

INSTITUT FRANCAIS DE RECHERCHE SCIENTIFIQUE POUR LE DEVELOPPEMENT EN COOPERATION

CENTRE DE BREST

ASTECH

ANALYSE DU SIGNAL TECHNICON

Manuel d'utilisation

Jean-Jacques LECHAUVE François BAURAND Claude OUDOT

Centre ORSTOM de Brest

BP 70 - 29280 PLOUZANE Tél. 98 22 45 01

Document technique du Centre de Brest n° 67, 1992

TABLE DES MATIÈRES

| INTRODUCTION | | | 4 |
|--------------|---|---|---|
| LES | MOYENS | D'ACQUISTION ET DE TRAITEMENT | 5 |
| PRIN | ICIPE DE | DÉPOUILLEMENT DU SIGNAL | 7 |
| LE P | ROGRAM | IME ASTECH | 9 |
| IV.1 | Introduct | ion | 9 |
| IV.2 | L'interfac | e graphique du programme | 10 |
| IV.3 | Les fonct | tions du programme | 12 |
| | IV.3.1 | La fonction 'BORNES' | 13 |
| | IV.3.2 | La fonction 'VUES' | 14 |
| | IV.3.3 | La fonction 'LIGNE DE BASE' | 15 |
| | IV.3.4 | La fonction 'GRILLE' | 18 |
| | IV.3.5 | La fonction 'ÉTALONS' | 19 |
| | IV.3.6 | La fonction 'MODÈLES' | 21 |
| | IV.3.7 | La fonction 'ÉCHANTILLONS' | 23 |
| | IV.3.8 | La fonction 'CALCULS' | 24 |
| | IV.3.9 | La fonction 'LISTING' | 26 |
| | IV.3.10 | La fonction 'DISQUE' | 27 |
| | IV.3.11 | La fonction 'FIN' | . 28 |
| | | | |
| | INTF LES PRIN LE P IV.1 IV.2 IV.3 | INTRODUCTION LES MOYENS PRINCIPE DE LE PROGRAM IV.1 Introduct IV.2 L'interfact IV.3 Les fonct IV.3.1 IV.3.2 IV.3.3 IV.3.4 IV.3.5 IV.3.4 IV.3.5 IV.3.6 IV.3.7 IV.3.8 IV.3.9 IV.3.10 IV.3.11 | INTRODUCTION LES MOYENS D'ACQUISTION ET DE TRAITEMENT PRINCIPE DE DÉPOUILLEMENT DU SIGNAL LE PROGRAMME ASTECH IV.1 Introductor IV.2 L'interface graphique du programme IV.3 Les fonctions du programme IV.3 Les fonctions du programme IV.3.1 La fonction 'BORNES' IV.3.2 La fonction 'BORNES' IV.3.3 La fonction 'UES' IV.3.3 La fonction 'LIGNE DE BASE' IV.3.4 La fonction 'GRILLE' IV.3.5 La fonction 'GRILLE' IV.3.6 La fonction 'MODÈLES' IV.3.7 La fonction 'ÉCHANTILLONS' IV.3.8 La fonction 'CALCULS' IV.3.9 La fonction 'LISTING' IV.3.10 La fonction 'DISQUE' IV.3.11 La fonction 'FIN' |

| Annexe-A | L'INSTALLATION DU PROGRAMME ASTECH | 29 |
|----------|-------------------------------------|----|
| Annexe-B | L'ALGORITHME DU PROGRAMME ASTECH | 31 |
| Annexe-C | LES FICHIERS ISSUS DE L'ACQUISITION | 34 |

II

FIGURES

| Figure-1 | Dispositif d'acquisition et de traitement des données d'analyse | | | | |
|-----------|---|----|--|--|--|
| | par colorimétrie des sels nutritifs | 5 | | | |
| Figure-2 | Forme du signal | 7 | | | |
| Figure-3 | Détermination du modèle linéaire | 8 | | | |
| Figure-4 | L'interface graphique du programme ASTECH | 10 | | | |
| Figure-5 | Les bornes de la fenêtre de visualisation | 13 | | | |
| Figure-6 | Un bouton de réglage | 13 | | | |
| Figure-7 | Succession des sections d'enregistrement | 14 | | | |
| Figure-8 | Sélection d'un intervalle de six minutes | 15 | | | |
| Figure-9 | Sélection d'un point de la ligne de base | 17 | | | |
| Figure-10 | Mise en évidence d'un signal non périodique | 18 | | | |
| Figure-11 | Tracé du modèle linéaire | 21 | | | |
| Figure-12 | Exemple de listing | 22 | | | |
| Figure-13 | Exemple de table des concentrations calculées | 25 | | | |
| Figure-14 | Structure du fichier de sauvegarde des résultats | 27 | | | |
| Figure-15 | L'organisation de la disquette ASTECH | 29 | | | |
| Figure-16 | Écran d'initialisation | 30 | | | |

I - INTRODUCTION

L'analyse des divers sels nutritifs présents dans l'eau de mer est une opération couramment effectuée aujourd'hui par les chimistes océanographes. Après la salinité et l'oxygène dissous, les sels nutritifs sont les paramètres les plus souvent mesurés car ils fournissent des informations utiles aussi bien pour la caractérisation et le suivi des masses d'eau que pour les processus (physiques et biochimiques) qui se développent en leur sein.

Le premier sel nutritif dosé en routine en mer fût le phosphate (PO_4), car c'était le plus facile à caractériser colorimétriquement. Il fût suivi au cours des années 60 par le nitrite (NO_2) et le nitrate (NO_3), dont les mesures se sont multipliées avec l'apparition des colonnes réductrices de cadmium qui a simplifié les déterminations de nitrate. A partir des années 70, le silicate (SiO_3) est venu compléter la série et sa mesure s'est répandue car la distribution de ce sel, au cycle biogéochimique différent de ceux du nitrate et du phosphate, fournit des renseignements précieux pour l'étude hydrologique des masses d'eaux.

La particularité commune à ces quatre composés chimiques est leur faculté à développer, en présence de réactifs appropriés, une coloration caractéristique dont l'intensité (Densité Optique) est proportionnelle à leur concentration dans le milieu (Loi de BEER-LAMBERT). Jusqu'à la fin des années 60, le traitement des échantillons d'eau de mer et la mesure des colorations étaient faites manuellement, au prix d'opérations longues et fastidieuses.

L'apparition des chaînes d'analyses automatiques (AutoAnalyzer II TECHNICON®) développées à l'origine pour traiter les échantillons sanguins des hôpitaux et laboratoires d'analyses médicales, en accélérant la cadence d'échantillonnage et en permettant des déterminations simultanées sur un même échantillon, a multiplié les données d'observations de sels nutritifs acquises en mer.

Aujourd'hui pour faire face au nombre de plus en plus grand de données à dépouiller (à titre d'exemple la campagne CITHER 1, avec ses 216 stations hydrologiques à 32 niveaux de prélèvements d'échantillons, fournira 27.648 données de sels nutritifs), le recours à un dépouillement informatisé des données est nécessaire. Le traitement informatique des signaux des colorimètres offre en outre la facilité de stockage des informations brutes pour un retraitement éventuel et élimine les erreurs qui peuvent apparaitre lors de la transcription des résultats au cours des dépouillements manuels (lecture des hauteurs de pics sur le papier de l'enregistreur - conversion des hauteurs en concentrations).

II - LES MOYENS D'ACQUISITION ET DE TRAITEMENT

La chaîne d'analyse par colorimétrie des sels nutritifs est couplée à un micro ordinateur compatible IBM-AT. La figure ci-dessous présente schématiquement les divers appareils mis en oeuvre.



■ Figure-1 Dispositif d'acquisition et de traitement des données d'analyse par colorimétrie des sels nutitifs

L'interface entre les colorimètres et le calculateur est une carte d'acquisition DAS8 de la Société MetraByte. Ce dispositif assure, à haute vitesse, la conversion analogique/digitale sur 12 bits de 8 canaux d'entrée au plus. Dans le contexte particulier de cette application, quatre canaux sont utilisés ; ils sont associés aux quatre sels à doser : phosphate, nitrate, nitrite et silicate. En parallèle, les colorimètres sont reliés à deux enregistreurs graphiques à double voie qui assurent en temps réel le tracé des mesures colorimètriques faites sur chaque voie.

Le programme d'acquisition surveille cycliquement les quatre voies. Il détermine une valeur moyenne pour chacune d'elles toutes les secondes. Ce module a été initialement développé par l'UBO¹ et l'IFREMER². Ecrit en GWBASIC, le programme a été adapté au QuickBASIC afin d'en faire un exécutable autonome (ACQUIS.EXE). Pour chaque analyse, ACQUIS génère deux fichiers. Le premier rassemble toutes

¹ UBO Université de Bretagne Occidentale

² IFREMER Institut Français de Recherche et d'Exploitation de la Mer

les informations que l'opérateur spécifie pour définir le contexte de la manipulation. Quant au second, il contient l'ensemble des valeurs des tensions mesurées aux bornes des colorimètres. Les structures de données associées à ces fichiers sont explicitées en détail dans la suite du document.

Le dépouillement des données est assuré en différé par le programme ASTECH (<u>A</u>nalyse du <u>S</u>ignal <u>TECH</u>nicon¹). Il requiert l'usage d'un micro ordinateur compatible AT. Le calculateur est impérativement équipé d'un coprocesseur arithmétique, d'un moniteur couleur EGA ou VGA, d'une souris et d'une imprimante. Les résultats du traitement sont disponibles à la fois sur l'imprimante et sur disque.

¹ TECHNICON Nom de la société qui, la première, a développé des chaînes d'analyses automatiques utilisées par les chimistes océanographes. La fabrication des AutoAnalyzer®II est aujourd'hui assurée par BRAN+LUEBBE (Groupe Alpha-Laval).

III - PRINCIPE DU DÉPOUILLEMENT DU SIGNAL

La cadence de prélèvement de l'échantillonneur est fixée par l'analyste. Ce choix, 180 secondes par exemple, détermine la période du signal enregistré. Le programme d'acquisition ne doit pas perturber cette constante. La figure ci-dessous présente la variation de tension due au passage d'un échantillon.



La ligne de base repère une tension de référence. C'est la valeur mesurée pour le passage du mélange "eau déminéralisée + réactifs". La ligne de base est en principe une droite horizontale, cependant dans la pratique cette tension de référence peut dériver très légèrement entre le début et la fin d'une analyse.

Les étapes successives du traitement d'un enregistrement sont :

l'évaluation de la ligne de base,

• la reconnaissance et le calcul de la hauteur des pics dûs au passage de solutions étalons,

· l'estimation d'une courbe d'étalonnage,

• la reconnaissance et le calcul de la hauteur des pics dûs au passage des échantillons,

• le calcul des concentrations par application du modèle d'étalonnage aux hauteurs de pics précédemment évaluées,

• l'archivage des résultats dans un fichier.

L'estimation du modèle d'étalonnage :

La seconde étape du traitement produit un ensemble de couples de valeurs de concentrations et de tensions { (c_i , u_i), i=1, n }. Ce sont les points étalons, théoriquement alignés.



Pour déterminer les concentrations, deux modèles sont retenus :

- le modèle linéaire : C = f U ξ
- le modèle non-linéaire : C = f $\log_{e} (1 U / a) \xi$

où ξ est une constante, assimilée à l'effet de sel.

Les trois constantes f, f' et a sont estimées par une méthode de régression sur l'ensemble des points étalons.

Lors du calcul des concentrations, l'usage conjoint des deux modèles sera permis.

IV - LE PROGRAMME ASTECH

IV.1 - Introduction

Le programme ASTECH (<u>A</u>nalyse du <u>S</u>ignal <u>TECH</u>nicon) a été développé à l'Atelier Informatique du Centre ORSTOM de Brest. Le code source de l'application est rédigé totalement en FORTRAN-77. Conçue essentiellement pour être exploitée dans un environnement PC sous MS/DOS¹, cette application est portable sur une station de travail UNIX². Le code (un peu plus de 3000 lignes) est unique pour les deux systèmes d'exploitation. Cela a été rendu possible par l'utilisation de la norme GKS (Graphic Kernel System). Cette dernière décrit un système formel dans lequel tous les concepts de base nécessaires au développement d'une application graphique sont clairement introduits. Un soin tout particulier a été porté à l'écriture du code afin d'en faciliter la maintenance.

La construction du programme ASTECH est organisée autour d'un superviseur qui offre à l'utilisateur une relative souplesse de mise en oeuvre des fonctionnalités de l'application. Les frappes au clavier ont été réduites au strict minimum ; un usage intensif de la souris est en revanche favorisé. Chaque fonction élémentaire de l'application est contrainte par un jeu de verrous qui autorisent ou non son exécution en fonction des opérations déjà réalisées.

La version actuelle exploite les structures de données qui proviennent du programme d'acquisition ACQUIS. Cependant ce logiciel peut être adapté aisément au traitement de données organisées différemment. Seuls l'accès aux fichiers et, éventuellement, la présentation des résultats, seraient à modifier. ASTECH traite un paramètre mesuré à la fréquence de **un Hertz** sur une durée maximale de **six heures**. La plage des tensions admissibles est de **10 Volts** (à partir de 0). Un maximum de **30 étalons** détermine la relation entre les tensions et les concentrations. Une table de **100 échantillons** au plus est traitée.

¹ MS/DOS est une marque déposée de Microsoft Corp.

² UNIX est une marque déposée des laboratoires Bell/ATT.

IV.2 - L'interface graphique du programme

L'écran graphique est subdivisé en trois parties :

- · la zone des messages ; elle contient une ligne de texte,
- · l'aire de visualisation de l'enregistrement,
- · l'aire de travail.



Figure-4 L'interface graphique du programme ASTECH

La zone de visualisation

Cette portion de l'aire d'affichage est réservée à la visualisation d'une section de trente minutes d'enregistrement. Afin de réduire le temps d'affichage, seul le cinquième des cycles acquis est tracé. On remarque la présence de cinq boutons de réglage des bornes du graphe. Deux d'entre eux sont consacrés à la définition des bornes de l'intervalle des tensions (ordonnées). La mise à jour de ces valeurs se fait par pas de 0,5 V. Les trois autres boutons servent à se déplacer dans le temps (abscisses). Le bouton de gauche fixe l'origine des temps à 00h00:01, alors que le bouton de droite modifie celle-ci de manière à provoquer la visualisation de la dernière section de l'enregistrement. Enfin, le bouton central autorise des décalages à gauche ou à droite de l'origine du tracé par pas de trente minutes. Toute modification d'une borne doit être suivie d'un "clique" dans la zone de tracé afin de valider la nouvelle définition de la fenêtre de visualisation. Outre les valeurs des bornes variables, on remarque quelques indications qui identifient l'enregistrement en cours de traitement. Sont stipulés, le nom du fichier, la date et l'heure de début de

l'acquisition, le code du paramètre traité. La fenêtre de tracé contiendra d'autres éléments graphiques en fonction de l'état d'avancement du travail de dépouillement du signal.

La zone de travail

C'est la moitié inférieure de l'écran. Sur la droite, l'opérateur dispose de la palette des fonctions du programme. En cliquant sur l'un des onze rectangles proposés, l'utilisateur provoque l'exécution de l'une des tâches prévues dans l'algorithme. Parmi ces fonctions, quatre d'entre elles nécessitent l'usage de fenêtres complémentaires ; une fenêtre de tracé munie d'un sous-menu de fonctions, une aire de choix dans laquelle est affichée une liste de tensions exprimées en mV, une zone de requête alphanumérique pour l'entrée des chaînes de caractères. Ces aires apparaîtront en fonction des besoins.

Les appareils d'entrée

L'opérateur pilote le programme essentiellement à l'aide de la souris. Seul, le bouton de gauche est utilisé. Il n'y a pas de refus possible. Le clavier sera sollicité dans les seuls cas où le programme désire que lui soient communiquées des valeurs particulières non prévisibles par l'algorithme.

IV.3 - Les fonctions du programme





🖬 Figure-5 Les bornes de la fenêtre de visualisation

Son objet est de fixer les bornes de la fenêtre de visualisation. Cette aire contient le tracé des tensions en fonction du temps. La largeur de la section représentée est fixée à 30 minutes. Pour améliorer les performances d'affichage, il n'est tracé dans cette aire qu'un cycle sur cinq.

Un clique sur la fonction ' BORNES ' donne l'accès aux cinq boutons de réglage des bornes.

→ La borne ' Tension max. ' (1)



En cliquant (bouton de gauche) sur la partie supérieure de l'icône associée, la tension maximum est augmentée de 0,5 V. La borne supérieure est fixée à 10 V. Inversement, en cliquant sur la partie inférieure de l'icône, la valeur de la tension sera diminuée de 0,5 V. Un contrôle est opéré pour maintenir un écart de 0,5 V avec la valeur de la borne 'Tension min.'. La valeur par défaut est initialisée à 9,5 V.

→ La borne ' Tension min. ' (2)

Le réglage de la borne 'Tension min. 's'effectue de manière identique. La valeur par défaut, fixée à l'initialisation du programme, est 3,5 Volts.

<u>La borne ' Heure début ' (3)</u>

L'origine de l'axe des temps dans le programme ASTECH est fixée à l'instant 00h00:01. C'est l'heure relative du premier cycle du signal. Cette valeur correspond à l'heure absolue de début de l'acquisition spécifiée en commentaire dans la partie supérieure de la fenêtre de visualisation.

La détermination de cette borne est gérée par les trois boutons situés sous l'axe des abscisses. Le bouton de gauche (a), provoque l'initialisation de l'heure de début à la valeur 00h00:01. Après validation des bornes, le tracé de la première section de l'enregistrement s'effectue. De même, en agissant sur le bouton de droite (b), l'heure relative de début sera calculée de manière à obtenir le tracé de la dernière portion du signal enregistré. Enfin, le bouton central (c) facilite la visualisation de la section précédente ou suivante. Le dispositif de détermination de l'heure de début de chaque section est conçu pour assurer un recouvrement entre deux tronçons successifs d'enregistrement. La figure ci-dessous schématise ce mécanisme de superposition, lequel s'avère bien pratique lors de la reconnaissance des pics.



■ Figure-7 Succession des sections d'enregistrement

L'intervalle de superposition est fixé à cinq minutes (300 cycles).

L'opérateur a toutes les libertés quant à l'ordre des ses interventions sur les bornes. Il est possible de cliquer plusieurs fois successivement sur la même portion d'icône. Les trois bornes étant fixées, il est impératif de valider ce jeu de valeurs en cliquant dans la fenêtre de tracé. Cela a un double effet : rafraîchir l'aire de visualisation en tenant compte des nouvelles valeurs, renvoyer le contrôle de l'application au niveau du panneau de commandes.

IV.3.2 - La fonction "VUES "

En cliquant de manière répétitive sur cette option du panneau de commandes, l'opérateur visualise, section par section, l'enregistrement du signal à dépouiller. Cette opération de scrutation est circulaire. Chaque section représente 30 minutes de mesure. Le mécanisme de superposition sur cinq minutes est appliqué.

IV.3.3 - La fonction "LIGNE DE BASE "

La ligne de base est une droite virtuelle qui peut être très légèrement inclinée par rapport à l'horizontale. Celle-ci doit être impérativement déterminée. Comme l'indique la figure-2, la hauteur des pics (tension nette) prise en compte dans ASTECH est évaluée par différence entre la hauteur absolue du pic (tension brute) et celle correspondant à la ligne de base, au cycle considéré, et obtenue par apllication de l'équation de la droite représentative de cette dernière. La tension de référence est déterminée en début et en fin d'analyse, en alimentant le colorimètre avec une eau pure additionnée des réactifs caractéristiques du sel recherché. Pendant cette phase, la tension mesurée est quasiment constante. Lors du dépouillement de l'enregistrement, il suffit de retrouver ces deux portions extrêmes du signal et d'y sélectionner quelques points caractéristiques. Par une méthode de moindre carrés, ASTECH détermine l'équation de la droite recherchée.

En "cliquant" sur le rectangle 'L-BASE' dans le panneau de commandes, deux fenêtres auxiliaires apparaissent dans la zone inférieure de l'écran. La plus grande des deux est habillée d'un bandeau dans lequel on repère trois sous-fonctions. La seconde fenêtre est initialement vide.

➡ La sous-fonction ' BORNES '

En "cliquant" sur la commande 'BORNES ', l'opérateur peut modifier la vue courante dans la fenêtre de visualisation. Le mécanisme de réglage des bornes vient d'être décrit au paragaphe IV.3.1.



➡ La sous-fonction ' Z-6MIN '

Cette commande a pour objet de définir dans l'enregistrement un intervalle de 6 minutes centré en un point donné. Le signal enregistré pendant cette période est alors retracé à une échelle différente dans la fenêtre de travail. Le programme gère automatiquement les coefficients de ce changement d'échelle de manière à produire un zoom du signal. Prenons un exemple en s'appuyant sur la figure-8 présentée à la page précédente.

En lançant la commande 'Z-6MIN', le curseur de la souris apparaît dans la fenêtre de visualisation. On "clique" par exemple dans la zone intitulée 'effet de sel' où on observe une rapide variation de la tension. Un marqueur (triangle creux) repère la position "cliquée". La portion de signal ainsi sélectionnée est retracée dans l'aire de travail. On peut ainsi observer avec une bien meilleure précision, l'évolution de la tension pendant ces six minutes de mesure. On remarque une verticale de couleur sombre ; cette droite matérialise la position du point sélectionné dans l'intervalle de six minutes. Dans la plupart des cas, cette droite est centrée. Le curseur de la souris se manifeste dans la fenêtre de travail.

Toutes les procédures de sélection des points caractéristiques d'un enregistrement mettent en oeuvre ce processus de définition d'un intervalle de six minutes. Le choix final du cycle s'opère dans la fenêtre de travail. Enfin on notera que, seule, la position horizontale du curseur du releveur de coordonnées a de l'importance.

➡ La sous-fonction ' CALCUL '

Cette commande provoque le calcul des coefficients de la droite des moindres carrés. C'est la seule porte de sortie de la fonction 'Ligne de base'. Cependant cette commande n'est pas toujours exécutable ; en effet il faut avoir sélectionné au moins deux points pour que la détermination de la droite soit possible. A l'issue du calcul, les fenêtres auxiliaires disparaissent et la ligne de base est représentée dans la fenêtre de visualisation. L'utilisateur reprend le contrôle de l'application au niveau du panneau principal de commandes.

De La sélection des points caractéristiques de la ligne de base

L'opérateur choisit un intervalle de six minutes représentatif de la mesure de la densité optique du mélange "eau pure + réactifs". Le curseur de la souris étant dans la fenêtre de travail, l'utilisateur peut exécuter l'une des sous-fonctions du bandeau, ou bien choisir un cycle particulier dans cette portion courante d'enregistrement. Seul le positionnement horizontal de la souris est à contrôler. En "cliquant" à la position souhaitée, une liste de 7 valeurs s'affiche dans la fenêtre de droite. Ces valeurs, prélevées dans le fichier, sont les tensions des cycles les plus proches du point sélectionné. Dans cette liste, l'opérateur décide alors de retenir ou non une tension en "cliquant" sur la ligne de son choix. Dans le cas positif, la table des points caractéristiques de la ligne de base est mise à jour ainsi que le compteur associé. Le programme réagit à cette décision en traçant un marqueur (petit segment vertical) au cycle retenu. Dans tous les cas, le contrôle est redonné dans la fenêtre de travail. Le programme ASTECH gère une table de 10 entrées au plus pour stocker les points de la ligne de base. L'opérateur est constamment tenu informé de la valeur du compteur de points.



■ Figure-9 Sélection d'un point de la ligne de base

L'exécution de la commande 'Ligne de base' a des conséquences importantes sur l'état des variables qui contrôlent les droits d'accès aux autres fonctions du programme ASTECH. Les premières instructions de cette commande consistent à initialiser à zéro le compteur des points de la ligne de base, et à affecter la valeur logique 'faux' aux trois indicateurs suivants :

la ligne de base est déterminée une liste de pics étalons est définie une liste de pics échantillons est établie

Enfin, un même enregistrement peut être dépouillé plusieurs fois. Dans ce cas, le logiciel ASTECH est conçu pour récupérer dans le fichier des résultats précédents, les coefficients de l'équation de la ligne de base. Le tracé de celle-ci est automatiquement réalisé lors de l'initialisation de la fenêtre de visualisation.

IV.3.4 - La fonction ' GRILLE '

Cette fonctionnalité du programme ASTECH est à la fois une aide à la détection de certains pics et une opportunité de vérifier la qualité de la cadence d'échantillonnage programmée dans le module d'acquisition (un cycle par seconde). La figure cidessous donne un exemple d'utilisation de la grille qui remet en cause la qualité du fichier produit lors de l'acquisition.



■ Figure-10 Mise en évidence d'un signal non périodique

Le processus mis en oeuvre par cette commande est très simple. En "cliquant" sur le rectangle 'GRILLE ', le curseur de la souris passe dans la fenêtre de visualisation. Un "clique" sur un cycle significatif, par exemple le début du plateau d'un pic prononcé, provoque le tracé d'un ensemble de segments de droite verticaux. La distance entre chacun d'eux est constante et égale à la période du signal choisie par l'analyste en agissant sur la programmation de l'échantillonneur. A chaque rafraîchissement de la fenêtre de visualisation, la grille sera automatiquement retracée.

L'utilisation de ce dispositif est facultative, cependant elle peut se révéler fort utile lors de la définition de certains intervalles à 'zoomer'. Ce sera le cas lors de la sélection des pics associés à des échantillons de faible concentration.

IV.3.5 - La fonction " ETALONS "

Elle constitue la première phase du processus d'étalonnage du dispositif de mesure. Cette fonction consiste à dresser une table des couples (tension, concentration) caractéristiques des étalons. Le signal enregistré présente impérativement un certain nombre de pics qui traduisent la variation de densité optique mesurée lors du passage de solutions standards dans le colorimètre. Le rang et la valeur de concentration associée de ces pics sont consignées dans la feuille d'analyse remplie lors de la manipulation. L'utilisateur du programme de dépouillement doit impérativement disposer de cette information. En effet, l'application ASTECH ne dispose d'aucun moyen pour distinguer un pic étalon d'un pic dû à la mesure d'un échantillon.

Le processus mis en oeuvre par cette commande est quasiment identique à celui qui est implémenté pour déterminer la ligne de base. La fenêtre de visualisation est supposée contenir la section de l'enregistrement dans laquelle les premiers étalons sont représentés. Un accès rapide à cette vue est rendu possible grâce à la commande 'VUES '. En "cliquant" sur 'ÉTALONS ' dans le panneau principal de contrôle, deux fenêtres auxiliaires apparaissent. La fenêtre de travail, celle de droite, présente une barre de contrôles dans laquelle on remarque trois sous-fonctions.

➡ La sous-fonction ' BORNES '

Elle permet de changer la vue courante dans la fenêtre de visualisation.

➡ La sous-fonction ' ÉTALON '

Elle est identique à la fonction 'Z-6MIN ' décrite à propos de la détermination des points de la ligne de base. Son but est de fixer un intervalle de 6 minutes qui contient un pic étalon. Cette portion de signal est reproduite dans la fenêtre de travail à une échelle qui facilite la localisation des cycles les plus représentatifs de la mesure de la concentration de cette solution standard.

➡ La sous-fonction ' EXIT '

Elle met fin au processus de sélection des pics étalon. Les fenêtres auxiliaires sont supprimées et le superviseur reprend la main. Un "clique" sur cette sous-fonction n'est suivi d'effet que si au moins deux références ont été introduites dans la table des étalons.

DP Le choix des couples caractéristiques

Le choix d'une abscisse significative dans la fenêtre de travail entraîne l'affichage de la liste des valeurs des tensions mesurées pendant l'intervalle de sept secondes centré sur le cycle correspondant à l'abscisse. Un "clique" sur l'une de ces sept lignes provoque l'exécution d'une requête d'entrée alphanumérique dans la zone de dialogue de l'interface. Cette zone est alimentée avec le libellé suivant :

' Concentration de cet etalon ?

L'ensemble des caractères <souligné> constitue le champ de la réponse attendue. La valeur entrée au clavier est une constante positive exprimée en µmol/l. La partie décimale est séparée de la partie entière par un point. La validation de la réponse se fait en frappant le caractère <CR>. Tant que cette validation n'est pas effective, l'opérateur peut modifier à volonté la chaîne de caractères en utilisant la touche <BackSpace>.

La table des étalons est alors mise à jour et le compteur de références est augmenté d'une unité. La table des étalons maintenue dans ASTECH est limitée à 30 points d'entrée. Les valeurs des tensions consignées dans cette table sont des valeurs relatives à la ligne de base. La zone de message de l'interface avise constamment l'opérateur du nombre de points déjà introduits dans la table. Enfin les pics ainsi qualifiés sont marqués dans la fenêtre de visualisation d'un petit carré de couleur vive. Ces marques sont maintenues pendant la durée de vie de la table. Ces symboles évitent à l'opérateur de sélectionner deux fois un même sommet de pic.

L'exécution de la fonction 'ÉTALONS' est autorisée si et seulement si la ligne de base est déterminée. Etant donné le peu de temps que requiert la création de cette table, nen dans le programme ne permet d'en modifier le contenu. Dans le panneau principal de commandes, tout appel à la fonction 'ÉTALONS ' provoque une remise à zéro du compteur et une initialisation à faux du flag logique " une table des étalons existe". Cette fonction doit impérativement avoir été exécutée pour accéder à la seconde phase du processus d'étalonnage : la détermination d'un modèle.

IV.3.6 - La fonction "MODELES "

Cette seconde phase du processus d'étalonnage assure la détermination des deux modèles retenus pour formuler la relation entre la concentration et la tension mesurée.

Un "clique" sur l'option 'MODÈLES ' du panneau de contrôle provoque le tracé des points étalons dans la fenêtre auxiliaire associée à cette fonction. L'axe des abscisses représente les concentrations.



Les bornes du graphe sont gérées automatiquement par le programme. Dans la partie inférieure de la fenêtre, on remarque un bandeau contenant les libellés de quatre sous-fonctions. On constate enfin, dans la zone de dialogue alphanumérique de l'interface, que le programme attend une réponse. Le libellé de la question est :

' Seuil de linéarité ? _____

La valeur attendue est celle d'une concentration exprimée dans le même système d'unités que celui qui a été employé lors de la constitution de la table des étalons (par exemple, μ mol / l). Cette question nécessite quelques commentaires.

Si la relation théorique entre la concentration et la densité optique mesurée est parfaitement linéaire, dans la pratique il s'avère que ce modèle n'est pas totalement satisfaisant. Le programme ASTECH est conçu pour déterminer une droite des moindres carrés sur un sous-ensemble des points étalons. Seuls les points de concentration inférieure ou égale au seuil de linéarité interviennent dans le calcul. En outre, le programme détermine un second modèle, dit exponentiel, en intégrant cette fois tous les points étalons. Ce modèle donne de meilleurs résultats, notamment pour les fortes tensions.

Les sous-fonctions, accessibles dans le bandeau de la fenêtre, accomplissent le tracé des graphes associés aux deux modèles.

➡ La sous-fonction ' T-PTS '

Cette commande a pour effet de rafraîchir la fenêtre de travail en y retraçant uniquement les points caractéristiques des étalons.

➡ La sous-fonction ' T-DROI. '

Elle réalise le tracé de la droite des moindres carrés.

➡ La sous-fonction ' T-EXPO. '

Elle effectue le tracé du graphe du modèle exponentiel.

➡ La sous-fonction ' EXIT '

Elle met fin à la fonction ' MODÈLES '. La fenêtre auxiliaire est retirée de l'interface et le curseur de la souris apparaît dans le menu principal.

La commande 'MODÈLES ' peut être sollicitée plusieurs fois de suite. En initialisant le seuil de linéarité avec des valeurs différentes, on détermine ainsi plusieurs modèles linéaires. Chacun d'eux est qualifié par un coefficient de détermination (r²). Pour accéder aux valeurs numériques élaborés par les modules de calcul, il faut utiliser la fonction 'LISTING '.

La figure ci-dessous présente un exemple de sortie imprimée.

| ETALONNAGE ess029 PO4 ************************************ | | | | | |
|--|------------------------------|------------------------------|-------------------------------|------------------------------|--------------------------------|
| des | Table étalons | Mod liné | dèle éaire | Modèle exponentiel | |
| U | Conc. | C.cal | delta | C.cal | delta |
| 247. 756. 1189. 1798. | 0.00 0.30 0.60 0.90 | 0.01 0.31 0.56 0.92 | 0.01 0.01 -0.04 0.02 | 0.00 0.29 0.55 0.92 | 0.00 -0.01 -0.05 0.02 |
| 2685. 3813. 4826. | 1.50 2.25 3.00 | 1.45 2.11 2.71 | -0.05 -0.14 -0.29 | 1.48 2.25 2.99 | -0.02 0.00 -0.01 |
| Seuil = | 0.95 | | | | |
| F = 0 | .000590 | | r ² | = 0.99558 | |
| F _{nl} = | 10.11 A = | 1790 | 00. r ² | = 0.99960 | |
| $C = F \cdot U$ $C = -F_{n1} \cdot \log_{e}(1 - U / A)$ Figure-12 Exemple de listing | | | | | |

IV.3.7 - La fonction 'ECHANTILLONS'

Cette phase du dépouillement d'un enregistrement consiste à créer une table des échantillons. Le processus de saisie des pics échantillons est semblable à celui qui a été mis en oeuvre lors de la détermination de la table des étalons. Celui-ci s'appuie sur l'utilisation de deux fenêtres auxiliaires. L'une d'elles contient l'agrandissement d'un intervalle de six minutes d'enregistrement, l'autre est réservée à l'affichage d'une liste des tensions des cycles les plus proches d'une position donnée. La table des échantillons peut être perçue comme un ensemble de triplets. La première composante est un libellé, la deuxième est la tension relative, la troisième sera la concentration déterminée dans la phase 'CALCULS'. Le libellé affecté à un échantillon est entré au clavier. Dans la version actuelle du programme ASTECH, il a été décidé que celui-ci serait un nombre entier. Le programme teste par conséquent que la chaîne introduite est bien représentative d'un entier naturel. Pour tout pic échantillon retenu le programme pose la question :

Libelle de cet echantillon ? ______

A l'instar des pics étalons, les cycles introduits dans la table des échantillons sont marqués (petit triangle plein de couleur vive) dans la fenêtre de visualisation. Ce marquage est maintenu tant que les échantillons sont définis. Leur nombre est limité à **100** dans cette version du programme.

La fonction 'ÉCHANTILLONS' est exécutable si et seulement si la ligne de base est déterminée. L'appel de cette fonction provoque une remise à zéro du compteur d'échantillons et une initialisation à faux du flag logique associé à l'existence de la table. Contrairement à la fonction 'ÉTALONS' la sortie de la commande 'ÉCHANTILLONS' n'est pas contrainte par un nombre minimum de pics sélectionnés.

IV.3.8 - La fonction 'CALCULS'

C'est le but ultime du programme ASTECH. A ce stade du traitement, deux possibilités sont offertes :

- déterminer les concentrations en appliquant le modèle calculé,
- requérir un autre modèle, dit de référence et procéder aux calculs.

L'exécution de la commande 'CALCULS' est uniquement contrainte par l'existence d'une table des échantillons. La détermination préalable d'un modèle n'est pas indispensable. Au cas où cette étape n'a pas été accomplie, l'opérateur devra obligatoirement entrer au clavier les valeurs des constantes qui définissent le modèle de référence. Dans le cas opposé, l'opérateur a le loisir de définir ou non ce modèle de référence.

Le modèle d'étalonnage retenu dans ASTECH est défini par les relations suivantes :

 $U \leq U_0$ $C = F \cdot U$

 $U > U_0$ $C = - Fnl \cdot log_{\theta} (1 - U / A)$

où U_0 représente le seuil de linéarité. La constante F est strictement positive. Si la partie linéaire du modèle doit impérativement exister, la valeur de Fnl peut être nulle. Dans ce cas particulier, la valeur de A est sans signification, ASTECH accepte une valeur nulle.

Si un modèle de référence est requis, la question suivante apparaît dans la zone de dialogue alphanumérique de l'interface :

` Modele : F, Seuil, Fnl, A ? _____`

Le programme ASTECH peut disposer à la fois du modèle calculé et d'un modèle de référence. Dans cette situation, il produit le tracé des graphes associés à ces deux relations dans une fenêtre auxiliaire et invite l'opérateur à choisir l'un d'eux pour estimer les concentrations.

Dans tous les cas, la détermination des constantes du calcul s'achève par l'entrée de la valeur de l'effet de sel

' Valeur de l'effet de sel ?

La valeur est exprimée dans l'unité retenue lors de la détermination des étalons. Les valeurs de F et de Fnl sont également dépendantes de ce choix d'unité. Cette concentration d'effet de sel traduit la différence entre la densité optique mesurée pour l'eau pure et celle obtenue pour de l'eau de mer exempte de sels nutritifs. Dans le processus de mesure, l'absorption de lumière est dûe, en majeure partie, à la coloration développée par la réaction entre le sel nutritif recherché et son réactif. Cependant, les autres constituants du mélange analysé ne peuvent être négligés. Cette absorption supplémentaire est quantifiée par une valeur de concentration qui sera déduite des valeurs calculées. Cette valeur corrective est supposée constante pour tous les échantillons.

Les valeurs calculées seront éditées en exécutant la fonction 'LISTING'. Dans l'exemple présenté ci-dessous, les pics étalons et échantillons sont presque confondus.

| | Figure-13 | Exemple | de table | e aes con | centratic | ons calcule | es |
|------------------------------------|--------------|---|-----------|-------------------|-----------|----------------|---------|
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| ETA | LONNAGE | ess02 | 29 PO4 | | | | |
| *** | ******** | ******* | ******* | ****** | | | |
| | Table | | Mod | èle | M | odèle | |
| | des étalons | | liné | linéaire | | nentiel | |
| | | _ | _ | | | | |
| | U | Conc. | C.cal | delta | C.cal | delta | |
| | | | | | | | |
| | 247. | 0.00 | 0.01 | 0.01 | 0.00 | 0.00 | |
| | 756. | 0.30 | 0.31 | 0.01 | 0.29 | -0.01 | |
| ì | 1189. | 0.60 | 0.56 | -0.04 | 0.55 | -0.05 | |
| • | 1798. | 0.90 | 0.92 | 0.02 | 0.92 | 0.02 | |
| | 2685 | 1 50 | 1 45 | -0.05 | 1 4 8 | -0.02 | |
| | 3813. | 2.25 | 2.11 | -0.14 | 2.25 | 0.00 | |
| | 4826. | 3.00 | 2.71 | -0.29 | 2.99 | -0.01 | |
| | | | | | | | |
| Sei | uil = 0.95 | | | | | | |
| | | | | 2 | | | |
| F = | = 0.0005 | 90 | | r² | = 0.9955 | 8 | |
| - | 10.1 | | 1 - 0 0 | · 2 | | • | |
| ^F n] | l = 10.1 | A = | 1790 | 0. r ² | = 0.9996 | 0 | |
| | | | | | | | |
| CON | JCENTRATIONS | CALCULEES | | ess()29 | PO4 | | |
| *** | ******** | ******** | ***** | ***** | ******* | * * | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | -11 | 1.5 | | | |
| Dei | rnier modele | experiment | tal calcu | le | | | |
| | F | r ² | Seuil | F . | ۵ | r ² | |
| | 1 | Ŧ | Dealt | 'nl | A | T | |
| | 0.000590 0. | 99558 | 0.95 | 10.11 | 17900. | 0,99960 | |
| | | ,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,, | 0.00 | 10011 | 1,200 | | |
| Mod | dèle utilisé | pour le ca | alcul des | concentr | ations | | |
| | | | | | | | |
| | F | | Seuil | Fnl | A | | Eff.sel |
| | | | | | 1 | | 0.45 |
| | 0.000590 | | 0.95 | 10.11 | 17900. | | 0.15 |
| Table des concentrations calculées | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | LID. | u u | Cor | | | | |
| | | | | | - | | |
| | 1 | 251. | 0.0 | 00 | | | |
| | 2 | 764. | 0.3 | 0 | | | |
| | 3 | 1197. | 0.5 | 6 | | | |
| | 4 | 1811. | 0.9 | 12 | | | |
| | 5 | 2095. | 2.4 | 3 | | | |
| | 7 | 4820. | 2.9 | 8 | | | |
| | | | | | / | | |
| | | | | / | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |

Les valeurs calculées seront éditées en exécutant la fonction 'LISTING'. Dans l'exemple présenté ci-dessous, les pics étalons et échantillons sont presque confondus.

Figure-13 Exemple de table des concentrations calculées

ETALONNAGE ess029 PO4 ****** Modèle Table Modèle linéaire exponentiel des étalons Conc. C.cal IJ delta C.cal delta 247.0.000.010.010.000.00756.0.300.310.010.29-0.011189.0.600.56-0.040.55-0.051798.0.900.920.020.920.02 1189. 1798. 2685.1.501.45-0.051.48-0.023813.2.252.11-0.142.250.004826.3.002.71-0.292.99-0.01 Seuil = 0.95 2 r = 0.99558F = 0.000590 10.11 A = 17900. 2 r = 0.99960 $F_{nl} =$ CONCENTRATIONS CALCULEES ess029 P04 Dernier modèle expérimental calculé F ² Seuil Fi A ² 0.000590 0.99558 0.95 10.11 17900. 0.99960 Modèle utilisé pour le calcul des concentrations F Seuil _{nl}F A · Eff.sel 0.95 10.11 17900. 0.000590 0.15 Table des concentrations calculées Lib. U Conc. 251. 1 0.00 2 764. 0.30 1197. 0.56 3 1811. 4 0.92 5 2695. 1.48 3806. 6 2.23 7 4820. 2.98

IV.3.9 - La fonction 'LISTING'

En "cliquant" sur cette commande, le programme ASTECH produit un état imprimé des valeurs stockées dans les tables associées aux étalons et aux échantillons. Les valeurs des constantes qui définissent le modèle d'étalonnage sont également éditées. La quantité d'information imprimée évolue en fonction de l'état d'avancement du traitement. Aux paragraphes précédents, les figures 12 et 13 présentent des exemples de sorties papier.

L'état complet est scindée en deux parties distinctes ; la première résume toutes les données afférentes à l'étalonnage, tandis que la seconde est consacrée aux valeurs des concentrations calculées.

• La section étalonnage :

Elle présente la table des standards et les valeurs des termes qui définissent le modèle calculé. Au cas où la fonction 'MODELES' a été correctement exécutée, le programme ASTECH calcule, pour chaque étalon, les valeurs ajustées de la concentration et les écarts à la valeur théorique. On constate que les lignes de cette table sont généralement séparées en deux groupes ; le premier d'entre eux correspond à l'ensemble des étalons de concentration inférieure ou égale au seuil de linéarité fixé. Chaque modèle est qualifié par un coefficient de détermination (r²).

• La section calcul :

Elle présente les valeurs des termes du dernier modèle calculé. Au-dessous, on remarque les valeurs qui déterminent la relation C = f(U) effectivement utilisée pour déterminer les concentrations. Ces valeurs peuvent être différentes des précédentes au cas où l'opérateur préfère utiliser un modèle de référence. Enfin la table des concentrations des échantillons est éditée.

La fonction 'LISTING' est toujours exécutable. Son comportement est modifié en fonction des opérations précédemment accomplies. L'algorithme est conçu pour éviter des éditions redondantes. Avant chaque sortie, l'opérateur est invité à vérifier que l'imprimante est accessible ; la zone de message de l'interface contient alors le libellé suivant :

```
' Verifier que l'imprimante est ON-LINE <CR> '
```

Le programme attend un <Retour Chariot> .

Dans la version Unix, l'impression des états est réalisée dans un fichier nommé 'PRN'. Ce fichier est détruit en début de traitement ,par la suite, chaque "clique" sur la commande 'LISTING' provoque son allongement. Pour compulser le contenu du fichier 'PRN' sans quitter l'application ASTECH, il faut prévoir une fenêtre 'cmdtool' supplémentaire. Celle-ci ne doit pas recouvrir la fenêtre principale de traitement. Au besoin, on utilisera la commande Unix 'cat PRN' pour lister le contenu du fichier. En "cliquant" sur les flèches ou sur les extrémités du câble de l'ascenseur associé à la fenêtre, on accèdera à la section de listing voulue.

IV.3.10 - La fonction 'DISQUE'

Les résultats élaborés au cours du traitement seront sauvegardés sur l'unité de disque courante par cette fonction. Le fichier est généré dans le répertoire courant. Son nom est construit automatiquement en associant le libellé de la station (six caractères au plus) mentionné lors de l'initialisation du programme, au rang du paramètre en cours de traitement. Par exemple, les valeurs calculées de phosphate (voie 1) de la station 'ess029 ' seront archivées dans le fichier ESS029.V1. C'est un fichier à accès séquentiel, son contenu est codé en ASCII. La figure ci-dessous décrit la présentation des données ; tous les champs ont une longueur de **10 caractères**.



Figure-14 Structure du fichier de sauvegarde des résultats

La fonction 'DISQUE' est exécutable uniquement si la table des échantillons est totalement déterminée.

Le contenu de ce fichier sera réutilisé par le programme ASTECH lors d'une exécution ultérieure sur le même jeu de données. Dans un tel cas, on remarque le tracé automatique de la ligne de base. A chaque exécution, ASTECH cherche à lire le fichier de sauvegarde. Au cas où cette tentative réussit, il récupère l'équation de la ligne de base et éventuellement les tables élaborées la fois précédente.

En étudiant le contenu du fichier de sauvegarde, on note que les deux tables contiennent une colonne dont il n'a pas encore été fait mention. Celle-ci est réservée au codage des dates relatives des pics. Cette information n'intervient pas dans la détermination des concentrations. L'archivage de ces dates est uniquement justifié par un mode particulier d'initialisation du programme. Pour lancer l'exécution du logiciel ASTECH, on frappe la commande suivante :

----> ASTECH [/r]

Si l'interrupteur /r est absent, le fonctionnement est conforme à l'ensemble des mécanismes décrits jusqu'à présent. Par contre si l'option /r est mentionnée sur la ligne de commande, le programme cherche à initialiser ses tables avec les valeurs élaborées lors d'une exécution précédente. Si cette tentative aboutit, on observe les marqueurs associés aux étalons et aux échantillons. Les modèles définis dans le fichier de sauvegarde sont <u>ignorés</u>. L'utilisateur poursuit son travail, soit en procédant à une nouvelle estimation des concentrations, soit en définissant de nouveaux points caractéristiques dans l'enregistrement.

IV.3.11 - La fonction 'FIN'

Elle permet de terminer correctement l'exécution du programme. Le système graphique est désactivé et fermé. Aucune sauvegarde n'est effectuée. Il appartient à l'opérateur de demander, au préalable, l'exécution de la commande 'DISQUE'. Un "clique" sur la commande 'FIN' provoque l'émission du message suivant :

' Fin du traitement, frapper <CR> '

Le programme en recevant cette validation enregistre l'intention de l'utilisateur mais ne se termine pas. Il faut immédiatement renouveler cette manoeuvre pour que l'exécution d'ASTECH soit définitivement interrompue. Cette répétition du processus de sortie est rendue volontairement désagréable pour que l'utilisateur ne regrette pas une sortie trop hâtive de l'application.

ANNEXE - A

L'installation du programme ASTECH

La disquette ASTECH contient une version exécutable du programme pour le système d'exploitation MS/DOS. Un jeu d'essai est proposé pour tester les fonctionnalités de l'application. A l'attention de ceux qui souhaiteraient adapter ce programme à des structures de données différentes, ou bien en faire une installation sous Unix, les codes sources sont fournis. Il appartient à l'utilisateur de se procurer la bibliothèque GKS.



[■] Figure-15 L'organisation de la disquette ASTECH

Dans le répertoire racine, le fichier LISEZMOI contient tous les détails qui n'ont pu être introduits dans ce document. Le volume est subdivisé en trois répertoires : PROG, SERVICES et SOURCES.

Le dossier PROG contient cinq fichiers : ASTECH.EXE, GKS.POL, GKS.ERR, ESS029.DON, ESS029.ENT. Le fichier GKS.POL décrit les polices de caractères de la bibliothèque GKS utilisée, et GKS.ERR contient les libellés des messages d'erreur. Les deux fichiers ESS029.DON et ESS029.ENT constituent le jeu d'essai. L'installation de l'application est très simple à réaliser. Il faut créer un répertoire dans le système de fichiers présent sur le disque dur du calculateur et y recopier les cinq fichiers du répertoire PROG. En principe l'application ASTECH est opérationnelle. Si celle-ci ne fonctionne pas correctement, notamment si le premier écran n'est pas convenablement présenté, il faut vérifier la configuration du système. La version MS/DOS nécessite impérativement que le driver ANSI.SYS soit disponible. Reportez-vous à votre manuel système si nécessaire.

Le répertoire SOURCES contient les codes FORTRAN-77 du logiciel. Le fichier ASTECH.FOR, le code du programme principal, est relativement volumineux. Son édition sur une imprimante représente un peu pus de 50 pages de 60 lignes. Une telle sortie sur papier peut s'avérer fort longue et pas toujours nécessaire. Le fichier ASTECH.MAT, listé dans l'annexe suivante, représente la table des matières du document ASTECH.FOR. Ce fichier sert à naviguer rapidement dans le code source. Il suffit d'utiliser la fonction de recherche d'une chaîne de caractères en lui soumettant la référence du chapitre ou du paragraphe désiré. Par exemple, pour accéder à la section de code 'Calcul du modèle linéaire', on recherchera la chaîne "X.3.3".

Pour installer l'application ASTECH sous Unix, on transfère l'ensemble des fichiers du répertoire SOURCES en n'oubliant pas de substituer au passage l'extension .FOR par le suffixe .f . Dans astech.f , quelques sections de code doivent être mises en commentaire et d'autres "décommentées". Le code source contient les indications à suivre.

Le répertoire SERVICES contient notamment des fichiers de commande de compilation et d'édition des liens. Ces procédures ne peuvent être que des exemples, elles sont bien évidemment dépendantes de l'organisation du système sur la machine hôte.



■ Figure-16 Écran d'initalisation

ANNEXE - B

L'algorithme du programme ASTECH

A l'instar d'un document, le texte source de l'application ASTECH est structuré de manière à faciliter la recherche d'une section particulière de code. Les fonctionnalités mises en oeuvre dans l'algorithme sont regroupées dans les chapitres 4 à 14. Chacune des 11 fonctions de base du logiciel est subdivisée en un certain nombres d'opérations plus élémentaires, les paragraphes.

ASTECH

Analyse du Signal TECHnicon

| ! A S T E C | н | Version 1.0, | avril 1992 ! |
|--|--|---|--------------|
| CHAPITRE I | DECLARATIONS | | |
| I.1 Dictionn I.2 Declarat I.3 Commons I.4 Constant | aire des variables ions es de l'interface graph | iques | |
| CHAPITRE II | INITIALISATIONS | | |
| II.1 Initial II.2 Initial II.3 Acces a II.3.1 Choix II.3.2 Lectu II.3.3 Affic II.3.4 Choix II.3.5 Lectu II.3.5 Defin II.3.5 Recup | isation des flags (bool isation des variables (nux resultats de l'acqui du fichier a depouille re des caracteristiques chage des | eens) numeriques) sition r de l'analyse es de l'analyse tte voie tie a ligne de base | TF |
| III.1 Acces III.1.1 Ouve III.1.2 Defi III.1.3 Defi III.2 Instal III.2.1 Marc III.2.2 Fene III.2.3 Trac III.2.4 Trac | au systeme GKS erture du systeme graphi inition du poste de trav inition de la fenetre du lation de la partie hau ges de la fenetre de vis etres boutons de reglage ce de la fenetre de visu ce des axes horizontaux | Eque (GKS) rail et activation a poste de travail ate de l'interface sualisation (trf. 2) ralisation (trf. 2) | 2) pornes |

III.2.6 Trace des boutons de reglage des bornes III.2.7 Trace des caracteristiques de l'enregistrement III.2.8 Trace des valeurs des bornes III.2.9 Trace de la limite inf. de la zone de visu. III.3 Installation de la partie basse de l'interface III.3.1 Definition des fonctions de l'application III.3.2 Visualisation de la palette de fonctions III.3.3 Definition de la zone de dialogue alphanumerique III.3.4 Trace de la limite de la zone de dialogue alpha. III.4 Preparation et mise en place du superviseur III.4.1 Priorites des transformations III.4.2 Choix d'une fonction III.4.3 Aiguillage vers les taches

CHAPITRE IV FONCTION BORNES

IV.1 Action (clique) sur un bouton ou dans la visu IV.1.1 Reglage de la tension maximum IV.1.2 Reglage de la tension minimum IV.1.3 Premiere section de l'enregistrement IV.1.4 Derniere section de l'enregistrement IV.1.5 Section suivante ou section precedente IV.1.6 Validation du jeu de bornes (trace)

CHAPITRE V FONCTION VUES

V.1 Mise a jour de l'heure relative de debut de la vue V.2 Trace de la vue (section de 30 ')

CHAPITRE VI FONCTION LIGNE DE BASE

VI.1 Definition et trace des fenetres de travail
VI.2 Choix d'une action 'ligne de base'
VI.3 Gestion des sous-fonctions 'ligne de base'
VI.3.1 Lancer la fonction bornes
VI.3.2 Definition d'un intervalle de 6 minutes
VI.3.3 Choix d'un point de la ligne de base
VI.3.4 Calcul des coefficients de la droite

CHAPITRE VII TRACE D'UNE GRILLE

VII.1 Choix d'un point de reference VII.2 Mise a jour de la fenetre de visualisation

CHAPITRE VIII DEFINITION DES ETALONS

VIII.1 Definition et trace des fenetres de travail VIII.2 Choix d'une action 'etalons' VIII.3 Gestion des sous-fonctions 'etalon' VIII.3.1 Lancer la fonction bornes VIII.3.2 Definition d'un intervalle de 6 minutes VIII.3.3 Choix d'un pic etalon et affectation d'une concentration VIII.3.4 Sortie de la fonction etalon

CHAPITRE IX DEFINITION DES ECHANTILLONS

IX.1 Definition et trace des fenetres de travail IX.2 Choix d'une action 'echantillon' IX.3 Gestion des sous-fonctions 'echantillon' IX.3.1 Lancer la fonction bornes IX.3.2 Definition d'un intervalle de 6 minutes IX.3.3 Choix d'un pic echantillon et affectation d'un libelle IX.3.4 Sortie de la fonction etalon CHAPITRE X DETERMINATION DES MODELES

X.1 Definition et trace des fenetres de travail X.2 Tri et trace des etalons X.3 Determine le(s) modele(s) X.3.1 Entree de la valeur du seuil de linearite X.3.2 Selection des etalons pour modele lineaire X.3.3 Calcul modele lineaire X.3.4 Calcul modele exponentiel X.4 Choix d'une action 'modele' X.5 Gestion des sous-fonctions 'modele' X.5.1 Trace des points etalons X.5.2 Trace de la droite de regression X.5.3 Trace de la fct exponentielle X.5.4 Sortie de la fonction 'modele'

CHAPITRE XI CALCUL DES CONCENTRATIONS

XI.1 Introduction XI.2 Entree d'un modele de reference (externe) XI.3 Entree de la valeur de l'effet de sel XI.4 Cas de deux modeles, comparaison et choix XI.4.1 Visualisation des deux modeles XI.4.2 Choix visuel (interactif) d'un modele XI.4.3 Effacement de la zone de travail 'modele' XI.5 Calcul des concentrations XI.5.1 Concentrations avec le modele experimental XI.5.2 Concentrations avec le modele de reference CHAPITRE XII LISTING

XII.1 Ouverture du fichier d'impression XII.2 Impression du bilan 'etalonnage' XII.3 Impression des valeurs des concentrations XII.4 Fermeture fichier impression CHAPITRE XIII SORTIE SUR DISQUE

CHAPITRE XIV E X I T

ANNEXE - C

Les fichiers issus de l'acquisition

Les fichiers, admis en entrée dans le programme ASTECH, proviennent du module d'acquisition ACQUIS. Ce programme a été développé à Brest en 1988 par l'IFREMER et l'UBO. Le programme a été écrit à l'époque en GW-BASIC. Nous avons adapté le code original, d'une part pour tenir compte du contexte présent et, d'autre part pour produire un module directement exécutable. Nous avons utilisé le compilateur QuickBASIC de Microsoft[®] dans sa version 4.50. Pour une analyse, on obtient deux fichiers :

le fichier entête libellé xxxxx.ent le fichier des mesures nommé xxxxx.don

où la chaîne de 6 caractères "xxxxxx" identifie le jeu d'échantillons analysés.

Le fichier entête :

C'est un fichier de type texte. Il peut être, par conséquent, listé à l'écran ou imprimé. L'analyste définit en partie son contenu en initialisant sa manipulation. Le programme ACQUIS y introduit automatiquement la durée de l'acquisition. Dans l'ordre des enregistrements on trouve les informations suivantes :

le nombre de voies traitées simultanément, le libellé des paramètres et la période d'échantillonnage, la durée de l'acquisition exprimée en heures, minutes, secondes, la date de début de l'analyse, la température du laboratoire.

Pour plus de détails sur les formats de codage de ces informations, vous pouvez vous reporter à la section "II.3.2" dans le source ASTECH.FOR.

Le fichier des mesures :

C'est un fichier à accès direct. Son contenu est codé en binaire. Chaque valeur de tension est un nombre entier représenté sur 16 bits. Le programme d'acquisition génère un enregistrement par seconde. La longueur de cet enregistrement dépend du nombre de voies analysées, au maximum six. La taille du "record" est, par conséquent, comprise entre deux et douze octets. L'ordre des libellés des paramètres dans le fichier xxxxx.ent définit celui des variables dans l'enregistrement.

ASTECH, dans la version actuelle, est limité au traitement d'un enregistrement de six heures au plus ; soit un maximum de 21600 cycles. Afin de réduire le temps de lecture, lequel peut s'avérer fort long si les cycles sont accédés un à un, ASTECH met en oeuvre une méthode d'accès "bufferisée" aux données. La taille du tampon, 5760 octets, a été judicieusement choisie, afin que celui-ci contienne un nombre entier de cycles, quel que soit le nombre de voies. Pour tous les détails de mise en oeuvre sous FORTRAN-77, se reporter au fichier ASTECH.FOR à la section "II.3.5".

Atelier de reprographie IFREMER - Centre de Brest B.P. 70 - 29280 PLOUZANE Tél. : 98. 22. 40. 40. .'

.

- OCTOBRE 1992 -

,