
* 5	* 10.0000	* 76.0
* 6	* 5.0000	* 86.0
* 7	* 2.5000	* 91.5
* 8	* 1.0000	* 95.0
* 9	* .5000	* 96.0
* 10	* 0.0000	* 97.0

\*\*\*Étalonnage numero 1 Détermination des coefficients de l'ajustement : Y = A(0) + A(1)\*C + A(2)\*C^2 + A(3)\*C^3 +-----+ A(n)\*C^n  
 Ajustement selon la loi de BEER de la valeur des transmissions T=I/I<sub>0</sub>, Y=LGT(Hpic)  
 R^2= Coefficient de détermination  
 REGRESSION AVEC 1 DEGRE D'AJUSTEMENT  
 Y = 1.9880 +- .0108 \*C  
 \*\*\* R^2 = .9999

Question 2.8. : 1 puis 20

C= 1.0000 ----->Hpic= 94.8954  
 C= 20.0000 ----->Hpic= 59.1647

Question 2.9. : CONT.

Question 2.10. : 0

Question 2.6. : 7

Question 2.7. et 2.7. bis : Valeur des étalons de l'étalonnage 2.

Question 2.8. : CONT

Dossier:32295<----->Date:Janvier 1983  
 \*\*\* ETALONAGE N° 2 : Valeur des étalons\*\*\*

N°	Teneur:SiO*	Signal:SiO*
1	25.0000	51.0
2	20.0000	58.0
3	15.0000	66.0
4	10.0000	75.5
5	5.0000	85.0
6	1.0000	95.0
7	0.0000	97.5

\*\*\*Etalonnage numero 2 Determination des coefficients de l'ajustement : Y = A(0) + A(1)\*C + A(2)\*C^2 + A(3)\*C^3 +-----+ A(n)\*C^n  
 Ajustement selon la loi de BEER de la valeur des transmissions T=[I/Io, Y=LGT(Hpic  
 )  
 R^2= Coefficient de détermination  
 REGRESSION AVEC 1 DEGRE D'AJUSTEMENT  
 Y = 1.9884 +- .0112 \*C  
 \*\*\* R^2 = .9998

- Menu 2.11. : 100.

Question 2.12. : On introduit les teneurs dans l'ordre.

On peut remarquer pour ce dosage (valeurs données pages suivantes) :

- . un très bon respect de la loi de Beer dans le domaine de l'étalonnage ( $R^2 = 0,9999$ ) ;
- . le peu de dérive entre les deux étalonnages : les coefficients des deux courbes sont très proches ;
- . le justesse des calculs : les signaux recalculés d'après les teneurs sont toujours égaux aux signaux mesurés ;
- . l'importance de l'utilisation de la correction de dérive pour améliorer la précision (choix 1 de la question 2.1.1.). Même pour cet exemple de dosage choisi pour sa bonne reproductibilité, l'écart sur les teneurs entre deux échantillons de mêmes signaux, comme l'échantillon 12 et l'échantillon 77, est de 2,5 %.

- Menu 2.14. : CONT entraîne le chargement du module de classement.

- Menu 3.2.1. : On classe les références comme elles sont indiquées en marge du tableau précédent :

B CONT - CONT N1 CONT - CONT N2 CONT - CONT ...

Aux échantillons 27, 60 et 84 s'affiche la question 3.2.1. bis : réponse CONT.

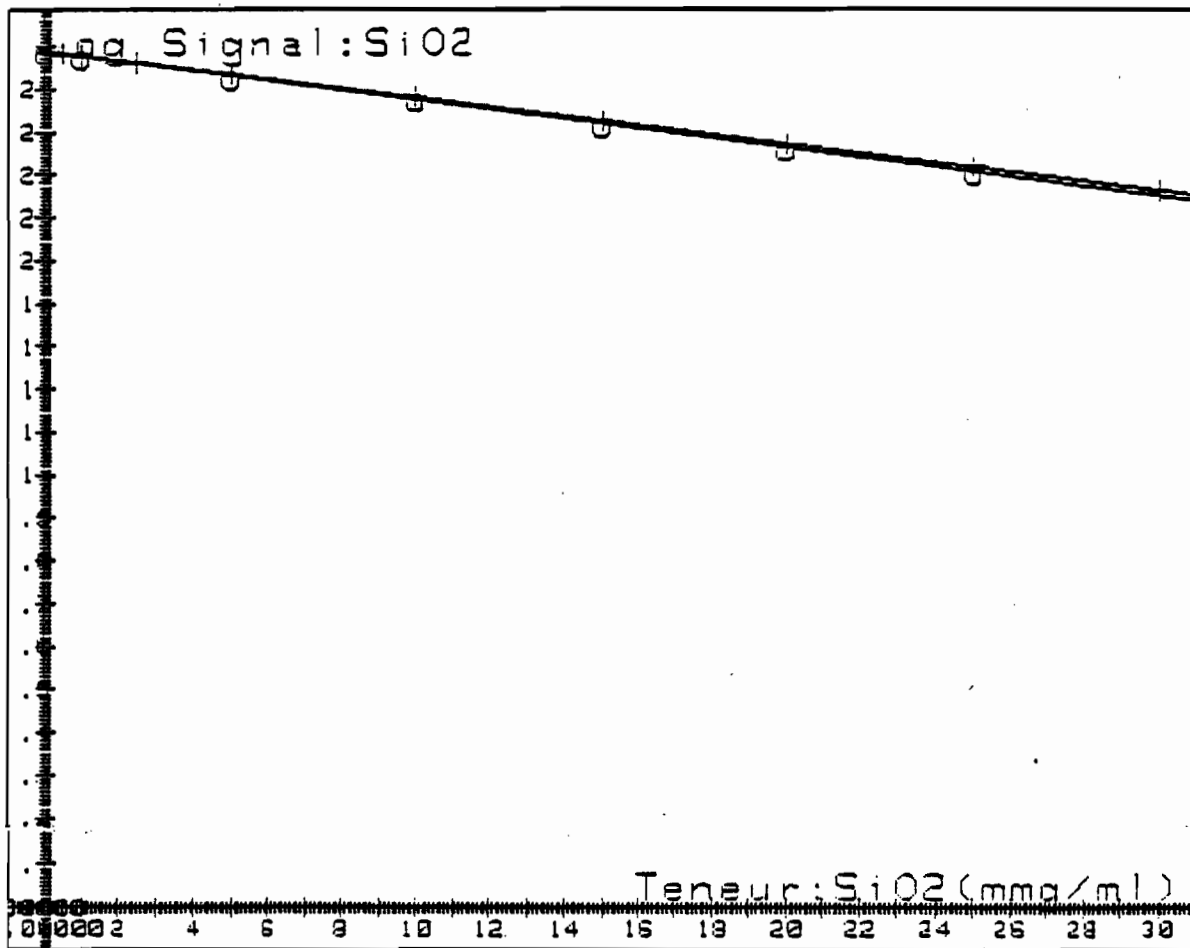
Après l'échantillon 100, s'affiche un instant le tableau d'analyses sans correction puis le menu 3.2.2.

- Menu 3.2.2. : Un facteur global a été calculé pour chaque échantillon. Aucun échantillon n'a subi d'autre dilution. On appelle 2 et on entre les facteurs dans l'ordre.

Le tableau d'analyse s'affiche alors à l'écran, puis le menu 3.2.3.

- Menu 3.2.3. : 15. On imprime le tableau (voir pages suivantes).





+ : ETALONAGE N° 1  
 o : ETALONAGE N° 2  
 \*\*\* Element dosé : SiO2 \*\*\* Fichier : S2295  
 \*\*\* Date : Janvier 1983

-----CALCUL DES TENEURS-----  
 MATRICE Coef(COURBE 1.0000 ) MATRICE Res(COURBE 2.0000 )  
 1.9888 <-----> 1.9884  
 -.8188 <-----> -.8112

-----  
 CORRECTION DE DERIVE ENTRE LES 2 DERNIERS ETALONS

Hpic 1 = 95.0 (Vrai)<--->(Rec) 95.0 ----->Teneur= .96 mg/ml
Hpic 2 = 95.5 (Vrai)<--->(Rec) 95.5 ----->Teneur= .74 mg/ml
Hpic 3 = 72.0 (Vrai)<--->(Rec) 72.0 ----->Teneur= 12.09 mg/ml
Hpic 4 = 73.0 (Vrai)<--->(Rec) 73.0 ----->Teneur= 11.54 mg/ml
Hpic 5 = 72.0 (Vrai)<--->(Rec) 72.0 ----->Teneur= 12.09 mg/ml
Hpic 6 = 73.0 (Vrai)<--->(Rec) 73.0 ----->Teneur= 11.53 mg/ml
Hpic 7 = 69.0 (Vrai)<--->(Rec) 69.0 ----->Teneur= 13.78 mg/ml
Hpic 8 = 70.0 (Vrai)<--->(Rec) 70.0 ----->Teneur= 13.20 mg/ml
Hpic 9 = 70.5 (Vrai)<--->(Rec) 70.5 ----->Teneur= 12.91 mg/ml
Hpic 10 = 71.5 (Vrai)<--->(Rec) 71.5 ----->Teneur= 12.34 mg/ml
Hpic 11 = 71.5 (Vrai)<--->(Rec) 71.5 ----->Teneur= 12.34 mg/ml
Hpic 12 = 71.2 (Vrai)<--->(Rec) 71.2 ----->Teneur= 12.50 mg/ml
Hpic 13 = 74.2 (Vrai)<--->(Rec) 74.2 ----->Teneur= 10.34 mg/ml
Hpic 14 = 74.3 (Vrai)<--->(Rec) 74.3 ----->Teneur= 10.79 mg/ml
Hpic 15 = 73.9 (Vrai)<--->(Rec) 73.9 ----->Teneur= 11.00 mg/ml
Hpic 16 = 74.2 (Vrai)<--->(Rec) 74.2 ----->Teneur= 10.93 mg/ml
Hpic 17 = 73.7 (Vrai)<--->(Rec) 73.7 ----->Teneur= 11.10 mg/ml
Hpic 18 = 74.0 (Vrai)<--->(Rec) 74.0 ----->Teneur= 10.93 mg/ml
Hpic 19 = 73.2 (Vrai)<--->(Rec) 73.2 ----->Teneur= 11.36 mg/ml
Hpic 20 = 73.5 (Vrai)<--->(Rec) 73.5 ----->Teneur= 11.19 mg/ml
Hpic 21 = 77.4 (Vrai)<--->(Rec) 77.4 ----->Teneur= 9.13 mg/ml
Hpic 22 = 77.6 (Vrai)<--->(Rec) 77.6 ----->Teneur= 9.02 mg/ml
Hpic 23 = 73.0 (Vrai)<--->(Rec) 73.0 ----->Teneur= 11.45 mg/ml
Hpic 24 = 73.2 (Vrai)<--->(Rec) 73.2 ----->Teneur= 11.34 mg/ml

N1  
N2  
N3  
N4  
N5  
N6  
N7  
N8  
N9  
N10  
N11

Hpic 25	=	72.0	(Vrai)<--->(Rec)	72.0	----->	Teneur=	11.99	mg/ml	N12
Hpic 26	=	72.3	(Vrai)<--->(Rec)	72.3	----->	Teneur=	11.82	mg/ml	
Hpic 27	=	68.2	(Vrai)<--->(Rec)	68.2	----->	Teneur=	19.11	mg/ml	
Hpic 28	=	68.3	(Vrai)<--->(Rec)	68.3	----->	Teneur=	19.04	mg/ml	
Hpic 29	=	68.5	(Vrai)<--->(Rec)	68.5	----->	Teneur=	18.90	mg/ml	
Hpic 30	=	68.0	(Vrai)<--->(Rec)	68.0	----->	Teneur=	19.22	mg/ml	
Hpic 31	=	59.8	(Vrai)<--->(Rec)	59.8	----->	Teneur=	19.34	mg/ml	
Hpic 32	=	68.1	(Vrai)<--->(Rec)	68.1	----->	Teneur=	19.14	mg/ml	
Hpic 33	=	68.2	(Vrai)<--->(Rec)	68.2	----->	Teneur=	19.07	mg/ml	
Hpic 34	=	68.1	(Vrai)<--->(Rec)	68.1	----->	Teneur=	19.12	mg/ml	
Hpic 35	=	68.3	(Vrai)<--->(Rec)	68.3	----->	Teneur=	18.98	mg/ml	
Hpic 36	=	59.5	(Vrai)<--->(Rec)	59.5	----->	Teneur=	19.51	mg/ml	
Hpic 37	=	59.7	(Vrai)<--->(Rec)	59.7	----->	Teneur=	19.37	mg/ml	
Hpic 38	=	72.5	(Vrai)<--->(Rec)	72.5	----->	Teneur=	11.66	mg/ml	N13
Hpic 39	=	72.8	(Vrai)<--->(Rec)	72.8	----->	Teneur=	11.49	mg/ml	
Hpic 40	=	72.4	(Vrai)<--->(Rec)	72.4	----->	Teneur=	11.71	mg/ml	N14
Hpic 41	=	72.6	(Vrai)<--->(Rec)	72.6	----->	Teneur=	11.59	mg/ml	
Hpic 42	=	71.8	(Vrai)<--->(Rec)	71.8	----->	Teneur=	12.03	mg/ml	N15
Hpic 43	=	72.2	(Vrai)<--->(Rec)	72.2	----->	Teneur=	11.88	mg/ml	
Hpic 44	=	72.5	(Vrai)<--->(Rec)	72.5	----->	Teneur=	11.64	mg/ml	N16
Hpic 45	=	72.9	(Vrai)<--->(Rec)	72.9	----->	Teneur=	11.41	mg/ml	
Hpic 46	=	71.0	(Vrai)<--->(Rec)	71.0	----->	Teneur=	12.45	mg/ml	N17
Hpic 47	=	71.4	(Vrai)<--->(Rec)	71.4	----->	Teneur=	12.23	mg/ml	
Hpic 48	=	71.0	(Vrai)<--->(Rec)	71.0	----->	Teneur=	12.44	mg/ml	N18
Hpic 49	=	71.6	(Vrai)<--->(Rec)	71.6	----->	Teneur=	12.11	mg/ml	
Hpic 50	=	71.4	(Vrai)<--->(Rec)	71.4	----->	Teneur=	12.21	mg/ml	N19
Hpic 51	=	71.5	(Vrai)<--->(Rec)	71.5	----->	Teneur=	12.15	mg/ml	
Hpic 52	=	73.5	(Vrai)<--->(Rec)	73.5	----->	Teneur=	11.06	mg/ml	N20
Hpic 53	=	73.7	(Vrai)<--->(Rec)	73.7	----->	Teneur=	10.95	mg/ml	
Hpic 54	=	75.7	(Vrai)<--->(Rec)	75.7	----->	Teneur=	9.89	mg/ml	N21
Hpic 55	=	76.0	(Vrai)<--->(Rec)	76.0	----->	Teneur=	9.73	mg/ml	
Hpic 56	=	71.8	(Vrai)<--->(Rec)	71.8	----->	Teneur=	11.96	mg/ml	N22
Hpic 57	=	72.0	(Vrai)<--->(Rec)	72.0	----->	Teneur=	11.85	mg/ml	
Hpic 58	=	81.0	(Vrai)<--->(Rec)	81.0	----->	Teneur=	7.22	mg/ml	N23
Hpic 59	=	81.2	(Vrai)<--->(Rec)	81.2	----->	Teneur=	7.12	mg/ml	
Hpic 60	=	59.8	(Vrai)<--->(Rec)	59.8	----->	Teneur=	19.12	mg/ml	T
Hpic 61	=	59.8	(Vrai)<--->(Rec)	59.8	----->	Teneur=	19.12	mg/ml	
Hpic 62	=	59.9	(Vrai)<--->(Rec)	59.9	----->	Teneur=	19.04	mg/ml	N24
Hpic 63	=	68.0	(Vrai)<--->(Rec)	68.0	----->	Teneur=	18.97	mg/ml	
Hpic 64	=	78.8	(Vrai)<--->(Rec)	78.8	----->	Teneur=	12.48	mg/ml	N25
Hpic 65	=	71.0	(Vrai)<--->(Rec)	71.0	----->	Teneur=	12.36	mg/ml	
Hpic 66	=	77.0	(Vrai)<--->(Rec)	77.0	----->	Teneur=	9.18	mg/ml	N26
Hpic 67	=	77.2	(Vrai)<--->(Rec)	77.2	----->	Teneur=	9.07	mg/ml	
Hpic 68	=	87.0	(Vrai)<--->(Rec)	87.0	----->	Teneur=	4.39	mg/ml	N27
Hpic 69	=	87.4	(Vrai)<--->(Rec)	87.4	----->	Teneur=	4.21	mg/ml	
Hpic 70	=	91.8	(Vrai)<--->(Rec)	91.8	----->	Teneur=	2.29	mg/ml	N28
Hpic 71	=	92.0	(Vrai)<--->(Rec)	92.0	----->	Teneur=	2.20	mg/ml	
Hpic 72	=	70.5	(Vrai)<--->(Rec)	70.5	----->	Teneur=	12.61	mg/ml	N29
Hpic 73	=	70.8	(Vrai)<--->(Rec)	70.8	----->	Teneur=	12.43	mg/ml	
Hpic 74	=	88.7	(Vrai)<--->(Rec)	88.7	----->	Teneur=	7.32	mg/ml	N30
Hpic 75	=	88.9	(Vrai)<--->(Rec)	88.9	----->	Teneur=	7.22	mg/ml	
Hpic 76	=	71.0	(Vrai)<--->(Rec)	71.0	----->	Teneur=	12.31	mg/ml	N31
Hpic 77	=	71.2	(Vrai)<--->(Rec)	71.2	----->	Teneur=	12.20	mg/ml	
Hpic 78	=	76.5	(Vrai)<--->(Rec)	76.5	----->	Teneur=	9.39	mg/ml	N32
Hpic 79	=	76.6	(Vrai)<--->(Rec)	76.6	----->	Teneur=	9.34	mg/ml	
Hpic 80	=	87.0	(Vrai)<--->(Rec)	87.0	----->	Teneur=	4.38	mg/ml	N33
Hpic 81	=	87.2	(Vrai)<--->(Rec)	87.2	----->	Teneur=	4.28	mg/ml	
Hpic 82	=	73.7	(Vrai)<--->(Rec)	73.7	----->	Teneur=	10.83	mg/ml	T
Hpic 83	=	73.9	(Vrai)<--->(Rec)	73.9	----->	Teneur=	10.72	mg/ml	
Hpic 84	=	59.6	(Vrai)<--->(Rec)	59.6	----->	Teneur=	19.08	mg/ml	N34
Hpic 85	=	59.7	(Vrai)<--->(Rec)	59.7	----->	Teneur=	19.01	mg/ml	
Hpic 86	=	59.8	(Vrai)<--->(Rec)	59.8	----->	Teneur=	19.34	mg/ml	N35
Hpic 87	=	59.6	(Vrai)<--->(Rec)	59.6	----->	Teneur=	19.06	mg/ml	
Hpic 88	=	59.7	(Vrai)<--->(Rec)	59.7	----->	Teneur=	18.99	mg/ml	N36
Hpic 89	=	68.0	(Vrai)<--->(Rec)	68.0	----->	Teneur=	18.79	mg/ml	
Hpic 90	=	68.1	(Vrai)<--->(Rec)	68.1	----->	Teneur=	18.71	mg/ml	T
Hpic 91	=	68.2	(Vrai)<--->(Rec)	68.2	----->	Teneur=	18.64	mg/ml	
Hpic 92	=	59.6	(Vrai)<--->(Rec)	59.6	----->	Teneur=	19.02	mg/ml	N37
Hpic 93	=	59.6	(Vrai)<--->(Rec)	59.6	----->	Teneur=	19.02	mg/ml	
Hpic 94	=	59.1	(Vrai)<--->(Rec)	59.1	----->	Teneur=	19.34	mg/ml	N38
Hpic 95	=	60.9	(Vrai)<--->(Rec)	60.9	----->	Teneur=	18.17	mg/ml	
Hpic 96	=	68.5	(Vrai)<--->(Rec)	68.5	----->	Teneur=	18.42	mg/ml	N39
Hpic 97	=	59.5	(Vrai)<--->(Rec)	59.5	----->	Teneur=	19.05	mg/ml	
Hpic 98	=	59.6	(Vrai)<--->(Rec)	59.6	----->	Teneur=	18.98	mg/ml	N40
Hpic 99	=	59.7	(Vrai)<--->(Rec)	59.7	----->	Teneur=	18.91	mg/ml	
Hpic 100	=	59.7	(Vrai)<--->(Rec)	59.7	----->	Teneur=	18.90	mg/ml	

```

*****
* DATE:Janvier DOSSIER:S2295 *
*
*****
* Orig.:Barszczus Operat: Technicon/A*
*
*****
* Substrat:Basaltes volcaniques *
*
*****
*Element dosé:SiO2 Unité:% *
*
*****
* REF * TENEUR *Repet*Ecart-type*
*****
* N1 * 4,35 * 2 * ,16 *
* N2 * 4,37 * 2 * ,16 *
* N3 * 4,65 * 2 * ,15 *
* N4 * 4,48 * 2 * ,15 *
* N5 * 4,43 * 2 * ,04 *
* N6 * 3,84 * 2 * ,02 *
* N7 * 3,95 * 2 * ,05 *
* N8 * 3,95 * 2 * ,05 *
* N9 * 4,08 * 2 * ,05 *
* N10 * 3,22 * 2 * ,03 *
* N11 * 4,01 * 2 * ,03 *
* N12 * 4,21 * 2 * ,05 *
* N13 * 7,16 * 2 * ,02 *
* T * 6,87 * 30 * ,10 *
* N14 * 4,09 * 2 * ,03 *
* N15 * 4,27 * 2 * ,06 *
* N16 * 3,98 * 2 * ,06 *
* N17 * 4,29 * 2 * ,06 *
* N18 * 4,32 * 2 * ,09 *
* N19 * 3,94 * 2 * ,01 *
* N20 * 3,93 * 2 * ,03 *
* N21 * 3,47 * 2 * ,04 *
* N22 * 4,31 * 2 * ,03 *
* N23 * 2,40 * 2 * ,03 *
* N24 * 4,48 * 2 * ,03 *
* N25 * 3,13 * 2 * ,03 *
* N26 * 1,33 * 2 * ,05 *
* N27 * ,55 * 2 * ,02 *
* N28 * 9,41 * 2 * ,10 *
* N29 * 2,33 * 2 * ,03 *
* N30 * 4,02 * 2 * ,03 *
* N31 * 3,28 * 2 * ,01 *
* N32 * 1,32 * 2 * ,02 *
* N33 * 3,58 * 2 * ,03 *
*****
Facteurs:Pr.essai<---->Dilut.
,3968<----> 1,0000
,3984<----> 1,0000
,3676<----> 1,0000
,3802<----> 1,0000
,3831<----> 1,0000
,3853<----> 1,0000
,3921<----> 1,0000
,3883<----> 1,0000
,3914<----> 1,0000
,3914<----> 1,0000
,3802<----> 1,0000
,3809<----> 1,0000
,3929<----> 1,0000
,3798<----> 1,0000
,3738<----> 1,0000
,3861<----> 1,0000
,3731<----> 1,0000
,3738<----> 1,0000
,3791<----> 1,0000
,3479<----> 1,0000
,3868<----> 1,0000
,3876<----> 1,0000
,3899<----> 1,0000
,3795<----> 1,0000
,3876<----> 1,0000
,3791<----> 1,0000
,3853<----> 1,0000
,3929<----> 1,0000
,8064<----> 1,0000
,3630<----> 1,0000
,3527<----> 1,0000
,3846<----> 1,0000
,3802<----> 1,0000
,3610<----> 1,0000
Blanc : .85 NbeB1= 2.00

```

- Menu 3.2.3. : -5- On recalculé l'échantillon N13
- 11- On classe selon l'ordre croissant des teneurs.

```

*****
* DATE:Janvier DOSSIER:S2295 *
*
*****
* Orig.:Barszczus Operat: Technicon/A*
*
*****
* Substrat:Basaltes volcaniques *
*
*****
*
*Element dosé:SiO2 Unité:%
*
*****
* REF * TENEUR *Repet*Ecart-type*
*****
* N27 * ,55 * 2 * ,02 * Facteurs:Pr.essai<---->Dilut.
* N32 * 1,32 * 2 * ,02 * ,3929<----> 1,0000
* N26 * 1,33 * 2 * ,05 * ,3882<----> 1,0000
* N29 * 2,33 * 2 * ,03 * ,3853<----> 1,0000
* N23 * 2,40 * 2 * ,03 * ,3630<----> 1,0000
* N25 * 3,13 * 2 * ,03 * ,3795<----> 1,0000
* N10 * 3,22 * 2 * ,03 * ,3791<----> 1,0000
* N31 * 3,28 * 2 * ,01 * ,3914<----> 1,0000
* N21 * 3,47 * 2 * ,04 * ,3846<----> 1,0000
* N33 * 3,58 * 2 * ,03 * ,3876<----> 1,0000
* N6 * 3,84 * 2 * ,02 * ,3610<----> 1,0000
* N20 * 3,93 * 2 * ,03 * ,3853<----> 1,0000
* N19 * 3,94 * 2 * ,01 * ,3868<----> 1,0000
* N7 * 3,95 * 2 * ,05 * ,3479<----> 1,0000
* N8 * 3,95 * 2 * ,05 * ,3921<----> 1,0000
* N16 * 3,98 * 2 * ,06 * ,3883<----> 1,0000
* N11 * 4,01 * 2 * ,03 * ,3731<----> 1,0000
* N30 * 4,02 * 2 * ,03 * ,3802<----> 1,0000
* N9 * 4,08 * 2 * ,05 * ,3527<----> 1,0000
* N14 * 4,09 * 2 * ,03 * ,3914<----> 1,0000
* N12 * 4,21 * 2 * ,05 * ,3788<----> 1,0000
* N13 * 4,21 * 2 * ,05 * ,3809<----> 1,0000
* N15 * 4,27 * 2 * ,06 * ,3929<----> 1,0000
* N17 * 4,29 * 2 * ,06 * ,3861<----> 1,0000
* N22 * 4,31 * 2 * ,03 * ,3738<----> 1,0000
* N18 * 4,32 * 2 * ,09 * ,3899<----> 1,0000
* N1 * 4,35 * 2 * ,16 * ,3791<----> 1,0000
* N2 * 4,37 * 2 * ,16 * ,3969<----> 1,0000
* N5 * 4,43 * 2 * ,04 * ,3984<----> 1,0000
* N4 * 4,48 * 2 * ,15 * ,3831<----> 1,0000
* N24 * 4,48 * 2 * ,03 * ,3802<----> 1,0000
* N3 * 4,65 * 2 * ,15 * ,3876<----> 1,0000
* T * 6,97 * 30 * ,10 * ,3676<----> 1,0000
* N28 * 9,41 * 2 * ,10 * ,3738<----> 1,0000
* ,0064<----> 1,0000
*****

```

Bianc : .85 Nbe31= 2.00

On peut remarquer :

- . la bonne reproductibilité des mesures : l'écart est dans la plupart des cas inférieur à celui signalé plus haut, si l'on n'avait pas utilisé la correction de dérive ;
- . le bon choix du nombre de décimales : la variation de l'écart-type intervient sur la dernière décimale. Si cela n'avait pas été le cas, on aurait utilisé la correction 3 du menu 3.2.3. ;
- . un grand nombre de répétitions pour l'échantillons T devant conduire à une bonne détermination du coefficient de variation; par contre, la teneur de cet échantillon est un peu forte et ne sera pas très représentative pour l'intervalle de variation des échantillons de teneurs les plus faibles.

Questions 3.2.4. : CONT - CONT : le programme choisit l'échantillon T pour le coefficient de variation et 2 mesures moyennes par échantillon.

- Menu 3.2.5. : CONT.

- Menus 4.1.1., 4.1.2. et 4.1.3. : Touches CONT à chaque fois.

- Menu 4.3.1. : CONT.

Question 4.3.2. : CONT.

- Menu 4.3.3. : CONT.

"Réf. N34 absente des références à stocker".

CONT : on ajoute cette référence aux références à stocker.

"Réf. T absente du fichier.

0 : on élimine cette référence des références à stocker.

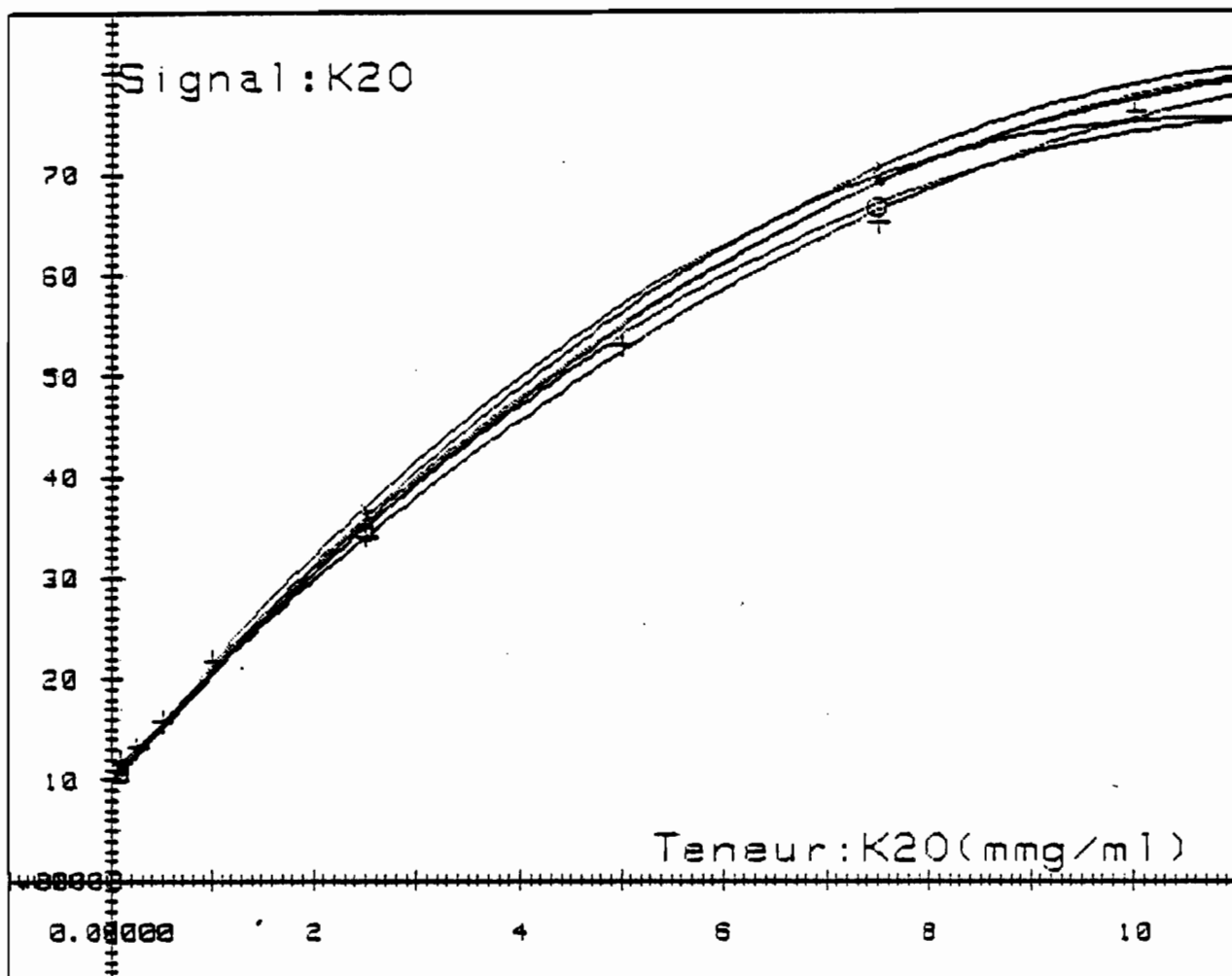
Après cette harmonisation on continue comme précédemment.

#### 4. Autres dosages.

Il est inutile de redécrire le processus de travail pour les autres dosages. Le classement pour des résultats bruts est analogue au classement précédent.

Signalons un exemple d'étalonnage de plus grande variabilité concernant le dosage du potassium par émission de flamme (voir courbe page suivante) :

- l'ajustement est, cette fois, un ajustement quelconque calé automatiquement au degré 2 ;
- vu la dérive importante, un plus grand nombre d'étalonnages a été nécessaire en répartissant les échantillons entre chaque étalonnage, avec correction de dérive à chaque fois ;
- on peut voir l'importance d'une correction tenant compte de la teneur, la dérive de la ligne de base restant faible devant celle des fortes teneurs.



+ : ETALONAGE N° 1  
 o : ETALONAGE N° 2  
 x : ETALONAGE N° 3  
 > : ETALONAGE N° 4  
 ^ : ETALONAGE N° 5  
 < : ETALONAGE N° 6

5. Lecture du fichier.

- Menu 1 : -6-

- Menu 5.1. -3-

Question 5.2. : CONT.

Question 5.3. : CONT.

Question 5.4. : CONT.

Le tableau d'analyse est imprimé en version 7 colonnes par page avec les variances.

Dossier: S2295		Date(s) : Janvier 1983					
Origine/s: Caledonie: Volcan Hunter			Methode/s: Technicon/Abs at				
Substrat: Basaltes volcaniques							
Maximums(Ech: 50 Dosages: 50 )<=====>Effectifs(Ech(Li): 35 Dosages(Col): 12)							
Dosage	H2O-	H2O+	SiO2	Al2O3	Fe2O3	MgO	K2O
Unité	%	%	%	%	%	%	%
Variat.	15 %	5 %	1.4748 %	32.086 %	8.5 %	.52729 %	1.1383 %
Nvariat	15essais	15essais	30essais	5essais	10essais	3essais	10essais
Nechant	1répèt	1répèt	2répèt	1répèt	3répèt	1répèt	1répèt
Echant.							
N1	1.45	ND	4.35	.991	16.13	10.941	1.174
N2	1.49	.72	4.37	1.124	14.20	9.171	.495
N3	1.30	.27	4.65	1.540	13.29	6.224	.531
N4	1.65	.45	4.48	1.314	13.08	7.352	.548
N5	1.41	.59	4.43	1.403	13.62	5.999	.452
N6	1.82	4.93	3.84	1.360	13.82	7.642	.302
N7	1.55	1.97	3.95	1.606	15.69	4.672	1.025
N8	1.72	2.08	3.95	1.602	15.62	4.691	1.118
N9	1.37	1.02	4.00	1.633	15.66	4.245	1.163
N10	2.36	7.50	3.22	1.568	14.70	6.463	.824
N11	1.96	2.94	4.01	1.414	13.76	7.220	.307
N12	1.02	ND	4.21	1.615	16.20	4.052	1.136
N13	1.40	1.00	4.21	1.322	13.26	2.393	1.731
N14	1.89	2.70	4.09	1.670	13.60	3.672	1.420
N15	11.06	1.86	4.27	1.623	13.16	2.621	2.041
N16	1.98	1.26	3.98	1.087	14.07	12.060	.745
N17	1.59	1.12	4.29	1.916	11.52	2.112	1.827
N18	2.11	2.51	4.32	1.669	13.57	2.543	1.963
N19	1.72	2.23	3.94	1.155	12.26	11.706	1.074
N20	1.71	.93	3.93	1.747	ND	2.346	1.794
N21	1.57	1.74	3.47	.987	14.38	9.152	.736
N22	1.52	4.80	4.31	.924	14.74	10.442	.514
N23	1.75	.93	2.40	1.283	14.35	4.935	1.225
N24	5.92	12.01	4.48	1.003	15.76	12.148	.770
N25	1.69	1.65	3.13	1.484	14.55	4.952	1.212
N26	11.28	9.17	1.33	1.312	13.49	8.562	.667
N27	1.82	26.50	.55	1.088	8.79	9.462	.307
N28	21.50	21.50	9.41	.591	5.31	9.971	1.462
N29	2.68	16.79	2.33	.896	.23	ND	5.553
N30	9.92	26.73	4.02	1.689	.55	9.105	3.754
N31	1.30	.27	3.28	1.711	13.36	5.713	.489
N32	2.36	7.50	1.32	2.018	14.26	6.609	.802
N33	1.72	2.23	3.58	1.195	14.38	10.182	1.199
N34	ND	26.50	ND	1.379	8.32	9.839	.328
N35	ND	ND	ND	1.000	14.61	7.732	.324

Suite du tableau

Dosage	CaO	Na2O	TiO2	MnO	P2O5
Unité	%	%	%	%	%
Variat.	2.5 %	3 %	4 %	5 %	3 %
Nuariat	10essais	10essais	15essais	20essais	25essais
Nechant	1répét	1répét	2répét	2répét	2répét
Echant.					
N1	19.17	1.86	2.72	ND	.33
N2	11.39	2.04	2.48	2.48	.27
N3	12.81	2.51	3.09	.16	.32
N4	12.65	2.19	2.75	.17	.27
N5	12.59	2.35	2.95	.18	.31
N6	12.56	2.00	2.89	.19	.28
N7	10.34	3.61	4.38	.23	.59
N8	9.88	3.54	4.47	.23	.54
N9	10.49	3.68	4.45	ND	.59
N10	9.88	2.95	3.98	.23	.41
N11	12.06	2.01	2.90	.21	.27
N12	11.29	3.82	4.29	.25	.52
N13	9.61	4.70	3.13	.22	.97
N14	9.77	3.15	3.82	.21	.69
N15	8.59	2.61	3.32	.14	.38
N16	10.75	1.52	2.58	.14	.45
N17	9.70	4.80	2.98	.14	1.00
N18	7.62	2.58	3.40	.15	.82
N19	11.25	1.43	3.14	.15	.56
N20	9.23	4.58	2.94	.13	.96
N21	12.31	2.02	3.18	.16	1.14
N22	12.82	1.67	3.08	.13	1.41
N23	10.99	2.32	3.45	.14	.43
N24	5.10	2.10	2.99	.21	.35
N25	9.55	2.79	4.03	.14	.54
N26	11.09	2.59	3.30	.12	.43
N27	23.86	.69	1.82	.13	.40
N28	2.09	4.81	.50	ND	.40
N29	28.86	6.88	.03	ND	.88
N30	12.21	5.77	.13	ND	.25
N31	2.29	2.29	3.03	.13	.32
N32	1.59	2.84	3.99	.16	.41
N33	12.28	1.38	3.23	.16	.52
N34	8.97	.66	1.80	.12	.39
N35	11.10	2.03	2.99	.15	.28

- CONT

- Menu 5.1. : -4-

6. Correction de fichier.

- Menu 6.1. : CONT.

- Menu 6.2. (1) : -1- puis -4- du menu 6.3. On corrige la description des méthodes d'analyse.
- 3- puis -2- du menu 6.5. On corrige la valeur de l'échantillon N1 du dosage MnO.
- 5- On supprime l'échantillon N30.
- 2- puis -3- du menu 6.4. On remplace 2 par 3 décimales pour le dosage SiO<sub>2</sub>.
- puis -4- du menu 6.4. On corrige la valeur des coefficients de variation pour SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO, K<sub>2</sub>O.



- 7- On change l'ordre des dosages  $H_2O^+$ ,  $H_2O^-$ .  
 -8- On change l'ordre des échantillons N31 à N35.

CONT.

- Menu 6.1. : -4-

- Menu 6.9. : CONT.

On imprime alors le nouveau tableau en 10 colonnes.

FICHER A LIRE: S2295

-----										
Dossier: S2295		Date(s) : Janvier 1983								
-----										
Origine/s: Caledonie: Volcan Hunter					Methode/s: Technicon/Absorption at/Emis					
-----										
Substrat: Basaltes volcaniques										
-----										
Maximums(Ech: 50 Dosages: 50 )<====>Effectifs(Ech(Li): 34 Dosages(Col): 12)										
Dosage	H2O+	H2O-	SiO2	Al2O3	Fe2O3	MgO	K2O	CaO	Na2O	TiO2
Unité	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%
Variat.	15 %	5 %	1.5 %	20 %	8.5 %	.5 %	1.2 %	2.5 %	3 %	4 %
Nvariat	15essa	15essa	30essa	5essa	10essa	5essa	10essa	10essa	10essa	15essa
Nechant	1répèt	1répèt	2répèt	1répèt	3répèt	1répèt	1répèt	1répèt	1répèt	2répèt
-----										
Echant.										
N1	ND	.45	4.351	.991	16.13	10.941	1.174	9.17	1.86	2.72
N2	1.72	.49	4.365	1.124	14.20	9.171	.495	11.39	2.04	2.48
N3	1.27	.30	4.647	1.548	13.28	6.224	.531	12.81	2.51	3.09
N4	1.45	.65	4.477	1.314	13.08	7.352	.548	12.65	2.19	2.75
N5	1.59	.41	4.432	1.403	13.62	5.999	.452	12.59	2.35	2.95
N6	14.93	.82	3.840	1.360	13.82	7.642	.302	12.56	2.00	2.89
N7	11.97	.55	3.947	1.606	15.69	4.672	1.025	10.34	3.61	4.38
N8	12.08	.72	3.947	1.602	15.62	4.691	1.118	9.88	3.54	4.47
N9	11.02	.37	4.082	1.633	15.66	4.245	1.163	10.49	3.68	4.45
N10	17.50	2.36	3.219	1.568	14.70	6.463	.824	9.88	2.95	3.98
N11	12.94	.96	4.010	1.414	13.76	7.220	.307	12.06	2.01	2.90
N12	ND	.02	4.213	1.615	16.20	4.052	1.136	11.29	3.82	4.29
N13	11.08	.48	4.214	1.822	13.26	2.393	1.731	9.61	4.70	3.13
N14	12.70	.89	4.091	1.670	13.60	3.672	1.429	9.77	3.15	3.82
N15	11.86	1.86	4.273	1.623	13.16	2.621	2.041	8.59	2.61	3.32
N16	11.26	.98	3.993	1.007	14.07	12.060	.745	10.75	1.52	2.58
N17	11.12	.59	4.295	1.916	11.52	2.112	1.827	9.70	4.80	2.98
N18	12.51	2.11	4.320	1.669	13.57	2.543	1.963	7.62	2.58	3.40
N19	12.23	.72	3.940	1.155	12.26	11.706	1.074	11.25	1.43	3.14
N20	1.93	.71	3.927	1.747	ND	2.346	1.794	9.23	4.58	2.94
N21	11.74	.57	3.473	.987	14.88	9.152	.736	12.31	2.02	3.18
N22	14.80	.52	4.310	.924	14.74	10.442	.514	12.82	1.67	3.08
N23	1.93	.75	2.397	1.283	14.35	4.935	1.225	10.99	2.32	3.45
N24	12.01	5.92	4.484	1.003	15.76	12.148	.770	5.10	2.10	2.99
N25	11.65	.69	3.129	1.484	14.55	4.952	1.212	9.55	2.79	4.03
N26	9.17	1.28	1.330	1.312	13.49	8.562	.667	11.09	2.59	3.30
N27	126.50	.82	.549	1.088	8.78	9.462	.307	23.86	.69	1.82
N28	121.50	21.50	9.410	.591	5.31	9.971	1.462	2.09	4.81	.50
N29	16.79	2.68	2.330	.896	.23	ND	5.553	28.86	6.88	.03
N35	ND	ND	ND	1.000	14.61	7.732	.324	11.10	2.03	2.99
N34	126.50	ND	ND	1.379	8.32	9.839	.323	8.97	.66	1.80
N33	12.23	.72	3.583	1.195	14.38	10.182	1.199	12.28	1.38	3.23
N32	17.50	2.36	1.323	2.018	14.26	6.609	.802	1.59	2.84	3.99
N31	1.27	.30	3.275	1.711	13.36	5.713	.489	2.29	2.29	3.03

Suite du tableau

! Dosage	! MnO	! P2O5
! Unité	! %	! %
! Variat.	! 5 %	! 3 %
! Nvariat	! 20essa	! 25essa
! Nechant	! 2répèt	! 2répèt
! Echant.!		
! N1	! .19	! .33
! N2	! .15	! .27
! N3	! .16	! .32
! N4	! .17	! .27
! N5	! .18	! .31
! N6	! .19	! .28
! N7	! .23	! .59
! N8	! .23	! .54
! N9	! ND	! .59
! N10	! .23	! .41
! N11	! .21	! .27
! N12	! .25	! .52
! N13	! .22	! .97
! N14	! .21	! .69
! N15	! .14	! .80
! N16	! .14	! .45
! N17	! .14	! 1.00
! N18	! .15	! .82
! N19	! .15	! .56
! N20	! .13	! .96
! N21	! .16	! 1.14
! N22	! .13	! 1.41
! N23	! .14	! .43
! N24	! .21	! .35
! N25	! .14	! .54
! N26	! .12	! .43
! N27	! .13	! .48
! N28	! ND	! .48
! N29	! ND	! .88
! N35	! .15	! .28
! N34	! .12	! .39
! N33	! .16	! .52
! N32	! .16	! .41
! N31	! .13	! .32

On réimprime une dernière fois le tableau sans les paramètres de l'intervalle de variation (question 5.4.).

## FICHER A LIRE: S2295

Dossier: S2295      Date(s) : Janvier 1983							
Origine/s: Caledonie: Volcan Hunter				Methode/s: Technicon/Absorption at/Emis			
Substrat: Basaltes volcaniques							
Maximums(Ech: 50 Dosages: 50 )<=====>Effectifs(Ech(Li): 34 Dosages(Col): 12)							
Dosage	H2O+	H2O-	SiO2	Al2O3	Fe2O3	MgO	K2O
Unité	%	%	%	%	%	%	%
Echant.!							
N1	ND	.45	4.351	.991	16.13	10.941	1.174
N2	1.72	.49	4.365	1.124	14.20	9.171	.495
N3	1.27	.30	4.647	1.548	13.28	6.224	.531
N4	1.45	.65	4.477	1.314	13.08	7.352	.548
N5	1.59	.41	4.432	1.483	13.62	5.999	.452
N6	4.93	.82	3.848	1.368	13.82	7.642	.302
N7	11.97	.55	3.947	1.686	15.69	4.672	1.025
N8	12.08	.72	3.947	1.682	15.62	4.691	1.118
N9	1.02	.37	4.082	1.633	15.66	4.245	1.163
N10	7.50	2.36	3.219	1.568	14.70	6.463	.824
N11	2.94	.96	4.018	1.414	13.76	7.228	.307
N12	ND	.02	4.213	1.615	16.20	4.052	1.136
N13	1.08	.48	4.214	1.822	13.26	2.393	1.731
N14	2.70	.89	4.091	1.670	13.68	3.672	1.428
N15	1.86	1.86	4.273	1.623	13.16	2.621	2.041
N16	1.26	.98	3.983	1.087	14.07	12.068	.745
N17	1.12	.59	4.295	1.916	11.52	2.112	1.827
N18	2.51	2.11	4.328	1.669	13.57	2.543	1.963
N19	2.23	.72	3.948	1.155	12.26	11.706	1.074
N20	.93	.71	3.927	1.747	ND	2.346	1.794
N21	1.74	.57	3.473	.987	14.88	9.152	.736
N22	4.88	.52	4.318	.924	14.74	10.442	.514
N23	1.93	.75	2.397	1.283	14.35	4.935	1.225
N24	12.01	5.92	4.484	1.883	15.76	12.148	.770
N25	1.65	.69	3.129	1.484	14.55	4.952	1.212
N26	9.17	1.28	1.338	1.312	13.49	8.562	.667
N27	26.50	.82	.549	1.088	8.78	9.462	.307
N28	21.50	21.50	9.418	.591	5.31	9.971	1.462
N29	16.79	2.68	2.338	.896	.23	ND	5.553
N35	ND	ND	ND	1.088	14.61	7.732	.324
N34	26.50	ND	ND	1.379	8.32	9.839	.328
N33	2.23	.72	3.583	1.195	14.38	10.182	1.199
N32	7.50	2.36	1.323	2.018	14.26	6.609	.802
N31	1.27	.38	3.275	1.711	13.36	5.713	.489

Suite du tableau

Dosage	CaO	Na2O	TiO2	MnO	P2O5
Unité	%	%	%	%	%
Echant.!					
N1	9.17	1.86	2.72	.19	.33
N2	11.39	2.04	2.48	.15	.27
N3	12.81	2.51	3.09	.16	.32
N4	12.65	2.19	2.75	.17	.27
N5	12.59	2.35	2.95	.18	.31
N6	12.56	2.00	2.89	.19	.28
N7	18.34	3.61	4.38	.23	.59
N8	9.88	3.54	4.47	.23	.54

! N9	!10.49	3.68	4.45	ND	.59
! N10	!9.08	2.95	3.98	.23	.41
! N11	!12.06	2.01	2.90	.21	.27
! N12	!11.29	3.82	4.29	.25	.52
! N13	!9.61	4.70	3.13	.22	.97
! N14	!9.77	3.15	3.82	.21	.69
! N15	!8.59	2.61	3.32	.14	.80
! N16	!10.75	1.52	2.58	.14	.45
! N17	!9.70	4.80	2.98	.14	1.00
! N18	!7.62	2.58	3.40	.15	.82
! N19	!11.25	1.43	3.14	.15	.56
! N20	!9.23	4.58	2.94	.13	.96
! N21	!12.31	2.02	3.18	.16	1.14
! N22	!12.82	1.67	3.08	.13	1.41
! N23	!10.99	2.32	3.45	.14	.43
! N24	!5.10	2.10	2.99	.21	.35
! N25	!9.55	2.79	4.03	.14	.54
! N26	!11.09	2.59	3.30	.12	.43
! N27	!23.86	.69	1.82	.13	.40
! N28	!2.09	4.81	.50	ND	.40
! N29	!28.86	6.88	.03	ND	.08
! N35	!11.10	2.03	2.99	.15	.28
! N34	!8.97	.66	1.80	.12	.39
! N33	!12.28	1.38	3.23	.16	.52
! N32	!1.59	2.84	3.99	.16	.41
! N31	!2.29	2.29	3.03	.13	.32

- (1) Le menu 6.2. a été complété par trois questions et se présente comme suit :

Voulez-vous:

- 1-Corriger l'en-tete du fichier
- 2-Corriger des identifiants de dosage
- 3-Corriger des valeurs d'échantillons
- 4-Rajouter un échantillon
- 5-Supprimer un échantillon
- 6-Supprimer un dosage
- 7-Changer l'ordre des dosages
- 8-Changer l'ordre des échantillons
- CONT-Fin de corrections

-Remarque: Pour rajouter un dosage, utilisez les autres programmes  
Taper -1 pour une valeur de dosage inexistante