

LA GESTION DES DONNEES DES LABORATOIRES D'ANALYSES PHYSICO-CHIMIQUES. EXEMPLE D'APPLICATION : MIDAS

Marc Pansu
(Chimie)
(Laboratoire "Matières organiques")

Centre ORSTOM de Bondy
70/74 route d'Aulnay
93140 Bondy (France)

RESUME - L'information correspondant aux analyses physico-chimiques est très diverse (Figure 1). Elle commence à la définition d'une expérience ou la collecte de renseignements qualitatifs correspondant à un dossier analytique, se poursuit par le choix de mesures associées à des protocoles analytiques avec éventuellement des mises au point méthodologiques. La partie laboratoire comprend la préparation d'échantillons préalablement à des mesures où des données brutes sont collectées à la sortie des appareillages. Il faut alors réduire ces données en résultats définitifs qualitatifs ou quantitatifs et contrôler ces résultats.

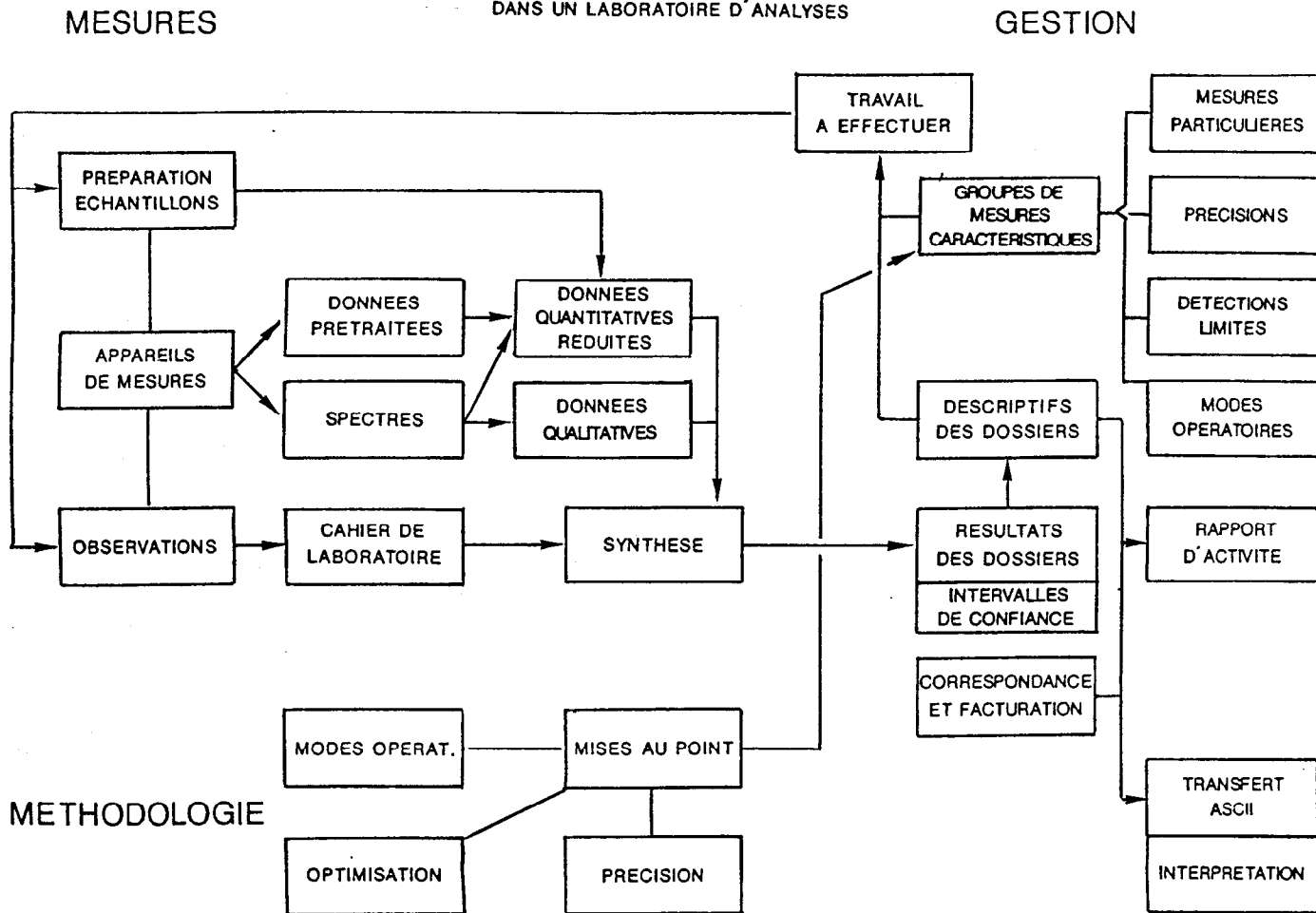
Le logiciel MIDAS (Mixage de l'Information concernant les Données Analytiques et Spectrographiques) tente de répondre à l'ensemble des problèmes de saisie et de gestion de cette information physico-chimique, tant dans la définition du travail que dans sa mise au point, sa réalisation et son contrôle.

INTRODUCTION

La diversité de l'information analytique engendre une panoplie des besoins informatiques d'un laboratoire d'analyses assez étendue : gestion du laboratoire, traitement de signaux, gestion des résultats analytiques, traitement des données, chimiométrie, textes, etc. Le chimiste moderne devient donc un grand "*consommateur*" de logiciels tels que traitements de textes, gestionnaires de bases de données, tableurs, calculs statistiques, programmes spécialisés de chimiométrie.

Il n'existe pourtant pas dans les produits de grande diffusion, de logiciel prenant vraiment en compte tant la spécificité de la mesure physico-chimique que celle du travail de laboratoire. Cette constatation nous a conduit à la définition du logiciel MIDAS, base

Figure 1 : LA CIRCULATION DES DONNEES
DANS UN LABORATOIRE D'ANALYSES



de données pour les informations physico-chimiques (Figure 1) sur laquelle peuvent se greffer en amont des applications concernant les plans d'expériences, le traitement du signal, les calculs d'étalonnages et en aval, des programmes statistiques et d'aide à l'interprétation.

1. DESCRIPTION GENERALE DU LOGICIEL MIDAS (Fichier d'aide 1)

MIDAS = Mixage de l'Information concernant les Données Analytiques et Spectrographiques :

- les échantillons sont regroupés en dossiers correspondant à un même type d'étude. Chaque dossier peut contenir un seul ou un nombre non limité d'échantillons. Les descripteurs du dossier ainsi qu'un texte associé peuvent être saisis dès la décision d'un projet d'études, lorsqu'on ne connaît encore ni les échantillons qui seront analysés, ni les dosages qui seront choisis. Chaque dossier est rangé dans une (ou plusieurs) bibliothèque(s) propre au laboratoire. Chaque bibliothèque MIDAS est automatiquement répertoriée dans une "directory" ;

- Les autres informations concernant le dossier sont alors saisies au fur et à mesure de leur connaissance : Descriptifs des échantillons, variables à mesurer, état des mesures, préparation des échantillons, saisie des résultats et observations dans un cahier de laboratoire ;

- Les descripteurs des variables sont optimisés à des variables physico-chimiques : identifiant, descriptions analytiques, unité, limite de détection, précision, valeurs permettant le calcul des intervalles de variation, prix.

Une originalité de MIDAS consiste en sa personnalisation pour chaque laboratoire : le programme MIDINST permet de ranger les variables déterminables par ce laboratoire par groupes (de une à un nombre non limité de variables) dans une (ou plusieurs) bibliothèque(s) d'installation. On pourra ainsi installer des groupes comme : éléments majeurs des roches, oligo-éléments des plantes, bases échangeables sols, soufre dans sédiments, humus bondy classique, polysaccharides des sols, etc. La saisie des analyses à effectuer sur un dossier est alors très rapide puisqu'elle consiste en un simple transfert de tous les descripteurs des variables choisies dans un ou plusieurs groupes d'installation. Des textes "modes opératoires" peuvent être associés à chaque groupe et consultés à tout moment.

Avec chaque analyse sont automatiquement associés deux fichiers de nombres réels : un fichier mesures et un fichier laboratoire. Chaque fichier mesures se dimensionne automatiquement à

la taille du fichier échantillon. Chaque mesure peut avoir trois états : "demandé", "non demandé" ou résultat réel. Chaque fichier laboratoire de taille non limitée permettra la saisie et l'archivage de données en sorties des appareils (spectres, chromatogrammes, hauteurs de pics, etc.).

Les procédures de lecture du dossier permettent à chaque opérateur d'avoir un état complet du travail à effectuer.

Peut alors commencer le travail lui-même de laboratoire. Le logiciel permet ici encore un découpage du travail tel qu'il est effectué en séparant la préparation des échantillons et les analyses :

- la préparation des échantillons permet la saisie des pesées (interface RS232 unidirectionnelle METTLER) et des dilutions ou concentrations associées à chaque échantillon, ces chiffres étant alors transformables en facteurs multiplicatifs ;

- la partie travail de laboratoire permet alors à l'opérateur de saisir soit des mesures définitives, soit d'apporter une correction interactive par les facteurs à ses mesures lors de leur saisie au clavier. Elle doit permettre avec des développements spécifique à chaque appareil (interfacage, traitement du signal, calculs d'étalonnages, etc) de réduire les données collectées dans chaque fichier laboratoire en données définitives dans les fichiers mesures correspondants (ou dans le texte cahier de laboratoire s'il s'agit de résultats qualitatifs).

Une procédure de conversion des fichiers mesures en ASCII permet l'utilisation en aval de logiciels statistiques tels que STATGRAPHICS, de tableurs et traitements de textes.

Une procédure d'exploration d'une bibliothèque permettra au responsable d'avoir à la demande l'état d'avancement d'un dossier, de l'analyse d'un échantillon, d'une analyse particulière dans les dossiers d'un client, etc.

Le logiciel correspond à une redéfinition du logiciel SPCLAS (M. Pansu, ORSTOM, 1983) écrite en Basic HP. Il est écrit en Turbo PASCAL sur système MS-DOS compatible IBM PC/AT. Son utilisation est possible en réseau (rejet si présence d'un autre utilisateur) ou individuellement avec disque dur ou double lecteur de disquettes.

Il comporte six types de fichiers pour le stockage des données : fichier directory, fichier bibliothèque, fichier échantillons, fichier variables, fichiers mesures, fichiers laboratoires, fichiers textes. La déclaration de types au début de programmes Turbo-PASCAL permet aisément de changer la longueur d'un champ ou d'ajouter un champ à un fichier pour gérer des informations supplémentaires.

Les fichiers textes servent à trois usages :

- aide ponctuelle à l'utilisation du logiciel et à des développements (noms et structure des fichiers de données fournis) ;
- aide à l'analyse chimique par consultation de modes opératoires analytiques associés aux groupes de la bibliothèque d'installation ;
- textes associés à chaque dossier : cahier de laboratoire et correspondance.

Le logiciel facilite la réalisation des principaux calculs de laboratoire (choix des calculs par fenêtres d'écran) associés aux contrôles des données et mises au point méthodologiques.

Les programmes comportent un fichier de commande .com inséré dans un fichier .bat ainsi que cinq fichiers compilés .chn. A l'exécution, le chargement d'un fichier .chn est instantané et les données communes restent en mémoire d'un programme à l'autre.

Les choix de travail, de transferts de variables, etc sont réalisés par menus en version couleur si disponible. Les seules touches actives du clavier sont alors les flèches pour la sélection et les touches de fonction indiquées. Les données devant être entrées au clavier sont associées à des gestions de curseur plein écran et des procédures de correction/effacement.

2. GESTION DES INTITULES DE BIBLIOTHEQUE (fichier d'aide 2)

Cette partie permet de ranger les dossiers analytiques dans une (ou plusieurs) bibliothèques correspondant au laboratoire.

Il faut donc au préalable créer sa bibliothèque de travail (1) en lui donnant un nom de 8 caractères maximum.

Cette bibliothèque est alors immédiatement répertoriée dans un fichier nommé DIRECTOR.BIB de structure :

```
fichierdirectory = record
                    classement      : integer ;
                    ficbibliotheque : ch8 ;
```

end ;

A chaque nom de bibliothèque (ficbibliotheque) est affecté un numéro entier de classement.

Lors du fonctionnement ultérieur du logiciel, le numéro de classement sera automatiquement transformé en caractère alphanumérique avec la procédure :

```
existantbib(ficbibliotheque:ch8, numerobib:char, exist:boolean)
du fichier : existbib.pas.
```

Le nombre de bibliothèques est limité à 36. Au-delà, il faut changer de répertoire. Pour une utilisation rationnelle du logiciel, il n'est conseillé de créer une nouvelle bibliothèque, que lorsqu'on aura rempli de dossiers la précédente.

Pour effacer une bibliothèque, utiliser la procédure 'Opérations sur fichiers' du menu principal.

A chaque bibliothèque, correspond un fichier : `ficbibliotheque.lab`, de structure :

```
fichierbiblio = record
    nomdossier      : ch8 ;
    numdossier      : char ;
    datarrivee      : ch8 ;
    datefin         : ch8 ;
    originegeo      : ch50 ;
    interlocut      : ch30 ;
    methodes        : ch50 ;
    operateurs      : ch20 ;
    substrat        : ch200 ;
    fichvar         : ch12 ;
    fichech         : ch12 ;
```

end ;

Dans ce fichier, on va ranger les renseignements correspondant à chaque dossier, lors d'un projet d'études sans qu'il soit alors nécessaire de connaître les références des échantillons ni les analyses exactes à effectuer.

On peut en outre avec l'éditeur Turbo ou un traitement de textes type Wordstar, (Option N ou Wconvt B : conversion des fichiers en ASCII) saisir un texte qui sera toujours associé au dossier, dans un fichier :

```
nomdossier.bi numerobib
```

Par défaut, la date de début (`datarrivee`) sera automatiquement celle de l'ordinateur (mettre à jour la date du MS-DOS).

Pour effacer un dossier : on peut utiliser la dernière option de ce premier menu si aucune référence d'échantillons n'a été saisie. Sinon, utiliser l'option 'Opérations sur fichiers de données' du menu principal. Avec la même option, il est possible de copier un dossier dans une autre bibliothèque.

A chaque dossier est affecté automatiquement un caractère alphanumérique (`numdossier`) qui servira, avec `numerobib`, à désigner les fichiers ultérieurs qui lui correspondent (échantillons, variables, mesures, laboratoire) en évitant les confusions.

Une bibliothèque peut contenir au maximum 50 dossiers.

3. UN DOSSIER DE LABORATOIRE EST CONSTITUE PAR (fichier aide 3)

1) *Un plan d'expériences (1)*: optimisation de méthodes, étude de causes d'erreurs, etc. ;

2) *Un ensemble (ou un seul) d'échantillons* sur lesquels devront être réalisés différentes mesures.

Dans ce cas, saisissez dans l'ordre :

- les références et caractéristiques des échantillons (2) ;
- les mesures à effectuer sur chaque échantillon (3).

L'option (4) permet une première visualisation du travail à effectuer sur le dossier.

L'ensemble des informations (travail à effectuer, caractéristiques des échantillons, des variables, texte, modes opératoires, etc) est accessible avec l'option "Lecture sur dossiers" du menu principal. Elles constituent les premiers renseignements du cahier de laboratoire et permettent à l'utilisateur de commencer le travail analytique.

Au cours du travail, il modifiera les informations numériques et alphanumériques correspondant au dossier : préparation échantillons, saisie résultats, observations sur les échantillons, sur les variables, observations générales, etc..

Les observations générales seront notées sur le fichier :
nomdos.bi numerobib

Les observations concernant les échantillons et variables seront corrigées ou ajoutées avec le présent menu. Les informations correspondant à la préparation des échantillons et mesures seront saisies avec l'option "Travail de laboratoire" du menu principal.

Le logiciel peut donc remplacer complètement le cahier de laboratoire ainsi que le dossier correspondant aux protocoles analytiques.

3) *Gestionnaire des échantillons (fichier d'aide 3-2)*

Un fichier échantillon est relié à un dossier d'une bibliothèque par son nom soit :

nomdossier .E numerobib numerodos

Sa structure est la suivante :

```
fichierechantillon = record
                                echantillon : ch10 ;
                                facteur1    : real ;
                                facteur2    : real ;
                                descript     : ch80 ;
                                cord1       : real ;
                                cord2       : real ;
                                cord3       : real ;
end ;
```

Les touches de fonction indiquées vous permettent :

<F2> *saisie* : ajoute en fin de fichier une référence de 10 car.
maxi à echantillon

met facteur1 et facteur2 à 1
met un blanc dans descript
initialise cord1 cord2 et cord3 à -32767

<F3> *correction* : permet de modifier la référence echantillon
à la position du curseur

<F4> *effacement* : efface l'enregistrement du curseur de
fichierechantillon et efface toutes les mesures correspondantes s'il y
en a

<F5> *insertion* : non installée

<F6> *description* : saisie ou correction du texte descript de 80
caractères associé à l'échantillon du curseur.

Curseur : seules les flèches haut et bas sont actives ainsi que
les deux flèches habituelles de changement de page.

4) *Gestion des variables. (fichier d'aide 3-3)*

Un fichier variable est associé à un dossier d'une bibliothèque
par son nom :

nomdossier .V numerobib numerodos

Sa structure est la suivante :

```
fichiervariables = record
    composant           : ch6 ;
    mesures             : ch12 ;
    descripteurunite    : ch6 ;
    descripteurprecision : integer ;
    limitedetection     : real ;
    coefvariation       : real ;
    nbrepetition        : integer ;
    nbressaimoyen       : integer ;
    descript1           : ch80 ;
    descript2           : ch200 ;
    descript3           : integer ;
    descript4           : real ;
    descript5           : real ;
    exp                 : array[1..6] of real ;
end ;
```

- descripteurprecision = nombre de décimales pour l'affichage des résultats ;
 - coefvariation = 100 écart-type/moyenne ;
 - nbrepetition = degrés de libertés de la mesure du coefficient de variation ;
 - nbressaimoyen = nombre répétitions mesures d'une variable ;
 - descript1 = nom de la variable ;
 - descript2 = principe de la mesure ;
 - descript4 = prix de l'analyse.

Il ne peut y avoir dans un même dossier deux variables portant le même nom (composant).

Les variables peuvent être saisies :

- directement (2^o option) : touche <ENTER> pour le positionnement. Pour qu'une saisie soit effective, il suffit d'avoir donné une valeur au nom de variable (composant). Cette option sert également à la correction en introduisant le nom de variable à corriger comme premier descripteur. Pour corriger ce nom, effacer la variable (3^o option) et recommencer. Les valeurs par défaut des champs numériques sont -32767, celles des alphanumériques, un blanc ;

- depuis une bibliothèque d'installation : cette procédure est de loin la plus rapide et la plus fiable. Il faut avoir au préalable utilisé MIDINST pour saisir tous les descripteurs des analyses du laboratoire rangées dans des groupes. Le même programme permet à tout moment de modifier ces descripteurs analytiques. L'option 'Variables installées' permet de transférer dans le dossier la variable choisie par le curseur avec tous ses descripteurs.

A chaque variable est associé un fichier mesures :
composant .M numerobib numerodos
soit un fichier de nombres réels dimensionné à la taille du
fichier échantillon.

Chaque mesure peut avoir trois états :

D = demandée = -32767

N = non demandée = -32766.

nombre réel = chiffre de mesure.

Par défaut, à la saisie des variables, toutes les mesures sont à
D. L'option 'Etat des mesures' permet de sélectionner avec le cur-
seur les mesures de même état et d'indiquer cet état avec N ou D
pour chaque échantillon sur un éditeur plein écran.

A chaque variable est également associé un fichier à utiliser
pour le travail de laboratoire :

composant .L numerobib numerodos

soit un fichier de réels de longueur non limitée.

4. TRAVAIL DE LABORATOIRE (Fichier d'aide 4)

Permet de distinguer la préparation des échantillons : pesées
et dilutions (Option 1), de la saisie des mesures :

- corrigées : sur éditeur plein écran pour chaque
variable (2) ;

- avec correction par les facteurs résultant de la prépa-
ration des échantillons (3)

- les deux autres options sont à développer spécifique-
ment avec chaque appareil de mesures.

Les mesures (spectres, chromatogrammes, résultats calculés,
etc.) seront saisies de manière séquentielle dans chacun des fichiers
correspondant à chaque variable, nommés :

Nomvar .L numerobib numerodos

Des programmes devront alors être employés pour réduire les
données dans les fichiers :

Nomvar .M numerobib numerodos

contenant les résultats définitifs quantitatifs et/ou dans le
fichier nomvar.BI numerobib pour les observations qualitatives.

Préparation des échantillons. (fichier d'aide 4-1)

- saisies pesées et dilutions d'échantillons. Opérations
arithmétiques simples sur ces facteurs pour les transformer en
facteurs de correction des mesures. Par défaut les facteurs sont
unitaires ;

- saisie manuelle : Editeur analogue à saisies manuelles
mesures ;

- interfacages : Avec Balance METTLER AE sortie de donnée RS232 ref 011. Même éditeur que précédemment, avec déplacement à l'échantillon choisi par <ENTER>. Presser la barre <ESPACE> ou une autre touche pour mise en attente de pesée. La balance n'envoie alors la pesée que lorsqu'elle est stable. Après cet envoi, le curseur passe à l'échantillon suivant.

Si l'ordinateur n'est pas connecté, la touche <ESPACE> ne bloque le logiciel que pendant 10 secondes (sur Goupil G40).

- Interfaces avec autres balances ou diluteur : Modifier la procédure Balance.pas selon le format de sortie des données.

5. LECTURE INFORMATION D'UN DOSSIER (Fichier d'aide 5)

1) Lecture d'un dossier :

En tête = information de la bibliothèque.

Variables = 6 colonnes par écran avec indication du nombre total d'écrans et du numéro d'écran actuel.

Echantillons = 17 lignes par page avec gestion des pages analogue à celle des écrans.

<ENTER> = Ecrans suivants puis pages suivantes.

Affichage des données :

- D = mesure en attente.

- Blanc = mesure non demandée.

- Valeurs numériques : avec nombre de décimales correspondant à descripteurprecision de fichiervariables.

Avec indication LD si valeur inférieure à limitedetection de fichiervariables.

2) Descriptifs échantillons : Lecture par page des descripteurs (descript de fichierechantillon)

3) Signification des variables : Lecture par page des noms (descript1 de fichiervariables)

4) Descriptifs : Lecture par pages des principes des méthodes de mesure des variables (descript2 de fichiervariables)

5) Relation bibliothèque d'installation et modes opératoires : trouve le groupe d'installation éventuel de chaque variable du dossier. Permet de lire :

- les descriptifs des groupes d'installation : nom, date mise au point, principe, etc. ;

- les modes opératoires associés à ces groupes accompagnés du nom du fichier pour leur saisie/correction.

6) *Intervalles de confiance des mesures d'un dossier* : indication de l'intervalle entourant les valeurs numériques listées en 1) selon le niveau de probabilité $\alpha/2$ choisi et rappelé dans l'en-tête. Avec les informations de fichiervariables (si elles ont été saisies), le logiciel calcule :

- valeur de t de Student pour la probabilité indiquée et (nbrerepetition -1) degrés de liberté ;

- pour chaque valeur mesurée :

$$s = \text{coeffvariation} \times \text{mesure} / 100$$

$$\text{Int} = s \times t / \sqrt{\text{nbressaimoyen}}$$

7) *Facturation d'un dossier* : pour chaque variable, si descript4 de fichiervariables a été saisi :

- affichage par page de la variable et des prix correspondant au nombre total de mesures demandées et au nombre de mesures effectuées ;

- affichage en fin de page du coût total du dossier et du coût des analyses effectuées.

8) *Texte associé au dossier* : lecture par page du texte en mode fichier ASCII correspondant aux remarques du cahier de laboratoire et aux correspondances. Même en l'absence de texte, le logiciel donne Le nom du fichier à utiliser pour sa saisie.

6. CALCULS DE LABORATOIRE (fichier d'aide 6)

Une calculatrice vectorielle sur les variables chimiques

L'opérateur construit sa formule de calcul au moyen de deux fenêtres d'écran : celle de gauche visualise la liste des symboles des variables du dossier, celle de droite la liste des calculs disponibles. Les flèches permettent le déplacement alternativement dans l'une ou l'autre des fenêtres. Elles autorisent les choix sur un nombre non limité de variables par défilement continu dans une fenêtre de quinze symboles.

Le choix de la variable ou du calcul à la position du curseur en inverse vidéo est réalisé par pression de la touche de fonction <F6>, la sortie par la touche <F10>.

Le menu principal permet le choix des options:

- transformation de variables ;
- opération entre variables ;
- calculs sur une variable ;
- calculs entre variables.

Transformation de variables :

Autorise les calculs suivants sur toutes les mesures saisies de variables:

- ajout : ajoute une constante ;
- soustraction : soustrait une constante ;
- multiplie : multiplie par une constante ;
- divise : divise par une constante non nulle ;
- log : calcule les logarithmes népériens pour les valeurs positives ;
- exp : calcule les exponentielles ;
- carre : élève au carré ;
- racine : donne la racine carrée des valeurs positives ou nulles ;
- inverse : donne l'inverse des valeurs non nulles ;
- puissance : élève à la puissance indiquée.

Lorsqu'une mesure est à l'état "demandé" ou "non demandé" (blanc), le résultat du calcul est "non demandé" (blanc).

La formule de calcul s'inscrit en bas de l'écran à mesure des choix. Par exemple:

| choix + | Formule |
|---------------------|-------------------------|
| variable TEMP | TEMP |
| calcul : ajout | TEMP+ |
| nbre à ajouter ?273 | TEMP+273 |
| calcul : multiplie | (TEMP+273)* |
| multiplicateur ?40 | (TEMP+273)*240 |
| calcul : inverse | 1/((TEMP+273)*240) |
| calcul : exp | EXP(1/((TEMP+273)*240)) |

A chaque calcul, sont mis à jour les paramètres chimiques de la variable choisie : soit y le vecteur transformé par f du vecteur x ($y = f(x)$). Les lois de propagation des erreurs donnent :

$$\sigma_y = \left| \sigma_x \frac{dy}{dx} \right|, \text{ avec}$$

y = écart type de la moyenne y
x = écart type de la moyenne x

Le coefficient de variation CVx devient

$$CV_y = \text{ABS}(x \text{ CV}_x \frac{dy}{dx}).$$

Des calculs analogues mettent à jour limite de détection et précision.

Les résultats du calcul correspondant à la formule du bas de l'écran sont affichés après la sortie par <F10> sur une nouvelle fenêtre d'écran à défilement continu en comparaison avec les valeurs initiales de la variable.

Après une nouvelle pression sur <F10>, le programme demande le symbole éventuel de la variable transformée pour le stockage dans le dossier des résultats associés aux nouveaux paramètres chimiques. La formule correspondante devient le nom de la variable transformée.

En l'absence de symbole (touche <ENTER> ou <F10>), la variable transformée n'est pas mémorisée. En aucun cas la variable source n'est détruite : pour cela on se reporte à la procédure normale d'effacement de variable.

Pour une correction éventuelle des descripteurs, on se reporte également à la procédure de correction d'une variable.

Attention : des changements ultérieurs de la variable source ne mettent pas à jour les calculs. Effacer la variable résultat et recommencer, la procédure est très rapide.

Opérations entre variables :

Ces opérations élémentaires sont les plus courantes au laboratoire. En particulier pour :

- les bilans analytiques ou sommes des résultats de plusieurs variables à comparer avec une constante ou une autre variable ;
- l'étude des rapports de deux variables (carbone/azote, silice/alumine, etc.) ;
- les comparaisons de méthodes par paires : étude de la distribution des différences de deux variables ;
- les moyennes de plusieurs méthodes.

La calculatrice vectorielle fonctionne avec un système à deux fenêtres d'écran analogue à ci-dessus : choix d'une variable, puis de l'opération d'une autre variable, etc.. La formule s'inscrit de même en bas de l'écran.

Les calculs suivants sont disponibles :

- somme : ajoute les résultats d'une nouvelle variable aux résultats courants. Le résultat est blanc si celui d'un des deux opérandes n'est pas une mesure (état "D" ou "ND") ;
- différence : idem, en retranchant les résultats de la nouvelle variable ;
- produit : idem, en multipliant par les résultats de la nouvelle variable ;
- rapport : idem, en divisant par les résultats de la nouvelle variable ;
- somme def : idem à somme, mais le résultat est la mesure existante si l'un des deux chiffres n'est pas une mesure ;
- moyenne def : idem, avec les moyennes des seules mesures effectuées.

La mise à jour des paramètres chimiques est réalisée selon les lois de propagation des erreurs aléatoires:

sommes, différences : $\sigma_y = \sqrt{(\sum \sigma_{xi}^2)}$, où σ_y est l'écart type de la moyenne y et σ_{xi} sont les écarts types des moyennes x_i ;
produits, rapports : $CV_y = \sqrt{(\sum CV_{xi}^2)}$, où CV_y est le coefficient de variation y et CV_{xi} sont les coefficients de variation des x_i .

La procédure d'affichage des résultats sur fenêtre d'écran et de sauvegarde est analogue à précédemment.

Calculs et tests sur une variable :

Procédure de fonctionnement par fenêtre d'écran analogue à précédemment. Ici les calculs ne portent plus sur chacun des résultats des variables mais concernent des paramètres de leur distribution :

effectif : nombre de mesures effectuées sur une variable,
somme : somme des mesures effectuées sur une variable,
moyenne : moyenne des mesures effectuées sur une variable,
médiane : médiane des mesures effectuées sur une variable,
Ectype : écart-type des mesures effectuées sur une variable,
Max : mesure maximum de la population,
Min : mesure minimum de la population,
Outlier : test de DIXON de recherche des valeurs aberrantes,

F/erreur : compare la variance de la distribution à la variance provenant du dosage $s^2 = (\bar{x} * CV/100)^2$. Une valeur de F non significative indique que les variations observées ne sont pas interprétables ;

Xbar=0 ? : test l'hypothèse nulle de nullité de la moyenne : test $t = \bar{x} / n/s$. Très utile pour les comparaisons par paires de séries de résultats (faire la différence des deux variables et appliquer ce test sur la variable résultat) ou la comparaison d'une série de résultats à une valeur étalon (faire la différence entre la série et la constante , puis test sur la variable résultat).

Calculs entre variables :

Ces calculs seront développés en liaison avec la partie "plans d'expériences" de gestion des dossiers : étude de causes d'erreurs et analyses de variances, optimisation numérique, régressions multiples. Ce logiciel ne vise pas à remplacer les logiciels statistiques mais doit faciliter la réalisation des principaux calculs et tests fréquemment nécessaires au laboratoire.

7. EXPLORATION D'UNE BIBLIOTHEQUE (fichier d'aide7)

Cette procédure n'est pas encore installée. Elle le sera en prenant au mieux en compte les besoins des utilisateurs : état d'une analyse dans la bibliothèque, d'un échantillon, des dossiers d'un demandeur, etc.. Son installation est d'ailleurs très facile connaissant la structure des fichiers fournie dans les autres menus d'aide.

8. OPERATION SUR FICHIERS DE DONNEES (Fichier d'aide 8)

1) Répertoire d'un disque : fournit les fichiers en version formatée quatre colonnes selon le critère de sélection.

- *.LAB => toutes les bibliothèques de travail.
- *.INS => toutes les bibliothèques d'installation.
- *.BI* => tous les fichiers textes chimiques
- *.E* => tous les fichiers échantillons.
- *.V* => tous les fichiers variables.
- *.M* => tous les fichiers mesures.
- *.L* => tous les fichiers laboratoires.
- *.COM
- *.CHN
- *.BAT => fichiers programmes
- *.HLP => fichiers d'aide à l'utilisation du logiciel.

2,3) N'utiliser que les procédures d'effacement de ce menu. Des procédures d'effacement concernant la bibliothèque d'installation sont prévues dans MIDINST. Ne pas effacer de fichiers sous MS-DOS. Sécurité : le logiciel empêche d'effacer une bibliothèque contenant des dossiers. Il faut effacer au préalable tous les dossiers (opt.3).

4,5) Ces procédures d'effacement d'une variable et d'un échantillon sont également intégrées dans 'GESTION DES INTITULES DE DOSSIER'.

6) La copie d'un dossier dans une autre bibliothèque est très utile lorsque celui-ci doit être analysé par plusieurs laboratoires ou plusieurs modules d'un laboratoire dans un même lieu. On évite ainsi les répétitions de saisie de l'en-tête et des échantillons.

7) Conversion ASCII des fichiers mesures et des références d'échantillons. Caractères séparateurs LF. Les fichiers sont récupérables par STATGRAPHICS, WORDSTAR, MULTIPLAN, etc.. Cette procédure doit être complétée avec des options pour la conversion plus rapide de toutes les mesures d'un dossier, des identifiants de variables, etc.. Nous devons aussi ajouter l'importation de fichiers ASCII sous MIDAS dans le but d'établir une compatibilité totale de ce logiciel avec des tableurs performants pour la sélection de données et avec les logiciels réseaux de gestion relationnelle de bases de données (10base, dBASE III).