

Application d'un progiciel de chimiométrie à l'étude de l'incidence du Bore et du Manganèse sur la fertilisation du blé (*Triticum aestivum* L.)

M. PANSU * et F. ABO **

* ORSTOM, 70-74, route d'Aulnay, 93140 Bondy
** Faculté d'agronomie, Université d'Alep (Syrie)

SUMMARY

A chemiometrics software application to study of B and Mn effects on wheat (*Triticum aestivum* L.) fertilization.

This paper fits into the actual trends of evolution in analytical chemistry towards chemometrics. It links closely plant nutrition, analytical chemistry, data acquisition and processing data system since the design of an experiment to its analysis.

The range of the measured contents and the variabilities being observed required to optimize the protocol, which could be made by using on a rational basis, the SPCLAS software especially written for laboratories in physico-chemistry.

The results obtained were systematically checked by statistical tests and they represent a reliable data base in mineral nutrition of wheat (*Triticum aestivum* L.) for Boron and Manganese.

Their interpretation which is given in other respects has allowed to display the reproductibility of results of additions on different crop profiles; it has also allowed to specify their influence on the fertility associated with a strong interaction of the two trace elements as interactions with the absorption of the other nutritive elements in the different parts of a plant.

It would be continued towards the research of a true model of B and Mn fixation in the soil-plant cycle.

The working method described can be applied to any study of the influence of two controlled factors on a great number of analytical measurements.

Key-words : Software. Chemiometrics. Trace elements. Boron. Manganese. Fertilization. Mineral nutrition. Wheat.

INTRODUCTION

Le développement des techniques d'analyses physico-chimiques, en association avec une saisie informatique favorisant l'optimisation de la préci-

Manuscrit reçu le 3 mai 1985; manuscrit modifié reçu le 26 juillet 1985; accepté le 27 juillet 1985.

RÉSUMÉ

Le travail présenté ici s'inscrit dans la démarche actuelle de développement de la chimie analytique vers la chimiométrie : il associe étroitement nutrition des plantes, chimie analytique, saisie et traitement des données, depuis le début d'une expérimentation jusqu'à son interprétation.

Le domaine des teneurs mesurées et les variabilités à observer nécessitaient une optimisation du protocole d'expérience qui a pu être réalisée par l'emploi rationnel du progiciel SPCLAS conçu spécifiquement pour les laboratoires d'analyses physico-chimiques.

Les résultats obtenus ont été contrôlés par des tests statistiques systématiques et constituent une base de données fiable dans le domaine de la nutrition oligo-minérale du blé (*Triticum aestivum* L.) en Bore et en Manganèse. Leur interprétation, décrite par ailleurs, a permis de mettre en évidence la reproductibilité de l'effet des apports sur différents profils culturaux, de préciser leur influence sur la fertilité en liaison avec une forte interaction des deux oligo-éléments, de mettre en évidence des interactions avec les autres éléments nutritifs dans les divers organes de la plante. Elle devrait se poursuivre vers la recherche d'une véritable modélisation du cycle sol-plante des deux oligo-éléments.

Le processus de travail décrit peut être étendu à toute étude de l'influence de deux facteurs contrôlés sur un grand nombre de déterminations analytiques.

Mots-clés : Progiciel. Chimiométrie. Oligo-éléments. Bore. Manganèse. Fertilisation. Nutrition minérale. Blé.

sion, une gestion des résultats bien adaptée aux calculs scientifiques, permettent de préciser des phénomènes se rapportant à des variations de faible amplitude, notamment dans le domaine des éléments traces [1,2].

Ainsi, en ce qui concerne la nutrition des plantes, si la disproportion qui existait il y a une vingtaine d'années entre les connaissances sur les oligo-éléments et les éléments majeurs tend aujourd'hui à

s'estomper, plusieurs questions se posent encore sur le comportement des oligo-éléments dans la plante en relation avec le milieu de culture en ce qui concerne leur absorption, leur répartition, leurs fonctions biologiques [3-5].

Le travail décrit ici se situe dans le cadre plus général de l'étude de l'influence du Bore et du Manganèse sur la nutrition, le développement et la production du blé (*Triticum aestivum L.*) cultivé sur sols de régions tempérées et arides [3,4].

Il comporte un nombre important de mesures physico-chimiques du fait du dosage de 9 éléments dans les différents organes de la plante, pour des essais en pots comportant différents ajouts de B et Mn sur différents sols.

L'optimisation de la précision, le classement des résultats, l'interprétation des mesures, tant pour les tests de validité que pour la quantification des observations et les études d'interaction, nécessitaient l'utilisation d'un outil informatique bien adapté. Nous avons choisi le progiciel SPCLAS [6] qui a permis un suivi du travail depuis la saisie des signaux des appareils de mesure jusqu'aux interprétations.

I. — UN PROGICIEL OPTIMISÉ POUR NOTRE APPLICATION

I.1. Caractéristiques

Matériel : microordinateur HP 9845B, 54 Koctets de mémoire vive équipé d'un clavier, un écran graphique, une imprimante interne, un lecteur de cartouches et un lecteur de disquettes.

Progiciel : SPCLAS, conversationnel, modulaire, langage Basic HP, transportable sur autres systèmes HP (HP 9000 séries 200 et 500), traduction nécessaire du langage Basic pour autres microordinateurs. Les figures 2 à 7 de ce texte sont générées par des modules du progiciel.

I.2. Adaptation aux contraintes de dosage des éléments traces

Les analyses des éléments à l'état de traces introduisent des problèmes spécifiques en ce qui concerne leur saisie informatisée :

Les étalonnages et le calcul des teneurs doit prendre en compte les contraintes liées à l'optimisation de la précision [7,8] ainsi que la dérive des appareils de mesure, souvent non négligeable aux faibles teneurs [6,9].

L'opérateur doit disposer d'un logiciel de classement des résultats tenant compte notamment des pollutions éventuelles en cours de manipulation, de variations dans les prises d'essai et les dilutions pour situer ses mesures en fonction des étalonnages, de

contraintes de précision imposant un nombre variable de répétitions, de la nécessité de déduction fréquente des teneurs des matrices de dosage.

La conception modulaire de SPCLAS (fig. 1) permet de rendre indépendants le calcul des résultats bruts et le calcul des résultats définitifs suivi des classements en fichiers.

Ce progiciel peut donc être utilisé en aval d'appareils de mesures délivrant des données brutes calculées par un programme interne ou bien d'appareils délivrant des signaux électriques dans lesquels les résultats sont calculés d'après des courbes d'étalonnage [8].

Dans ce dernier cas, nous disposons du choix de divers modèles d'ajustement et de la possibilité de réaliser des étalonnages successifs avec correction de dérive pour chaque échantillon en fonction de sa position entre deux étalonnages et de sa teneur (fig. 2).

Les données brutes sont ensuite transférées vers les modules de classement où elles sont affectées aux références d'échantillons. Ces modules permettent de s'affranchir des contraintes citées plus haut. Le ou les échantillons affectés à une référence peuvent se situer à n'importe quel endroit de la série de mesures. Les moyennes et écarts-types sont calculés et les corrections de facteurs d'échantillonnage et facteurs de dilution sont effectués pour chaque référence, les blancs étant déduits entre ces deux facteurs. Les facteurs comme les références et les données courantes restent en mémoire d'un dosage à l'autre.

Après chaque dosage, les données définitives obtenues sont stockées en fichiers. Les procédures de saisie nous ont permis de randomiser nos séries de mesures, afin de rendre aléatoire l'influence d'éventuels facteurs non contrôlés [7].

I.3. Une structure de fichiers, une gestion et des calculs scientifiques adaptés aux dossiers d'analyses et à la chimométrie

Si la structure des fichiers est proche de la plupart des fichiers utilisés pour l'analyse des données et les traitements statistiques [10-12], elle est ici optimisée pour les études physico-chimiques. Pour l'utilisateur, un fichier se présente toujours sous la forme d'un classique tableau d'analyses (fig. 4). Une en-tête le décrit. Les colonnes représentent les différentes analyses et les lignes, les échantillons. Chaque analyse est lue avec le nombre de décimales correspondant à sa précision, les résultats se situant à la limite de détection sont notés LD, les résultats non déterminés ND. Les paramètres permettant d'estimer l'intervalle de confiance des mesures selon les techniques statistiques classiques des laboratoires [7,13,14] sont stockés pour chaque analyse. Cette optimisation n'empêche évidemment pas la saisie de variables autres que physico-chimiques, par exemple, dans notre travail, les doses de B et Mn

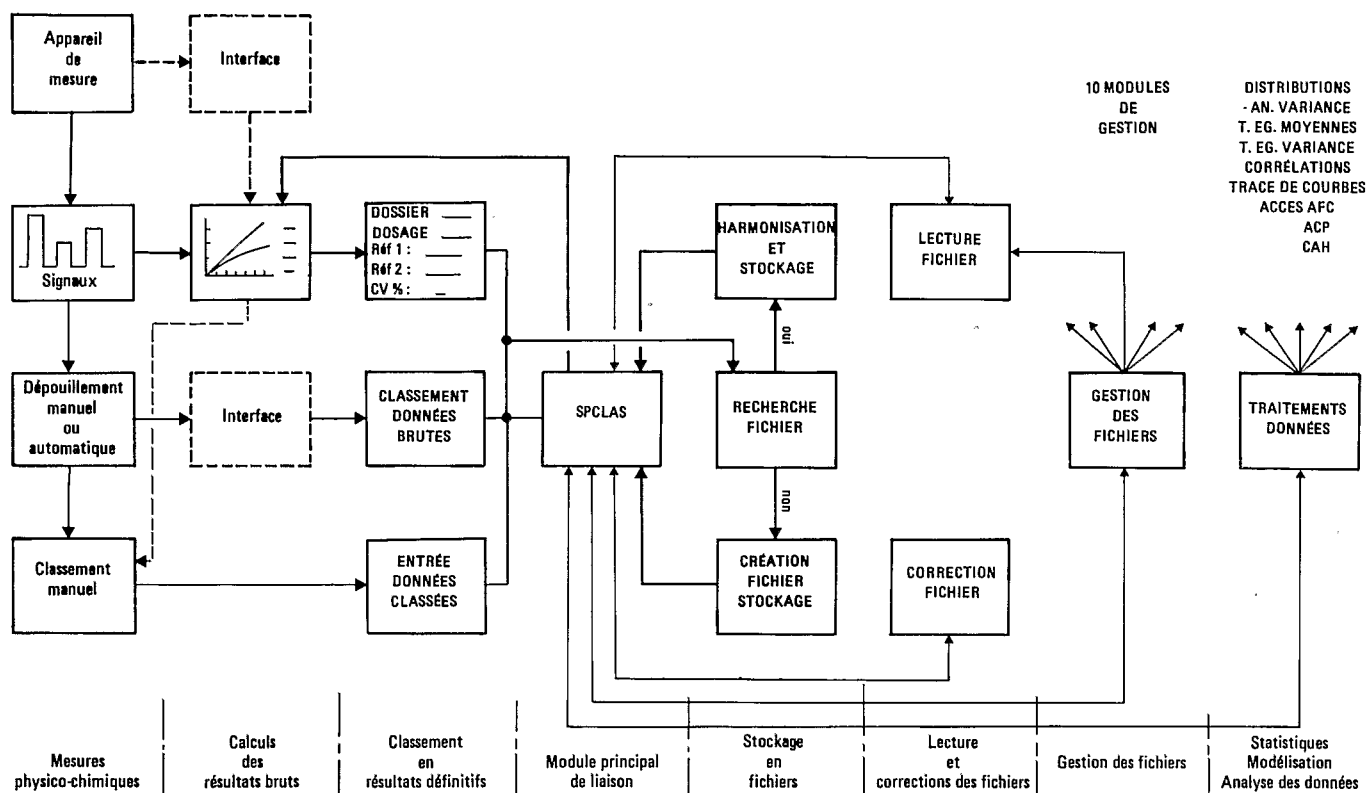


FIG. 1. — Tableau synoptique du fonctionnement du progiciel en liaison avec les mesures physico-chimiques.

FIG. 1. — Block diagram of the software operating in connection with the physico-chemical measurements.

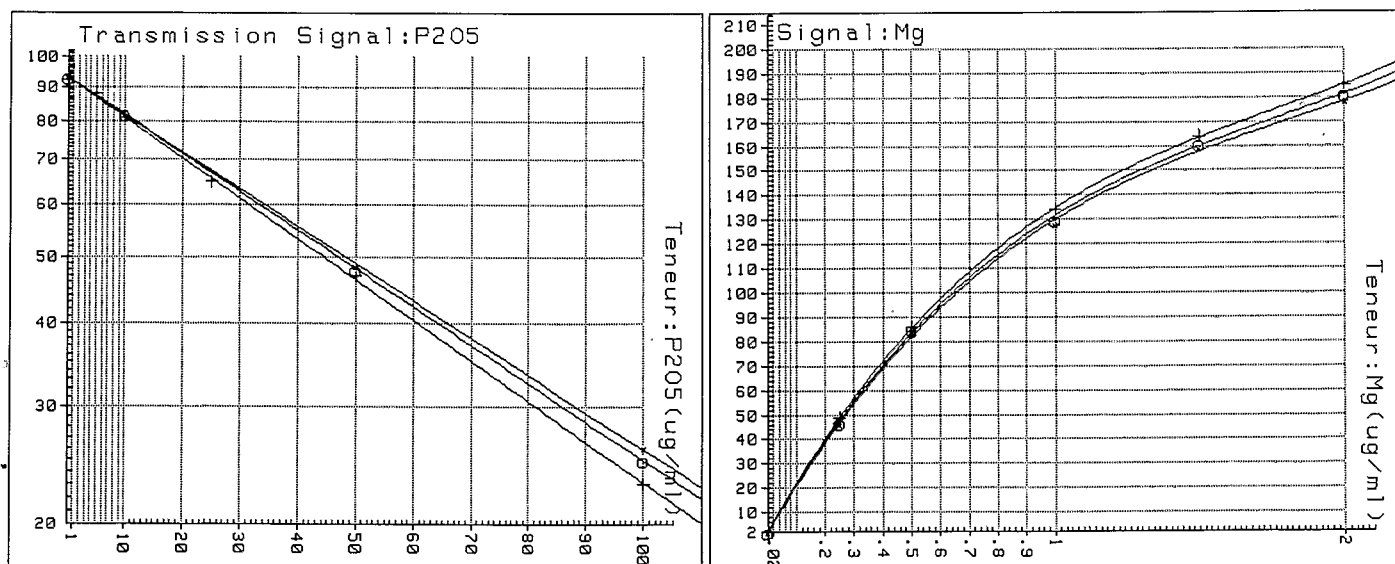


FIG. 2. — Etalonnages successifs :

- Loi de Lambert-Beer mesures des transmissions.
- Régression polynomiale avec choix automatique du degré lors du premier étalonnage.

FIG. 2. — Successive calibrations :

- Lambert-Beer law, measurements of transmissions.
- Polynomial regression with automatic selection of the degree of adjustment in the first calibration.

apportées à chaque plante et les poids de matière sèche de chaque organe.

Par rapport à d'autres logiciels de gestion scientifique [10-12], la gestion des fichiers SPCLAS est apparue particulièrement bien adaptée au travail de laboratoire et à notre étude. En effet, les modules de gestion conservent toujours aux fichiers la structure optimisée ci-dessus et définissent une application de l'ensemble des tableaux d'analyses sur lui-même : chaque module appliqué à un ou plusieurs tableaux génère un ou plusieurs nouveaux tableaux de même structure.

Les performances sont en outre accrues par rapport à d'autres logiciels moins spécialisés du même type [10]. Les possibilités de réorganisation d'un tableau sont plus performantes. Les contrôles d'échantillons lors des sélections de variables de plusieurs fichiers ne sont pas bloquants, les échantillons inexistant dans un fichier sont rajoutés en fin de liste, les mesures étant notées ND pour les variables provenant de ce fichier. Il en est de même pour les contrôles de variables lors des sélections d'échantillons.

Ces caractéristiques nous ont permis d'organiser efficacement nos séries de mesures en nous préoccupant uniquement des contraintes de précision à la saisie et de visualiser clairement ensuite les effets de nos facteurs contrôlés selon les observations à effectuer (fig. 4).

La conservation de la structure des fichiers permet un mode constant de prélèvement des données par les modules de calcul et l'adaptation rapide de nouveaux programmes. Les modules de calcul actuels SPCLAS comprennent un ensemble statistique appliqué aux mesures physico-chimiques ainsi que des ajustements et tracés de divers types de courbes [7,8,15]. En outre, un module de gestion permet de transformer un fichier SPCLAS en un autre fichier donnant accès à des analyses multivariées : analyse en composantes principales, analyse factorielle des correspondances, classification ascendante hiérarchique. Lors des calculs, une mesure notée ND et éventuellement LD entraîne, si nécessaire, la non prise en compte de l'échantillon correspondant.

II. — CHOIX DU DISPOSITIF ET DU PROCESSUS EXPÉRIMENTAL

II.1. — Dispositifs de cultures

Les cultures sont réalisées en serres dans des pots de plastique contenant différents types de sols avec deux pieds de blé par pot. Les conditions de culture (sols, éclairage, arrosage, nutrition, traitements, etc.) ont été rigoureusement décrites [3].

La première expérience est réalisée sur deux sols prélevés en France : un sol brun lessivé sur limon et un sol de rendzine sur calcaire. A chaque pot est ajouté une solution nutritive [16] et des doses combi-

nées de B et Mn selon un plan factoriel de type 4*4. Les doses choisies ont été déduites d'une première expérimentation [4] et sont calculées en mg/kg de sol :

Mn :	1	6	11	16
B :	0,5	3	5,5	8

Les expériences comportent, en plus, un traitement sans aucun apport et un traitement avec apport de tous les éléments nutritifs sauf B et Mn. Il y a donc 18 traitements au total.

Pour des raisons de validité des tests statistiques, nous avons effectué 4 répétitions par traitement. Pour la même raison, afin de rendre aléatoire l'effet de certains facteurs non contrôlés comme l'énergie incidente, nous avons procédé tous les deux jours à une rotation d'un quart de tour des pots et tous les huit jours, à la permutation aléatoire des 72 pots par sol, soit 144 pots.

Une deuxième expérience a servi à confirmer et affiner les résultats de la première. Un troisième sol a été ajouté. Il provenait de la basse vallée de l'Euphrate où se posent des problèmes de fertilisation oligo-minérale. Le plan d'expérience était cette fois un plan pyramidal avec sélection des doses les plus intéressantes [7].

Différents prélèvements, des observations biologiques et agronomiques ont été effectués au cours de la croissance. Nous ne nous intéressons ici qu'aux mesures réalisées sur les plantes adultes.

II.2. Choix des mesures

Afin d'étudier le comportement des éléments nutritifs dans la plante, nous avons séparé les divers organes : limbes, racines, graines, gaines, tiges, ainsi que les nœuds pour le sol rendzine de la première expérience.

Dans chacun de ces organes, il s'agissait d'étudier les influences des apports sur la fertilité, sur l'absorption du bore et du manganèse, sur l'absorption des autres éléments nutritifs, des interactions pouvant se manifester et se traduire par d'éventuels effets antagoniques ou synergiques [17,18].

La faible amplitude des phénomènes à observer nécessitait l'observation de toute précaution pouvant minimiser l'erreur résiduelle, tant en ce qui concerne les protocoles de dosage que le processus de leur exécution et leur saisie informatisée.

II.3. Préparation des échantillons

Les échantillons végétaux sont lavés après prélèvement pour éliminer au maximum les traces de poussière à leur surface [19], mais de façon à éviter l'entraînement des éléments présents à l'intérieur des organes [20]. Ils sont ensuite séchés 48 h à 70 °C dans une étuve hors poussière. Les poids de matières sèches sont alors déterminés, puis un broyage est effectué préalablement à une calcination selon un

protocole permettant de minimiser une éventuelle volatilisation du bore [4,21].

Les mises en solution sont réalisées à l'acide nitrique (Merck, Suprapur) selon les techniques préconisées [22]. Les attaques, évaporations à sec, filtrations et réextractions du résidu sont réalisées sous hotte à flux laminaire d'air filtré.

Les milieux finaux sont à 2 % d'acide nitrique. Les aliquotes destinées aux dosages de B sont conservées à part en tube plastique.

II.4. Éléments dosés

Les méthodes de dosages sont inspirées de celles mises au point par ailleurs [22,23], sauf en ce qui concerne le bore par émission de plasma.

Les éléments majeurs dosés sont :

K par émission de flamme

Mg et Ca par absorption atomique de flamme

P par absorptiométrie automatique

Les oligo-éléments dosés sont :

Mn et Cu par absorption atomique électrothermique

Zn par absorption atomique de flamme

Fe par absorptiométrie automatique

B par absorptiométrie automatique et par émission de plasma

II.5. Processus de la réalisation des dosages et de leur saisie informatisée

Nous avons organisé nos dosages pour un sol en séries d'un élément par organe de la plante. De cette façon, nous avons pu confectionner des solutions étalons adaptées aux teneurs moyennes de ces organes et mesurer nos échantillons vers le milieu des courbes d'étalonnage SPCLAS, minimisant ainsi l'erreur de précision [7].

Cette procédure correspond à une optimisation logique de la saisie dans les fichiers : les paramètres concernant la description des colonnes (intervalle de variation, unité, nombre de décimales) sont bien définis selon les valeurs moyennes de chaque organe, chaque échantillon représente un pot de culture parfaitement décrit sur une ligne (teneurs mesurées, doses apportées, poids de matière sèche de chaque organe).

III. — TRAITEMENT DES DONNÉES

Les fichiers sources établis selon la procédure ci-dessus sont toujours conservés sur les unités de stockage. Certains traitements de données sont effectués directement sur ces fichiers, d'autres sur des fichiers générés par la gestion.

III.1. Fichiers moyennes et vérification des données

L'application du module « fichiers moyennes » sur les fichiers sources fournit rapidement une première idée concernant la validité de nos mesures. Il calcule, pour chaque variable de chaque traitement, la moyenne des quatre répétitions, l'écart-type et le coefficient de variation. Il est possible de repérer certaines valeurs anormales qui sont vérifiées et corrigées au moyen du module de corrections. Les fichiers moyennes recalculés avec les nouvelles données sont automatiquement stockés pour des études ultérieures.

III.2. Corrélations, régressions

Le tableau triangulaire des coefficients de corrélations entre les variables, soit d'un fichier source, soit d'un fichier moyennes, permet d'effectuer un premier tri des variables qui semblent indépendantes et des variables liées dont nous devons préciser la liaison.

Un premier tracé de courbes, en version une courbe par graphique et six graphiques par page, est appliqué aux fichiers sources. Il fournit un complément d'informations concernant l'allure des liaisons et permet de vérifier les points expérimentaux éloignés des distributions des nuages de points.

III.3. Etude de l'influence des doses apportées sur la production de matière sèche et l'assimilabilité minérale de chaque organe

Cette étude nécessite des tests de significativité de l'influence de chacun des apports B et Mn, ainsi que de l'influence globale de ces deux facteurs en interaction par rapport à la variance résiduelle. Des analyses de variances devaient donc être réalisées sur chaque colonne de nos fichiers sources en se rapportant au plan d'expérience initial.

Lorsqu'une influence significative est détectée, l'analyse de régression permet d'en préciser l'allure.

Les conditions de validité de l'analyse de variance nécessitent que soient testées au préalable la normalité des distributions et l'égalité des variances.

Tests de normalité

Ces tests sont effectués en parallèle sur un petit fichier indépendant des fichiers sources ci-dessus. Un module calcule pour chaque colonne du fichier les paramètres de la distribution, en trace l'histogramme comparé à celui d'une loi normale, effectue le test de Chi² et trace la droite de Henry (fig. 3).

Extraction de sous-fichiers

Ce module de gestion extrait en série, depuis chaque colonne du fichier source, des fichiers se rapportant au plan d'expérience initial. L'influence respective de facteurs contrôlés B et Mn peut être traduite au choix selon les lignes ou les colonnes des sous-fichiers. L'impression en série des sous-fichiers

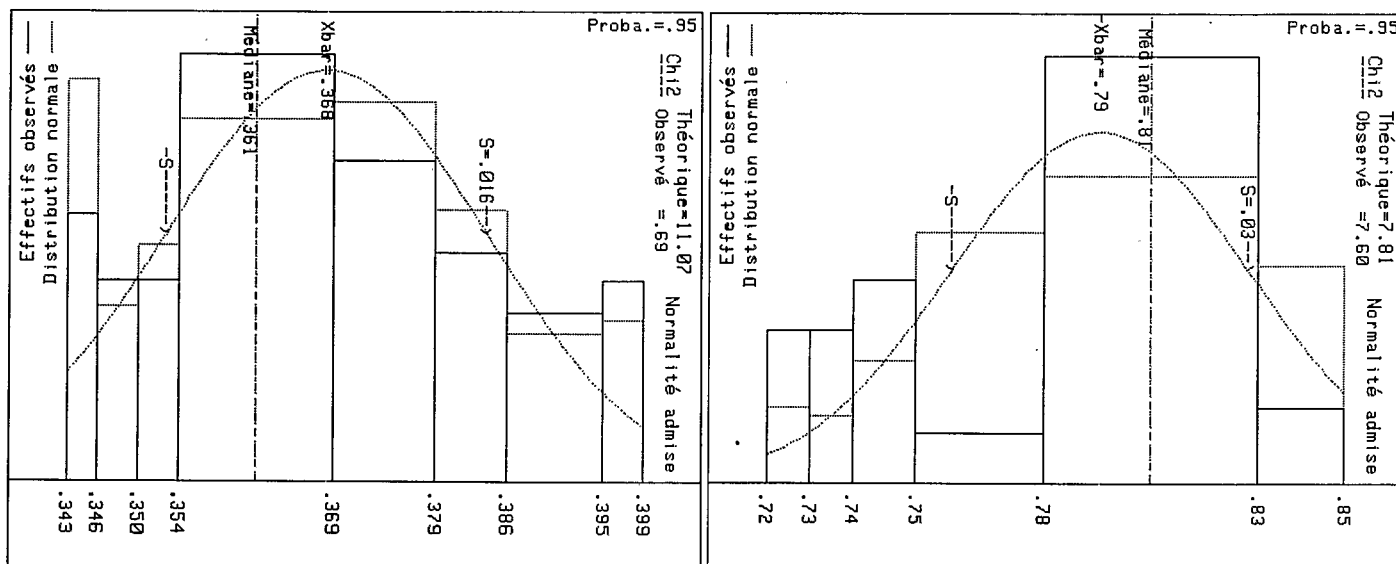


FIG. 3. — Histogrammes de distributions et tests de normalité :

- 1 : Dosage de Mn par absorption atomique électrothermique.
- 2 : Dosage de B par émission de plasma.

FIG. 3. — Distribution histograms and normality tests :

- 1 : Mn titration by electrothermic atomic absorption.
- 2 : B titration by plasma emission.

FICHER A LIRE:r/Gr

Dossier:r/Gr		Date(s) : 1/4/84				
Origine:s:These etat		Methode:s:Rbo Fouad				
Substrat:FOUAD1-->r/Gr						
Maximums(Ech: 21 Dosages: 6)<=====>Effectifs(Ech(Li): 21 Dosage						
Dosage	B(a,0	B(a,5	B(a,3	B(a,5,5	B(a,8	Mn(a,p)
Unité	gr/M.S	gr/M.S	gr/M.S	gr/M.S	gr/M.S	PPM
Echant.!						
0-1	12.4128	ND	ND	ND	ND	L.D.
0-2	13.6247	ND	ND	ND	ND	L.D.
0-3	13.8124	ND	ND	ND	ND	L.D.
0-4	13.7422	ND	ND	ND	ND	L.D.
0-5	13.6846	ND	ND	ND	ND	L.D.
1-1	IND	3.2017	3.2927	2.3852	1.2426	1.00
1-2	IND	3.3007	3.2554	2.2806	1.3257	1.00
1-3	IND	3.3178	3.2853	2.3787	1.3628	1.00
1-4	IND	3.2474	3.3461	2.3431	1.2771	1.00
6-1	IND	3.4047	3.3124	2.4306	2.0476	6.00
6-2	IND	3.5969	3.4481	2.4407	2.0802	6.00
6-3	IND	3.4014	3.2625	2.3654	1.8127	6.00
6-4	IND	3.4678	3.3859	2.4013	1.9025	6.00
11-1	IND	2.4506	2.1992	1.7720	1.2387	11.00
11-2	IND	2.5732	2.1986	1.7667	1.3602	11.00
11-3	IND	2.5904	2.2771	1.6504	1.2721	11.00
11-4	IND	2.4717	2.2285	1.7089	1.3459	11.00
16-1	IND	1.6646	1.6264	1.2871	1.2672	16.00
16-2	IND	1.5927	1.5712	1.3624	1.2467	16.00
16-3	IND	1.6299	1.6478	1.3089	1.2968	16.00
16-4	IND	1.5648	1.5699	1.3125	1.1804	16.00

Fichier r/Gr tests d'égalité des variances

Co	Mod	Nui	S2(X-Xbar)	S2x	Ecart-type	Etendue	Moyenne
1	1	3	,0084	,0028	,0528	,1161	3,2669
1	2	3	,0251	,0084	,0914	,1955	3,4677
1	3	3	,0149	,0050	,0705	,1398	2,5215
1	4	3	,0057	,0019	,0435	,0998	1,6130
2	1	3	,0043	,0014	,0378	,0907	3,2949
2	2	3	,0200	,0067	,0816	,1856	3,3522
2	3	3	,0041	,0014	,0369	,0785	2,2259
2	4	3	,0047	,0016	,0394	,0779	1,6038
3	1	3	,0069	,0023	,0479	,1046	2,3469
3	2	3	,0034	,0011	,0338	,0753	2,4095
3	3	3	,0098	,0033	,0571	,1215	1,7245
3	4	3	,0030	,0010	,0318	,0753	1,3177
4	1	3	,0084	,0028	,0529	,1202	1,3021
4	2	3	,0471	,0157	,1253	,2675	1,9608
4	3	3	,0102	,0034	,0583	,1215	1,3042
4	4	3	,0073	,0024	,0494	,1164	1,2478

Test egalité des 16 Modalités: 4 Colonnes 4 Modalités

Test de BARTLETT:

Snu1 S1/Nu Effec S.carrés Snu*LogS2 C*Qui2 Chi2 pr. Chi2 th.

48 5,333 16 ,1832 -282,2220 14,9384 13,3611 24,9958

Au niveau de confiance .95

Pas de différence significative entre les variances testées

Test G de COCHRAN -- Test R de HARTLEY

S2maximum S2minimum S2totale Effectif Test G Test R

1.57076966 1.01297583 6.10648475 16 ,257229769 15.5064870

Tests des étendues

Etendue max= ,2675 min= ,0753 Somme étendues= 1.9863 Effectif K= 16

Gprim= ,134672506671 Rprim= 3.55245683931

(K+2)*Gprim= 2.42410512007

analyse de variance sur fichier r/Gr

Deux facteurs contrôlés plan factoriel avec répétitions

- 1°Facteur contrôlé=colonnes du fichier=B apporté

- 2°Facteur contrôlé=tri sur échantillons=Mn apporté

- Résiduel=Répétitions

Source de variation	Variance	Ecart-type
B apporté	,3261	,5710
Mn apporté	,3438	,5863
Interaction: B appo/Mn ap.	,1108	,3329
Répétitions	,0038	,0618

Source de Variation	Sommes carrés	D°liberté	Carrés moyens	Fprat	Ftheo
B apporté	16,99233	3	5,66411	12,67	6,99
Mn apporté	17,84343	3	5,94781	13,30	6,99
Interr: B appo/Mn ap	4,02335	9	,44704	117,13	2,00
Répétitions	,18319	48	,00382		
Totale:	39,04231	63			(Prob ,990)

FIG. 4. — Influence des ajouts de B et Mn sur la production de grains du blé cultivé sur le sol rendzine de la première expérience.

FIG. 4. — Influence of the B and Mn additions on the production of grains of wheat cultivated on rendzina soil of the first experimentation.

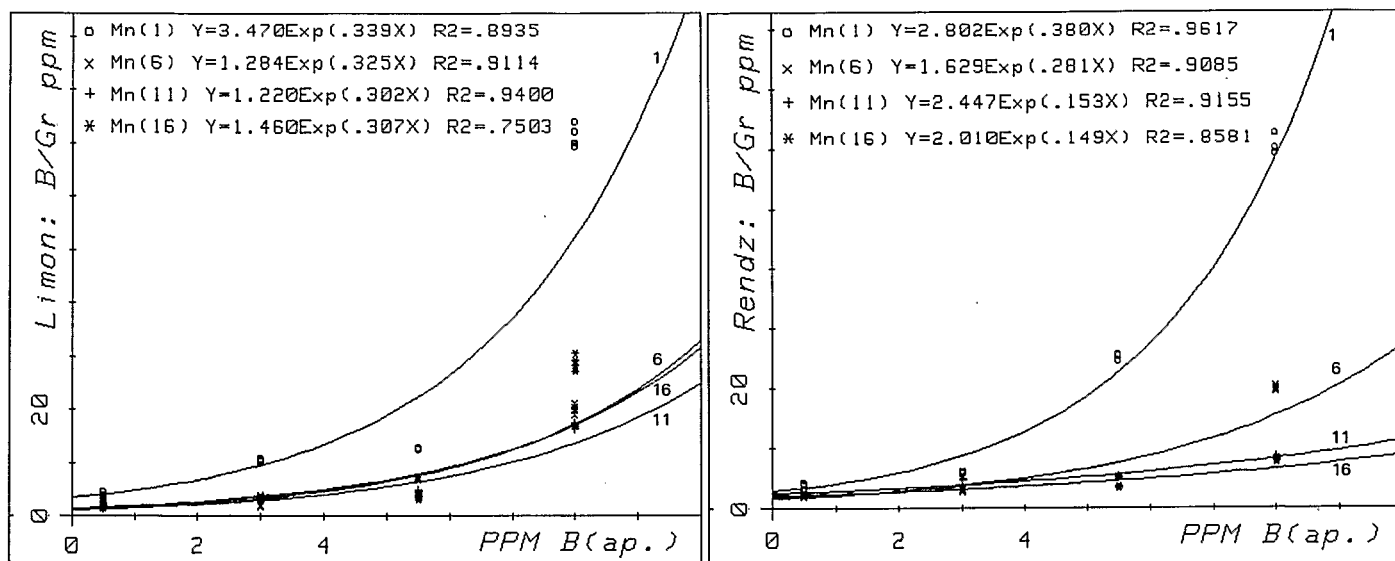


FIG. 5. — Influence des ajouts de B et Mn sur la fixation de ces éléments par les graines de blé de la première expérience.
 FIG. 5. — Influence of the B and Mn additions on the absorption of these elements in the wheat seeds of the first experimentation.

permet une observation claire du comportement de chaque élément dans chaque organe (fig. 4).

Tests d'égalité de variances

Nous effectuons en série, sur les sous-fichiers, les comparaisons des variances dues aux répétitions. Le programme imprime simultanément (fig. 4) les résultats du test de Bartlett, des tests de Cochran et de Hartley, ainsi que le test des étendues [7].

Analyses de variance

Les plans d'expérience factoriels permettent de tester l'influence de l'interaction des deux facteurs contrôlés B et Mn, ainsi que chacun des facteurs par rapport à cette interaction. Les plans pyramidaux ne testent que chacun des facteurs par rapport à la variance résiduelle [7].

Ces tests F sont également effectués en série sur les sous-fichiers et, comme pour les autres modules statistiques, les lois de probabilité théoriques sont calculées par le programme (fig. 4).

Courbes de l'influence des facteurs contrôlés

Les analyses de régression nous ont servi à préciser les effets des deux facteurs contrôlés lorsque leur influence était mise en évidence. Les courbes ont été tracées en série sur les sous-fichiers en version 4 courbes par graphe selon différents modèles (linéaire, exponentiel, parabolique, etc.) (fig. 5).

III.4. Quantification de l'influence des doses apportées : modèles de régression linéaire multiple et courbes d'isoinfluences [8,15,24]

Ce programme est appliqué aux fichiers sources ou aux fichiers moyennes sur les variables où a été détectée une influence des facteurs contrôlés. Il

calcule les coefficients du premier et second degré, ainsi que le coefficient d'interaction du premier ordre Bore-Manganèse. Il teste la validité du modèle (test F) et la signification de chaque coefficient (test T). Il permet alors d'éliminer éventuellement les termes non significatifs en recalculant le modèle et en testant la validité de cette élimination (test F). En outre, un test de normalité des résidus permet de repérer et, si nécessaire, d'éliminer les échantillons trop éloignés de l'intervalle de confiance des valeurs prédites. Le modèle définitif est alors transféré vers un autre module qui trace les courbes d'isoinfluences selon les valeurs choisies par l'opérateur (fig. 6).

III.5. Analyses multivariées

En complément des études détaillées précédentes, les analyses multivariées nous fournissent une vue d'ensemble des influences respectives.

Préparation des fichiers

Nous travaillons cette fois sur les fichiers moyennes. Des analyses sont conduites sur un sol, puis nous précisons l'étude sur chaque organe de la plante. Nous extrayons alors de nouveaux sous-fichiers au moyen d'un module de tri des variables de chaque organe dans le fichier moyennes d'un sol.

Analyses factorielles des correspondances

Cette technique permet d'examiner au plus près le profil des interactions variables-échantillons. L'exemple présenté figure 7, concernant le comportement des limbes des plantes cultivées, respectivement sur le sol brun lessivé sur limon et le sol rendzine sur calcaire, traduit une reproductibilité intéressante entre ces deux sols.

L'axe 1 représente respectivement 84.9 et 85 % de

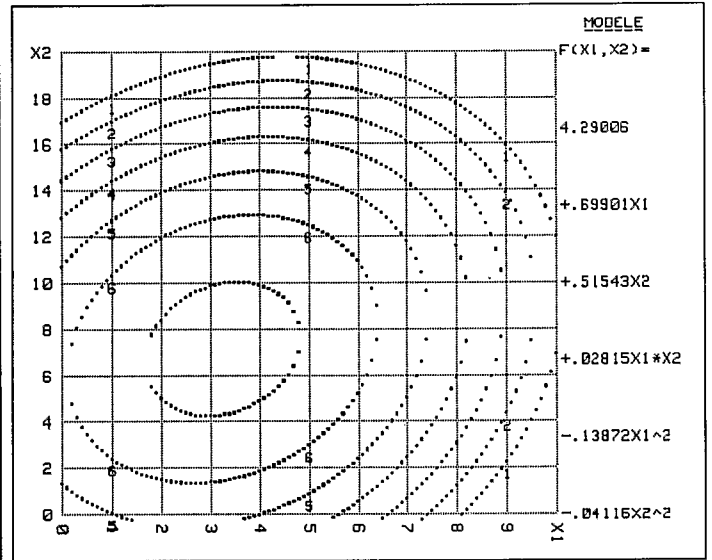
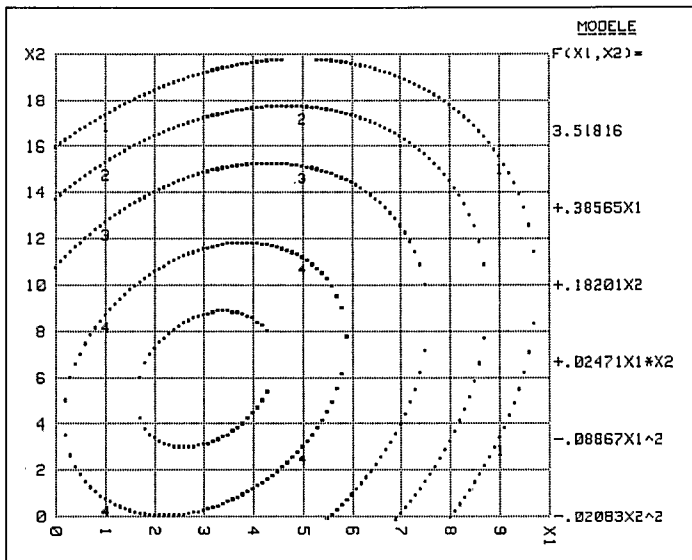


FIG. 6. — Influence des apports sur la production de grains de blé cultivé sur sols limon et rendzine de la deuxième expérience :
 X1 = Doses de Bore apportées mg/kg de sol.
 X2 = Doses de Manganèse apportées en mg/kg de sol.
 Les valeurs prédites des courbes d'isofertilité sont des poids de grains en grammes par pot de culture.

FIG. 6. — Influence of additions on the production of wheat grains cultivated on silty and rendzina soils of the second experimentation :
 X1 : amount of Boron
 X2 : amount of Manganese
 Value of isofertility curves : weight of dry grains in g/culture pot.

PLAN FACTORIEL : axe horizontal = 1 axe vertical = 2

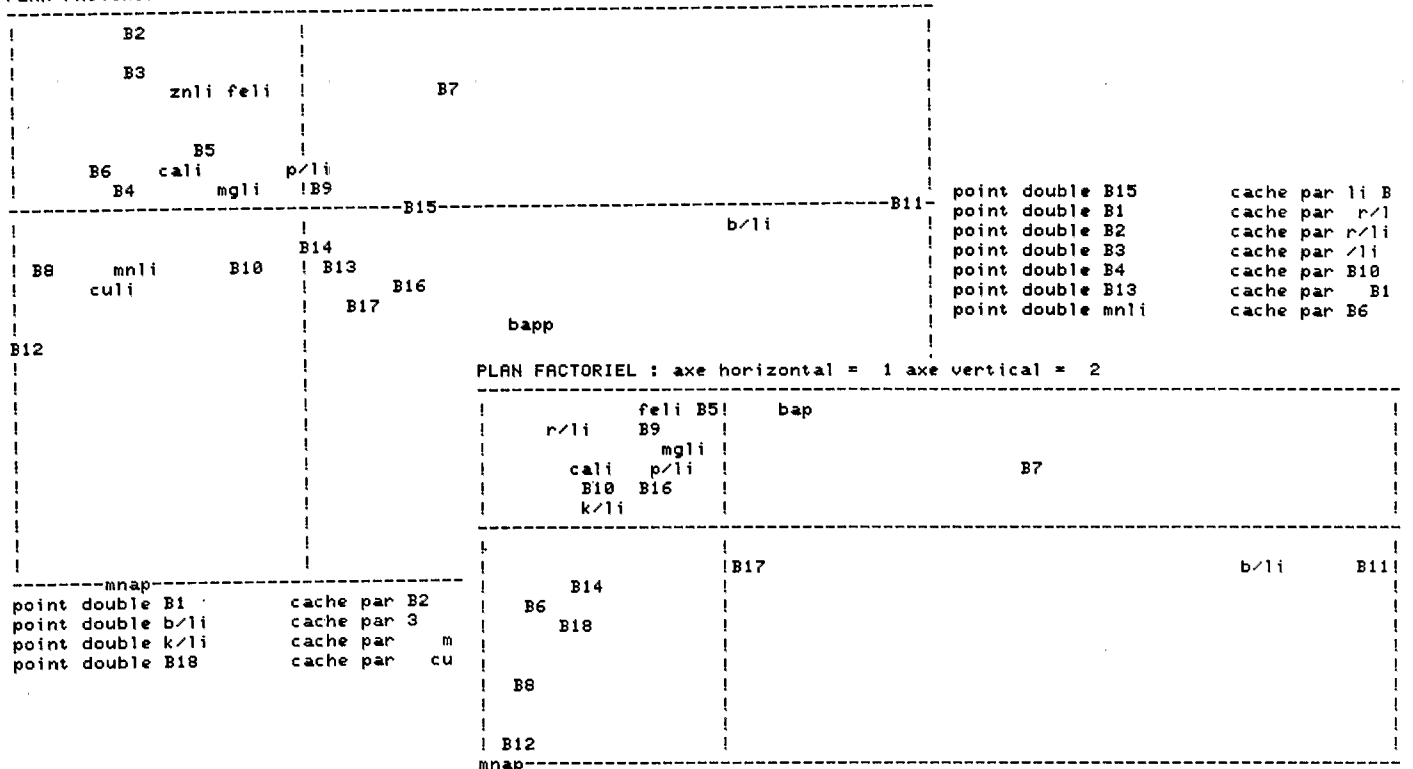


FIG. 7. — Analyse factorielle des correspondances sur deux sous-fichiers : laminae de blés cultivés sur sols limon et rendzine de la première expérience.

FIG. 7. — Correspondance factorial analysis on two sub card-index : laminae of wheats cultivated on silty and rendzina soils of the first experimentation.

la variabilité. Il traduit un effet antagonique du bore avec l'ensemble des autres éléments dosés dans ces organes, ainsi qu'avec le poids de matières sèches et l'apport de manganèse. Cet effet est également observé dans les échantillons. De la gauche vers la droite des plans factoriels, se répartissent les échantillons ayant reçu de plus en plus de bore et de moins en moins de manganèse.

L'axe 2 représente respectivement 13 et 12 % de la variabilité. Il traduit principalement un antagonisme entre l'accumulation du manganèse et celle du fer dans l'organe étudié. Cet effet se manifeste également avec la fertilité et, dans une moindre mesure, avec l'accumulation des autres éléments sauf le cuivre dont l'absorption semble favorisée par le manganèse. De haut en bas des graphiques se situent des échantillons ayant reçu de plus en plus de manganèse.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Conformément aux souhaits actuels de la chimiométrie [1], le progiciel utilisé, en liaison avec nos plans d'expérience et nos mesures, a permis un suivi du travail depuis la saisie des données jusqu'à leur interprétation. Les résultats obtenus sont très encourageants. Ils ont été décrits par ailleurs et pourront faire l'objet d'interprétations plus approfondies dans le domaine de la modélisation du cycle sol-plante des oligo-éléments comme de telles études ont déjà été réalisées pour l'azote, le phosphore, fertilisants dont l'effet est plus marqué et plus facilement mesurable [25]. Cette étude préalable indispensable n'aurait pas pu être réalisée de manière aussi systématique sans les tests en série et l'optimisation de la précision fournis par notre progiciel.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] FEINBERG (M.), DUCAUZE (C.). — *Analisis*, 1984, 12, 475.
- [2] PANSU (M.), TOSTAIN (S.), PINTA (M.). — *J. Chromatogr.*, 1981, 204, 377.
- [3] ABO (F.). — *Thèse d'état*, Université Paris VII, 1984.
- [4] ABO (F.). — *Thèse Ingénieur-Docteur*, Université Paris VII, 1980.
- [5] HELLER (R.). — *Physiologie végétale I-Nutrition*, Masson, Paris, 1978.
- [6] PANSU (M.). — SPCLAS, un logiciel basic pour le calcul, le classement, la gestion des résultats d'un laboratoire d'analyses physico-chimiques, ORSTOM, Bondy, 1983.
- [7] COMMISSARIAT À L'ENERGIE ATOMIQUE. — *Statistiques appliquées à l'exploitation des mesures*, Masson, Paris, 1978.
- [8] TOMASSONE (R.), LESQUOY (E.), MILLIER (C.). — *La régression, nouveaux regards sur une ancienne méthode statistique*, Masson, Paris, 1983.
- [9] PINTA (M.). — *Recherche et dosage des éléments traces*, Dunod, Paris, 1962.
- [10] LAVAL (Ph.). — *La préparation des fichiers pour les analyses multivariées sur microordinateurs*, Masson, Paris, 1984.
- [11] LEFEBVRE (J.), BOITARD (M.), REY (J.F.). — *Logiciels d'analyses statistiques multidimensionnelles sur microordinateurs*, Masson, Paris, 1981.
- [12] BATTAGLIA (A.), CADIOU (Y.), DELAPORTE (F.). — *Le système PROF, une organisation pour la gestion et le traitement des fichiers scientifiques adaptée aux microordinateurs*, Actes XI^e Colloque Informatique et Biosphère, Paris, 26-28 avril 1982, 65-73.
- [13] HELLER (R.). — *Manuel de statistique biologique*, Gauthier-Villars, Paris, 1968.
- [14] FEINBERG (M.), DUCAUZE (M.). — *Analisis*, 1984, 12, 26.
- [15] BOX (G.E.P.), HUNTER (W.G.), HUNTER (J.S.). — *Statistics for experimenters*, Wiley, New-York, 1978.
- [16] HEWITT (E.J.). — *Sand and water culture methods used in the study of plant nutrition*, CAB England, 1952.
- [17] BUSSLER (W.). — *J. Plant. Nutrition*, 1981, 3, 115.
- [18] CHUDE (V.O.). — *Comm. Soil. Sci. Plant Analysis*, 1983, 14, 989.
- [19] KOWALENKO (C.G.). — *Can. J. Soil Science*, 1984, 64, 147.
- [20] WALLACE (A.), ROMNEY (E.M.), HUNTER (R.B.). — *Soil Sci.*, 1982, 134, 31.
- [21] GESTRING (W.D.), SOLTANPOUR (P.N.). — *Commun. Soil. Sci. Plant. Analysis*, 1981, 12, 733.
- [22] PINTA (M.) et C.I.I. — *Analisis*, 1975, 3, 344.
- [23] PINTA (M.), RIANDEY (C.). — *Analisis*, 1975, 3, 86.
- [24] FEINBERG (M.), SCHNITZER (G.). — *Analisis*, 1983, 11, 299.
- [25] PENNING DE VRIES (F.W.T.), VAN LAAR (H.H.) (eds). — *Simulation of plant growth and crop production*, Centre for agricultural publishing and documentation, Wageningen, 1982.