

50376
1989
313-2

50376
1989
313-2

n° d'ordre : 422

THESE

présentée à

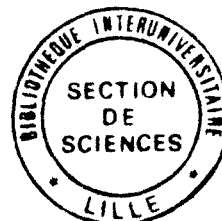
**L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES
DE LILLE - FLANDRES - ARTOIS**

pour obtenir le titre de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITE EN GEOLOGIE APPLIQUEE
(GEOLOGIE PHYSIQUE)**

par

Frédéric DELAY



**LE MASSIF NORD-PYRENEEN DE L'AGLY
(Pyrénées Orientales)**

**EVOLUTION TECTONO-METAMORPHIQUE ET
EXEMPLE D'UN AMINCISSEMENT CRUSTAL
POLYPHASE**

(VOLUME II: INFORMATISATION DU TRAITEMENT DES DONNEES)

Soutenue le 26 Octobre 1989 devant la commission d'examen:

Président:

J. Paquet

Rapporteurs:

J. Fabries

J.L. Bouchez

Examineurs:

P. Choukroune

C. Lefèvre





**CHAPITRE I: PRESENTATION, ANALYSE
CONCEPTUELLE DU LOGICIEL DE
TRAITEMENT DES ANALYSES A LA
MICROSONDE**

I- Présentation, généralités.

La nécessité de développer un logiciel complet de traitement des analyses par microsonde est venue du nombre de données à traiter afin de cerner les conditions générales de métamorphisme des faciès profonds du massif de l'Agly (Pyrénées Orientales). Pour que ce travail et la méthodologie adoptée puissent être réutilisés, il fallait éviter de présenter l'ensemble sous la forme de simples éditions des programmes de calcul. Cette remarque est d'autant plus justifiée que très souvent, lorsque l'on veut reprendre des travaux de ce type, l'auteur des programmes s'est contenté de développer un outil qui n'est utilisé que par lui et qui d'ailleurs n'est compréhensible que par lui à cause du manque de structuration que présentent les développements. Les simples éditions de programmes présentent aussi l'inconvénient majeur d'être dédiés à un langage particulier qui n'est pas forcément celui prisé par un utilisateur autre que le concepteur.

Bien évidemment le logiciel n'a pas la prétention de répondre à tous les traitements envisageables sur les données analytiques obtenues par la microsonde. En fait il répond aux applications qui sont nécessaires à l'étude thermobarométrique de faciès profonds. De par sa nature évolutive, le système de traitement doit être bâti sur une architecture ouverte et facilement accessible à d'autres personnes que le concepteur. Sachant cela, il faut s'attacher à respecter l'utilisateur concernant, par exemple, la convivialité des applications, mais aussi à préserver les cellules grises de la personne assurant la maintenance en évitant les astuces de programmation et en répondant plutôt à une méthode structurée d'analyses de projets type MERISE ou AXIAL. Les applications sont donc de véritables modules gérés par des menus et faisant référence à une base de données regroupant:

- les analyses quantitatives en masse d'oxydes de la microsonde;
- les formules structurales de chaque minéral analysé.

L'étude qui va suivre a été conçue comme un véritable dossier de programmation ce qui permet deux types d'implantations:

- soit une programmation complète par l'intermédiaire de langages de développement interprétés ou compilés
- soit une implantation à partir de progiciels de base de données dans lesquels on créera son propre système de traitement.

Les nouvelles méthodes de présentation utilisées par la plupart des services de traitement de l'information sont de type "descendantes", où le logiciel est abordé successivement sous trois aspects:

- l'analyse conceptuelle;
- l'analyse fonctionnelle;
- l'analyse organique.

Rappelons que l'analyse conceptuelle définit les orientations que devra prendre l'application en définissant les grands groupes de traitements que l'utilisateur est en droit d'attendre de son produit.

l'analyse fonctionnelle définit les objets manipulés (données, résultats,...) par l'application afin qu'elle réponde

aux besoins de l'utilisateur. Elle met en avant les modalités d'utilisation du logiciel: masques de saisies à l'écran, contrôle des erreurs, formes de sortie des résultats (tableaux, listes, graphiques...) ainsi que les éléments nécessaires leur sauvegarde en vue d'une exploitation différée.

Enfin l'analyse organique intéresse tout particulièrement le programmeur qui devra donner des noms, des définitions mais aussi des structures aux objets que l'analyse fonctionnelle a proposés. C'est dans cette analyse organique qu'interviennent deux types d'algorithmie:

- celle liée aux calculs destinés à l'obtention des résultats;
- l'algorithmie générale relative au fonctionnement du programme; en d'autres termes: la logique que doit suivre le calculateur afin qu'il puisse mener à bien et dans le bon ordre les travaux qui lui sont confiés.

Par vocation, l'analyse organique est partiellement liée au matériel mais aussi au langage utilisé. Cependant, si les étapes antérieures de l'étude sont correctement menées, cette dépendance est restreinte et ne doit pas conditionner l'établissement des éléments tels que les tableaux de préparation de données, les tableaux de préparation des résultats et enfin les arbres programmatiques, c'est-à-dire les graphiques standardisés de mise en forme de l'algorithmie générale d'un programme.

II- Aspect conceptuel de l'application.

Cette analyse est essentiellement présentée sous forme de graphiques qui exposent le découpage du logiciel en modules cohérents et les relations de dépendance entre ces différents modules. L'application est couronnée par un menu général (non présenté) dont le but est de subdiviser le logiciel en quatre sous-systèmes :

- le développement d'un fichier d'analyses;
- les calculs de formules structurales et les traitements de base des analyses;
- les calculs thermobarométriques à partir des analyses et des formules structurales;
- enfin, les fonctions utilitaires.

Chacun de ces sous-systèmes est géré par un menu d'application dont nous allons passer en revue les dépendances hiérarchiques.

1- Le menu dédié au développement du fichier d'analyses: Menu-A.

Ce programme (fig. 1) dirige les fonctions logicielles liées au développement d'un fichier d'analyses. L'acquisition automatique des données analytiques sur l'organe de sortie de la microsonde est représentée par l'unité fonctionnelle Charg-01. Elle est dégagée de la dépendance du Menu-A car elle correspond à des processus d'échanges entre calculateurs sur lesquels nous reviendrons en abordant les fonctions utilitaires. Cinq options gérées par Menu-A sont définies:

- Charg-02: acquisition manuelle des analyses chimiques et chargement de ces informations dans la base de données;
- Modif-A: modification d'analyses erronées inscrites dans la base de données;
- Ecran-I: visualisation à l'écran de l'index repérant les analyses dans la base des données;

- Liste-I: édition de tout ou partie de cet index par l'imprimante;
- Retour Système: module permettant d'échapper au contrôle de Menu-A et de se positionner à l'échelon hiérarchique supérieur.

Chaque option appelée par le menu peut boucler sur elle même, le contrôle de la relance étant laissé au libre choix de l'opérateur. L'organisation hiérarchisée rend systématiquement la main au gestionnaire Menu-A lorsqu'une application est désactivée.

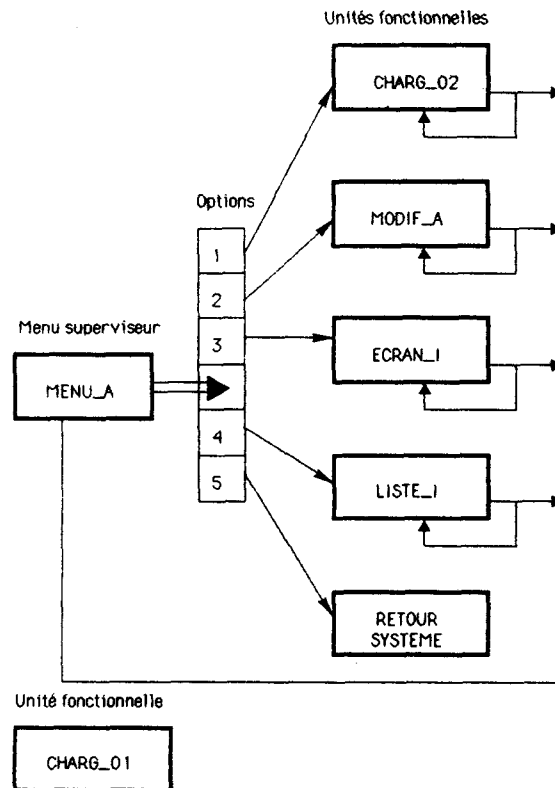


Fig. 1: Architecture d'organisation des fonctions logicielles liées au développement d'un fichier d'analyses CAMEBAX

2- Le menu dédié aux calculs de formules structurales et aux traitements de base: Menu-M.

Les fonctions logicielles gérées sont, cette fois, dédiées aux calculs de routine sur les analyses (fig.2). Les relations de dépendances entre applications sont du même type que celles exposées à propos des fonctions gérées par Menu-A. On disposera de:

- Struct-M, chargée de calculer les formules structurales des minéraux analysés. L'unité intègre les résultats dans la base de données, permet l'édition et la correction de ces formules;
- Ecran-F: cette unité offre une visualisation à l'écran de l'index repérant les formules structurales dans la base de données;
- Liste-F: fournit une édition complète ou non de l'index précité par l'imprimante.

- ACF-AKF: constitue un des premiers traitements de base des analyses de minéraux de niveaux métamorphiques, c'est-à-dire, une double représentation triangulaire des analyses en fonction des fractions molaires en Al_2O_3 , Fe_2O_3 , K_2O , Na_2O , CaO , FeO , MgO , MnO .

- AFM-A'FM: réalise les projections triangulaires de Thompson (1957) des minéraux ferro-magnésiens.

Des utilitaires graphiques de représentation en coordonnées rectangulaires et triangulaires sont ajoutées aux unités précédentes. Ces fonctions : Graph-R, Graph-T sont supervisées par un sous menu: Menu-G. Notons que l'utilisation de fonctions graphiques sur les calculateurs impose très souvent l'initialisation des organes de restitutions: écran, imprimante, traceur. Ce rôle est alloué aux fonctions Init-graphic pour l'utilisation en mode graphique et Mode-Txt pour le retour à une utilisation standard. Sur la figure 2, l'encadrement en pointillé de ces deux fonctions indique que les opérations sont transparentes pour l'utilisateur.

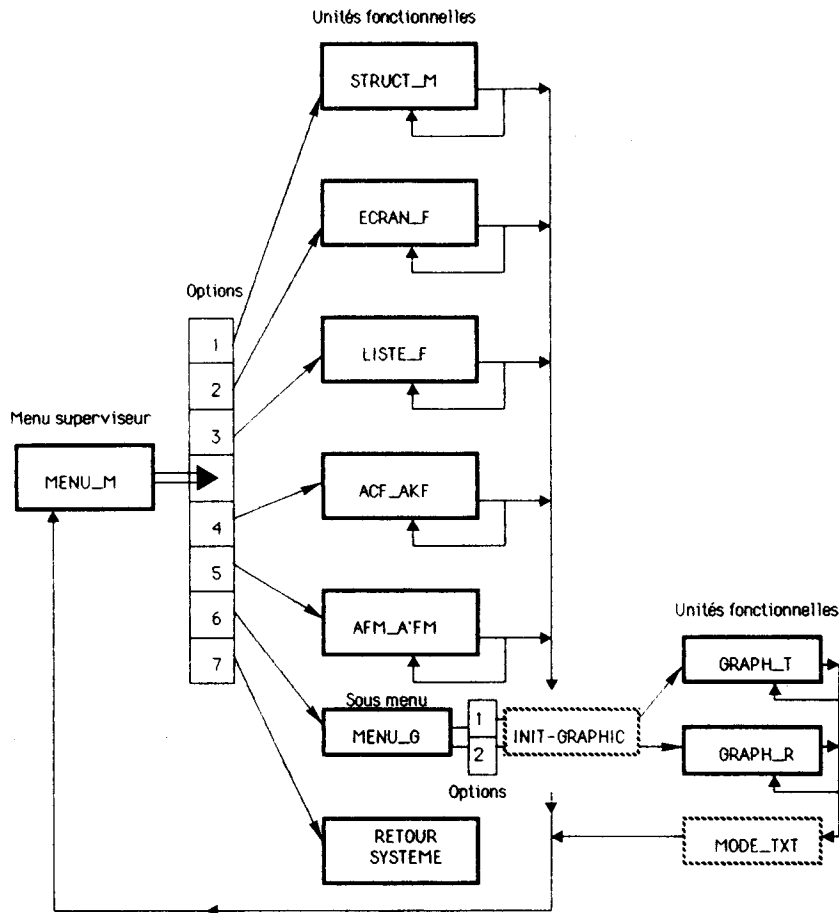


Fig. 2: Architecture d'organisation des fonctions logicielles liées au développement d'un fichier de formules structurale et aux calculs de base sur les analyses CAMEBAX

3- Le menu dédié aux calculs thermobarométriques: Menu-PT.

Ce menu supervise toutes les applications qui intéressent les estimations thermobarométriques sur les équilibres chimiques entre phases dans les roches métamorphiques. Bien évidemment, la liste des calculs proposés n'est pas exhaustive et ne reprend que les besoins suscités par l'étude des faciès métamorphiques profonds du

massif de l'Agly. Les fonctions proposées sont les suivantes (fig. 3):

- Therm-Al: réalisera les calculs thermométriques sur les associations [grenat - cordiérite] et [grenat - biotite];
- PT-Ga-Cd: renvoie les estimations thermobarométriques calibrées sur le couple [grenat - cordiérite];
- T-Op-Cp: fournit les estimations thermiques sur l'équilibre [ortho - clinopyroxène];
- P-G-Py-P: intègre les calibrations barométriques sur l'association [grenat - orthopyroxène - plagioclase - quartz];
- P-Ga-Pl : estime les pressions d'équilibre de l'association [grenat - plagioclase - silicate d'alumine (Al_2SiO_5)].

Chaque unité fonctionnelle peut se relancer d'elle même en fonction du souhait de l'utilisateur. En fin de session de travail, le contrôle est rendu à Menu-PT ou replacé au niveau supérieur à savoir, le système d'exploitation du calculateur.

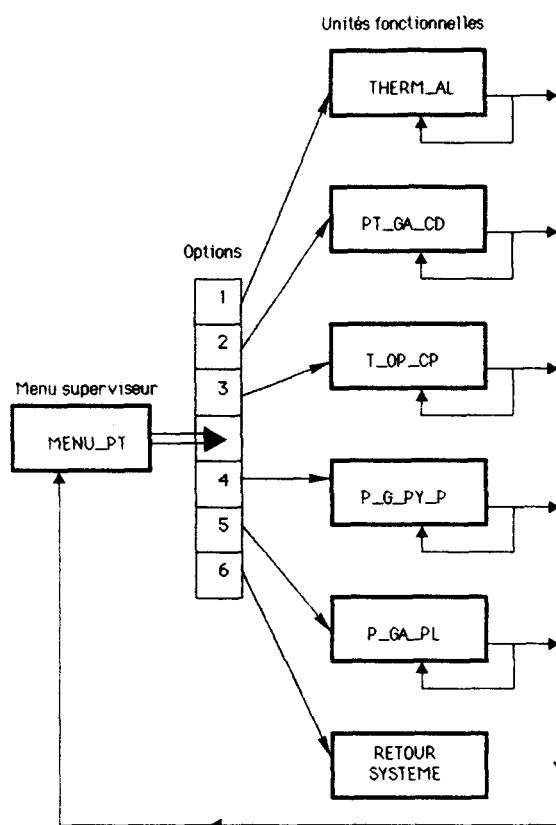


Fig. 3: Architecture d'organisation des fonctions logicielles attribuées aux calculs thermobarométriques sur équilibres minéraux

4- Menu dédié aux fonctions utilitaires: Menu-O.

La conception du logiciel distingue deux types d'utilitaires:

- les fonctions associées au traitement des analyses: modifications d'index dans la base des données, éditions différées de résultats, tri d'index:

- Les fonctions de transfert qui permettent de transporter la base de données et les résultats d'un calculateur à un autre.

La figure 4 présente l'organisation hiérarchique de ces diverses unités. Le groupe d'utilitaires assistant le traitement des analyses, est directement géré par Menu-O :

- Outil-01, Outil-02 interviennent dans la modification des index;
- Outil-03, 04, 05, 06 proposent les éditions différées des fichiers de résultats issus respectivement des applications ACF-AKF, AFM-A'FM, Therm-AI, T-Op-Cp;
- Outil-07 trie par ordre croissant des index de la base de données.

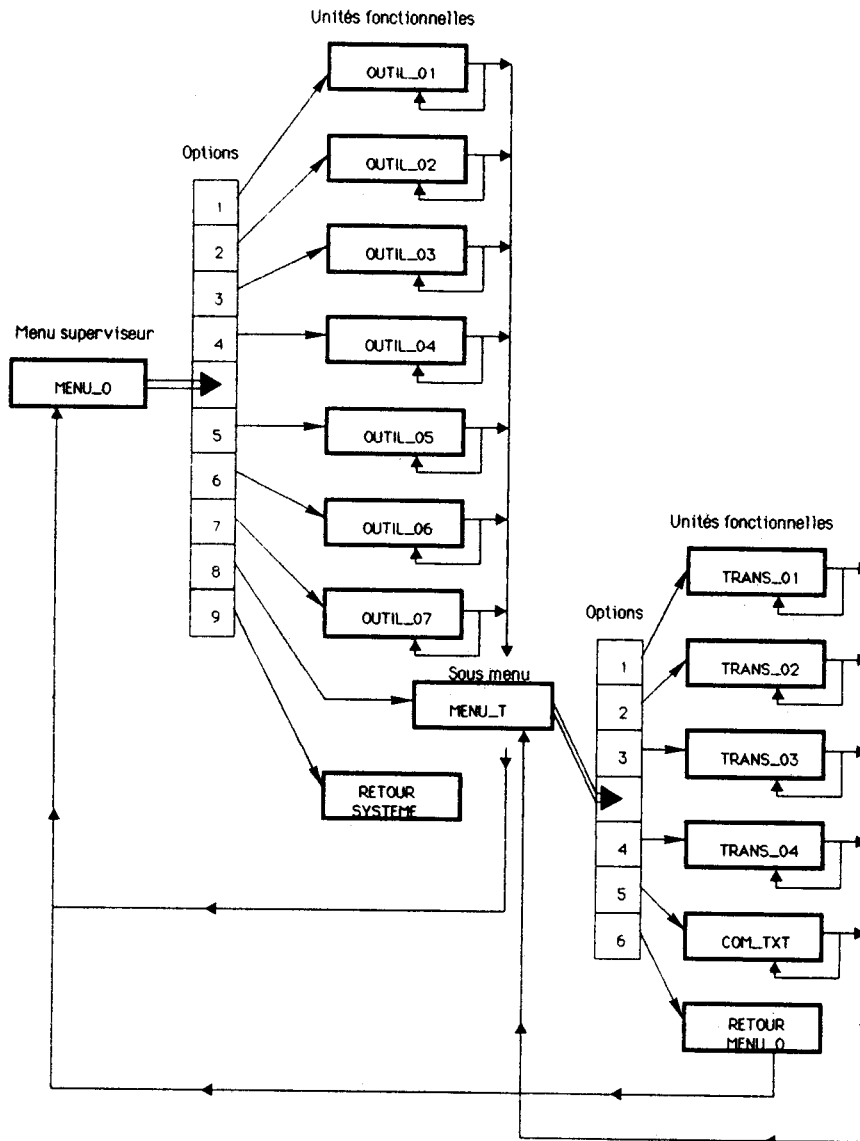


Fig. 4: Architecture d'organisation des fonctions utilitaires associées aux applications du logiciel de traitement des analyses CAMEBAX

Les utilitaires de transfert sont contrôlés en accès par le sous menu Menu-T, lui même activé dans l'option n° 8 de Menu-O. Sur la plupart des calculateurs, les langages de programmation donnent un format spécifique aux fichiers de valeurs numériques, les données inscrites sont dites compactées. Ce format diffère d'un

compilateur à l'autre voire d'une machine à l'autre. Seuls les fichiers de caractères ASCII peuvent s'échanger sans grande difficulté. Le rôle des outils de transfert sera de décompacter les données numériques, c'est-à-dire de les transformer en texte ASCII. Ensuite un programme transférera le texte d'un calculateur à l'autre et enfin, les fichiers textes seront à nouveau compactés pour fournir des valeurs numériques utilisables:

- Trans-01 décompacte les valeurs numériques du fichier des analyses chimiques et de son index;
- Trans-02 assure le passage texte ASCII - mode compacté pour les analyses et l'index associé;
- Trans-03 décompacte les informations du fichier des formules structurales et de l'index associé;
- Trans-04 assure le passage texte ASCII - données compactées des formules structurales et de l'index associé;
- Com-txt s'occupe du transfert par câble de fichiers ASCII entre deux calculateurs.

La gestion par Menu-O ou Menu-T de l'ensemble des outils reste comparable à celle des structures précédemment décrites. Chaque fonction peut boucler sur elle même son exécution, revenir au contrôle du menu ou encore accéder directement au système d'exploitation du calculateur.

**CHAPITRE II: ASPECT FONCTIONNEL DU
LOGICIEL**

I- Remarques préliminaires

Dans la mesure où le logiciel peut intéresser des personnes non rompues à l'utilisation de calculateurs, il faut absolument que l'ensemble reste le plus convivial possible, tout en introduisant des contrôles à l'entrée des données. En particulier lors des accès aux modules de traitement, ou au cours d'une introduction de paramètres dans une formule de calcul, il faut que l'utilisateur soit rejeté si les variables entrées ne correspondent pas à ce qu'attend l'application. Il faudra alors différer le traitement et inviter l'opérateur à reprendre la saisie.

Nous orienterons essentiellement la présentation de l'analyse fonctionnelle sur la manière dont se déroule, à l'écran ou sur imprimante, l'opération lancée par l'utilisateur. Il est vrai que ce principe constitue un raccourci de ce que représente une analyse fonctionnelle complète, mais il a l'avantage de donner très rapidement toutes les clefs nécessaires à l'utilisation judicieuse de l'application, et ce que l'on peut en attendre.

Sur toutes les figures, masques de saisie, éditions à l'écran, éditions par imprimante, les variables, les données et les résultats utiliseront la symbolique suivante:

- £ pour un caractère numérique;
- \$ pour un caractère alpha-numérique;
- une représentation des nombres réels où, par exemple, £££.££ signifie que la valeur est définie sur 5 chiffres dont 2 après le point décimal;
- enfin, tous les champs entre [] constituent soit des saisies optionnelles, soit les messages d'erreur suite à une manipulation ou une saisie erronée.

II- La grille de visualisation des menus de gestion du logiciel.

Les masques de saisie des options accessibles sont tous construits sur le même modèle et sont regroupés sur les figures 5 et 6. Au démarrage l'utilisateur aura toujours devant lui les propositions du menu de supervision. Dès qu'une option est choisie, la grille est remplacée par celle du menu d'application faisant elle-même état des services proposés:

- Menu-A: accès aux fonctions d'entrée, de consultation, de modification des analyses de microsonde (fig. 5);
- Menu-M: accès aux fonctions de calculs de base sur les phases minérales analysées, formules structurales et représentations triangulaires. Il existe un sous-menu, Menu-G, gérant l'accès à 2 utilitaires graphiques (fig. 5);
- Menu-PT: accès aux fonctions de calculs thermobarométriques sur les équilibres entre phases minérales (fig. 5);
- Menu-O: accès aux utilitaires de l'ensemble de l'application. Le sous-menu Menu-T est chargé de la gestion des outils de transformation de fichiers en vue du transfert de la base de données entre calculateurs (fig. 6).

PRESENTATION DES POSSIBILITES DE TRAVAIL SUR LE LOGICIEL CAMEBAX. (menu activé: MENU_SUPERVISEUR)	
Accès aux fonctions d'entrée, consultation, modification des analyses CAMEBAX	--> Option n°1
Calculs de base sur les phases analysées (formules structurales, représentations triangulaires), Utilitaires graphiques.	-> Option n°2
Calculs thermodynamiques sur les équilibres entre phases minérales: détermination des grandeurs pression, température	-> Option n°3
Utilitaires des options précédentes Transformations et transferts de fichiers	-> Option n°4
Sortie du logiciel: Retour système d'exploitation	--> Option n°5
ENTREZ L' OPTION CHOISIE (1/2/3/4/5): \$ [Erreur de saisie: Entrez à nouveau l' option (1/2/3/4/5): \$]	

ENTREE, CONSULTATION, MODIFICATION D'ANALYSES AU FICHIER CAMEBAX (Menu activé: MENU_A).	
Entrée au clavier d'analyses sur le fichier.	--> Option n°1
Consultation, modification des analyses du fichier	--> Option n°2
Edition à l'écran de l'ensemble de l'index associé au fichier analyses	--> Option n°3
Edition sur imprimante de l'index, borné par 2 n° d'analyses	--> Option n°4
(Chargement direct des analyses au fichier par interface avec le PDP11 de la sonde: faire retour système et lancer charg_01)	
Sortie du logiciel: Retour au système	--> Option n°5
ENTREZ L' OPTION CHOISIE (1/2/3/4/5): \$ [Erreur de saisie: Entrez à nouveau l'option (1/2/3/4/5): \$]	

TRAITEMENT DES ANALYSES CAMEBAX FORMULES STRUCTURALES REPRESENTATIONS TRIANGULAIRES (menu activé: MENU_M)	
Calcul et consultation des formules structurales sur fichier FO_STR	-> Option n°1
Edition complète sur écran de l'index associé au fichier formules structurales	-> Option n°2
Edition sur imprimante de l'index borné par 2 n° d'analyses	-> Option n°3
Calcul des coordonnées triangulaires dans les représentations ACF, AKF, A'KF	-> Option n°4
Calcul des coordonnées triangulaires dans les représentations AFM, A'FM	-> Option n°5
Accès aux outils graphiques sur traceur représentations triangulaires, rectangulaires	-> Option n°6
Sortie du logiciel: Retour au système	-> Option n°7
ENTREZ L' OPTION CHOISIE (1/2/3/4/5/6/7): \$ [Erreur de saisie: Entrez l' option (1/2/3/4/5/6/7): \$]	

CALCULS THERMODYNAMIQUES ETABLISSEMENT DES VALEURS P,T SUR EQUILIBRES DE PHASES MINERALES (Menu activé: MENU_PT)	
Calcul de T sur équilibres grenat/cordiérite, grenat/biotite calibrations Thompson, Holdaway & Lee, Ferry & Spear	--> Option n°1
Calcul de P,T sur équilibre grenat/cordiérite, calibrations Currie, Hensen & Green, Hutcheon et al., Newton & Wood, Thompson, Holdaway & Lee, Martignole & Sisi, Lonker	--> Option n°2
Calcul de T sur équilibre ortho/cinopyroxène, calibrations Ghent, Wood & Banno	--> Option n°3
Calcul de P sur équilibre grenat/pyroxène/plagioclase calibrations Newton & Perkins, Bohlen et al.	--> Option n°4
Calcul de P sur équilibre grenat/plagioclase/Al ₂ SiO ₅ calibrations Ghent, Newton & Haseilton	-> Option n°5
Sortie du logiciel: Retour système	-> Option n°6
ENTREZ L' OPTION CHOISIE (1/2/3/4/5/6): \$ [Erreur de saisie: Entrez l' option (1/2/3/4/5/6): \$]	

UTILITAIRES GRAPHIQUES RESTITUTION SUR TRACEUR (Menu activé: MENU_G (sous menu de MENU_M))	
Tracé de points en coordonnées triangulaires: représentations ternaires quelconques représentations ACF, AKF, A'KF, AFM, A'FM	-> Option n°1
Tracé de points et courbes en coordonnées cartésiennes	-> Option n°2
Retour au menu supérieur: MENU_M	-> Option n°3
ENTREZ L' OPTION CHOISIE (1/2/3): \$ [Erreur de saisie: Entrez (1/2/3): \$]	

Fig. 5: Masques de saisie des menus: MENU-SUPERVISEUR, MENU-A, MENU-M, MENU-PT

UTILITAIRES ET ACCES AUX TRANSFORMATIONS ET TRANSFERTS DES FICHIERS ANALYSES (ANA_CBX), FORMULES STRUCTURALES (FO_STR) (Menu activé: MENU_O)	
Modification directe des champs du fichier Index_A (Index associé au fichier des analyses)	--> Option n°1
Modification directe des champs du fichier Index_F (Index associé au fichier des formules structurales)	--> Option n°2
Edition sur imprimante par n° d'échantillon du fichier ACF (résultats de l'application ACF_AKF (option 4 de menu_m))	--> Option n°3
Edition sur imprimante par n° d'échantillon du fichier AFM (résultats de l'application AFM_AFM (option 5 de menu_m))	--> Option n°4
Edition sur imprimante par n° d'échantillon du fichier GA_CD_BI (résultats de l'application THERM_AL (option 1 de menu_pt))	--> Option n°5
Edition sur imprimante par n° d'échantillon du fichier OPX_CPX (résultats de l'application T_OP_CP (option 3 de menu_pt))	--> Option n°6
Tri par valeurs croissantes du n° d'échantillon des fichiers Index_A, Index_F	--> Option n°7
Accès aux outils de transformations et transferts de fichiers	--> Option n°8
Sortie du logiciel: Retour au système	--> Option n°9
ENTREZ L' OPTION CHOISIE (1/2/3/4/5/6/7/8/9): \$ [Erreur de saisie: Entrez l'option (1/2/3/4/5/6/7/8/9): \$]	

UTILITAIRES DE TRANSFORMATIONS ET TRANSFERTS DES FICHIERS ANALYSES (ANA_CBX) FORMULES STRUCTURALES (FO_STR) ET DE LEURS INDEX (Menu activé: MENU_T (sous menu de MENU_O))	
Transformation du fichier analyses (ANA_CBX) et de son index (Index A) en texte ASCII	--> Option n°1
Restitution, à partir du texte ASCII, des fichiers ANA_CBX et Index A	--> Option n°2
Transformation du fichier formules structurales (FO_STR) et de son index (Index F) en texte ASCII	--> Option n°3
Restitution, à partir du texte ASCII, des fichiers FO_STR et Index F	--> Option n°4
Communication de fichiers textes depuis un calculateur quelconque vers un compatible PC	--> Option n°5
Retour au menu supérieur MENU_O	--> Option n°6
ENTREZ L' OPTION CHOISIE (1/2/3/4/5/6) : \$ [Erreur de saisie: Entrez l'option (1/2/3/4/5/6): \$]	

Fig. 6: Masques de saisie du menu : MENU-O

III- Le unités gérées par Menu-A.

Comme nous avons pu le voir dans l'analyse conceptuelle et sur le masque de saisie de Menu-A (fig. 5), l'unité fonctionnelle charg-01 a une place particulière dans ce sous-ensemble. Son aspect fonctionnel sera étudié avec celui des utilitaires de transfert.

1- Unité fonctionnelle Charg-02.

L'unité va créer le premier fichier majeur de la base de données: le fichier des analyses. Elle contrôle l'entrée par clavier des analyses et, de manière transparente pour l'utilisateur, générera un index dont la clef sera le numéro de l'analyse. Notons que ce numéro devra toujours être défini sur sept caractères avec le format suivant:

- les deux premiers caractères correspondent à l'année;
- le troisième caractère: - (tiret);
- le quatrième caractère est numéro de série dans l'année: une lettre majuscule;
- les trois derniers caractères: numéro de l'analyse dans la série: trois chiffres.

L'utilisateur pourra choisir entre la création d'un fichier d'analyses vierge ou l'ajout d'analyses en fin d'un fichier préexistant. Ensuite, en suivant le masque de saisie (A, fig. 7), il entrera le numéro d'échantillon, le numéro d'analyse, le nombre d'oxygènes de la formule structurale du minéral, puis les proportions d'oxydes (12 majeurs de la microanalyse). Ces opérations seront répétées autant de fois qu'on le souhaite (B, fig. 7)

A

ENTREE D'ANALYSES CAMEBAX SUR FICHER (ANA_CBX)
(Application activée: CHARG_02)

Conception et réalisation: Frédéric Delay

GEOL. PHYSIQUE, bât. SN 5, tél (20 43 41 51)
(20 43 41 60)
Université des Sciences et Techniques de Lille 1
59655 Villeneuve d'Ascq cedex

Option n° 1 Entrée des analyses sur un fichier vierge
Option n°2 Entrée des analyses en fin de fichier préexistant
ENTREZ VOTRE CHOIX (1/2): \$
[Erreur de saisie! Entrez (1/2): \$]

Entrez le n° de lame ou d'échantillon: \$\$\$\$\$\$\$\$

Format du n° d'analyse 2 chiffres année

1 majuscule n° de série
3 chiffres n° analyse dans la série
ex: 87-G024

Entrez le n° d'analyse: \$\$\$\$\$\$

Entrez le nom du minéral analysé: \$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

NOMBRE D'OXYGENES DE LA FORMULE

Olivine: 4	Pyroxène: 6	Zoisite: 12,5
Sphène: 16	Cordiérite: 18	Wollastonite: 18
Mica: 22	Amphibole: 23	Grenat: 24
Chlorite: 28	Feldspath: 32	Staurotide: 48
Scapolite: 0		

Entrez le nombre d'oxygènes voulu: EE.E

B

ENTREE DES PROPORTIONS EN POIDS D'OXYDES (%)

Na2O= EEE.EE	K2O= EEE.EE
MnO= EEE.EE	MgO= EEE.EE
Al2O3= EEE.EE	SiO2= EEE.EE
FeO= EEE.EE	NiO= EEE.EE
ZnO= EEE.EE	CaO= EEE.EE
TiO2= EEE.EE	Cr2O3= EEE.EE
H2O= EEE.EE	Total= EEE.EE

Saisie des valeurs numériques correctes ? (o/n): \$
[Erreur de saisie entrez (o/n) \$]

Faut-il entrer d'autres analyses au fichier ? (o/n): \$
[Erreur de saisie entrez la réponse (o/n): \$]

Fig. 7: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application CHARG-02

2- Unité fonctionnelle Modif-A.

Cette application propose l'édition et/ou la modification d'analyses entrées par l'unité précédente. La consultation ou la modification s'effectue systématiquement en bornant un intervalle du fichier, les bornes étant constituées de numéros d'analyses entrés par l'utilisateur (A, fig. 8). Si l'un des numéros n'existe pas, l'utilisateur est rejeté et l'application procède immédiatement à une nouvelle demande de saisie d'un autre intervalle. On pourra alors, soit relancer la recherche soit stopper l'exécution pour consulter l'index des analyses et vérifier la validité des numéros (voir unités fonctionnelles Ecran-I, Liste-I).

L'application fournit l'accès contrôlé à une édition écran analyse par analyse sur l'intervalle borné (B, fig. 8). L'édition par imprimante n'a pas été installée car elle ferait double emploi avec celle fournie automatiquement par le calculateur de la microsonde.

Enfin, il est possible de modifier, dans l'intervalle borné, une analyse choisie par son numéro d'enregistrement. L'index des analyses est affiché par page, afin d'assister l'utilisateur dans son choix. Une fois la modification réalisée, il est possible de faire boucler le traitement afin de sélectionner, sur le même intervalle, une autre analyse à modifier (C, fig. 8). En pouvant définir autant d'intervalles d'analyses qu'il le souhaite, l'utilisateur conserve la décision de sortir de l'application.

A

CONSULTATION, MODIFICATION DES ANALYSES
CAMEBAX SUR FICHER (ANA_CBX)
(Application activée: MODIF_A)

Conception et réalisation: Frédérick Delay

GEOL. PHYSIQUE . bât. SN 5, tél (20 43 41 51)
(20 43 41 60)
Université des Sciences et Techniques de Lille 1
59655 Villeneuve d'Ascq cedex

La consultation se fait sur un intervalle d'analyses du fichier. Après consultation vous pourrez modifier dans cet intervalle, les analyses que vous choisirez.

Entrez le n° d'analyse de la borne inférieure de l'intervalle: \$\$\$\$\$\$
Entrez le n° d'analyse de la borne supérieure de l'intervalle: \$\$\$\$\$\$

[le n° de la première analyse n'existe pas !!]
[le n° de la dernière analyse n'existe pas !!]

Voulez vous éditer les analyses à l'écran ? (o/n): \$
[Erreur de saisie Entrez à nouveau la réponse (o/n): \$]

Voulez vous modifier les données d'un enregistrement ? (o/n): \$
[Erreur de saisie entrez à nouveau la réponse (o/n): \$]

Faut -il accéder à un autre intervalle d'analyses ? (o/n): \$
[Erreur de saisie Entrez à nouveau la réponse (o/n): \$]

B

EDITION ECRAN

N° d'enregistrement: EEEE N° de lame: \$\$\$\$\$\$\$\$\$\$
N° d'analyse: \$\$\$\$\$\$ Minéral: \$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

POIDS D'OXYDES (%)

SIO2= EEE.EE	TIO2= EEE.EE
Al2O3= EEE.EE	Cr2O3= EEE.EE
FeO= EEE.EE	MnO= EEE.EE
MgO= EEE.EE	ZnO= EEE.EE
NiO= EEE.EE	CaO= EEE.EE
Na2O= EEE.EE	K2O= EEE.EE
H2O= EEE.EE	Total= EEE.EE

Frappez < ESPACE > pour l'analyse suivante

MODIFICATION D'ANALYSE AVEC EDITION PREALABLE DE L'INDEX

Analyse: \$\$\$\$\$\$ N° enr EEEE

↓

Analyse: \$\$\$\$\$\$ N° enr EEEE

Frappez < ESPACE > pour la page suivante

Entrez le n° d'enregistrement de l'analyse à modifier: EEEE

Lame.....	\$\$\$\$\$\$\$\$\$?->	\$\$\$\$\$\$\$\$\$
Analyse.....	\$\$\$\$\$\$\$?->	\$\$\$\$\$\$\$
Minéral.....	\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$?->	\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$
Nbre O.....	EE.E	?->	EE.E
Na2O.....	EEE.EE	?->	EEE.EE
K2O.....	EEE.EE	?->	EEE.EE
MnO.....	EEE.EE	?->	EEE.EE
MgO.....	EEE.EE	?->	EEE.EE
Al2O3.....	EEE.EE	?->	EEE.EE
SIO2.....	EEE.EE	?->	EEE.EE
FeO.....	EEE.EE	?->	EEE.EE
NiO.....	EEE.EE	?->	EEE.EE
ZnO.....	EEE.EE	?->	EEE.EE
CaO.....	EEE.EE	?->	EEE.EE
TIO2.....	EEE.EE	?->	EEE.EE
Cr2O3.....	EEE.EE	?->	EEE.EE
H2O.....	EEE.EE	?->	EEE.EE
Total.....	EEE.EE	?->	EEE.EE

Faut-il modifier un autre enregistrement de l'intervalle? (o/n) \$
[erreur de saisie: Entrez à nouveau la réponse (o/n): \$]

Fig. 8: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application MODIF-A

3- Unités fonctionnelles Ecran-I, Liste-I.

Ces deux petites applications ont pour but de visualiser l'index des analyses construit sur le numéro d'analyse et le numéro d'enregistrement au fichier.

Ecran-I affiche sur l'écran, page par page, tout l'index (A, fig. 9) et sera essentiellement utilisée en cas de problème dans l'unité Modif-A. En effet, lorsque l'utilisateur a entré un numéro d'analyse non inscrit au fichier, il peut alors retrouver le numéro correct en consultant directement l'index.

Liste-I édite sur l'imprimante une portion d'index borné par deux numéros d'analyses (B, fig. 9). Son intérêt principal est de procurer une liste d'archivage des analyses inscrites au fichier que l'on pourra conserver avec l'édition des analyses fournie par le calculateur de la microsonde.

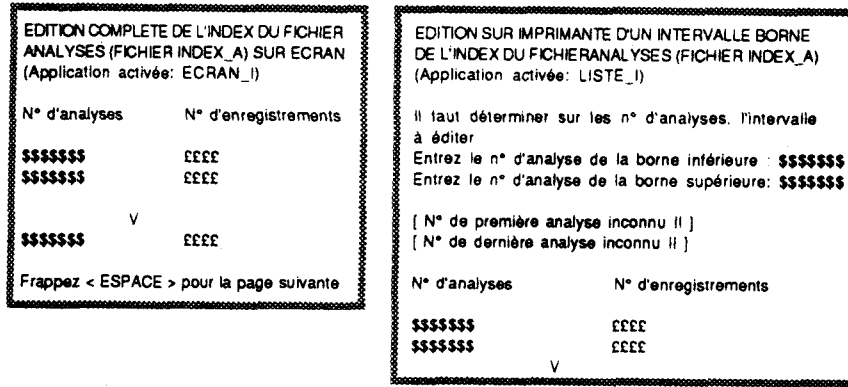


Fig.9. Masques d'édition (saisie/résultats) des applications ECRAN-I, LISTE-I

IV- Les unités gérées par Menu-M.

1- Unité fonctionnelle Struct-M.

C'est elle qui a la charge de définir le deuxième fichier majeur de la base de données: celui des formules structurales. La création d'un index repose sur les mêmes critères que ceux de l'application charg-02 c'est-à-dire deux champs par enregistrement que sont: le numéro d'analyse et le numéro d'enregistrement de la formule structurale correspondante. L'unité regroupe deux modules dont l'accès est contrôlé par l'utilisateur (A, fig. 10):

- le calcul des formules et le chargement automatique sur fichier;
- la consultation sur fichier de ces formules.

a- Le module de calcul.

Deux possibilités d'entrée des données sont proposées:

- soit une entrée au clavier (C, fig. 10) où l'utilisateur entre une analyse complète avec contrôle de validité de la saisie des proportions massiques d'oxydes;

- soit une entrée par l'intermédiaire du fichier des analyses (E, F, fig. 10). Dans ce cas, l'utilisateur peut choisir son mode d'accès. Soit il passe par l'index en entrant les numéros des analyses, ce qui est plus convivial mais demande plus de temps pour le traitement, soit il entre directement le numéro de l'analyse ce qui est rapide mais nécessite la liste de l'index du fichier des analyses (obtenue par Liste-I).

Lorsque le mode d'entrée des données est défini, l'utilisateur pourra boucler indéfiniment sur le module de calcul, le chargement des résultats au fichier restant transparent.

b- Le module de consultation.

Cette consultation se fait en bornant, par le numéro d'analyse, l'intervalle du fichier à éditer. En cas de mauvaise saisie, l'utilisateur contrôle lui-même (A, fig. 10) la réaffectation des bornes ce qui lui évite de boucler indéfiniment s'il n'arrive jamais à proposer un intervalle correct. L'édition de l'intervalle est proposée soit sur écran avec contrôle de défilement (G, fig. 10), soit par l'imprimante. L'utilisateur aura, bien évidemment, tout le loisir d'éditer autant d'intervalles du fichier qu'il le désire.

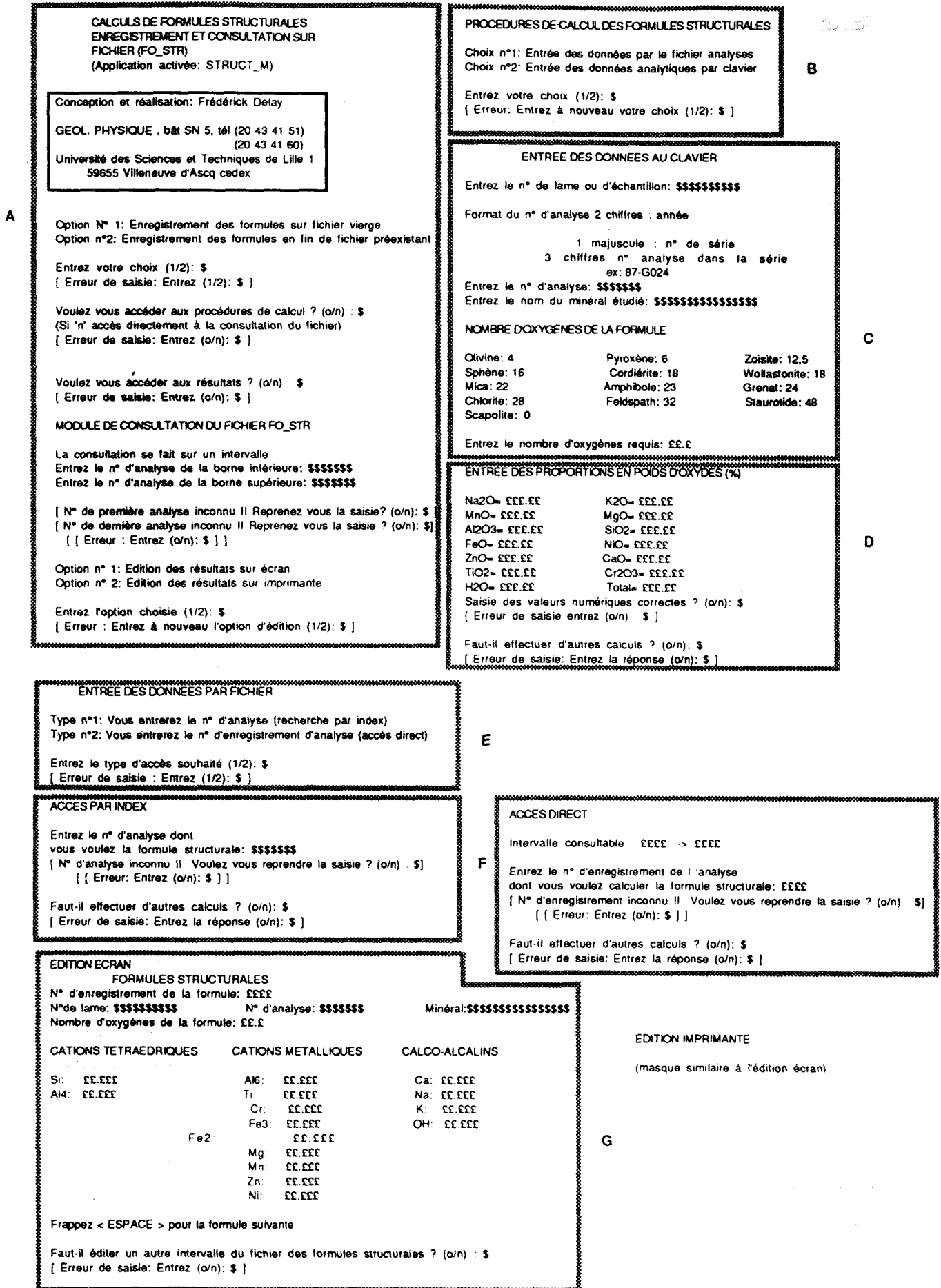


Fig. 10: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application STRUCT-M

2- Unités fonctionnelles Ecran-F, Liste-F.

Leur fonction et leur mise en oeuvre sont parfaitement similaires à celles des unités Ecran-I, Liste-I, mais cette fois en travaillant sur l'index du fichier des formules structurales. Les masques d'édition des deux applications sont consignés sur la figure 11.

EDITION COMPLETE DE L'INDEX DU FICHIER FORMULES STRUCTURALES (FICHIER INDEX_F) SUR ECRAN (Application activée: ECRAN_F)	
N° analyses des formules	N° d'enregistrements
\$\$\$\$\$\$	EEEE
\$\$\$\$\$\$	EEEE
	V
\$\$\$\$\$\$	EEEE
Frappez < ESPACE > pour la page suivante	

EDITION SUR IMPRIMANTE D'UN INTERVALLE BORNE DE L'INDEX DU FICHIER FORMULES STRUCTURALES (FICHIER INDEX_F) (Application activée: LISTE_F)	
Il faut déterminer sur les n° d'analyses, l'intervalle à éditer	
Entrez le n° d'analyse de la borne inférieure: \$\$\$\$\$\$	
Entrez le n° d'analyse de la borne supérieure: \$\$\$\$\$\$	
[N° de première analyse inconnu !!]	
[N° de dernière analyse inconnu !!]	
N° d'analyses des formules	N° d'enregistrements
\$\$\$\$\$\$	EEEE
\$\$\$\$\$\$	EEEE
	V

Fig. 11: Masques d'édition (saisie/résultats) des applications ECRAN-F, LISTE-F

3- Remarques préliminaires à l'étude des autres fonctions gérées par Menu-M.

Nous allons aborder les premières unités de traitement utilisant la base de données principale. Généralement, les programmes de traitement sont bâtis sur le même principe à savoir:

- les fonctions de calcul et de sauvegarde automatique ou contrôlée des résultats;
- le module de consultation différée du fichier de sauvegarde, l'utilisateur ayant le choix, dès l'entrée dans l'application, entre calcul ou consultation. (Notons que la consultation reste toujours proposée en fin de session de calcul).

Concernant la fonction des fichiers de sauvegarde, deux positions peuvent se discuter:

- ils sont considérés comme des organes simples dont le but n'est que de fournir une édition différée des résultats;
- ou alors, ils deviennent de véritables éléments de la base de données avec stockage de tous les résultats et création d'index.

Dans l'étude qui suit, la première solution est adoptée, en considérant les fichiers de sauvegarde comme de simples tampons d'édition. Il y a deux raisons majeures à ce choix: tout d'abord c'est la solution qui occupe le moins de place sur les disques, ensuite, elle correspond mieux à l'utilisation des résultats qui sont le plus souvent "retravaillés" pour produire notamment des restitutions graphiques.

Cependant, comme nous le verrons dans l'analyse organique, si les fichiers de sauvegarde sont bien construits, il est très facile de les transformer afin qu'ils deviennent les supports d'une base de données élargie. Nous envisagerons cette possibilité en créant un outil externe à l'ensemble du logiciel. Son principe de fonctionnement sera décrit dans l'analyse organique.

4- Unité fonctionnelle ACF-AKF

Il s'agit d'un module visant à représenter les analyses minéralogiques dans des systèmes ternaires standards définis sur les proportions molaires d'oxydes. L'utilisateur est tout d'abord convié à opter soit pour le calcul soit pour l'accès immédiat à la consultation du fichier des résultats (A, fig. 12).

**CALCUL DES COORDONNES TRIANGULAIRES
DANS LES REPRESENTATIONS ACF, AKF, AKF
SAUVEGARDE AUTOMATIQUE SUR FICHER ACF
(Application activée: ACF_AKF)**

Conception et réalisation: Frédéric Delay

GEOL. PHYSIQUE, bât SN 5, tél (20 43 41 51)
(20 43 41 60)

Université des Sciences et Techniques de Lille 1
59655 Villeneuve d'Ascq cedex

Voulez vous accéder aux fonctions de calcul? (o/n): \$
(Si 'n': accès direct à la consultation des résultats)
[Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

Voulez vous accéder aux résultats ? (o/n): \$
[Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

CONSULTATION DU FICHER ACF

La consultation des résultats se fait par édition complète en séquence du fichier ACF
Option n°1: Edition des résultats sur écran
Option n°2: Edition des résultats sur imprimante

Entrez l'option choisie (1/2): \$
[Erreur: Entrez à nouveau l'option choisie (1/2): \$]

CALCUL DES COORDONNES TRIANGULAIRES

Option n°1: Enregistrement des résultats sur fichier vierge
(les anciennes valeurs stockées seront écrasées)
Option n°2: Enregistrement des résultats en fin de fichier

Entrez votre choix (1/2): \$
[Erreur de saisie: Entrez (1/2): \$]

Choix n°1: Entrée des données de calcul par fichier
Choix n°2: Entrée des données de calcul par le clavier

Entrez votre choix (1/2): \$
[Erreur: Entrez à nouveau votre choix (1/2): \$]

ENTREE DES DONNEES AU CLAVIER

Entrez le n° de lame ou d'échantillon: \$\$\$\$\$\$\$\$\$

Format du n° d'analyse: 2 chiffres: année

1 majuscule: n° de série
3 chiffres: n° analyse dans la série
ex: 87-G024

Entrez le n° d'analyse: \$\$\$\$\$\$

Entrez le nom du minéral étudié: \$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

ENTREE DES PROPORTIONS EN POIDS D'OXYDES (%)

Na2O=	\$\$\$.	K2O=	\$\$\$.
CaO=	\$\$\$.	Al2O3=	\$\$\$.
FeO=	\$\$\$.	MgO=	\$\$\$.
MnO=	\$\$\$.		

Si vous avez du Fe2O3, entrez sa valeur, sinon entrez 0 --> Fe2O3= \$\$\$.

Saisie des valeurs numériques correcte? (o/n): \$
[Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

(Si Fe2O3=0->[Si vous avez la formule structurale du minéral:
Entrez le nb d'atomes de fe2+, sinon entrez 0 --> Fe2+= \$.\$.
Entrez le nb d'atomes de fe3+, sinon entrez 0 --> Fe3+= \$.\$.

Faut-il effectuer d'autres calculs ? (o/n): \$
[Erreur de saisie: Entrez la réponse (o/n): \$]

**ENTREE DES DONNEES PAR FICHIERS
(FICHIERS ANA_CBX, FO_STR)**

Entrez le n° d'analyse Camebax de la phase à étudier: \$\$\$\$\$\$

[Erreur: Le n° d'analyse est inconnu dans un des fichiers]
[ANA_CBX/ FO_STR]
[Reprenez vous la saisie du n° d'analyse ? (o/n): \$]
[[Erreur: Entrez (o/n): \$]]

Faut-il effectuer d'autres calculs ? (o/n): \$
[Erreur de saisie: Entrez la réponse (o/n): \$]

EDITION ECRAN DES RESULTATS

N° de lame ou d'échantillon: \$\$\$\$\$\$\$\$\$\$ N° d'analyse: \$\$\$\$\$\$

Minéral: \$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

PROPORTIONS MASSIQUES D'OXYDES (%)

Na2O=	\$.\$.	K2O=	\$.\$.	CaO=	\$.\$.	Al2O3=	\$.\$.	Fe2O3=	\$.\$.
FeO=	\$.\$.	MgO=	\$.\$.	MnO=	\$.\$.				

COORDONNEES TRIANGULAIRES

A=	\$\$\$.	A'=	\$\$\$.	A=	\$\$\$.
C=	\$\$\$.	K=	\$\$\$.	K=	\$\$\$.
F=	\$\$\$.	F=	\$\$\$.	F=	\$\$\$.

V
(2 résultats par page écran)
Frappez < ESPACE > pour continuer

EDITION DES RESULTATS PAR IMPRIMANTE
(grille similaire à l'édition écran sans contrôle de défilement)

Fig. 12: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application ACF-AKF

a- Le module de calcul.

Bien que le fichier de sauvegarde soit considéré comme un tampon d'édition, il est tout de même possible de choisir entre (B, fig. 12):

- l'effacement des anciens résultats (par exemple: calculs dont on possède déjà une restitution sur papier, ou calculs jugés inutiles);
- l'ajout des résultats en fin de fichier, ce qui préserve les anciens calculs stockés.

Ensuite les deux possibilités d'entrée des données sont proposées(B, fig. 12). Tout d'abord, l'entrée des données au clavier (C, fig. 12) qui permet de saisir:

- les paramètres d'identification du calcul, numéro de lame, numéro d'analyse, nom de la phase minérale étudiée;
- les proportions massiques des oxydes de l'analyse nécessaires au calcul;
- enfin, en fonction de ce qui est à la disposition de l'utilisateur, soit la proportion de Fe_2O_3 , soit les valeurs Fe^{2+} , Fe^{3+} de la formule structurale du minéral. Notons que dans le cas où aucune de ces valeurs n'est connue, un calcul permet d'estimer empiriquement les teneurs en Fe^{3+} .

L'entrée automatique des données utilise le fichier des analyses pour les poids d'oxydes, le fichier des formules structurales pour l'estimation du Fe^{3+} . La procédure passe par la saisie du numéro d'analyse. En cas d'erreur, l'utilisateur contrôle lui-même la relance d'une nouvelle recherche.

Quelque soit le mode d'entrée, le calcul peut boucler indéfiniment avec sauvegarde automatique des résultats. Etant donné que le fichier de réception est considéré comme un tampon d'édition différée, les résultats ne seront affichés qu'en fin de session de calcul. Ceci permet d'aller très vite lorsqu'il y a beaucoup d'opérations à réaliser, par exemple en traitant systématiquement toutes les analyses d'une journée passée sur la sonde. Remarquons que la boucle sur le calcul préserve les modes de saisie et de sauvegarde définis lors du premier accès au programme.

b- La consultation des résultats

L'édition sur écran ou imprimante affecte l'ensemble du fichier des résultats en respectant la grille de la figure 12-E. Nous verrons qu'un utilitaire (Outil-03 de Menu-O) permet l'édition sélective des résultats par numéro de lame ou d'échantillon.

5- Unité fonctionnelle AFM-A'FM.

Elle fournit le calcul des coordonnées des projections définies par Thompson (1957) relatives aux minéraux ferro-magnésiens. L'architecture générale de l'application est comparable à ACF-AKF et débute par l'accès contrôlé au calcul ou à la consultation du fichier résultats (A, fig. 13).

Le module de calcul définit en priorité (B, fig. 13), le devenir des anciens résultats stockés sur fichier et le mode d'entrée des données.

L'entrée au clavier (C, fig. 13) permet de saisir:

- les champs d'identification du calcul: numéro de lame, d'analyse, nom du minéral;
- les proportions massiques d'oxydes: K_2O , FeO , MnO , MgO , Al_2O_3 dont la validité est contrôlée par l'utilisateur.

L'entrée par la base de données (D, fig. 13) fait rechercher, grâce à la saisie du numéro d'analyse, l'enregistrement correspondant dans le fichier des analyses.

La sauvegarde automatique ne passe pas par une édition à l'écran du résultat. Pour le visualiser, il faudra lancer le module de consultation qui est automatiquement proposé en fin de session de calcul. Cette édition des résultats à l'écran et par l'imprimante obéit à la grille définie sur la figure 13-E. L'utilitaire externe Outil-04 géré par Menu-O délivrera une édition sélective sur le numéro de lame ou d'échantillon.

**CALCUL DES COORDONNÉES TRIANGULAIRES
DANS LES REPRESENTATIONS AFM, A'FM
SAUVEGARDE AUTOMATIQUE SUR FICHIER AFM
(Application activée: AFM_A'FM)**

Conception et réalisation: Frédéric Delay

GEOL. PHYSIQUE , bât SN 5, tél (20 43 41 51)
(20 43 41 60)
Université des Sciences et Techniques de Lille 1
59655 Villeneuve d'Ascq cedex

Voulez vous accéder aux fonctions de calcul? (o/n): \$
[Si 'n': accès direct à la consultation des résultats]
[Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

Voulez vous accéder aux résultats ? (o/n): \$
[Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

CONSULTATION DU FICHIER AFM

La consultation des résultats se fait par édition complète en séquence du fichier AFM
Option n°1: Edition des résultats sur écran
Option n°2: Edition des résultats sur imprimante

Entrez l'option choisie (1/2): \$
[Erreur: Entrez à nouveau l'option choisie (1/2): \$]

CALCUL DES COORDONNÉES TRIANGULAIRES

Option n°1: Enregistrement des résultats sur fichier vierge
(les anciennes valeurs stockées seront écrasées)
Option n°2: Enregistrement des résultats en fin de fichier

Entrez votre choix (1/2): \$
[Erreur de saisie: Entrez (1/2): \$]

Choix n°1: Entrée des données de calcul par fichier
Choix n°2: Entrée des données de calcul par le clavier

Entrez votre choix (1/2): \$
[Erreur: Entrez à nouveau votre choix (1/2): \$]

ENTREE DES DONNEES AU CLAVIER

Entrez le n° de lame ou d'échantillon: \$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

Format du n° d'analyse: 2 chiffres: année
1 majuscule: n° de série
3 chiffres: n° analyse dans la série
ex: 87-G024

Entrez le n° d'analyse: \$\$\$\$\$\$

Entrez le nom du minéral étudié: \$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

ENTREE DES PROPORTIONS EN POIDS D'OXYDES (%)

K2O= \$\$\$\$.\$\$ AL2O3= \$\$\$\$.\$\$
FeO= \$\$\$\$.\$\$ MgO= \$\$\$\$.\$\$
MnO= \$\$\$\$.\$\$

Saisie correcte ? (o/n): \$
[Erreur: Entrez (o/n): \$]

faut-il effectuer d'autres calculs ? (o/n): \$
[Erreur de saisie: Entrez la réponse (o/n): \$]

**ENTREE DES DONNEES PAR FICHIER
(FICHIER ANA_CBX)**

Entrez le n° d'analyse de la phase à étudier: \$\$\$\$\$\$

[N° d'analyse inconnu: Reprenez vous la saisie du n° ? (o/n): \$]
[[Erreur: Entrez (o/n): \$]]

Faut-il effectuer d'autres calculs ? (o/n): \$
[Erreur de saisie: Entrez la réponse (o/n): \$]

EDITION DES RESULTATS SUR L'ECRAN

N° de lame ou d'échantillon: \$\$\$\$\$\$\$\$\$\$ N° d'analyse: \$\$\$\$\$\$

Minéral: \$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$\$

PROPORTIONS MASSIQUES D'OXYDES (%)

K2O= \$\$.\$\$. Al2O3= \$\$.\$\$. FeO= \$\$.\$\$. MgO= \$\$.\$\$. MnO= \$\$.\$\$.

COORDONNEES DE PROJECTION THOMPSON

A= \$.\$\$. A'= \$.\$\$. X-Mg= \$.\$\$.

v
(3 résultats par page)

Frapper < ESPACE > pour continuer

EDITION DES RESULTATS SUR IMPRIMANTE
(grille similaire à l'édition écran sans contrôle de défilement)

Fig. 13: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application AFM-A'FM

6- Unité fonctionnelle Graph-T.

Son exécution est lancée depuis le sous-menu: Menu-G du menu principal Menu-M.

On pourrait s'interroger sur l'intérêt de développer des outils graphiques alors que le marché du logiciel regorge de produits plus puissants les uns que les autres. En fait, on retrouve pratiquement toujours les mêmes défauts dans les produits commerciaux:

- le descriptif du format de l'édition par traceur brille par son absence ou son manque de souplesse;
- la puissance de calcul est souvent si faible qu'il est impossible de transformer des coordonnées triangulaires en coordonnées cartésiennes susceptibles d'être comprises par un traceur;
- les logiciels offrent, pour la plupart, des formats de représentation hermétiques d'où les systèmes barycentrés, ternaires sont exclus.

Avant de pouvoir lancer une application, Menu-G renvoie à une initialisation graphique: INIT-GRAPHIC. Cette étape est essentiellement dépendante du matériel d'implantation; parfois elle n'est pas utile, dans d'autres cas elle pourra, par exemple, se charger d'initialiser un moniteur vidéo type console graphique Tektroniks pour le graphisme et un moniteur monochrome pour l'interactif c'est-à-dire les entrées/sorties de valeurs numériques et alphanumériques. En ce qui concerne son aspect purement fonctionnel, cette étape est totalement transparente pour l'utilisateur. Il en sera de même pour le retour à Menu-G par l'application MODE-TXT dont la fonction est de revenir au mode d'utilisation standard de la console.

L'entête graphique démarrant une session de travail indiquera quelles sont les coordonnées triangulaires à entrer et permet de choisir le type de représentation entre ACF (et ternaire quelconque), AFM, ou enfin A'FM.

Ensuite, l'entrée au clavier des données obéit à un contrôle de défilement page par page (B, fig. 14). Après calcul (transparent pour l'utilisateur) deux types de visualisation graphique à l'écran sont proposés en fonction du mode de représentation triangulaire sélectionné:

- un triangle dont les axes de graduations correspondent aux représentations ternaires classiques (ACF et autres) et A'FM. Sur la figure 14-C, il s'agit d'un ternaire classique. Dans le cas d'un A'FM, le triangle est identique mais les graduations sont indicées de 0,0 jusqu'à 1,0 (le pôle A' étant au sommet supérieur du triangle);
- un triangle dont les axes de graduations correspondent aux représentations AFM (D, fig. 14, le pôle A étant au sommet supérieur, le pôle F dans l'angle inférieur gauche).

On constatera sur les deux écrans graphiques reproduits, qu'une fenêtre texte permet la saisie du type et de la taille du point voulu pour la visualisation. Dans le cas où l'architecture matérielle ne permet pas de mélanger graphisme et saisie interactive, il faut faire apparaître la saisie avant le dessin ou encore, l'assigner à un moniteur spécifique, le moniteur graphique n'étant réservé qu'au dessin.

Suite à la visualisation, ou en même temps si l'utilisateur possède deux moniteurs dédiés, apparaît un module d'entrée des paramètres de format d'une édition par traceur (E, fig. 14). Il est évident que cette partie du traitement dépend beaucoup du matériel utilisé. Dans cette étude nous avons restreint le nombre de paramètres en imposant la dimension du triangle tracé (l'application qui fonctionne avec les traceurs que j'utilise: GRAPHTEC MP3100 et HP 7475A, permet de fixer l'origine absolue du triangle ainsi que ses dimensions.)

En fin d'application l'utilisateur pourra, s'il le désire, relancer un traitement complet lui permettant de superposer un nouveau tracé au précédent. Notons que dans le développement présentée ici, cette superposition n'intéresse que la restitution sur traceur. On pourrait très facilement l'appliquer à la visualisation écran en sauvegardant en mémoire l'image du traitement précédent. Si la place mémoire est suffisante, il ne faut pas hésiter à implanter cette variante, elle donnera une idée beaucoup plus précise de l'éventuelle restitution sur traceur (cet avantage est implémenté sur la version du programme fonctionnant avec les cartes Hercules+ et VGA de chez Compaq, ou encore avec le Starbase en C sous Unix de HP 9000).

7- Unité fonctionnelle Graph-R.

L'application génère des tracés en coordonnées rectangulaires soit à partir de points isolés entrés au clavier, soit à partir de la définition d'une fonction $y = f(x)$ où les valeurs de x sont entrées au clavier. Afin de rendre l'application compatible avec le plus de langages et de systèmes possibles, nous avons utilisé une "astuce" de programmation (voir analyse organique) concernant la définition des fonctions. De ce fait, un message lié à la relance du programme apparaît dès le départ, indiquant à l'application et à l'utilisateur si le travail s'effectue en direct ou sur un réamorçage après la définition d'une fonction (A, B, fig. 15).

La saisie au clavier (C, D, fig. 15) est assujettie à un contrôle du défilement. Après calcul, une restitution est proposée à l'écran où le tracé occupera toujours la même taille physique. Ce sont les pas et les labels des 11 graduations de chacun des axes qui changent suivant les valeurs extrêmes du tracé. Une option permet de choisir (E, fig. 15) entre un tracé par points ou un tracé des points et des segments de liaison.

Suite à cette visualisation sur écran, intervient la saisie des paramètres du format de restitution sur traceur (F, fig. 15). Cette fois, l'application présentée permet à l'utilisateur de définir le format complet du cadre de tracé: origine, pas de graduation, nombre de graduations. On y ajoute aussi la taille physique de chaque graduation. Bien évidemment, l'entrée de ces paramètres est contrôlée de façon à ce qu'il y ait accord entre les valeurs extrêmes du tracé et la taille physique maximale que peut occuper le graphique.

En fin de traitement, comme dans l'application Graph-T, l'utilisateur pourra relancer l'application en vue de réaliser un tracé se superposant au précédent (A, fig. 15).

V- Les unités gérées par Menu-PT.

1- Unité fonctionnelle Therm-AI.

Cette unité fournit des estimations thermiques sur les associations alumineuses [grenat-biotite], [grenat-cordiérite]. Elle constitue le programme utilisé en "routine" sur tous les échantillons contenant ces phases. Nous verrons qu'une autre application, plus complète au niveau du calcul sur les associations [grenat-cordiérite], peut

TRACE DE POINTS ET COURBES EN COORDONNEES CARTESIENNES SOIT A PARTIR DE POINTS ISOLEES SOIT APRES DEFINITION D'UNE FONCTION
(Application activée: GRAPH-R)

Conception et réalisation: Frédéric Delay

GEOL. PHYSIQUE, bât. SN 5, tél (20 43 41 51)
(20 43 41 60)
Université des Sciences et Techniques de Lille 1
59655 Villeneuve d'Ascq cedex

Venez vous de relancer l'application après avoir défini une fonction $y = f(x)$? (o/n) : \$
[Erreur de saisie: Entrez la réponse (o/n): \$]

(si 'n')

Option n° 1: Tracé à partir de points définis par leurs coordonnées

Option n°2: Tracé d'une fonction $y = f(x)$

Entrez l'option choisie: (1/2): \$
[Erreur: Entrez l'option (1/2): \$]

(Saisie données et restitution écran graphique)

Edition sur traceur ? (o/n): \$
[Erreur: Entrez (o/n): \$]

Faut-il effectuer un tracé se superposant au précédent ? (o/n): \$
[Erreur de saisie: Entrez la réponse (o/n): \$]

ENTREE DES DONNEES POINTS ISOLEES

(Attention: pour mettre fin à la session, après avoir entré le dernier point, frappez 'n', sinon entre chaque point entré, frappez < ESPACE >)

point n° £££ --> X: £££.££ Y: £££.££
point n° £££ --> X: £££.££ Y: £££.££

V

(Contrôle défilement: 19 points par page écran)

ENTREE DONNEES CALCUL PAR FONCTION

(Attention: pour mettre fin à la session, après avoir entré le dernier point, frappez 'n', sinon entre chaque point entré, frappez < ESPACE >)

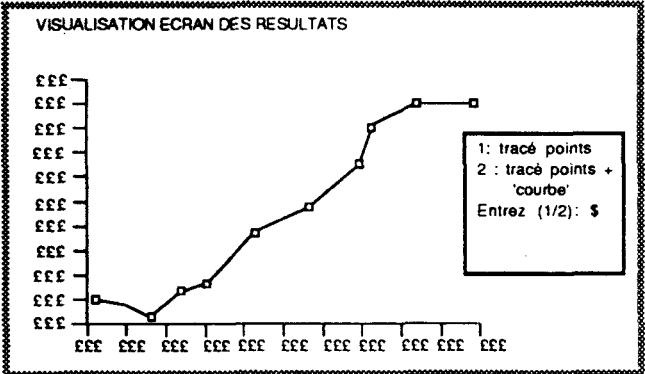
point n° £££ --> X: £££.££ Y = f(X) = £££.££
point n° £££ --> X: £££.££ Y = f(X) = £££.££

V

(Contrôle défilement: 19 points par page écran)

DEFINITION DE FONCTION

Entrez le texte de définition dans le langage de programmation
Vous nommerez la fonction : CALCUL
Pour terminer l'édition de la fonction frappez <CTRL-Z>
Il y aura ensuite une interruption système et relance de l'exécution
--->



ENTREE DES PARAMETRES D'ACCES A LA RESTITUTION TRACEUR

Vous allez devoir définir le format du tracé

Valeurs mini <--> maxi sur axe X = £££££ £££££
Entrez le nombre de graduations voulues sur X (origine incluse): ££
Entrez le coefficient entier de puissance de 10 sur l'axe X: £

Fixez l'origine sur X (en tenant compte du facteur puissance): ££££
(Notez origine <= mini sur X)

Fixez le pas d'une graduation (prise en compte du facteur puissance): ££££
(Notez : (origine + (nb grad -1) * pas grad) * puis de 10 > = maxi sur X)
[Erreur de formatage : Frappez < ESPACE > pour reprendre la saisie]

Valeurs mini <--> maxi sur axe Y = £££££ £££££
Entrez le nombre de graduations voulues sur Y (origine incluse): ££
Entrez le coefficient entier de puissance de 10 sur l'axe Y: £

Fixez l'origine sur Y (en tenant compte du facteur puissance): ££££
(Notez origine <= mini sur Y)

Fixez le pas d'une graduation (prise en compte du facteur puissance): ££££
(Notez : (origine + (nb grad -1) * pas grad) * puis de 10 > = maxi sur X)
[erreur de formatage: Frappez < ESPACE > pour reprendre la saisie]

Entrez en moins de 40 caractères

La désignation de l'abscisse
\$

La désignation de l'ordonnée
\$

Le titre générique de la figure
\$

Taille des caractères: $0,7^{*(n+1)} / 0,4^{*(n+1)}$ en mm

Entrez n pour les graduations d'axes: £££
Entrez n pour les désignations d'axes: £££
Entrez n pour le titre générique de la figure: £££

SUITE ENTREE PARAMETRES RESTITUTION TRACEUR

2 types de tracés sont proposés
Type n°1: Tracé des points isolés
Type n° 2 Tracé des points et de courbe interpolée (polynômes de Lagrange)

Entrez le type choisi (1/2): \$
[Erreur: Entrez 1/2): \$]

Entrez le code (1 <--> 15) du type de point voulu sur le tracé

Taille du point : $0,3^{*(n+1)}$ en mm
Entrez n: £££

Fig. 15: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application GRAPH-R

être utilisée lorsque l'on désire obtenir des résultats complémentaires sur les pressions d'équilibre, les teneurs en eau des cordiérites et de la phase fluide. Therm-Al propose:

- de calculer T avec les calibrations de Thompson (1976) et Holdaway et Lee (1977) pour les assemblages [grenat-cordiérite];

- de calculer T avec les calibrations de Thompson (1976) , Holdaway et Lee (1977) et Ferry et Spear (1978) pour les assemblages [grenat-biotite].

Notons que la calibration d'Indares et Martignoles (1985) prenant en compte la fraction de TiO₂ dans les biotites, n'a pas été retenue. Elle aurait considérablement allongé le programme alors que dans la gamme de composition des minéraux qui nous intéressait, elle n'apportait pas de variations significatives des résultats par rapport aux calibrations plus anciennes. L'architecture générale de l'application obéit aux règles suivantes:

- le choix de l'accès préférentiel à deux modules, calcul ou consultation de l'élément de sauvegarde (A, fig. 16);

- lors de l'entrée dans le module de calcul, le fichier (tampon d'édition) peut être écrasé ou voir ses données préservées par ajout des nouvelles en queue de liste;

- enfin, l'utilisateur décide du mode d'entrée des données nécessaires au calcul (B, fig. 16).

a- L'entrée des données au clavier.

Les paramètres d'identification du calcul sont définis: numéro de lame, numéro et position de l'analyse du grenat. Notons qu'à ce niveau de l'application, l'utilisateur définit le type de phase associée au grenat. Lors de la saisie des proportions massiques d'oxydes de chacune des phases, le masque d'écran peut différer de celui de la figure 16-C, suivant la présence ou non des colonnes affectées aux minéraux cordiérite et/ou biotite. La saisie des données relatives à chaque minéral est contrôlée puis validée par l'opérateur.

b- L'entrée des données par fichier.

Elle est régie par la saisie de la clef d'index du fichier des analyses (D, fig. 16). La localisation du point d'analyse sur le grenat n'étant pas inscrite au fichier, elle est entrée séparément. Suivant ses choix sur les associations, l'utilisateur entre successivement les numéros d'analyses du grenat, de la cordiérite, de la biotite. Notons qu'en cas d'erreur de recherche sur chacune des clefs entrées, la reprise de saisie est contrôlée (si la saisie n'est pas recommencée, l'exécution est interrompue).

c- Le calcul puis l'enregistrement automatique des résultats.

Ces opérations restent transparentes, l'opérateur pouvant boucler indéfiniment sur le module de calcul en conservant, bien sûr, les modes de saisie et de sauvegarde définis lors du premier accès.

d- L'édition écran ou par imprimante.

La restitution des enregistrements stockés sur le fichier de sauvegarde obéit au masque défini sur la figure 16-E. Les valeurs Fe-Mg() correspondent au rapport des proportions molaires en FeO et MgO de la phase considérée. Le Kd représente la constante d'équilibre de la réaction donnant lieu au calcul thermique (on en édite le logarithme népérien). L'utilitaire Outil-05 de Menu-O proposera une édition sélective par numéro de lame ou d'échantillon.

A

**CALCUL DES TEMPERATURES D'EQUILIBRE
D'ASSOCIATIONS GRENAT/BIOTITE GRENAT/BIOTITE
SALVEGARDE AUTOMATIQUE DES RESULTATS
SUR FICHIER GA_CD_BI
(Application activée: THERM_AL)**

Conception et réalisation: Frédéric Delay

GEOL. PHYSIQUE, bât. SN 5, 161 (20 43 41 51)
(20 43 41 60)
Université des Sciences et Techniques de Lille 1
59655 Villeneuve d'Ascq cedex

Voulez vous accéder aux fonctions de calcul? (o/n): \$
(Si 'n': accès direct à la consultation des résultats)
[Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

Voulez vous accéder aux résultats ? (o/n): \$
[Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

CONSULTATION DU FICHIER GA_CD_BI

La consultation des résultats se fait par édition
complète en séquence du fichier GA_CD_BI
Option n°1: Edition des résultats sur écran
Option n°2: Edition des résultats sur imprimante

Entrez l'option choisie (1/2): \$
[Erreur: Entrez à nouveau l'option choisie (1/2): \$]

B

CALCUL DES TEMPERATURES D'EQUILIBRE

Option n°1: Enregistrement des résultats sur fichier vierge
(les anciennes valeurs stockées seront écrasées)
Option n°2: Enregistrement des résultats en fin de fichier

Entrez votre choix (1/2): \$
[Erreur de saisie: Entrez (1/2): \$]

Choix n°1: Entrée des données de calcul par fichier
Choix n°2: Entrée des données de calcul par le clavier

Entrez votre choix (1/2): \$
[Erreur: Entrez à nouveau votre choix (1/2): \$]

C

ENTREE DES DONNEES AU CLAVIER

Entrez le n° de lame ou d'échantillon: \$\$\$\$\$\$\$\$

Format du n° d'analyse: 2 chiffres: année
1 majuscule: n° de série
3 chiffres: n° analyse dans la série
ex: 87-G024

Association Ga/Cd ? (o/n): \$ Association Ga/Bi ? (o/n): \$
[Erreur: Entrez (o/n): \$] [Erreur: Entrez (o/n): \$]

Lieu d'analyse du grenat: Entrez C pour coeur, P pour périphérie: \$

N° analyse grenat: \$\$\$\$\$\$	N° analyse cordiérite: \$\$\$\$\$\$	N° analyse biotite: \$\$\$\$\$\$
PROP. MASSIQUES (%)	PROP. MASSIQUES (%)	PROP. MASSIQUES (%)
MgO= \$\$\$\$.	MgO= \$\$\$\$.	MgO= \$\$\$\$.
FeO= \$\$\$\$.	FeO= \$\$\$\$.	FeO= \$\$\$\$.
Saisie correcte ? (o/n): \$	Saisie correcte ? (o/n): \$	Saisie correcte ? (o/n): \$
[Erreur: Entrez (o/n): \$]	[Erreur: Entrez (o/n): \$]	[Erreur: Entrez (o/n): \$]

Faut-il effectuer d'autres calculs ? (o/n): \$
[Erreur de saisie: Entrez la réponse (o/n): \$]

D

**ENTREE DES DONNEES PAR FICHIER
(FICHIER ANA_CBX)**

Lieu d'analyse du grenat: Entrez C pour coeur, P pour périphérie: \$

Entrez le n° d'analyse du grenat: \$\$\$\$\$\$
[N° d'analyse inconnu! Reprenez vous la saisie du n° ? (o/n): \$
[Erreur: Entrez (o/n): \$]]

Association Ga/Cd ? (o/n) \$
[Erreur: Entrez (o/n): \$]

Entrez le n° d'analyse de la cordiérite: \$\$\$\$\$\$
[N° d'analyse inconnu! Reprenez vous la saisie du n° ? (o/n): \$
[Erreur: Entrez (o/n): \$]]

Association Ga/Bi ? (o/n): \$
[Erreur: Entrez (o/n): \$]

Entrez le n° d'analyse de la biotite: \$\$\$\$\$\$
[N° d'analyse inconnu! Reprenez vous la saisie du n° ? (o/n): \$
[Erreur: Entrez (o/n): \$]]

Faut-il effectuer d'autres calculs ? (o/n): \$
[Erreur de saisie: Entrez la réponse (o/n): \$]

E

EDITION DES RESULTATS SUR L'ECRAN

N° de la lame: \$\$\$\$\$\$ N° d'analyse du grenat: \$\$\$\$\$\$ Localisation: \$
Prop. massiques (%): MgO-Ga= \$\$\$\$. FeO-Ga= \$\$\$\$.

N° d'analyse de la cordiérite: \$\$\$\$\$\$
MgO-Cd= \$\$\$\$. FeO-Cd= \$\$\$\$. rapport mol.: Fe/Mg(Ga)= \$\$\$\$. Fe/Mg(Cd)= \$\$\$\$.
T°C(Thompson)= \$\$\$\$. T°C(Holdaway & Lee)= \$\$\$\$. Ln(Kd)= \$\$\$\$.

N° d'analyse de la biotite: \$\$\$\$\$\$
MgO-Bi= \$\$\$\$. FeO-Bi= \$\$\$\$. rapport mol.: Fe/Mg(Ga)= \$\$\$\$. Fe/Mg(Bi)= \$\$\$\$.
T°C(Thompson)= \$\$\$\$. T°C(Holdaway & Lee)= \$\$\$\$. T°C(Ferry & Spear)= \$\$\$\$.
Ln(Kd)= \$\$\$\$.

V
(2 enregistrements par page écran)
(quelque soit les couples minéraux)

Frappez < ESPACE > pour continuer

EDITION DES RESULTATS PAR IMPRIMANTE
(Grille similaire à celle de l'édition écran sans contrôle de défilement)

Fig. 16: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application THERM-AL

2- Unité fonctionnelle PT-Ga-Cd.

Elle représente l'alternative de l'application précédente lorsque l'opérateur ne travaille que sur des associations [grenat-cordiérite] et qu'il désire obtenir des résultats relatifs à la fois aux températures et aux pressions d'équilibre. Nous retrouvons la séquence désormais classique d'accès contrôlé au calcul auquel succède le module de consultation des résultats stockés sur fichier (A, fig. 17).

a- L'entrée des données et le module de calcul.

L'opérateur n'y sélectionne que la façon dont il gère les anciens résultats du fichier de sauvegarde (B, fig. 17). En effet, il n'y a pas de choix sur le mode d'entrée des données; seule l'entrée au clavier est autorisée. Les raisons en sont multiples:

- il y a peu de valeurs à entrer: trois identificateurs, quatre valeurs numériques;
- le programme s'utilise assez peu dans la mesure où il complète l'application précédente;
- étant donné le nombre de calibrations abordées, le programme impose une multitude de déclarations et de définitions (heureusement, tout cela hors de portée de l'utilisateur). Par conséquent, il n'est pas indispensable de surcharger le programme avec les déclarations nécessaires à l'accès par fichier, pour le peu de saisie à réaliser.

Le masque d'entrée des données au clavier est matérialisé sur la figure 17-C. Il contrôle la validité des paramètres saisis pour chaque minéral. Après réalisation du calcul, l'opérateur bénéficie d'une édition immédiate du résultat à l'écran et contrôle lui-même la sauvegarde au fichier. Cette méthode est employée à cause de la taille de chaque enregistrement (D, fig. 17) car il est préférable d'éviter une surcharge des disques avec des valeurs dont l'intérêt n'aurait pas été préalablement apprécié.

b- L'édition des résultats à l'écran.

Le masque d'édition de la figure 17-D affiche:

- les paramètres de reconnaissance du calcul: numéro de lame, numéro d'analyse du grenat, numéro d'analyse de la cordiérite;
- les fractions $X_{Fe} = FeO/(FeO+MgO)$, $X_{Mg} = 1-X_{Fe}$ pour chaque minéral (les oxydes étant exprimés en proportions molaires);
- les constantes d'équilibre des réactions:
 - Kd: équilibre des solutions solides naturelles;
 - Z-Fe: équilibre de composants purs ferrifères;
 - Z-Mg: équilibre de composants purs magnésiens;
- les résultats numériques pour chaque calibration: pression en bars, température en celsius, nombre de molécules d'eau par molécule de cordiérite (nH_2O_{Cd}), fraction d'eau dans la phase fluide associée à la cordiérite (les calibrations Martin0 --> Martin6, Lonker0 --> Lonker8 correspondent à une évolution respective de nH_2O_{Cd} de 0 à 0,6 et 0 à 0,8).

L'édition complète des résultats par lecture du fichier de sauvegarde intervient en fin de session de calcul (fin laissée à la discrétion de l'opérateur). Elle utilise exactement le même masque que la visualisation immédiate. Bien qu'il ne soit pas écrit, il serait très facile de proposer un outil externe d'édition sélective par numéro d'échantillon.

CALCULS DE P, T SUR EQUILIBRE Ga/Cd, CALIBRATIONS CURRIE, HENSEN & GREEN, HUTCHISON ET AL., NEWTON & WOOD, THOMPSON, HOLDAWAY & LEE, MARTIGNOLE & SISI, LONKER
 (Application activée: PT_GA_CD)

Conception et réalisation: Frédéric Delay

GEOLOGIE PHYSIQUE . bât. SN 5, 161 (20 43 41 51)
 (20 43 41 60)
 Université des Sciences et Techniques de Lille 1
 59655 Villeneuve d'Ascq cedex

Voulez vous accéder aux fonctions de calcul? (o/n): \$
 (Si 'n': accès direct à la consultation des résultats)
 [Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

Voulez vous accéder aux résultats ? (o/n): \$
 [Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

CONSULTATION DU FICHIER GA_CD

La consultation des résultats se fait par édition complète en séquence du fichier GA_CD
 Option n°1: Edition des résultats sur écran
 Option n°2: Edition des résultats sur imprimante

Entrez l'option choisie (1/2): \$
 [Erreur: Entrez à nouveau l'option choisie (1/2): \$]

A

Edition du fichier sur écran et édition du fichier sur imprimante:

Voir grille d'édition sur écran contrôle du défilement dans l'édition écran du fichier

CALCUL DES PRESSIONS TEMPERATURES

Option n°1: Enregistrement des résultats sur fichier vierge
 (les anciennes valeurs stockées seront écrasées)
 Option n°2: Enregistrement des résultats en fin de fichier

Entrez votre choix (1/2): \$
 [Erreur de saisie: Entrez (1/2): \$]

B

ENTREE DES DONNEES AU CLAVIER

Entrez le n° de lame ou d'échantillon: \$\$\$\$\$\$\$\$

Format du n° d'analyse: 2 chiffres: année
 1 majuscule: n° de série
 3 chiffres: n° analyse dans la série
 ex: 87-G024

N° d'analyse du grenat: \$\$\$\$\$\$ N° d'analyse de la cordiérite: \$\$\$\$\$\$

PROP. MASSIQUES (%) PROP. MASSIQUES (%)
 MgO= EEE.EE MgO= EEE.EE
 FeO= EEE.EE FeO= EEE.EE

Saisie correcte ? (o/n): \$ Saisie correcte ? (o/n): \$
 [Erreur: Entrez (o/n): \$] [Erreur: Entrez (o/n): \$]

EDITION ECRAN DU RESULTAT

Sauvegarde des données sur fichier ? (o/n): \$
 (si 'n': attention pas d'édition imprimante)
 (prévue sans le fichier de sauvegarde)
 [Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

Faut-il effectuer d'autres calculs ?(o/n): \$
 [Erreur de saisie: Entrez la réponse (o/n) : \$]

C

EDITION SUR ECRAN DU RESULTAT

N° de lame: \$\$\$\$\$\$\$\$ N° analyse cordiérite: \$\$\$\$\$\$

N° analyse grenat: \$\$\$\$\$\$

X-Fe(Ga)= E.EEE X-Fe(Cd)= E.EEE
 X-Mg(Ga)= E.EEE X-Mg(Cd)= E.EEE
 Kd= E.EEE Z-Fe= E.EEE Z-Mg= E.EEE

AUTEUR	PRESSION(B)	TEMP.(°C)	N H2O (Cd)	X H2O (Cd)
Currie	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Hensen	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Hutcheon	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Newton	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Thompson	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Holdaway	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Martin0	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Martin2	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Martin4	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Martin6	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Lonker0	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Lonker2	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Lonker4	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Lonker6	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE
Lonker8	EEEE	EEEE	E.EE	E.EE

D

Fig. 17: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application PT-GA-CD

3- Unité fonctionnelle T-Op-Cp.

Cette unité propose des estimations thermiques sur les conditions d'équilibre des assemblages [ortho - clinopyroxène] dans les calibrations de Wood et Banno (1973), Ghent (1976). L'application développe deux modules (A, fig. 18):

- l'accès aux saisies de données et aux calculs;
- la consultation du fichier stockant les résultats.

La saisie des données et le calcul obéissent à la structuration standardisée pour tout le logiciel, à savoir:

- sélection du mode d'enregistrement sur fichier des résultats (B, fig. 18);
- sélection du mode d'entrée des données (B, fig. 18). Dans le cas d'une entrée au clavier, l'opérateur peut choisir le type de données entrées: les analyses chimiques ou les formules structurales des minéraux.

a- L'entrée au clavier des formules structurales.

Par l'intermédiaire du masque de saisie représenté sur la figure 18-C, on entrera:

- les paramètres d'identification du calcul: numéro de lame, numéros d'analyses correspondant aux formules structurales de l'ortho- et du clinopyroxène;
- les valeurs en nombre de cations de la formule structurale de chaque minéral.

La validation des saisies est contrôlée par l'utilisateur pour chaque phase.

b- L'entrée au clavier des analyses.

Elle permet la saisie (D, fig. 18):

- des paramètres d'identification du calcul: numéro de lame, numéros d'analyses de l'ortho- et du clinopyroxène;
- des proportions massiques en oxydes de l'analyse de chaque minéral.

La validation des saisies est contrôlée par l'utilisateur. Si ce dernier connaît les proportions massiques en Fe_2O_3 , il les entrera pour le calcul.

c- L'entrée des données par fichier.

Elle utilise le fichier des formules structurales et son index (E, fig. 18). Les deux numéros d'analyses des minéraux constituent l'unique saisie manuelle qui obéit à la structure de contrôle largement utilisée dans les autres applications en cas d'erreur de recherche.

d- Le calcul et la sauvegarde automatique des résultats.

Ces deux entités, transparentes pour l'opérateur, peuvent boucler indéfiniment en conservant le mode de saisie défini lors du premier accès. La visualisation des résultats n'est pas accessible entre chaque calcul; il faut mettre fin à ce dernier pour pouvoir éditer le fichier où ils sont stockés.

e- La restitution des calculs.

Qu'elle se fasse à l'écran ou sur l'imprimante, elle édite la totalité du fichier de sauvegarde en suivant la grille de la figure 18-F. Les X-Fe représentent les fractions du pôle pur ferreux dans la phase considérée; Fe-(mx), Mg-(mx) représentent le nombre de cations Fe^{2+} , Mg^{2+} répartis sur les sites M1 ou M2 des pyroxènes.

Fig. 18: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application T-OP-CP

EDITION DES RESULTATS SUR L'ECRAN

N° de lame: \$\$\$\$\$\$ N° d'analyse Opx: \$\$\$\$\$\$ N° d'analyse Cpx: \$\$\$\$\$\$

X-Fe(Opx) = E.333 Mg(m2) = E.333 Fe(m1) = E.333
 Opx --> Fe(m2) = E.333 Mg(m2) = E.333 Fe(m1) = E.333
 Cpx --> Fe(m2) = E.333 Mg(m2) = E.333 Fe(m1) = E.333

Activité Mg2SiO6(Opx) = E.333
 Tc(Wood & Banno 1) = E.333 Tc(Wood & Banno 2) = E.333 Tc(Wood & Banno 3) = E.333
 Tc(Wells) = E.333

V

(2 enregistrements par page écran)

F

EDITION DES RESULTATS PAR MAPPRIMANTE
 (Voir grille la grille d'édition sur écran (pas de contrôle de défilement))

ENTREE DES DONNEES TYPE ANALYSES AU CLAVIER

Entrez le n° de lame ou d'échantillon: \$\$\$\$\$\$

Format du n° d'analyse: 2 chiffres: année
 1 majuscule: n° de série
 3 chiffres: n° analyse dans la série
 ex: 87-G024

N° de lame: \$\$\$\$\$\$ N° d'analyse Opx: \$\$\$\$\$\$
 N° de lame: \$\$\$\$\$\$ N° d'analyse Cpx: \$\$\$\$\$\$

Prop. massiques (%) Opx

K2O	E.333	E.333
Na2O	E.333	E.333
MgO	E.333	E.333
SiO2	E.333	E.333
Al2O3	E.333	E.333
FeO	E.333	E.333
ZnO	E.333	E.333
CaO	E.333	E.333
Cr2O3	E.333	E.333
TiO2	E.333	E.333
H2O	E.333	E.333

Saisie correcte ? (o/n): \$
 [Erreur: Entrez (o/n): \$]
 Entrez Fe2O3 ou O --> Fe2O3 = E.333 E.333
 Entrez Fe2O3 ou O --> Fe2O3 = E.333 E.333

Faut-il effectuer d'autres calculs ? (o/n): \$
 [Erreur de saisie: Entrez la réponse (o/n): \$]

D

ENTREE DES DONNEES PAR FICHIER (FICHIER FO_STR)

Entrez le n° d'analyse de l'Opx: \$\$\$\$\$\$
 [Erreur: Entrez (o/n): \$]
 [N° d'analyse inconnu! Reprenez vous la saisie du n° ? (o/n): \$]

Entrez le n° d'analyse du Cpx: \$\$\$\$\$\$
 [Erreur: Entrez (o/n): \$]
 [N° d'analyse inconnu! Reprenez vous la saisie du n° ? (o/n): \$]

Faut-il effectuer d'autres calculs ? (o/n): \$
 [Erreur de saisie: Entrez la réponse (o/n): \$]

E

ENTREE DES DONNEES TYPE FORMULES STRUCTAU CLAVIER

Entrez le n° de lame ou d'échantillon: \$\$\$\$\$\$

Format du n° d'analyse: 2 chiffres: année
 1 majuscule: n° de série
 3 chiffres: n° analyse dans la série
 ex: 87-G024

N° de lame: \$\$\$\$\$\$ N° d'analyse Opx: \$\$\$\$\$\$
 N° de lame: \$\$\$\$\$\$ N° d'analyse Cpx: \$\$\$\$\$\$

Cations de la form. struct.

Al6	E.333	E.333
Fe2+	E.333	E.333
Fe3+	E.333	E.333
Ca	E.333	E.333
Cr	E.333	E.333
Mg	E.333	E.333
Mn	E.333	E.333
K	E.333	E.333
Si	E.333	E.333
Zn	E.333	E.333
Al4	E.333	E.333

Saisie correcte ? (o/n): \$
 [Erreur: Entrez (o/n): \$]
 Faut-il effectuer d'autres calculs ? (o/n): \$
 [Erreur de saisie: Entrez la réponse (o/n): \$]

C

CONSULTATION DU FICHIER Opx_CPX

La consultation des résultats se fait par édition complète en séquence du fichier Opx_CPX

Option n°1: Edition des résultats sur écran
 Option n°2: Edition des résultats sur imprimante

Entrez l'option choisie (1/2): \$
 [Erreur: Entrez à nouveau l'option choisie (1/2): \$]

Voulez vous accéder aux résultats ? (o/n): \$
 [Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

(S: n° accès direct à la consultation des résultats)
 [Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

A

Conception et réalisation: Frédéric Delay
 GEOL. PHYSIQUE, bat. SN 5, 161 (20 43 41 51)
 Université des Sciences et Techniques de Lille 1
 (20 43 41 60)
 59655 Villeneuve d'Ascq cedex

CALCUL DES TEMPERATURES DEQUILIBRE Opx_CPX SELON LES CALIBRATIONS DE GIBERT, NEWTON & WOOD SAUVEGARDE AUTOMATIQUE SUR FICHIER Opx_CPX (Application activée: T_OP_CP)

CALCUL DES TEMPERATURES DEQUILIBRE Opx_CPX

Option n°1: Enregistrement des résultats sur fichier vierge (les anciennes valeurs stockées seront écrasées)

Option n°2: Enregistrement des résultats en fin de fichier

Entrez votre choix (1/2): \$
 [Erreur de saisie: Entrez (1/2): \$]

Choix n°1: Entree des données de calcul par fichier
 Choix n°2: Entree des données de calcul par le clavier

Entrez votre choix (1/2): \$
 [Erreur: Entrez à nouveau votre choix (1/2): \$]

B

Type 1: Entree clavier des analyses
 Type 2: Entree clavier des formules struct.
 Entrez le type voulu (1/2): \$
 [Erreur: Entrez (1/2): \$]

4- Unité fonctionnelle P-G-Py-P.

Elle calcule les pressions d'équilibre de l'assemblage [grenat - orthopyroxène - plagioclase - quartz] ou encore [grenat - clinopyroxène - plagioclase - quartz]. Nous retrouvons (A, fig. 19):

- un accès aux saisies de données, au calcul et à la sauvegarde des résultats;
- une consultation des résultats par édition du fichier de sauvegarde.

Lors de l'accès au calcul, l'opérateur gère le devenir des anciens résultats stockés sur fichier ainsi que le mode d'entrée des données (B, fig. 19). Pour chaque calcul et quelque soit le mode d'entrée, il faudra tout d'abord définir le type d'association minéralogique étudiée (C, fig. 19).

a- L'entrée des données au clavier.

Elle respecte la grille de la figure 19-D en initialisant, pour chaque minéral, les valeurs des proportions massiques en oxydes nécessaires au calcul. La validité des saisies numériques est contrôlée par l'utilisateur. La valeur de la fraction en masse de Fe_2O_3 du pyroxène est entrée séparément ou mise à 0 si elle est inconnue de l'utilisateur.

b- L'entrée des données par fichier.

Elle s'adresse au fichier des analyses chimiques et à son index (E, fig. 19). Les numéros d'analyses servent de clef de recherche pour chacun des trois minéraux de l'équilibre (on entre pas l'analyse du quartz qui est considéré comme une phase pure). En cas d'erreur puis d'abandon de la recherche sur index, le déroulement du programme est interrompu. Notons, qu'indépendamment du mode d'entrée, l'opérateur devra toujours saisir au clavier la température de référence nécessaire à la réalisation du calcul (C, fig. 19).

c- l'édition des résultats.

Etant donné le nombre important de valeurs numériques sorties par la procédure de calcul, l'application propose une visualisation immédiate du résultat (F, fig. 19), la sauvegarde de ce dernier étant soumise à l'approbation de l'utilisateur (on évite ainsi une surcharge du disque avec des résultats dont l'intérêt n'est pas préalablement estimé). Ultérieurement, une restitution complète des enregistrements du fichier de sauvegarde reprendra la même grille de présentation que celle de la visualisation immédiate. Les champs proposés ont la signification suivante (F, fig. 19):

- Activ-Ca Ga, Activ-Mg Ga , Activ-Fe Ga sont les activités respectives du grossulaire, du pyrope et de l'almandin dans le grenat;
- Activ-An Pl: l'activité de l'anorthite dans le plagioclase;
- Activ-Fe(pyrox), Activ-Mg(pyrox) représentent les activités des pôles purs ferreux et magnésiens dans le pyroxène (ferrosillite, enstatite dans l'orthopyroxène, hedenbergite, diopside dans le clinopyroxène);
- Kd: constante d'équilibre de la réaction étudiée.

A

Application activée: P_G_PY_P)
 SAUVEGARDE SUR FICHIER P_GPYPL
 BOHLEN ET AL
 PLAGIOCLASE CALIBRATIONS NEWTON & PERKINS,
 CALCUL P DES EQUILIBRES GRENATOPX-CPX

Conception et réalisation: Frédéric Delay
 GEOL. PHYSIQUE, Bât. SN 5, 161 (20 43 41 51)
 Université des Sciences et Techniques de Lille 1
 59655 Villeneuve d'Ascq cedex

Voulez vous accéder aux fonctions de calcul? (o/n): \$
 [si 'n': accès direct à la consultation des résultats]
 [Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

Voulez vous accéder aux résultats ? (o/n): \$
 [Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

CONSULTATION DU FICHIER P_GPYPL
 La consultation des résultats se fait par édition
 complète en séquence du fichier P_GPYPL
 Option n°1: Edition des résultats sur écran
 Option n°2: Edition des résultats sur imprimante
 Entrez l'option choisie (1/2): \$
 [Erreur: Entrez à nouveau l'option choisie (1/2): \$]

B

CALCUL DES PRESSIONS

Option n°1: Enregistrement des résultats sur fichier vierge
 (les anciennes valeurs stockées seront écrasées)
 Option n°2: Enregistrement des résultats en fin de fichier
 Entrez votre choix (1/2): \$
 [Erreur de saisie: Entrez (1/2): \$]

Choix n°1: Entrée des données de calcul par le clavier
 Choix n°2: Entrée des données de calcul par le clavier
 Entrez votre choix (1/2): \$
 [Erreur: Entrez à nouveau votre choix (1/2): \$]

C

2 types de calculs peuvent être effectués:
 Type n°1: Calcul barométrique sur association Ga,Plagio,Cpx
 Type n°2: Calcul barométrique sur association Ga,Plagio,Cpx
 Entrez le type de calcul choisi: (1/2): \$
 [Erreur de saisie: Entrez (1/2): \$]

ENTREE DONNEES CLAVIER OU FICHIER)
 Les calculs se font pour 3 températures à savoir
 T(c), T+100(c), T+200(c).
 Entrez la valeur de T(c): E3E3E
 (RESTITUTION ECRAN DU RESULTAT)
 Sauvegarde des données sur fichier ? (o/n): \$
 (si 'n': attention pas d'édition imprimante)
 (prévue sans le fichier de sauvegarde)
 [Erreur de saisie: Entrez (o/n): \$]

Faut-il effectuer d'autres calculs ?(o/n): \$
 [Erreur de saisie: Entrez la réponse (o/n): \$]

D

ENTREE DES DONNEES AU CLAVIER

Entrez le n° de lame ou d'échantillon: \$\$\$\$\$\$\$\$\$\$
 Format du n° d'analyse: 2 chiffres: année
 1 majuscule: n° de série
 3 chiffres: n° analyse dans la série
 ex: 87-G024

N° analyse Ga: \$\$\$\$\$\$
 N° analyse Pl: \$\$\$\$\$\$
 Prop. massiques(%)

N° analyse [Opx/Cpx]: \$\$\$\$\$\$
 Prop. massiques(%)

MgO= E3.E3E3
 FeO= E3.E3E3
 Na2O= E3.E3E3
 K2O= E3.E3E3
 CaO= E3.E3E3
 MnO= E3.E3E3
 MgO= E3.E3E3
 Al2O3= E3.E3E3
 SiO2= E3.E3E3
 FeO= E3.E3E3
 NiO= E3.E3E3
 ZnO= E3.E3E3
 CaO= E3.E3E3
 TiO2= E3.E3E3
 Cr2O3= E3.E3E3
 H2O = E3.E3E3
 Total: E3E3E3

Saisie correcte ? (o/n): \$
 [Erreur: Entrez (o/n): \$]

Saisie correcte ? (o/n): \$
 [Erreur: Entrez (o/n): \$]

Entrez Fe2O3 du pyroxène, ou trappes O: -> Fe2O3 E3E3E3

E

ENTREE DES DONNEES PAR FICHIER
 (fichier ANA_CBX)

Entrez le n° d'analyse du grenat: \$\$\$\$\$\$
 [Erreur: Entrez (o/n): \$]

Entrez le n° d'analyse du plagioclase: \$\$\$\$\$\$
 [Erreur: Entrez (o/n): \$]

[N° d'analyse inconnu! Reprenez vous la saisie du n° ? (o/n): \$]
 [Erreur: Entrez (o/n): \$]

Entrez le n° d'analyse du pyroxène: \$\$\$\$\$\$
 [N° d'analyse inconnu! Reprenez vous la saisie du n° ? (o/n): \$]
 [Erreur: Entrez (o/n): \$]

F

RESTITUTION ECRAN DU RESULTAT

N° de lame: \$\$\$\$\$\$
 N° analyse Pl: \$\$\$\$\$\$
 N° analyse Ga: \$\$\$\$\$\$
 N° analyse [Opx/Cpx]: \$\$\$\$\$\$

Températures	E3E3E3	E3E3E3
Activ_Ca Ga(Newton)	E3E3E3	E3E3E3
Activ_Mg Ga(Newton)	E3E3E3	E3E3E3
Activ_Fe Ga(Newton)	E3E3E3	E3E3E3
Activ_An Pl(Newton)	E3E3E3	E3E3E3
Activ_Fe [Opx/Cpx]	E3E3E3	E3E3E3
Activ_Mg [Opx/Cpx]	E3E3E3	E3E3E3
Kd(Newton1)	E3E3E3	E3E3E3
Kd(Newton2)	E3E3E3	E3E3E3
Kd(Bohlen1)	E3E3E3	E3E3E3
Kd(Bohlen2)	E3E3E3	E3E3E3
Pression (b) (Newton1)	E3E3E3	E3E3E3
Pression (b) (Newton2)	E3E3E3	E3E3E3
Pression (b) (Bohlen1)	E3E3E3	E3E3E3
Pression (b) (Bohlen2)	E3E3E3	E3E3E3

Fig. 19: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application P-G-PY-P

5- Unité fonctionnelle P-Ga-Pl.

Elle établit les valeurs de pressions d'équilibre de l'assemblage [grenat-plagioclase-silicate d'alumine-quartz] dans les calibrations de Ghent (1976), Newton et Haselton (1981). L'ossature du développement reste similaire à celle de l'application précédente. L'opérateur choisit en début de traitement d'activer le processus de calcul ou la consultation des résultats stockés (A, fig. 20).

La procédure de calcul définit la position au fichier des futurs résultats à sauvegarder ainsi que le mode de saisie des données: saisie au clavier (C, fig. 20) ou saisie grâce au fichier des analyses et son index (D, fig. 20). Sur la base de ces définitions, le calcul peut être repris autant de fois que le souhaite l'utilisateur, tout en préservant les modes d'entrée et de sauvegarde générés lors du premier accès. Quelque soit le mode de saisie, l'opérateur entrera la température servant de base au calcul ainsi que le type de silicate d'alumine à l'équilibre: andalousite, disthène ou sillimanite (E, fig. 20).

La variable structurée contenant le résultat des calculs est de forte taille; il en est donc proposé une visualisation immédiate à l'écran (F, fig. 20), l'opérateur prenant alors lui-même la décision de sauvegarde.

La consultation des résultats se fera par édition complète du fichier de sauvegarde. Comme pour l'application précédente, une édition sélective par numéro d'échantillon serait simple à écrire, sous la forme d'un outil externe. L'édition obéit à la syntaxe de la grille définie sur la figure 20-F où:

- Activ-Ca Ga représente l'activité du grossulaire dans le grenat;
- Activ-An Pl représente l'activité de l'anorthite dans la plagioclase;
- Kd définit la valeur de la constante d'équilibre entre les phases.

VI- Les unités gérées par Menu-O.

Ce menu regroupe l'ensemble des utilitaires dédiés aux applications précédentes, ainsi qu'un sous-menu, Menu-T dont la fonction est d'organiser l'utilisation de programmes de transformations et transferts de fichiers.

1- Unités fonctionnelles Outil-01, Outil-02.

L'aspect conversationnel de ces deux utilitaires est extrêmement restreint. En fait, il s'agit de courts programmes permettant la modification de chaque index associé au fichier des analyses et au fichier des formules structurales. Ils seront lancés lorsque, après avoir édité l'index, l'utilisateur constate une anomalie sur la clef (mauvais format du numéro d'analyse, "bug" sur le disque ...). Cette anomalie peut engendrer des erreurs de recherche quand on utilise l'index lors d'un accès à la base de données. Les deux outils iront tout simplement réécrire sur l'index la clef et le numéro d'enregistrement entrés par l'utilisateur, ce qui réinitialisera le champ défectueux.

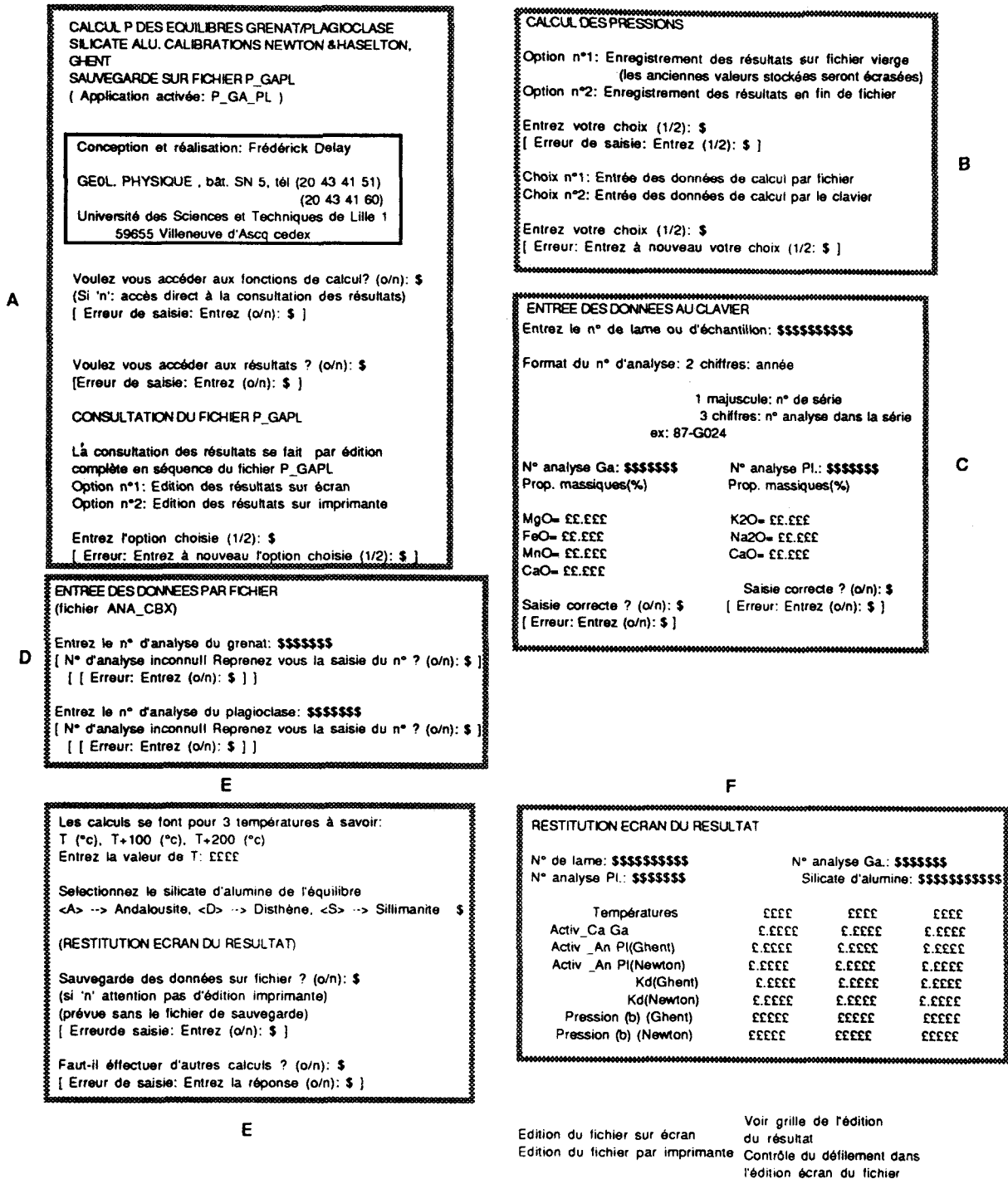


Fig. 20: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application P-GA-PL

2- Unités fonctionnelles Outil-03 à Outil-06.

Ce sont les utilitaires d'édition sélective par numéro d'échantillon des fichiers résultats:

- Outil-03 est affecté au fichier de l'application ACF-AKF;
- Outil-04 correspond à l'application AFM-AFM;
- Outil-05 correspond à l'application Therm-AI;
- enfin, Outil-06 est dédié à l'application T-Op-Cp.

Ces quatre programmes sont bâtis sur le même principe et leurs aspects conversationnels sont regroupés sur la figure 21. Après la saisie du numéro d'échantillon voulu, l'utilitaire lit tout le fichier des résultats et à chaque fois que l'enregistrement répond à l'identificateur sélectionné, les valeurs sont éditées en empruntant la grille de l'application de référence.

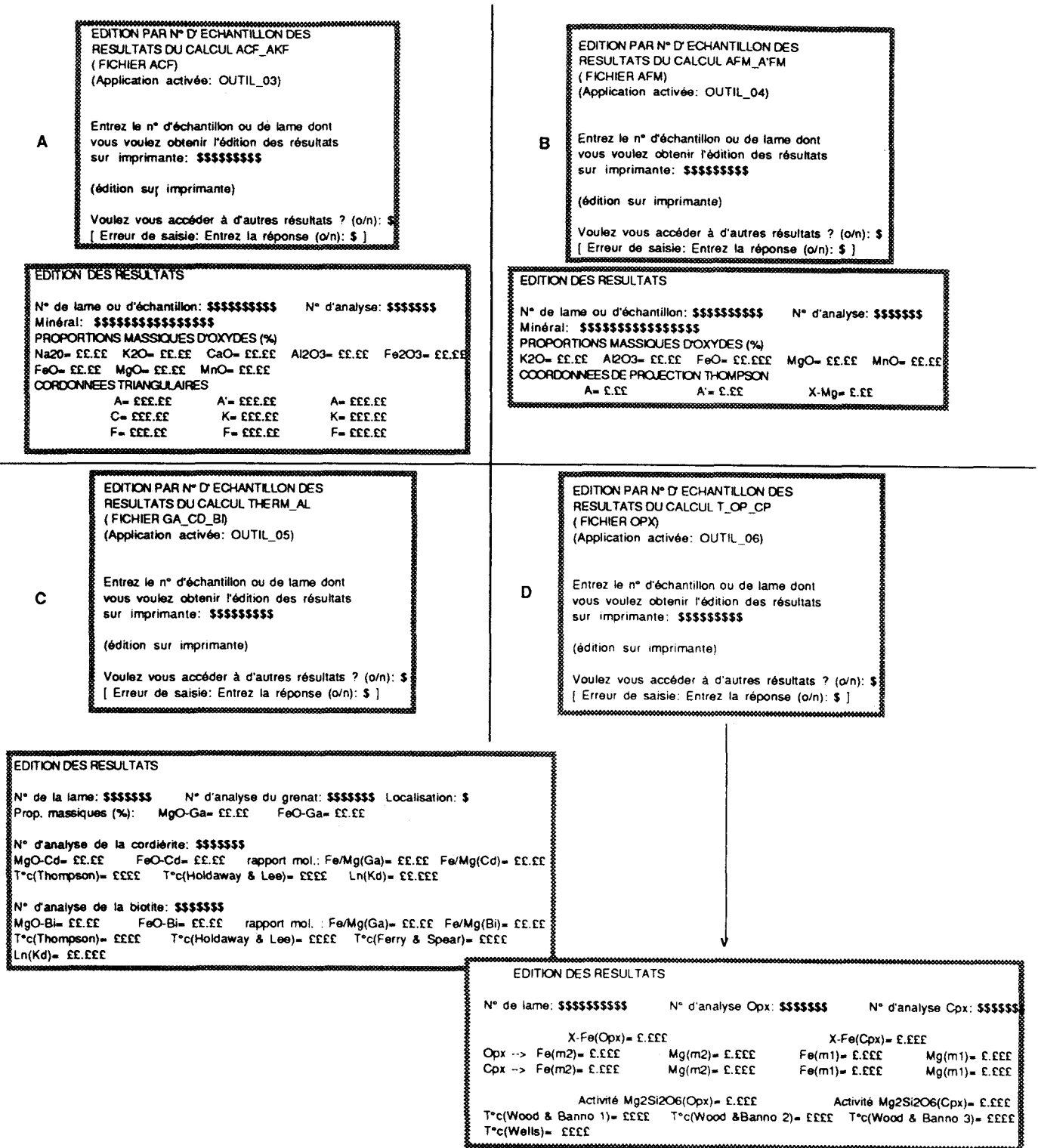


Fig. 21: Masques d'édition (saisie/résultats) des utilitaires OUTIL-03 -> OUTIL-06

3- Unité fonctionnelle Outil-07.

Nous avons vu que les deux fichiers principaux de la base de données sont associés à des index, ce qui favorise la convivialité et la vitesse des recherches. Le principe d'accès sur l'index le plus rapide repose sur la sélection dichotomique (voir analyse organique) mais, pour que cette sélection fonctionne sans erreur, il faut que les index soient triés par numéros d'analyses (les clefs) croissants. Ce rôle de tri est alloué à l'application outil-07 (fig. 22):

- l'opérateur sélectionnera l'index à trier;
 - un message d'attente le fait patienter pendant le chargement et le tri de l'index;
 - une fois trié, une édition de contrôle avec gestion du défilement à l'écran permet de vérifier le bon déroulement des opérations;
 - si le tri est correct (décision laissée à l'appréciation de l'utilisateur), l'index sera réécrit sur le disque.
- Dans le cas d'une appréciation négative, le logiciel conseille l'emploi des utilitaires Outil-01/Outil-02 afin de résoudre le problème directement sur l'index. En effet, les erreurs de tri sont le plus souvent liées à un mauvais format de la clef ou à la présence d'homonymes.

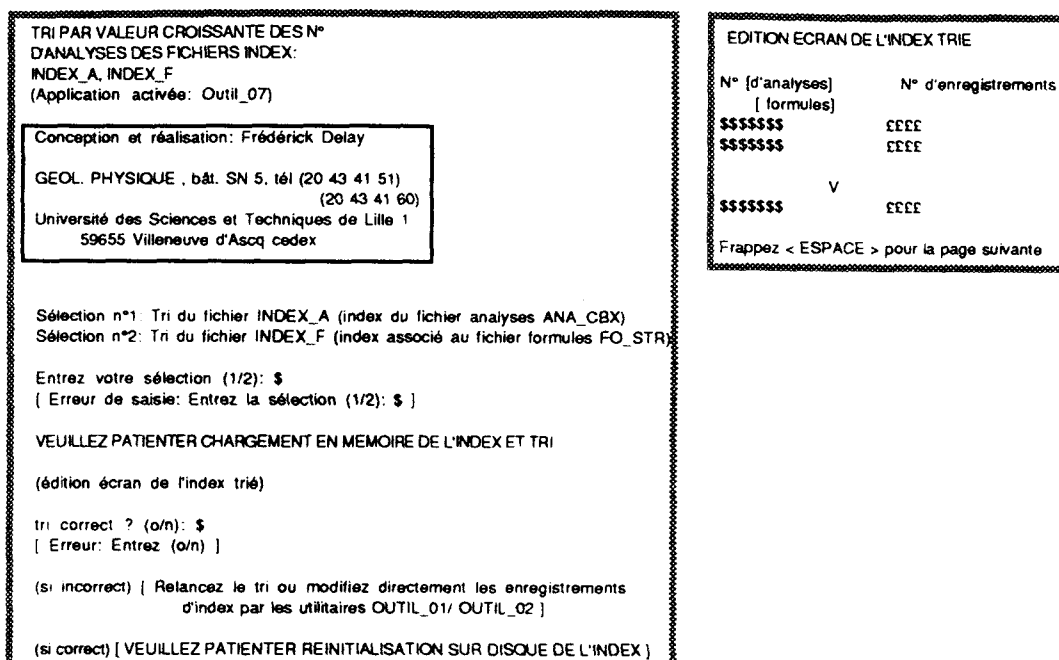


Fig. 22: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'utilitaire OUTIL-07

VII- Les unités gérées par Menu-T et l'acquisition automatique des données analytiques en sortie de microsonde.

Menu-T regroupe les applications chargées de réaliser des transformations concernant le fichier des analyses, le fichier des formules structurales et les index associés, ainsi qu'une application de transfert de fichiers textes. rappelons que:

- Trans-01 assure le passage données compactées / texte du fichier des analyses et de son index;
- Trans-02 assure le passage texte / données compactées pour le fichier des analyses et son index;

- Trans-03: assure le passage données compactées / texte du fichier des formules structurales et de son index;

- Trans-04: assure le passage texte / données compactées pour le fichier des formules structurales et son index.

L'aspect fonctionnel de ces quatre applications est totalement transparent pour l'utilisateur. Seuls les messages de vérification du positionnement sur disque entre fichier source et fichier cible sont affichés.

1- Unité fonctionnelle Com-txt.

Cette unité a pour mission de transférer des fichiers textes depuis un calculateur vers un compatible PC. Elle pourra bien évidemment transférer les fichiers décompactés par Trans-01 et Trans-03, mais aussi tous les autres fichiers textes (code ASCII) dont la taille n'excède pas 64 KO. Cette taille limite est choisie pour deux raisons:

- afin de rendre compatible la procédure de transfert avec tous les calculateurs, on utilise une communication physique entre les machines sans utiliser de protocole complexe. De ce fait on multiplie le risque d'erreur de transfert en travaillant sur des très gros fichiers;

- la taille limite de 64 KO correspond au maximum de données que peut gérer un programme écrit avec les anciennes versions des compilateurs BORLAND très largement utilisés sur les PC et compatibles.

Cette limitation n'est pas trop gênante dans la mesure où, il est toujours possible de segmenter le texte à transférer. Nous verrons, dans le cas qui nous intéresse, que les fonctions Trans-01 à Trans-04, se chargent automatiquement de telles segmentations.

En début de traitement, l'utilisateur peut, s'il le désire, obtenir à l'écran les directives d'utilisation (B, fig. 23). Elles indiquent le type de liaison, le protocole de transmission utilisé et le câblage nécessaire à la liaison des deux calculateurs. La programmation des ports de l'élément receveur obéit à la séquence (C, fig. 23):

- sélection du n° de canal de transmission choisi;
- définition en bauds de la vitesse de transmission;
- format en bits du caractère transmis;
- définition du test de parité.

Lorsque l'opération de programmation de la ligne de transmission est achevée, le receveur est prêt à réceptionner les données. L'utilisateur entre le nom à donner au fichier reçu, puis le récepteur se met en attente de caractères sur son port série.

Pendant le transfert, le receveur indique à l'écran le nombre de lignes de texte reçues. la procédure de transmission peut être reprise si l'utilisateur le désire. Notons qu'entre deux sessions d'échange, l'opérateur est en droit de modifier les paramètres de programmation de sa ligne série sur le récepteur. Cette possibilité imposant aussi des modifications au niveau de l'élément transmetteur, l'accès est protégé par un double contrôle et un message d'avertissement (A, fig. 23).

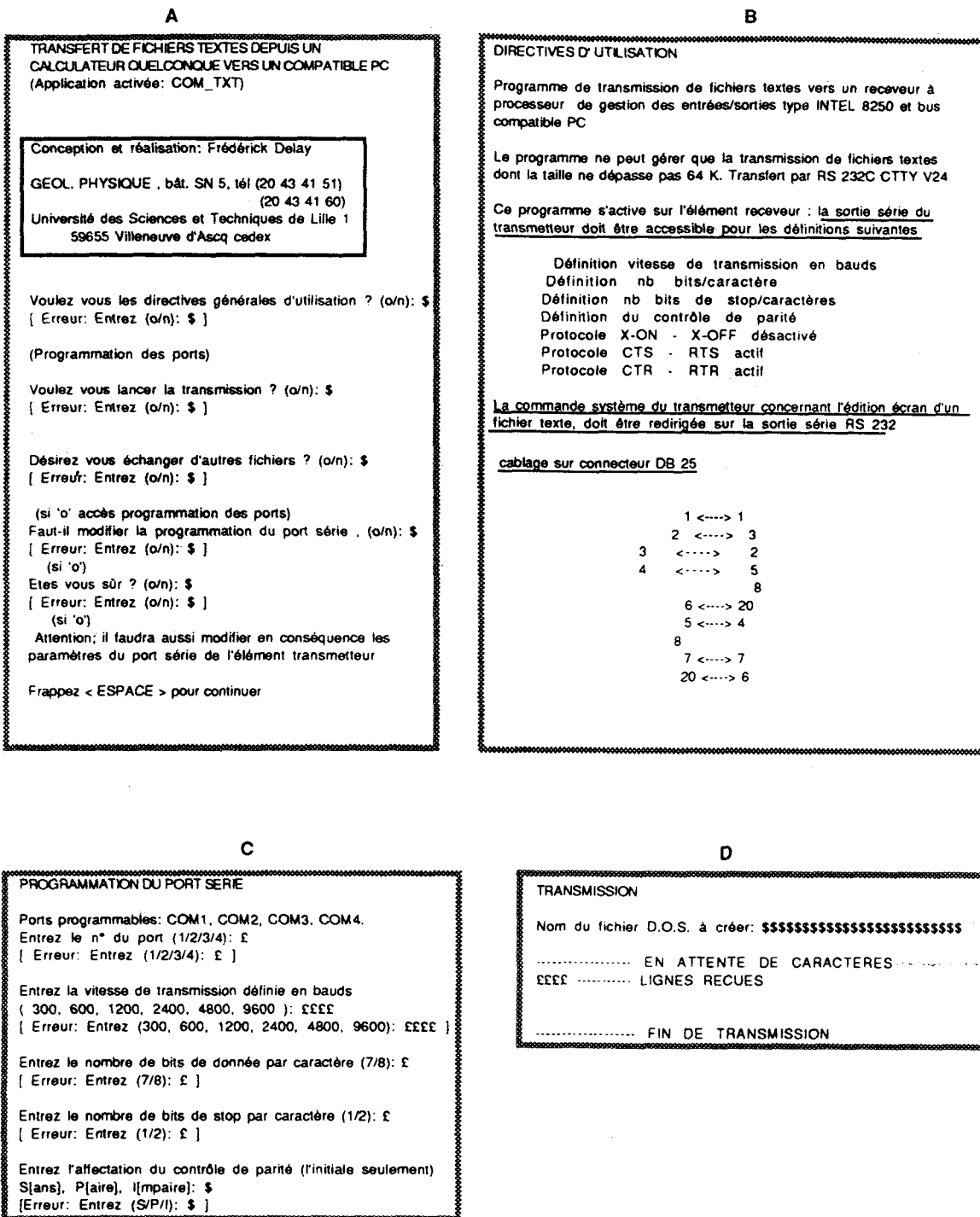


Fig. 23: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'utilitaire COM-TXT

2- Unité fonctionnelle Charg-01.

Cette unité charge automatiquement le fichier des analyses de la base de données à partir de la ligne de sortie série du calculateur annexe de la microsonde CAMEBAX. Le principe de transmission des données est comparable à celui mis en oeuvre dans Com-txt (voir analyse organique).

Les phases d'initialisation de l'application Charg-01 sont semblables à celles de l'application Com-txt. Seuls les masques d'écran tiennent compte de la spécificité de l'application et correspondent aux figures 24-A et 24-B.

Lorsque Charg-01 est en phase d'acquisition, les analyses reçues sont présentées à l'opérateur selon la grille de la figure 24-C. Pour chaque élément analysé (Na, K, Mn, Mg, Al, Si, Fe, Ni, Zn, Ca, Ti, Cr), nous avons de gauche à droite dans la grille:

- le rapport d'intensité du rayonnement X entre l'échantillon et le standard de calibration;
- le k ratio;
- la fraction en masse de chaque élément (celle de l'oxygène est calculée par différence);
- La proportion atomique résultante: fraction massique divisée par le poids moléculaire de l'élément;
- Les pourcentages pondéraux en oxydes (Na₂O ...) de l'analyse.

Tant qu'il est répondu 'o' ou 'retour chariot' à la question " Analysis?", l'étape d'acquisition boucle sur elle même, la sauvegarde sur fichier de chaque analyse étant automatique et transparente pour l'utilisateur. En fin de session de travail (réponse 'n' à la question "Analysis?"), l'application suggère de lancer le programme Trans-m dont la fonction est de compacter les analyses reçues sous forme de texte, en données numériques compatibles avec le format du fichier d'analyses de la base de données (A, fig. 24). L'application Trans-m est totalement transparente pour l'utilisateur et son étude ne sera abordée que dans l'analyse organique.

A

CHARGEMENT DIRECT DU FICHIER ANALYSES (ANA_CBX), PAR ACQUISITION DES DONNEES EN SORTIE DU PDP11 DE LA SONDE CAMEBAX (Application activée: CHARG_01)

Conception et réalisation: Frédérick Delay

GEOL. PHYSIQUE, bât. SN 5, tél (20 43 41 51)
(20 43 41 60)

Université des Sciences et Techniques de Lille 1
59655 Villeneuve d'Ascq cedex

Voulez vous les directives générales d'utilisation ? (o/n): \$
[Erreur: Entrez (o/n): \$]

(programmation des ports)

Voulez vous lancer la communication ? (o/n): \$
[Erreur: Entrez (o/n): \$]

Vous possédez maintenant un fichier texte contenant les informations relatives à vos analyses. Afin de compacter et transformer ces informations pour qu'elles soient compatibles avec le format du fichier ANA_CBX, Revenez sous système et lancez l'application TRANS_M

ATTENTION: Vous pouvez ne pas lancer TRANS_M, mais si vous réactivez l'acquisition sur PDP, votre fichier texte sera écrasé par les nouvelles données

Frappez < ESPACE > pour sortir

B

DIRECTIVES D'UTILISATION

Programme de communication des analyses Camebax en sortie du PDP11 de la sonde vers un receveur à processeur de gestion des entrées/sorties type INTEL 8250 et bus compatible PC

Ce programme ne peut être activé en ce qui concerne la communication sensu stricto, que lorsque la calibration analytique de la sonde est terminée et que le PDP11 a renvoyé sa première invite: 'ANALYSIS ?'

Ce programme s'active sur l'élément receveur : la sortie série du transmetteur doit être accessible pour les définitions suivantes

Définition vitesse de transmission en bauds
Définition nb bits/caractère
Définition nb bits de stop/caractères
Définition du contrôle de parité
Protocole X-ON - X-OFF désactivé
Protocole CTS - RTS actif
Protocole CTR - RTR actif
cablage sur connecteur DB 25

1	<---->	1
2	<---->	3
3	<---->	2
4	<---->	5
		8
6	<---->	20
5	<---->	4
		8
7	<---->	7
20	<---->	6

C

COMMUNICATION

----- EN ATTENTE

ELEMENT	K I. X./I. STD.	K. RATIO	W. F. CONCEN.	NORMALIZED ATOM. C	ELEM. & O COMP. C
NA :	E.EEEE	E.EEEE	E.EEEE	E.EEEE	E.EEEE
CR :	V E.EEEE	V E.EEEE	V E.EEEE	V E.EEEE	V E.EEEE
O		E.EEEE		E.EEEE	BY DIFFERENCE
TOTAL :			E.EEEE		E.EEEE
ANALYSIS ?					

Programmation du port série:
voir application COM_TXT

Fig. 24: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'utilitaire CHARG-01

CHAPITRE III: ANALYSE ORGANIQUE

I- Considérations préliminaires.

1- Langages d'implantation.

De par sa nature, l'analyse organique fait beaucoup plus intervenir l'aspect matériel que ne le faisait l'analyse fonctionnelle. C'est pourquoi, avant d'entrer dans le vif du sujet, il semble opportun de préciser quelques points. De part sa taille, la construction de l'application est grandement facilitée lorsque le langage d'implantation laisse à l'utilisateur la possibilité de définir ses propres types de données et ses propres structures. Ces dernières donneront un format aux informations sauvegardées sur fichiers. Comme nous allons le voir, l'application fait largement appel à ces structures, ainsi qu'à l'accès séquentiel indexé sur fichier.

Ces quelques remarques sont suffisantes pour éviter l'utilisation du BASIC standard comme langage d'implantation. On préférera des langages nettement plus structurés tels que: PASCAL, ADA, ou encore C. (Les développements personnels de l'application sont écrits en Pascal sur COMPAQ 386 sous MS DOS et en C sur HP 9000 sous UNIX). A cela il faudrait ajouter quelques routines en langage d'assemblage afin d'améliorer les commandes systèmes. On conservera, en particulier pour les fichiers d'accès direct ou séquentiel indexé, une structure qui permette l'utilisation du BASIC standard, à savoir: la mise à blanc du premier enregistrement du fichier correspondant en BASIC standard à l'espace nécessaire pour la gestion du nombre d'enregistrements. Cette opération, inutile en C ou en PASCAL, ne nuit pas au fonctionnement des programmes.

2- Remarques concernant les menus.

Les menus, Menu-A, Menu-M, Menu-PT, Menu-O constituent de véritables applications qui peuvent être écrites de deux manières:

- soit sous forme d'un programme édité dans le langage utilisé par le logiciel, ce langage devant permettre le lancement et l'exécution d'un programme à partir d'un autre;
- soit sous forme d'une application du système d'exploitation écrite avec les commandes du "Shell" (couche externe du système) et lançant les exécutables relatifs aux options proposées.

On se contentera de présenter un type de programme source pour chacune des possibilités en prenant l'exemple de Menu-A.

a- Premier cas: exemple d'utilisation du langage C

```
/* Programme Menu-A.c */
/* exécution des unités fonctionnelles se fait à partir de fichiers .EXE */
# include <stdio.h>
# include <process.h>

status (int val)
{
```

```
    if (val == 1)
        printf (" Impossible de lancer l'unité fonctionnelle \n");
    else
        if (val > 0 )
            printf("Unité fonctionnelle terminée de façon anormale\n");
}
main()
{
    char *pathname [] = {    \\\fantom;
                            "c: \\sonde \\charg-02.EXE";
                            "c: \\sonde \\modif-A.EXE";
                            "c: \\sonde \\ecran-I.EXE";
                            "c: \\sonde \\liste-I.EXE";
                            }

    char *args[]
    int choix;

    /*-----*/
do
    {
        printf("option n° 0: retour système \n");
        printf("option n° 1: entrée d'analyses dans le fichier \n");
        printf("option n° 2: recherche et modification d'analyses \n");
        printf("option n° 3: édition à l'écran de l'index du fichier analyses \n");
        printf("option n° 4: édition sur imprimante de l'index du fichier des
analyses \n");
        printf("entrez l'option choisie: 0/1/2/3/4 \n");
        scanf("%d",choix);
        args[0] = pathname[choix];

        if(choix <> 0)
            status(spwanl(P-wait, pathname[choix], args[0], NULL));
        /* spwanl: fonction d'appel du processus fils, P-wait signifiant au
processus père d'attendre la fin du processus fils */
    }
    while(choix != 0);

} /* fin de Menu-A */
```


b- Deuxième cas: exemple sous système MS DOS.

Menu-A.bat

echo off

: debut

echo option A: retour au système d'exploitation.

echo option B: entrée d'analyses au fichier.

echo option C: recherche et modifications d'analyses.

echo option D: édition à l'écran de l'index du fichier analyses.

echo option E: édition par imprimante du fichier analyses.

choix A B C D E

rem choix.com = procédure assembleur 8086

if error level 4 goto: fin

if error level 3 goto: opt B

if error level 2 goto: opt C

if error level 1 goto: opt D

if error level 0 goto: opt E

: opt B

command/C charg-02.bat ---> c:\sonde \charg-02.EXE

goto: debut EXIT

: opt C

command/C modif-A.bat ---> c:\sonde \modif-A.EXE

goto: debut EXIT

: opt D

command/C ecran-I.bat ---> c:\sonde \ecran-I.EXE

goto: debut EXIT

: opt E

command/C liste-I.bat ---> c:\sonde \liste-I.EXE

goto: debut EXIT

: fin

Source en assembleur 8086 de choix.com

; fichier choix.asm


```
SCASB ; équivalent de " cmp AL, [ ES:DI ] "  
je danslist  
loop compare  
jmp encore  
danslist:  
dec ccl  
mov al, cl  
mov ah, 4CH  
int 21H  
choix ENDP  
prog ENDS  
END choix
```

Dans la suite de l'analyse organique, nous ne reviendrons pas sur la structure à donner aux menus; elle est similaire à l'une des deux formes précédemment exposées. Notons que dans les deux cas de figure, le retour au système d'exploitation ne constitue pas une unité fonctionnelle à part entière puisque le processus s'intègre directement dans le fonctionnement du menu: soit par la gestion d'un processus fantôme dans le programme écrit en C, soit par un branchement en fin de programme dans le cas du menu écrit sous système d'exploitation MS-DOS.

3- Symbolisme utilisé dans les arbres programmatiques.

Les arbres programmatiques sont des schémas standardisés décrivant de manière précise le fonctionnement d'un programme. Ils représenteront ici la part majeure de l'analyse organique car, après la description et la définition des types, fonctions, procédures et variables, ils fournissent l'algorithme nécessaire au fonctionnement de l'application. Leur symbolisme est résumé et expliqué sur la figure 25.

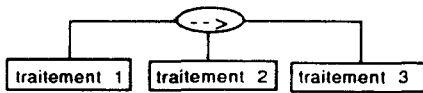
4- Objets généraux manipulés par l'ensemble du logiciel.

Comme nous l'avons déjà vu dans l'analyse fonctionnelle, l'ensemble du logiciel repose en grande partie sur les objets constituant une petite base de données:

- le fichier des analyses de minéraux à la sonde Camebax;
- le fichier des formules structurales des minéraux analysés.

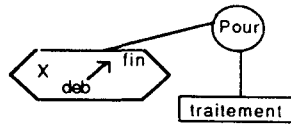
Du fait de la taille que peuvent atteindre ces fichiers et de la fréquence avec laquelle il faut y accéder, une structure pouvant répondre à un accès séquentiel indexé à été développée. Rappelons le principe utilisé (fig. 26):

- l'utilisateur entre la valeur 'cherch' de la clef de détermination dans l'index;
- l'index est lu jusqu'à ce que la clef corresponde à la valeur 'cherch' et le numéro d'enregistrement correspondant est sorti;



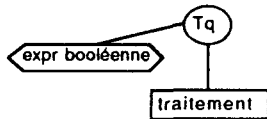
La séquence:

Elle est lue de bas en haut et de gauche à droite. ce qui donne la succession des opérations: traitement 1 puis 2 puis 3



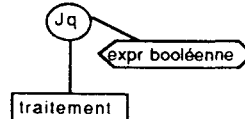
La répétitive:

Ceci symbolise une exécution de traitement en utilisant un compteur X. Si X est un entier, le traitement se fera (fin - deb + 1) fois et si X est un type par énumération, le traitement se réalisera autant de fois qu'il y a de valeurs successives entre deb et fin



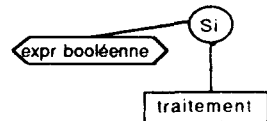
boucle tant que:

Le traitement est réalisé tant que l'expression booléenne est vraie. Notons que l'expression booléenne est testée avant le traitement. Si cette expression est fausse avant d'arriver sur la structure Tq, le traitement ne sera jamais exécuté



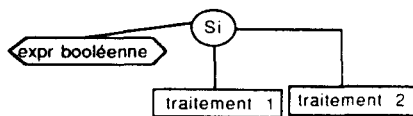
Boucle jusqu'à:

Le traitement est réalisé jusqu'à ce que l'expression booléenne soit vraie. Notons que dans sa structure, l'expression booléenne est testée après le traitement. Ainsi, quelque soit la valeur de l'expression avant d'arriver sur la structure Jq, le traitement sera réalisé au moins une fois



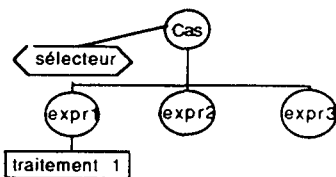
Alternative Si

Le traitement ne sera réalisé que si l'estimation de l'expression booléenne est vraie



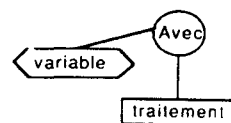
Alternative Si - Sinon

L'expression booléenne est estimée. Si elle est vraie, le traitement 1 sera exécuté; si elle est fausse, c'est le traitement 2 qui est exécuté

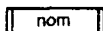


sélection

La variable sélecteur est estimée avant d'entrer dans la structure. Si sélecteur = expr1 le traitement 1 est exécuté. Si sélecteur = exprn le traitement n est exécuté.



Cette représentation permet de condenser l'écriture de traitement. Variable représente une structure (record en Pascal, structure en C), dont un champ pourra être directement nommé dans traitement, sans utiliser son nom complet. (Ex: Si "nom" est un champ de Variable, dans traitement toute expression peut utiliser "nom" plutôt que "variable.nom")



L'encadré à double barre signifie que nom correspond à l'appel d'une fonction, d'une procédure par le traitement.



L'encadré simple sert à faire le rappel entre 2 arbres programmatiques de la suite en séquence du traitement

Fig. 25: Symbolique utilisée dans la réalisation des arbres programmatiques.

- avec ce numéro d'enregistrement le pointeur du fichier principal peut être incrémenté de $(noenr - 1) * T$ octets (T: taille de chaque enregistrement du fichier principal);

- le calculateur peut alors accéder directement à l'enregistrement voulu puisqu'il connaît maintenant sa position exacte dans le fichier principal.

L'accès séquentiel indexé concerne deux fichiers majeurs: celui des analyses: Ana-Cbx, l'index associé étant Index-A; celui des formules structurales: Fo-Str, l'index associé étant Index-F.

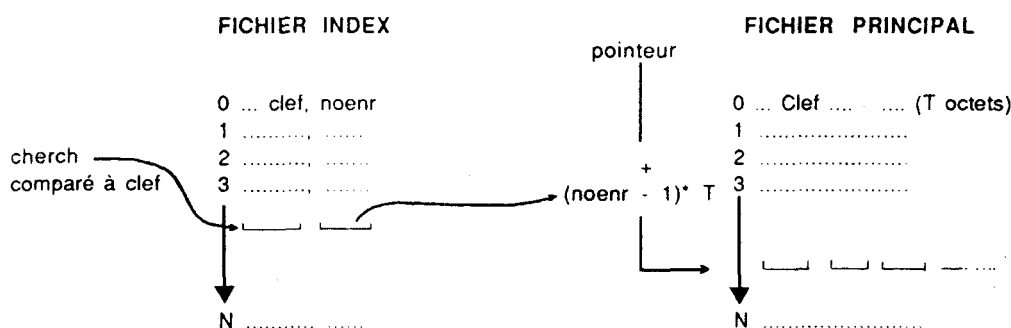


Fig. 26: Mode de fonctionnement d'un accès séquentiel indexé.

a- Le fichier Ana-Cbx

Il est constitué de structures du type En-A:

En-A (96 octets):

- snolam: chaîne de 10 caractères: numéro d'échantillon ou de lame
- snoana: chaîne de 10 caractères: numéro d'analyse Camebax
- smin: chaîne de 16 caractères: nom du minéral ou de la roche
- nbo: réel: nombre d'atomes d'oxygène de la formule structurale
- Na2OM - K2OM - MnOM
- MgOM - Al2O3M - SiO2M réels: proportions massiques d'oxydes de l'analyse
- FeOM - NiOM - ZnOM
- CaOM - TiO2M - CrO3M
- H2OM
- Total: réel: total des proportions massiques d'oxydes

Le fichier Index-A associé au fichier des analyses est constitué de structures du type A-ind:

A-ind (12 octets):

- Inoana: chaîne de 10 caractères: clef de recherche sur le numéro d'analyse
- noenr: entier: numéro d'enregistrement correspondant dans le fichier Ana-Cbx

b- Le fichier Fo-Str

Il représente une suite de structures du type En-F:

En-F (100 octets):

- lnolam: chaîne de 10 caractères: numéro de lame

- lnoana: chaîne de 10 caractères: numéro d'analyse Camebax
- lmin: chaîne de 16 caractères: nom du minéral
- nbo: réel: nombre d'atomes d'oxygène de la formule structurale
- Si - Al4 - Al6 - Cr
- Ti - Fe3 - Fe2 - Mn réels: nombre de cations de la formule structurale
- Zn - Ni - Mg - Ca
- Na - K - OH

- Le fichier Index-F, associé au fichier des formules structurales, est constitué de structures du type F-ind:

F-ind (12 octets):

- pnoana: chaîne de 10 caractères: clef de recherche sur le numéro d'analyse
- noenr: entier: numéro d'enregistrement correspondant dans le fichier Fo-Str

Dans les programmes qui seront présentés, les index sont créés en même temps que leurs fichiers principaux (voir Charg-02, Struct-M). Ceci n'est pas une nécessité, il est tout à fait possible de les construire de façon différée grâce à une unité fonctionnelle spécifique. On peut, par conséquent, dresser un index sur une ou plusieurs autres clefs que le numéro d'analyse (prendre garde cependant aux homonymes sur les autres clefs de détermination).

II- Analyse organique des applications associées à Menu-A.

Rappelons que Menu-A gère le fichier des analyses Camebax et que l'unité fonctionnelle Charg-01 d'acquisition automatique des analyses à la sortie de la microsonde occupe une place à part traitée à la fin de ce chapitre.

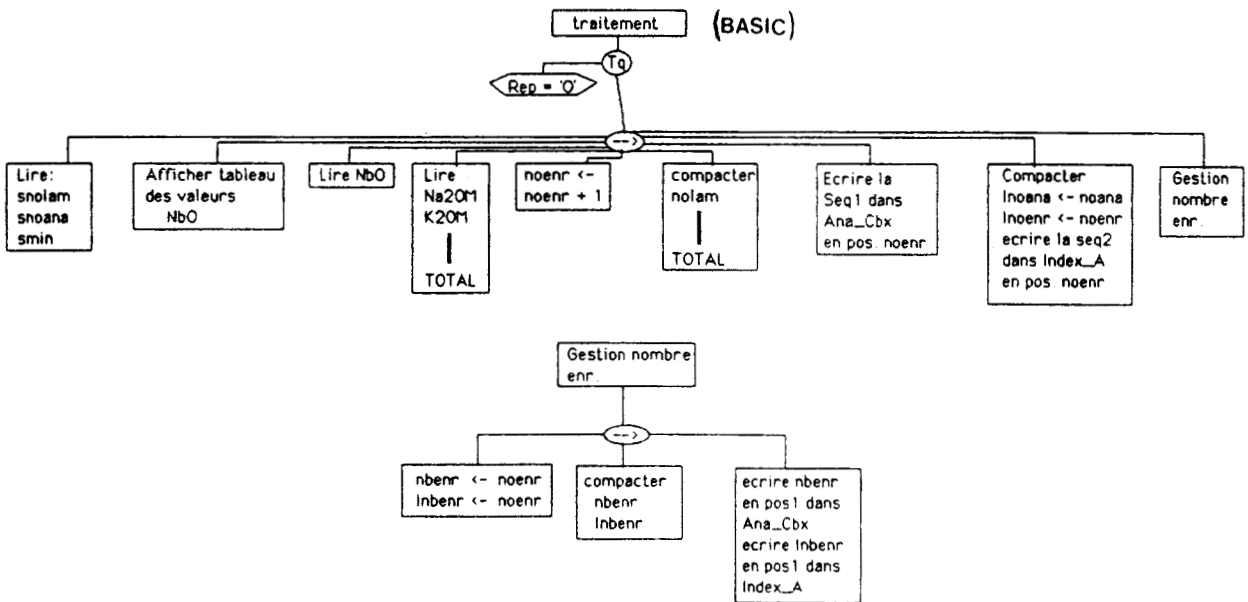
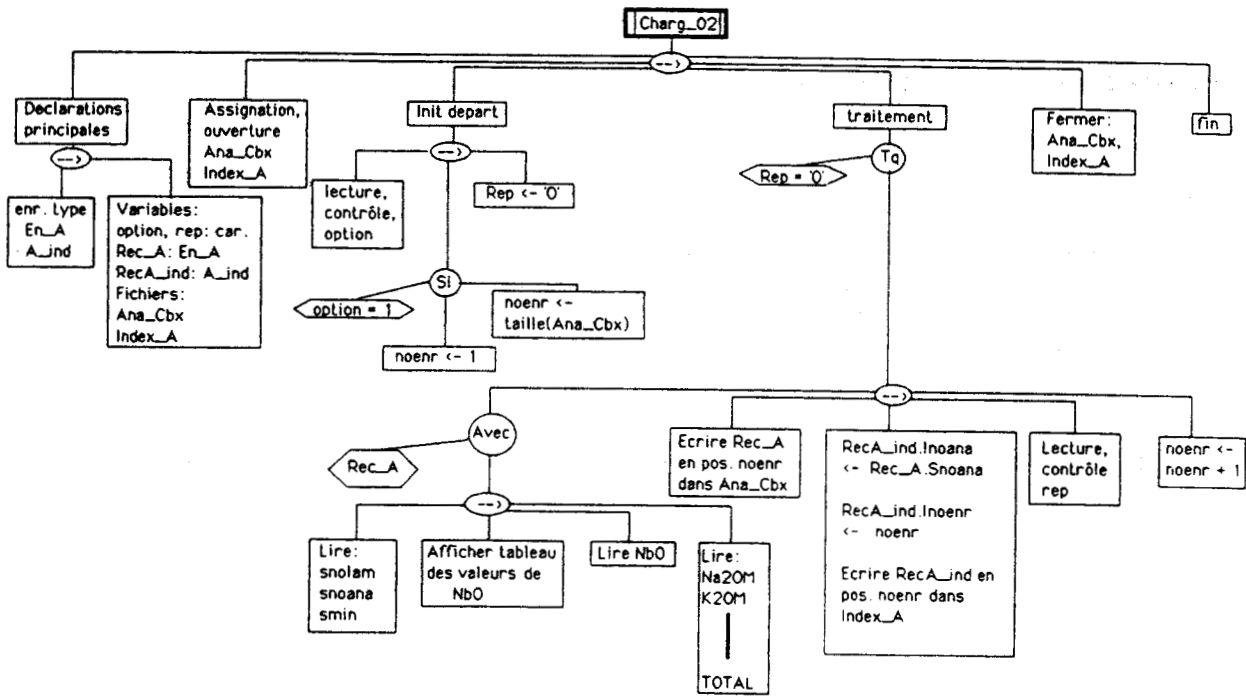
1- Unité fonctionnelle Charg-02.

Cette unité fonctionnelle (arbre A1) utilise les types En-A et A-ind auxquels on associe respectivement les variables Rec-A et RecA-ind.

Deux variables de type caractère sont définies:

- option: '1' -> le traitement charge un nouveau fichier Ana-Cbx et Index-A;
- '2' -> le traitement ajoute les données en fin de fichiers Ana-Cbx et Index-A préexistants;
- rep: permet de faire boucler le traitement pour charger les fichiers.

La structure de traitement sur l'arbre A1 est construite pour des accès aux fichiers écrits avec des langages type PASCAL UCSD, FORTRAN 77, C, TURBOBASIC,... Avec l'interpréteur du BASIC standard, il faut gérer soit-même la taille du fichier d'accès direct en conservant cette valeur sur le premier enregistrement (enregistrement n°1 en BASIC). C'est pourquoi le premier enregistrement de la structure présentée reste vide (enregistrement n° 0 en C, PASCAL, FORTRAN). Cette opération n'est pas nécessaire dans le cas de langages type PASCAL, mais elle ne gêne en rien le fonctionnement de l'application et permet de conserver la compatibilité de l'algorithme avec les contraintes imposées par le BASIC standard.



Arbre A1

Les divergences sur l'arbre programmatique A1 entre une application écrite pour un langage structuré et celle utilisant le BASIC, reposent essentiellement sur des problèmes de syntaxe et l'impossibilité de définir une variable structurée en BASIC. Ces divergences s'expriment encore mieux si l'on compare les deux sources possibles du programme Charg-02

Eléments du programme basic standard relatif à l'application charg-02

```

/
/
100 ' DEFINITION FICHIERS
110 open "R",£1,"b:ana-cbx",96
120 field £1,10 as snolam$,10 as snoana$,16 as smin$,4 as nbo$,4 as na2om$,4 as k2om$,
      4 as k2om$,4 as mnom$,4 as mgom$,4 as al2o3m$,4 as sio2m$,4 as feom$,
      4 as niom$,4 as znom$,4 as caom$,4 as tio2m$,4 as cr2o3m$,4 as h2om$,
      4 as total$
130 field £1,2 as nbenr$
140 '
150 open "R",£2,"b:index-a",12
160 field £2,10 as inoana$,2 as inoenr$
170 field £2,2 as inbenr$
/
/
1000 'TRAITEMENT

(entrées des données nolams... na2om... total)
2000' compactage
2010 lset snolam$=nolam$: lset snoana$=noana$: lset smin$=min$
2020 lset nbo$= mks$(nbo)
2030 lset na2om$= mks$(na2om): lset k2om$= mks$(kom$)
/
/
2100 lset h2om$= mks$(h2om): lset total$= mks$(total)
2110 noenr =noenr+1
2120 put £1,noenr
2130'
2140 lset inoana$= noana$ : lset inoenr$= mki$(noenr)
2150 put £2,noenr
2160'
2170' Gestion nb d'enr
2180 lset nbenr$ = mki$(noenr) : lset inbenr$ = mki$(noenr)
2190 put £1,1 : put £2,1
/
/
```

Elément du programme Turbo Pascal relatif à l'application Charg-02

```

/
/
(* déclarations*)

type
  En-A = record
      snolam: string[10];
      snoana : string[10];
      smin : string[10];
      nbo: réal;
      na2om, k2om, mnom, mgom,
      al2o3m, sio2m, feom, niom,
      znom, caom, tio2m, cr2o3m,
      h2om, total : real;
  end;

  A-ind = record
      inoana: string[10];
      inoenr : integer;
```



```
end;

var
  rec-A: En-A;
  recA-ind: A-ind;
  ana-cbx: file of En-A;
  index-A : file of A-ind;
  noenr: integer;
  /
  /
  (*traitement *)
  if option = '1' then
    begin
      assign (ana-cbx,'b:ana-cbx'); rewrite (ana-cbx);
      assign (index-A,'b: index-A'); rewrite (index-A);
      noenr :=1;
    end
  else
    begin
      assign (ana-cbx,'b:ana-cbx'); reset (ana-cbx);
      assign (index-A,'b: index-A'); reset (index-A);
      noenr := filesize(index-A);
    end; (* fin de if - else *)
  /
  /
  with rec-A do
    begin
      ( lecture de snolam... nbo, na2om... total)
    end;

  seek (ana-cbx,noenr);
  write (ana-cbx,rec-A);

  recA-ind.inoana := rec-A.noana;
  recA-ind.inoenr := noenr;
  seek (index-A,noenr);
  write(index-A,recA-ind);
  noenr := noenr+1;
  /
  /
```

2- Unité fonctionnelle Modif-A.

(structure complète: se référer aux arbres programmatiques A2 -> A3)

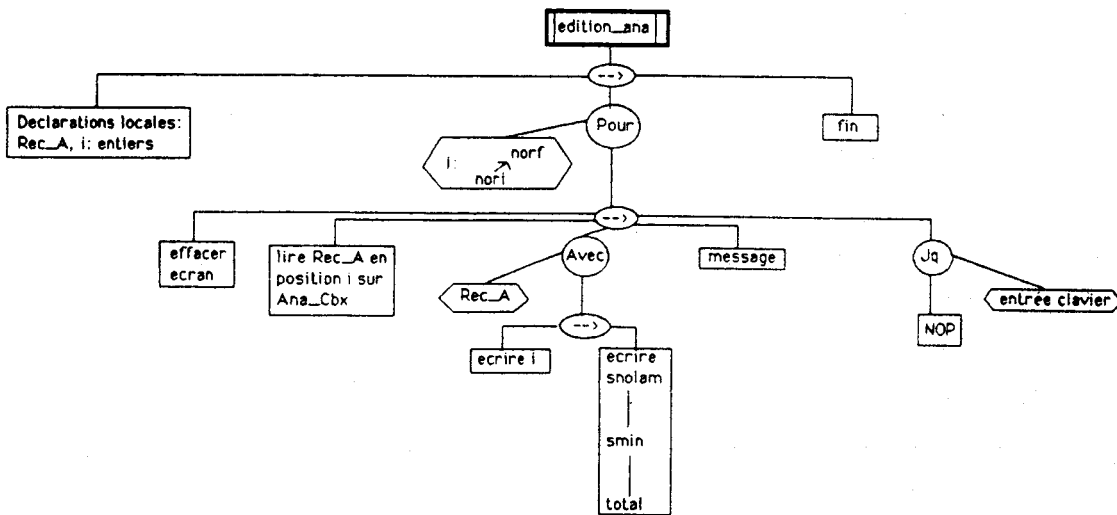
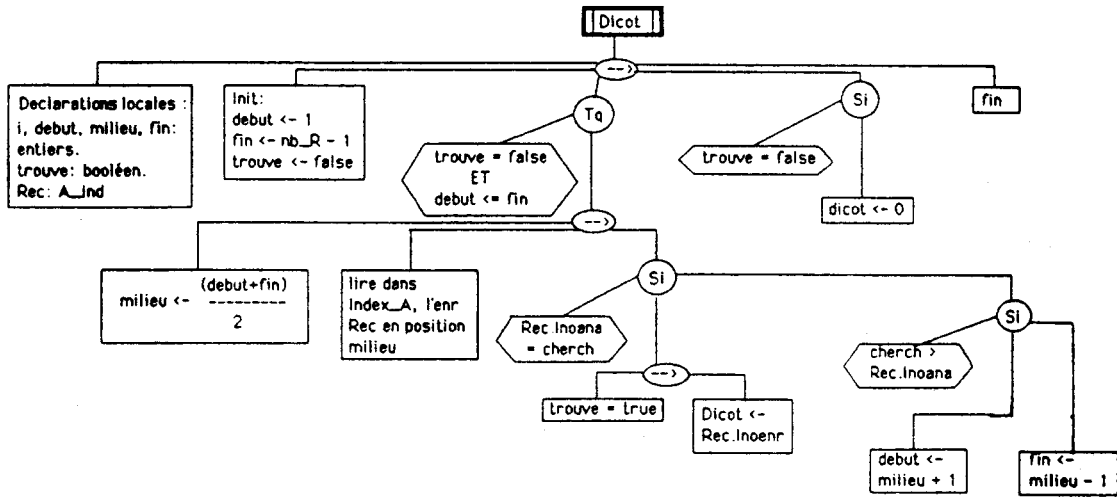
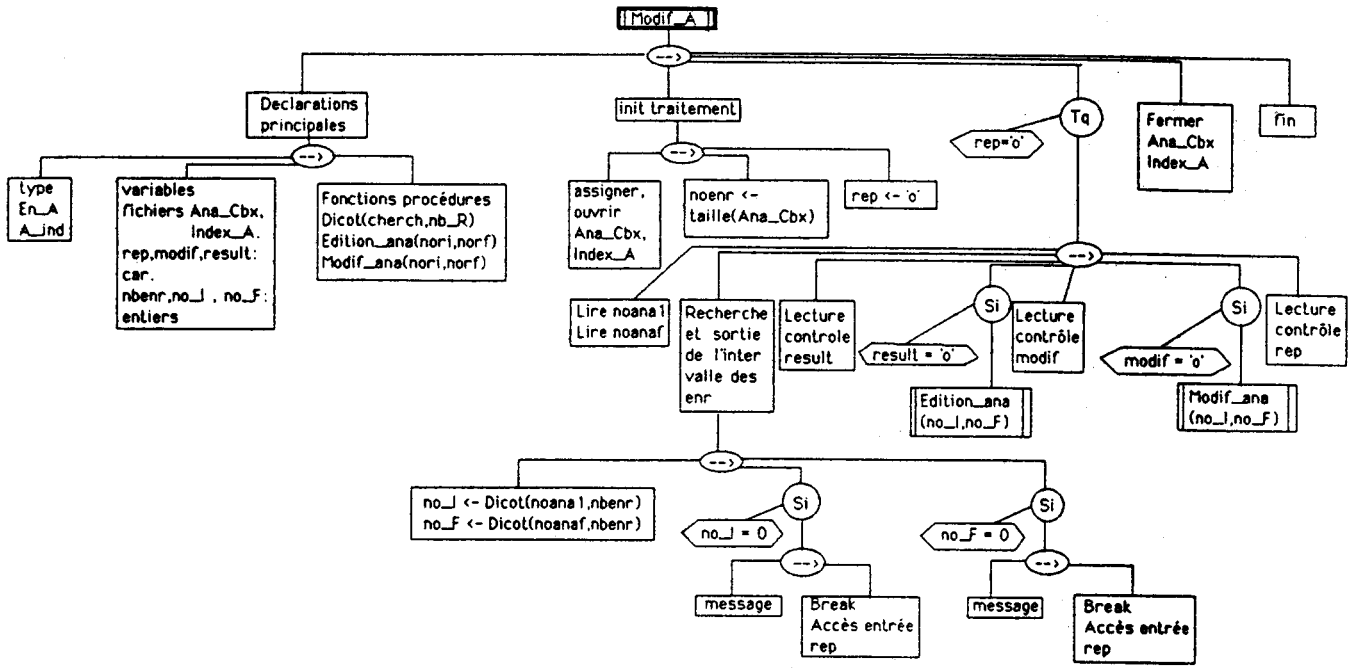
Cette unité fait appel aux types En-A, A-ind, mais n'a pas besoin des variables globales afférentes, car elles sont définies localement dans les procédures et fonctions qui les utilisent.

- La fonction Dicot(cherch, nb-r) permet de lire par dichotomie le fichier Index-A (arbre A2). Les paramètres passés par valeur matérialisent les entités suivantes:

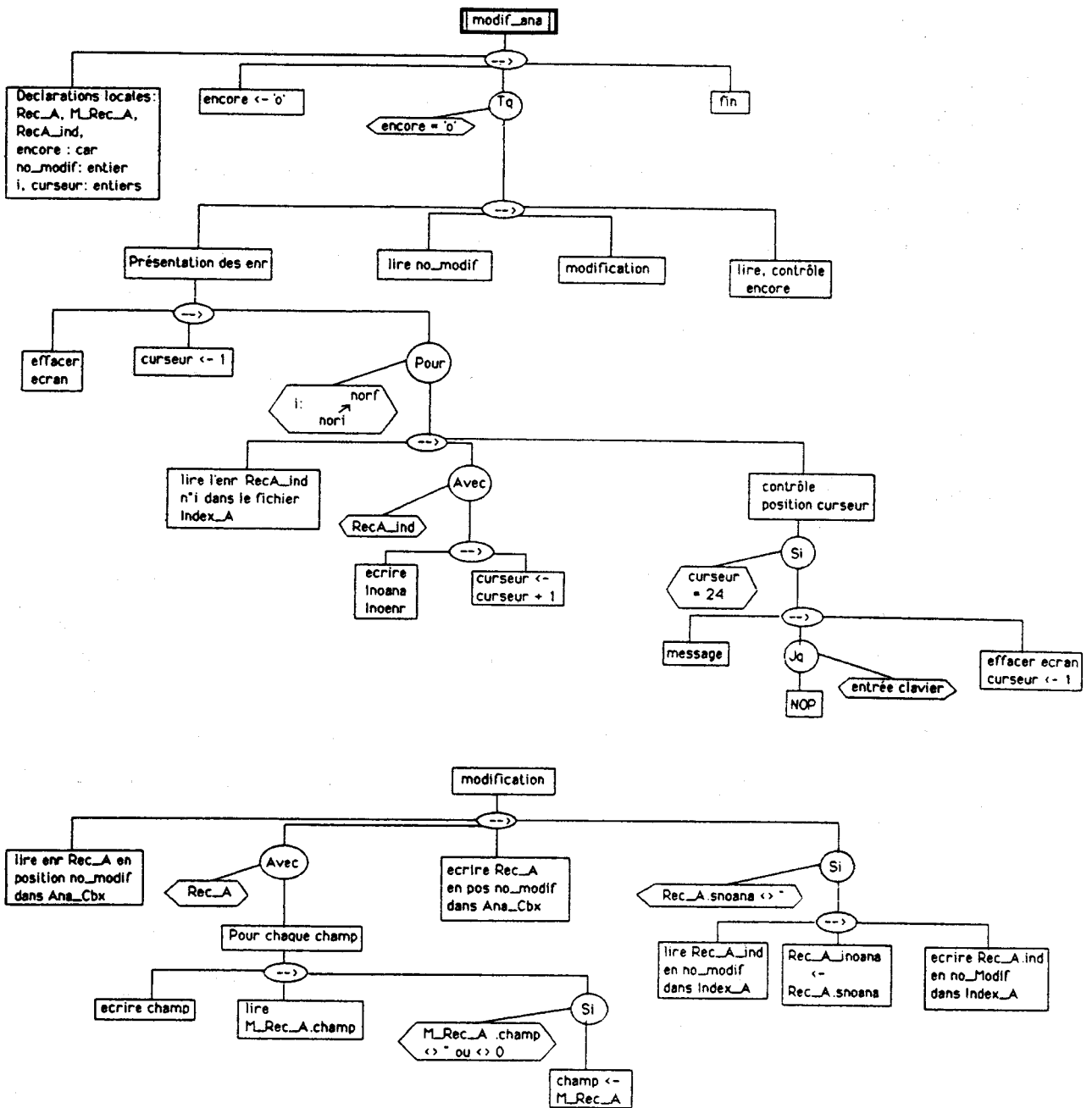
- **cherch**: chaîne de 10 caractères: numéro d'analyse à rechercher;
- **nb-r**: entier: nombre d'enregistrements de Index-A.

Dicot renvoie le numéro d'enregistrement correspondant à **cherch**, ou 0 si l'analyse n'est pas trouvée. Notons que dans l'affectation des deux paramètres locaux:

- **début** est initialisé à 1 puisque le premier enregistrement (n°0) est laissé vierge.



Arbre A2



Arbre A3

- fin est initialisé à nb-r - 1. En effet, le numéro du dernier enregistrement correspond à la taille du fichier en nombre d'enregistrements - 1, puisque le premier porte le numéro 0. (En BASIC MICROSOFT, début devrait être initialisé à 2, fin au nombre d'enregistrements indiqué sur le premier enregistrement).

Remarquons enfin, que la fonction Dicot ne peut travailler que sur un fichier Index-A trié par ordre croissant de numéros d'analyses. C'est le cas si on archive correctement les analyses en reprenant la définition standard du numéro d'analyse (chap. II section III-1). En cas de problèmes, l'unité fonctionnelle Outil-07 pourra reprendre le tri dans Index-A.

- La procédure edition-ana(norl, norF) affiche à l'écran l'intervalle d'analyses sélectionné dans un but de simple visualisation ou de modification de ces dernières (arbre A2). Norl, norF sont des entiers passés par valeur qui donnent les numéros d'enregistrement des analyses bornant l'intervalle. La procédure déclare en local la variable Rec-A de type En-A pour l'édition.

- La procédure Modif-ana (norI, norF) devra modifier l'analyse sélectionnée directement sur Ana-Cbx, puis éventuellement modifier la clef sur Index-A. NorI et norF ont le même type et la même signification que dans la procédure précédente.

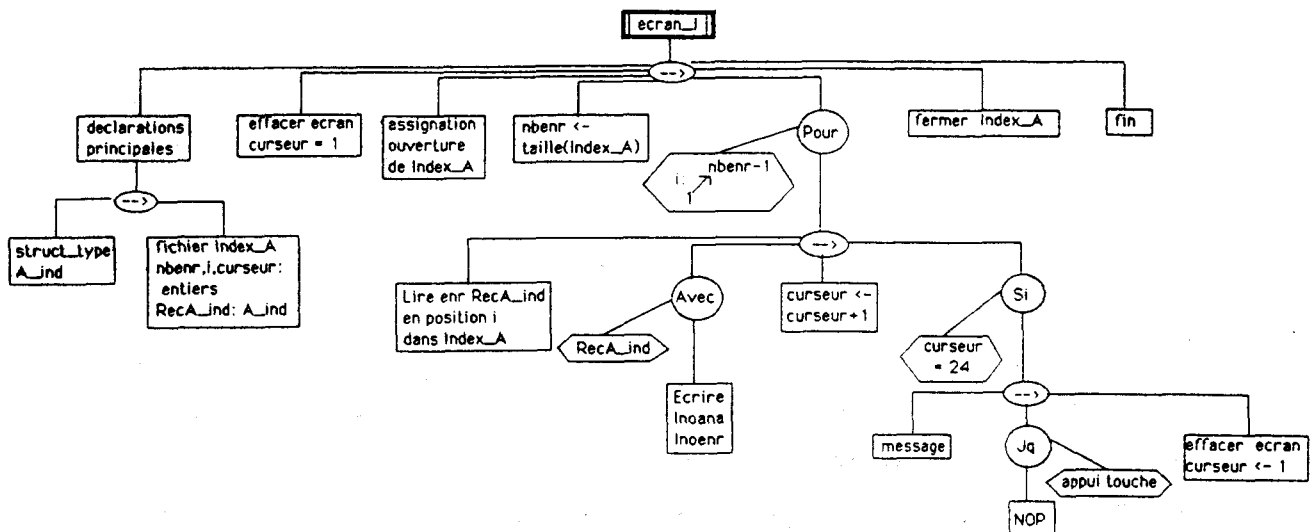
Deux variables locales type En-A: Rec-A, M-Rec-A sont déclarées localement, M-Rec-A servant au stockage temporaire des modifications. Une variable locale type A-ind : Rec-A-ind est déclarée au cas où la modification affecterait la clef de l'index. Elle permet aussi de présenter la portion d'index correspondant aux bornes définies dans la procédure edition-ana(). La variable locale no-modif, de type entier, sera saisie et correspondra au numéro d'enregistrement de l'analyse à modifier.

Remarquons que la variable curseur (que nous retrouveront souvent), incrémentée par le nombre de lignes d'édition, permet de gérer page par page l'affichage écran

3- Unité fonctionnelle Ecran-L

Cette unité fonctionnelle très simple (arbre A4) pourrait être classée avec les utilitaires. Elle fait défiler à l'écran le fichier Index-A. L'utilisateur y trouvera un intérêt en cas de problème de recherche d'analyse par Index-A ou encore, avant de lancer Modif-A, lorsqu'il veut consulter l'index pour faciliter la sélection d'un intervalle d'analyses.

Cette unité emploie évidemment la structure A-ind sous forme d'une variable globale Rec-A-ind. Les entiers nbenr et curseur correspondent respectivement au nombre d'enregistrements de l'index et au gestionnaire du numéro de ligne pour une édition page par page à l'écran.



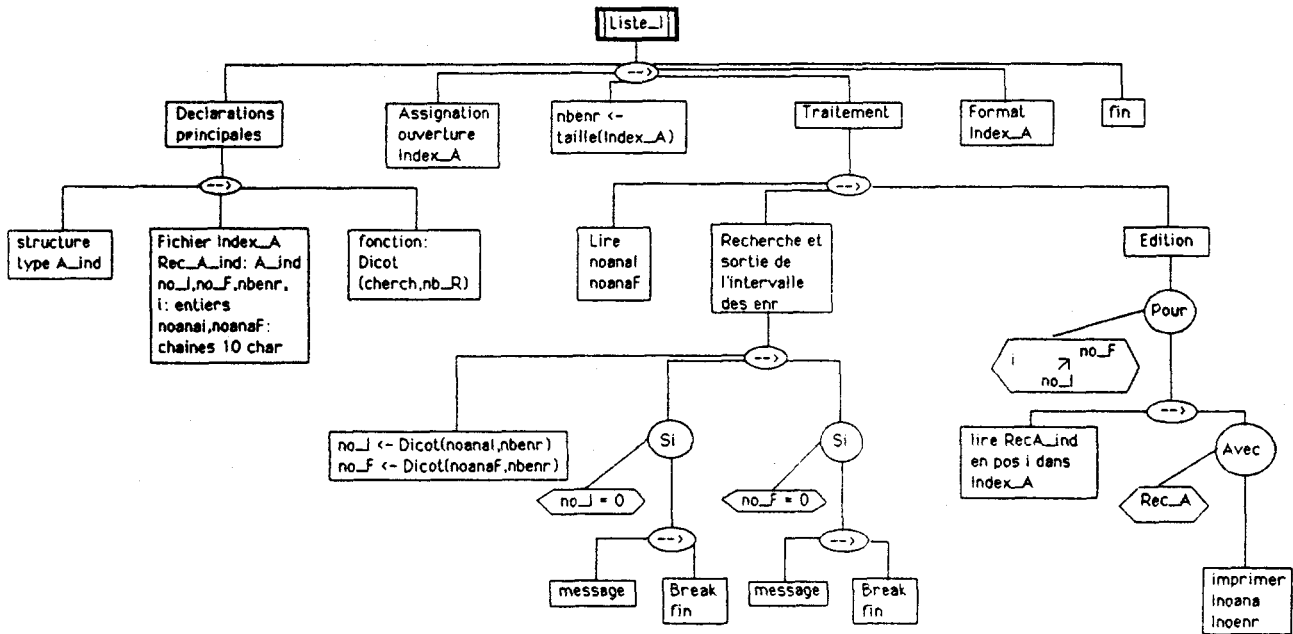
Arbre A4

4- Unité fonctionnelle Liste-L

Cette unité fonctionnelle (arbre A5) édite sur imprimante l'index borné par deux numéros d'analyses saisis sous deux variables de type chaîne: noanaI, noanaF.

Rec-A-ind de type A-ind sert à l'édition de l'index. La fonction Dicot(cherch,nb-r), déjà définie dans Modif-A, permettra de sortir les variables entières no-I et no-F (numéros d'enregistrements relatifs à noanaI, noanaF), afin d'éditer par accès direct entre no-I et no-F la portion du fichier Index-A.

Comme l'unité précédente, Liste-I peut paraître inutile dans l'utilisation d'un fichier en mode d'accès séquentiel indexé. Cependant, en cas de perte de l'index, une liste de ce dernier associée aux analyses est toujours la bienvenue. De plus, en cas de difficultés avec l'accès séquentiel indexé (fichiers endommagés, mal triés), une telle liste sera indispensable à la récupération des analyses par accès direct pur.



Arbre A5

III- Analyse organique des applications associées à Menu-M.

1- Unité fonctionnelle Struct-M.

(Structure complète: se référer aux arbres programmatiques A6 -> A10)

C'est une unité importante qui utilise les quatre types de structures définies dans la section I de l'analyse organique, à savoir:

<u>type</u>	<u>variable globale associée</u>
En-A	Rec-A
A-ind	Rec-A-ind
En-F	Rec-F
F-ind	Rec-F-ind

Bien évidemment, les fichiers Ana-Cbx, Index-A, Fo-Str, Index-F sont déclarés au niveau de cette application.

Une structure particulière, Prop-mol, associée à la variable globale P-mol doit être définie afin de stocker les proportions molaires d'oxydes du minéral étudié (masse d'oxyde/ masse molaire).

Prop-mol: Na2OP, K2OP, MnOP, MgOP,
Al2O3P, SiO2P, FeOP, NiOP, réels
ZnOP, CaOP, TiOP, Cr2O3P, H2OP

$$\text{Na2OP} = \text{Na2OM} / 61,98$$

$$\text{K2OP} = \text{K2OM} / 94,2$$

$$\text{MnOP} = \text{MnOM} / 70,94$$

$$\text{MgOP} = \text{MgOM} / 40,32$$

$$\text{Al2O3P} = \text{Al2O3M} / 101,94$$

$$\text{SiO2P} = \text{SiO2M} / 60,09$$

$$\text{FeOP} = \text{FeOM} / 71,85$$

$$\text{NiOP} = \text{NiOM} / 74,71$$

$$\text{ZnOP} = \text{ZnOM} / 81,38$$

$$\text{CaOP} = \text{CaOM} / 56,08$$

$$\text{TiO2P} = \text{TiO2M} / 79,9$$

$$\text{Cr2O3P} = \text{Cr2O3M} / 152,02$$

$$\text{H2OP} = \text{H2OM} / 18,02$$

a- Les entrées de données.

Elles peuvent se dérouler au clavier ou par l'intermédiaire du fichier Ana-Cbx. Dans tous les cas, la même variable Rec-A réceptionnera les données. Conformément aux indications de l'analyse fonctionnelle, l'entrée par fichier peut se faire soit en accès direct, soit en accès séquentiel indexé. Nous pouvons alors définir trois procédures d'entrées des données:

- lect-fich1(An): lecture de l'analyse par accès séquentiel indexé sur Ana-Cbx, Index-A;
- lect-fich2(An): lecture de l'analyse par accès direct sur Ana-Cbx;
- lect-clavier(An): entrée de l'analyse au clavier.

Dans les trois cas, An, de type En-A, est un paramètre passé par variable correspondant à l'analyse chimique. Lect-fich1() utilise la fonction Dicot(cherch, nb-r) déjà définie dans l'application Modif-A et par conséquent, les déclarations locales relatives au travail sur Index-A sont inutiles dans lect-fich1() (arbre A7).

Dans la procédure lect-clavier(), la construction permet de corriger une erreur de frappe, la variable correct, de type caractère, contrôlant cette possibilité (arbre A7). Une commande d'effacement partiel de l'écran, suppose que le langage de programmation possède des fonctions de positionnement du curseur. Si elles n'existent pas, il faudra les écrire soit-même, ce qui se fait facilement lorsqu'on connaît les séquences de commande du moniteur (livrées dans les documentations dignes de ce nom). En utilisant une fonction du type gotoxy(x,y) avec x numéro de ligne et y numéro de colonne, il suffira d'écrire des blancs sur les zones de l'écran affectées aux données pour effacer ces dernières. Le curseur est ensuite positionné par gotoxy(x,y) pour une nouvelle saisie.

b) L'établissement de la formule structurale.

Il fait l'objet de calculs intermédiaires sous la forme de blocs qui seront appelés par une entité supérieure: cal-F-struct(An, Prop, Form) (arbre A8). Les trois paramètres de cette dernière procédure sont passés par variable:

- An de type En-A représente le paramètre d'entrée, c'est-à-dire l'analyse du minéral;
- Prop de type Prop-mol est un paramètre intermédiaire (proportions molaires) utilisé par les procédures calcul-T(), calcul-O());

- Form de type En-F représente le paramètre de sortie, c'est-à-dire la formule structurale complète.

Après définition de Prop à partir de An, la procédure est simple puisque suivant le nombre d'oxygènes, elle appelle soit calcul-T(P-M, F-S) soit calcul-O(P-M,N-O,F-S).

calcul-T(P-M,F-S) établit les formules structurales des scapolites dont le nombre d'atomes d'oxygène est affecté de la valeur 0. P-M et F-S sont passés par variable: P-M est de type Prop-mol, F-S de type En-F. Pour les scapolites, le calcul est basé sur le nombre de "cations tétraédriques" dont la valeur doit être ramenée à 12, d'où les déclarations locales de cat34 et de y réels (arbre A8).

Pour les autres minéraux, affectés d'un nombre d'atomes d'oxygène non nul, le calcul est pris en charge par la procédure calcul-O (P-M, N-O, F-S). Les trois paramètres sont passés par variable:

- P-M de type Prop-mol: représente l'entrée des proportions molaires;
- N-O de type réel représente l'entrée du nombre d'atomes d'oxygène sur lequel doit être bâtie la formule;
- F-S de type En-F représente le paramètre de sortie, c'est-à-dire la formule structurale.

La procédure déclarera aussi les variables locales suivantes:

- Al de type réel est une variable intermédiaire contenant la quantité d'Al³⁺ avant qu'elle ne soit répartie en Al4 (tétraédrique) et Al6 (Al4 et Al6 sont des champs réels de En-F);

- z de type réel correspond à une somme de cations dépendante de l'espèce minérale envisagée et qui servira d'estimateur pour le calcul de Fe³⁺. En effet, la microsonde ne faisant pas de distinction entre Fe²⁺ et Fe³⁺, il faut recalculer ce dernier en "fabricant artificiellement" Fe₂O₃ à partir de FeO. Invariablement, ce calcul modifie les proportions d'oxygène dans le minéral puisqu'il y a 3 O pour 2 Fe dans Fe₂O₃ et seulement 1 O pour 1 Fe dans FeO). Dès lors, il faut intégrer le calcul du nombre de cations de la formule structurale dans une procédure spécifique.

Cal-cat(q) représente ce calcul cationique, il est déclaré en interne dans la procédure calcul-T() et q, entier passé par valeur, correspond au coefficient itératif du calcul de Fe³⁺. Cal-cat(q) (arbre A8) calcule d'abord les proportions d'oxygène relatives à chaque oxyde de l'analyse puis détermine les valeurs de chaque cation de la formule structurale, après avoir ramené les proportions d'oxygène à N-O (nombre d'atomes d'oxygène). Cette démarche justifie la déclaration locale de:

- A, S, T, C réels représentant les proportions d'oxygène relatives à Al₂O₃P, SiO₂P, TiO₂P, Cr₂O₃P;
- F2 proportion d'oxygène liée à Fe²⁺ ($F2 = FeOP * (100 - q)/100$);
- F3 proportion d'oxygène liée au Fe³⁺ calculé ($F3 = FeOP * 1,5 q/100$; q pouvant varier de 0 à 100);
- sumo: somme des proportions d'oxygène.

La procédure Cal-cat() fait varier les valeurs cationiques en fonction de q. le paramètre z évolue suivant les valeurs prises par q. En testant les conditions booléennes impliquant z, on contrôlera l'évolution de q, le nombre d'appels à la procédure Cal-cat() et par conséquent les teneurs en Fe³⁺ de la formule structurale.

Pour chaque type de minéral, le paramètre z représente une fourchette ou une valeur limite pour laquelle la formule structurale est correcte. Il existe plusieurs méthodes aboutissant à la détermination de ces limites. La

plus employée consiste à équilibrer les charges entre cations et anions, mais encore faut-il avoir les teneurs en OH^- des minéraux hydratés, ce que la sonde ne donne pas. De plus, les analyses ne ferment jamais parfaitement à 100%, on ne peut savoir si l'écart est lié au pouvoir de résolution de la sonde (qui diffère d'ailleurs d'un cation à l'autre) ou à un cation qui n'aurait pas été analysé, ce dernier étant alors absent dans le calcul de la balance cationique. Il est préférable d'utiliser une méthode basée sur l'analyse statistique de phases minérales. A partir des données de Deer *et al.* (1980) où, les compositions estimées par "voie humide" donnent Fe^{3+} et OH^- , on encadre la variable z par des valeurs limites:

- Olivine: $z = \text{Si} + \text{Al} + \text{Ti} + \text{Fe}_2 + \text{Fe}_3 + \text{Mg} + \text{Mn} + \text{Zn} + \text{Ca} + \text{Na} + \text{K}$ = somme des cations de la formule. Si ($z > 3$) on calcule Fe^{3+} . Ce calcul augmente les proportions d'oxygène et fera donc diminuer les valeurs cationiques;

- Pyroxène: $z = \text{Si} + \text{Al} + \text{Ti} + \text{Fe}_3 + \text{Fe}_2 + \text{Cr} + \text{Ni} + \text{Zn} + \text{Mn} + \text{Mg} + \text{Ca} + \text{Na} + \text{K}$ = somme des cations de la formule.

Si ($z > 4,05$) on calcule Fe^{3+} pour ramener la somme des cations à 4;

- Zoisite: si ($\text{Si} > 3$) $z = \text{Al} + \text{Ti} + \text{Fe}_3$ sinon

$$z = \text{Si} + \text{Al} - 3 + \text{Ti} + \text{Fe}_3.$$

Z représente la somme des cations trivalents et tétravalents non liés au site. $[\text{SiO}_4 - \text{Si}_2\text{O}_7]$. Le calcul de Fe^{3+} est lancé si ($z > 3,15$);

- Sphène: pas de calcul de Fe^{3+} ;

- Cordiérite: Le Fe^{3+} est toujours rare dans les cordiérites. Deux attitudes peuvent être prises: soit on néglige Fe^{3+} , soit on effectue son calcul grâce à $z = \text{Si} + \text{Al} - 6 + \text{Fe}_3 + \text{Ti}$ c'est-à-dire la somme des cations non liés à la charpente $[(\text{SiAl})_6 \text{O}_{18}]$.

Fe^{3+} est estimé tant que ($z \leq 3$). Malgré une diminution des valeurs cationiques autres que Fe^{3+} , z croît dans les premiers pas d'itération de q car l'augmentation de Fe^{3+} est plus forte que la diminution des autres cations. Sur tous les essais réalisés, la teneur en Fe^{3+} reste faible et cautionne la méthode de calcul. Les valeurs obtenues sur les autres cations restent très proches de celles obtenus par un calcul sans Fe^{3+} . Le fait de négliger, par absence de données, l'état d'hydratation des phases influe peu sur l'établissement de la formule structurale. En fait, sans OH^- , on sous-estime les proportions d'oxygène et par conséquent, on sur-estime les valeurs cationiques. Pourtant, il est rare d'obtenir une formule structurale où les sites affectés aux ions bivalents (Fe^{2+} , Mg^{2+} essentiellement) sont saturés à 2. Cette constatation prouve les difficultés à estimer l'influence de l'état d'hydratation du minéral dans le calcul de la formule structurale;

- Wollastonite: pas de calcul de Fe^{3+} ;

- Mica: Le calcul de Fe^{3+} n'est pas envisagé pour des raisons similaires à celles évoquées concernant l'état d'hydratation des cordiérites, mais cette fois, la fluctuation du nombre de cations métalliques non liés à la charpente tétraédrique $[(\text{SiAl})_4 \text{O}_{10}]$ est telle, qu'il devient illusoire de vouloir borner une valeur z ;

- Amphibole ferro-magnésienne: $z = \text{Si} + \text{Al} - 8 + \text{Ti} + \text{Cr} + \text{Fe}_3 + \text{Fe}_2 + \text{Mn} + \text{Mg} + \text{Zn} + \text{Ni} + \text{Ca} + \text{Na} + \text{K}$ c'est-à-dire la somme des cations non liés à la charpente silicatée $[(\text{SiAl})_8 \text{O}_{22}]$. Le calcul est effectué lorsque z n'est pas compris dans la fourchette $6,95 \leftrightarrow 7,2$;

- Amphibole calco-ferro-magnésienne: $z = \text{Si} + \text{Al} - 8 + \text{Ti} + \text{Cr} + \text{Fe}^3 + \text{Fe}^2 + \text{Mn} + \text{Mg} + \text{Zn} + \text{Ni}$ c'est-à-dire la somme des cations métalliques non liés à la charpente silicatée $[(\text{SiAl})_8 \text{O}_{22}]$. Le calcul est effectué lorsque z n'entre pas dans la fourchette $4,95 \leftrightarrow 5,2$;

- Grenat: $\text{Si} (\text{Si} > 6)$: $z = \text{Al} + \text{Ti} + \text{Cr} + \text{Fe}^3$;

sinon: $z = \text{Si} + \text{Al} - 6 + \text{Ti} + \text{Cr} + \text{Fe}^3$ c'est-à-dire la somme des cations non liés à la charpente $[(\text{SiAl})_6 \text{O}_{24}]$. Le calcul est réalisé tant que $(z \leq 4)$. Il diminue les valeurs cationiques autres que Fe^{3+} mais z augmente quand même sur les premiers pas d'itération de q car l'augmentation de Fe^{3+} reste plus forte que la diminution des autres cations;

- Chlorite: $z = \text{Si} + \text{Al} - 8 + \text{Fe}^2 + \text{Fe}^3 + \text{Mg} + \text{Mn} + \text{Ti} + \text{Cr} + \text{Na} + \text{Ca} + \text{K}$ ce qui représente la somme des cations non liés à la charpente tétraédrique $[(\text{SiAl})_4 \text{O}_{10}]$. Malgré une hydratation très forte de ces minéraux, en effectuant le calcul sur 28 oxygènes (plutôt que 36), l'estimation de Fe^{3+} est cohérente avec les valeurs obtenues par "voie humide". Fe^{3+} est calculé lorsque $(z > 12)$, l'itération sur les premiers pas du paramètre q faisant diminuer z ;

- Feldspath: pas de calcul de Fe^{3+} ;

- Staurotide: $\text{Si} (\text{Si} \geq 8)$: $z = \text{Al} + \text{Fe}^3 + \text{Ti} + \text{Cr}$

sinon $z = \text{Si} + \text{Al} - 8 + \text{Fe}^3 + \text{Cr} + \text{Ti}$ soit la somme des cations tri- et tétravalents non liés aux tétraèdres $[(\text{SiAl}) \text{O}_4]$. Le calcul est lancé lorsque $(z \leq 8)$, cette variable augmentant lors de l'itération liée au paramètre q .

c- Edition des formules structurales.

Pour terminer cette présentation de l'unité fonctionnelle Struct-M, signalons que deux procédures d'édition des formules structurales sont déclarées (arbre A8):

- edit-ecran(no-I, no-F);

- edit-imp (no-I, no-F).

Elles éditent respectivement sur l'écran et par l'imprimante, l'intervalle du fichier des formules structurales compris entre les numéros d'enregistrements no-I et no-F. Elles déclarent leurs propres variables locales Rec-F2 de type En-F, et l'édition sur écran est contrôlée, en défilement, formule par formule.

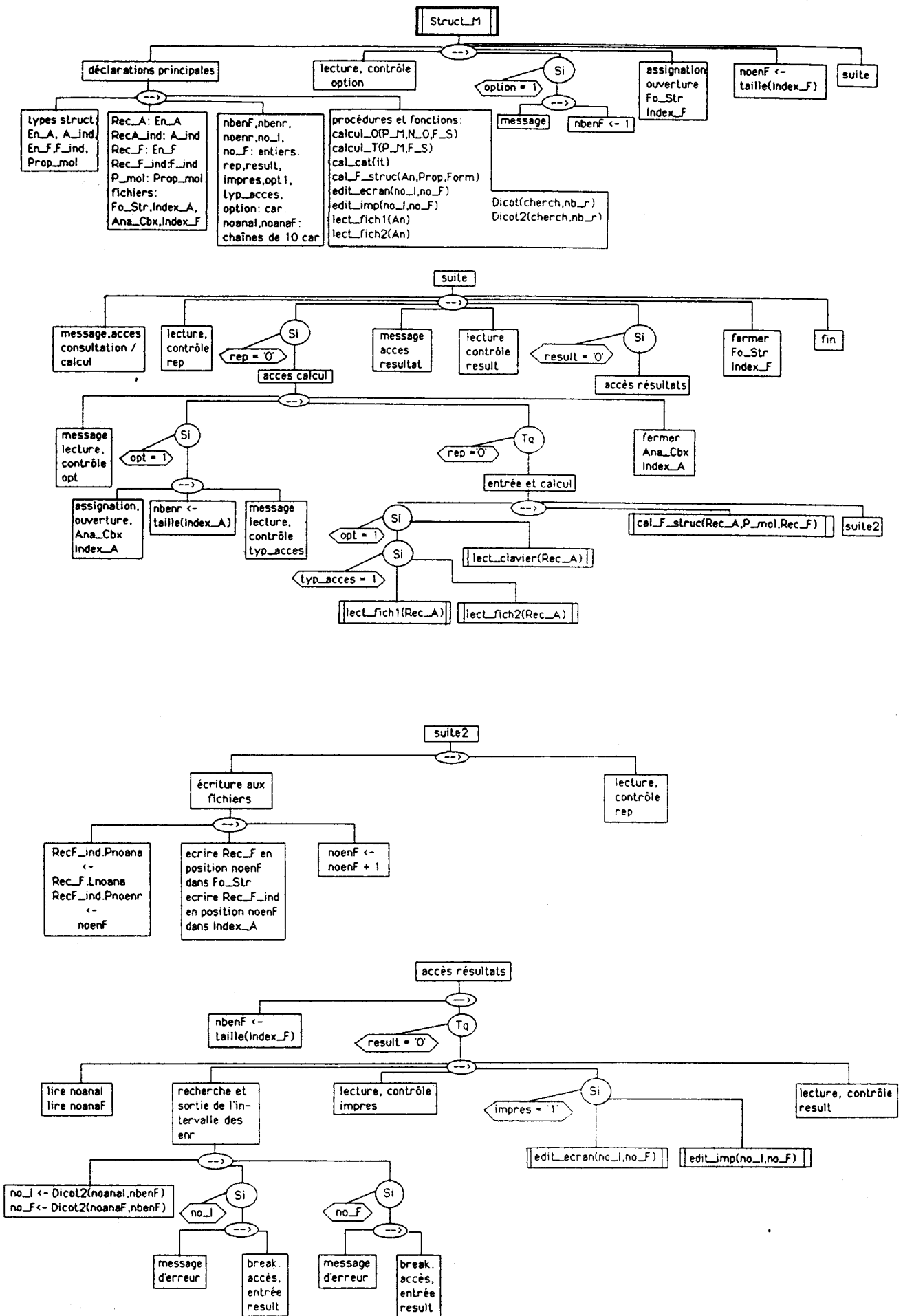
La détermination des valeurs no-I et no-F est le fruit d'une recherche dichotomique sur le fichier Index-F grâce à la fonction Dicot2(cherch, nb-r) (arbre A7). Cherch, de type chaîne, correspond au numéro d'analyse, nb-r à la taille en nombre d'enregistrements du fichier Index-F. Comme la fonction Dicot() déjà citée, Dicot2() renverra le numéro d'enregistrement de la formule structurale relative à cherch, ou 0 si cherch n'est pas dans Index-F.

2- Unités fonctionnelles Ecran-F, Liste-F.

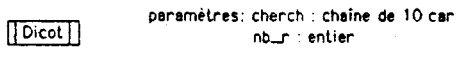
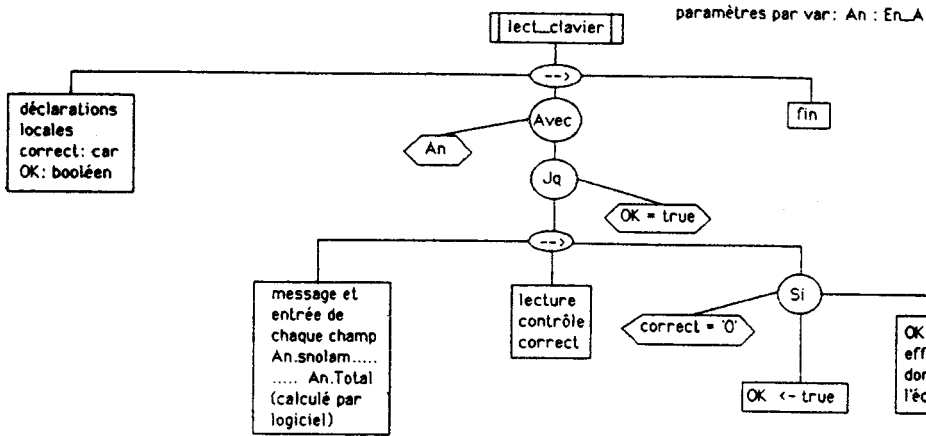
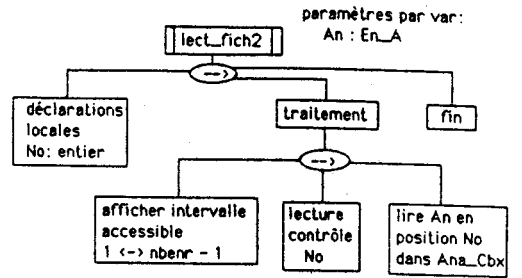
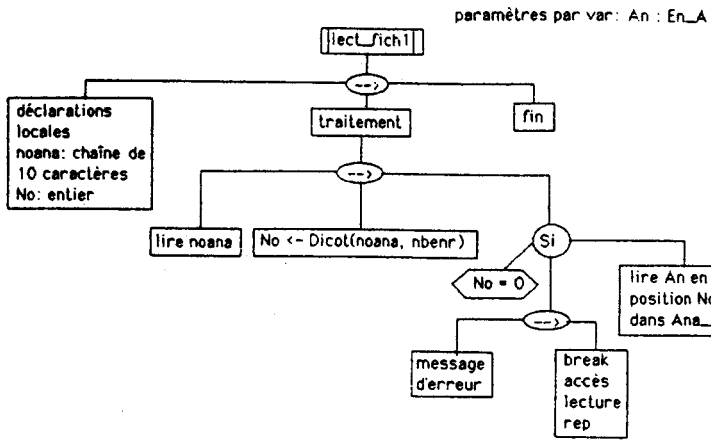
Ces unités (arbre A11) sont similaires quant à leurs structures et leurs fonctions aux unités Ecran-I et Liste-I (section II-3 et II-4 de ce chapitre).

Ecran-F utilisera RecF-ind de type F-ind dans l'édition de l'index et nbenF de type entier initialisé par la taille en nombre d'enregistrements d'Index-F.

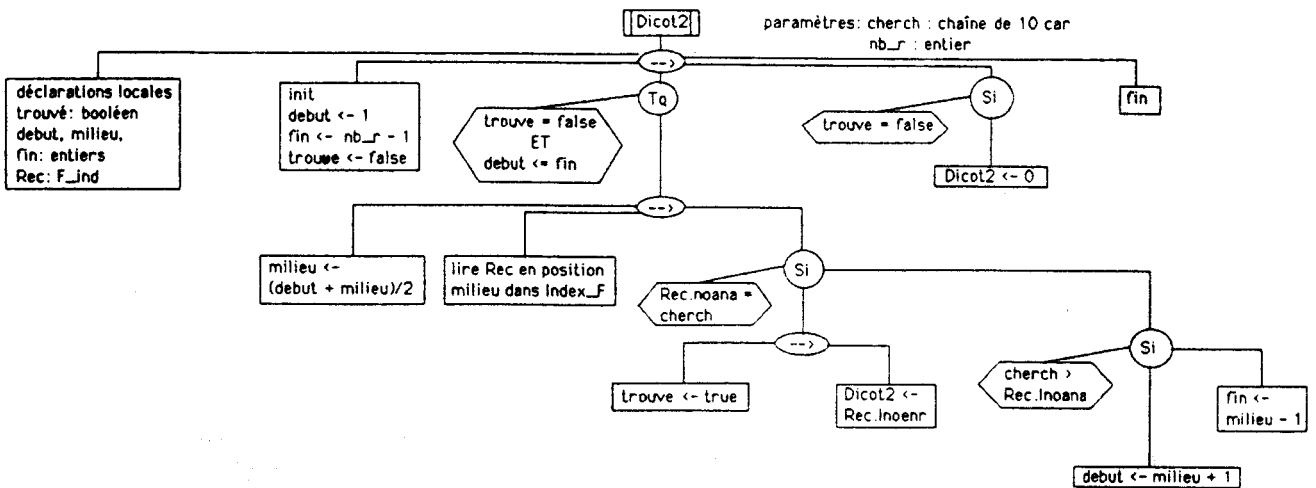
L'unité fonctionnelle Liste-F édite l'index entre les bornes définies par noanaI et noanaF. La fonction Dicot2(cherch, nb-r) qui vient d'être décrite dans Struct-M, effectuera la recherche de ces bornes avant que l'impression par accès direct sur l'index soit lancée.



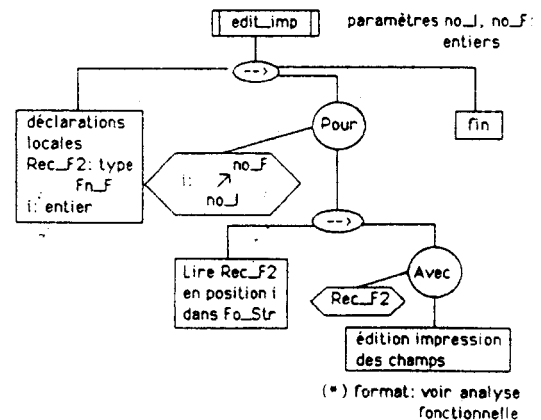
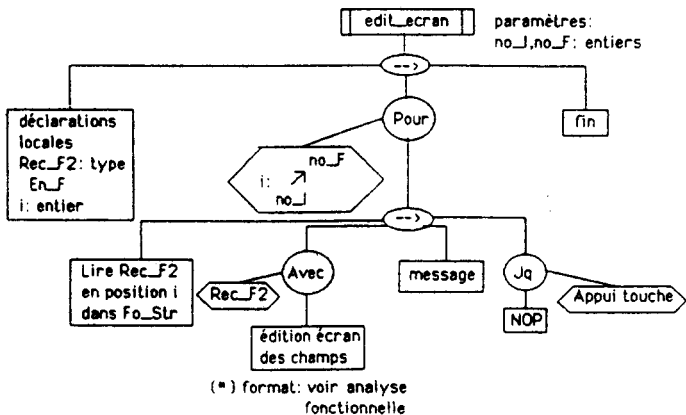
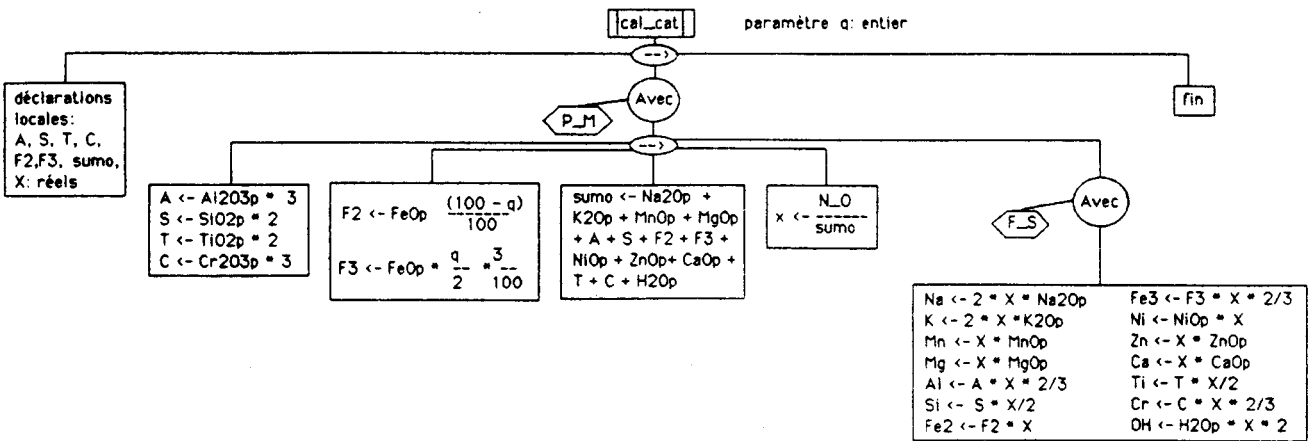
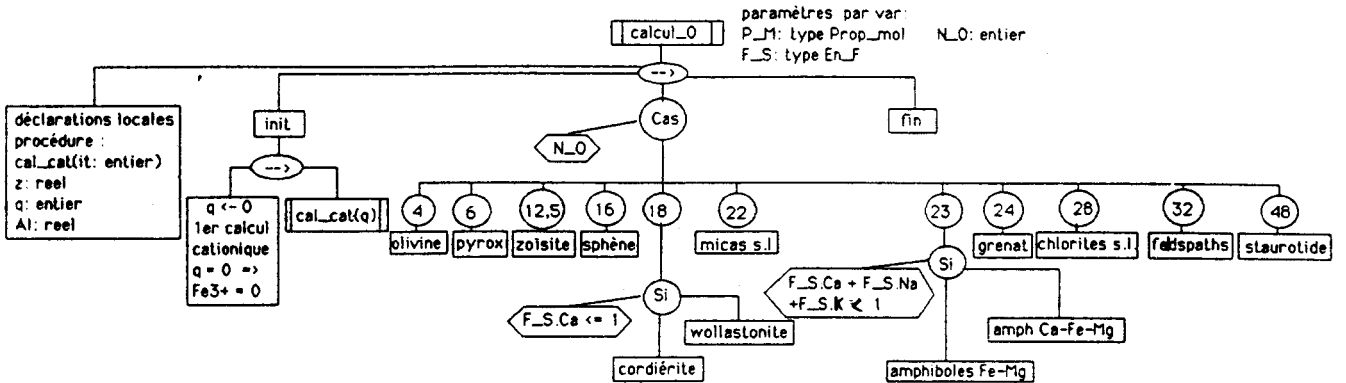
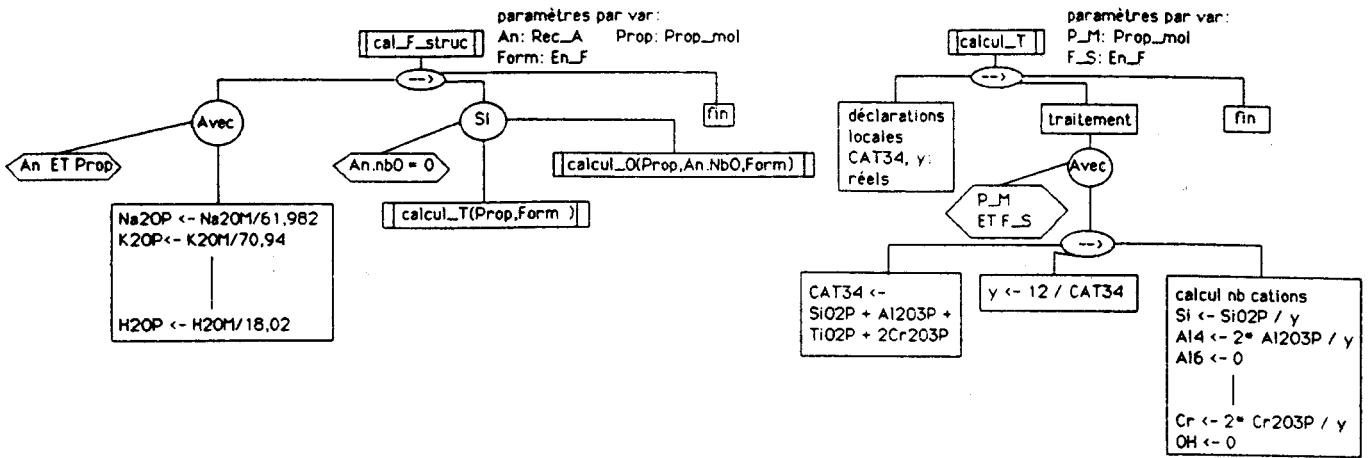
Arbre A6



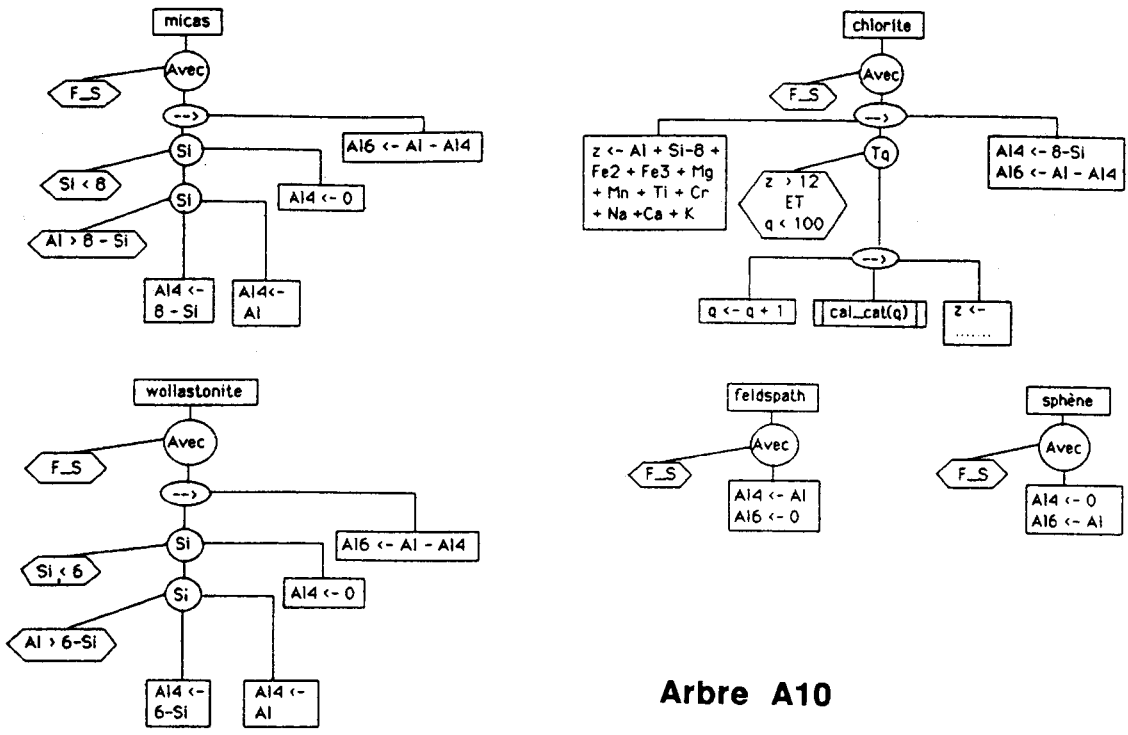
voir définition dans l'unité fonctionnelle Modif_A



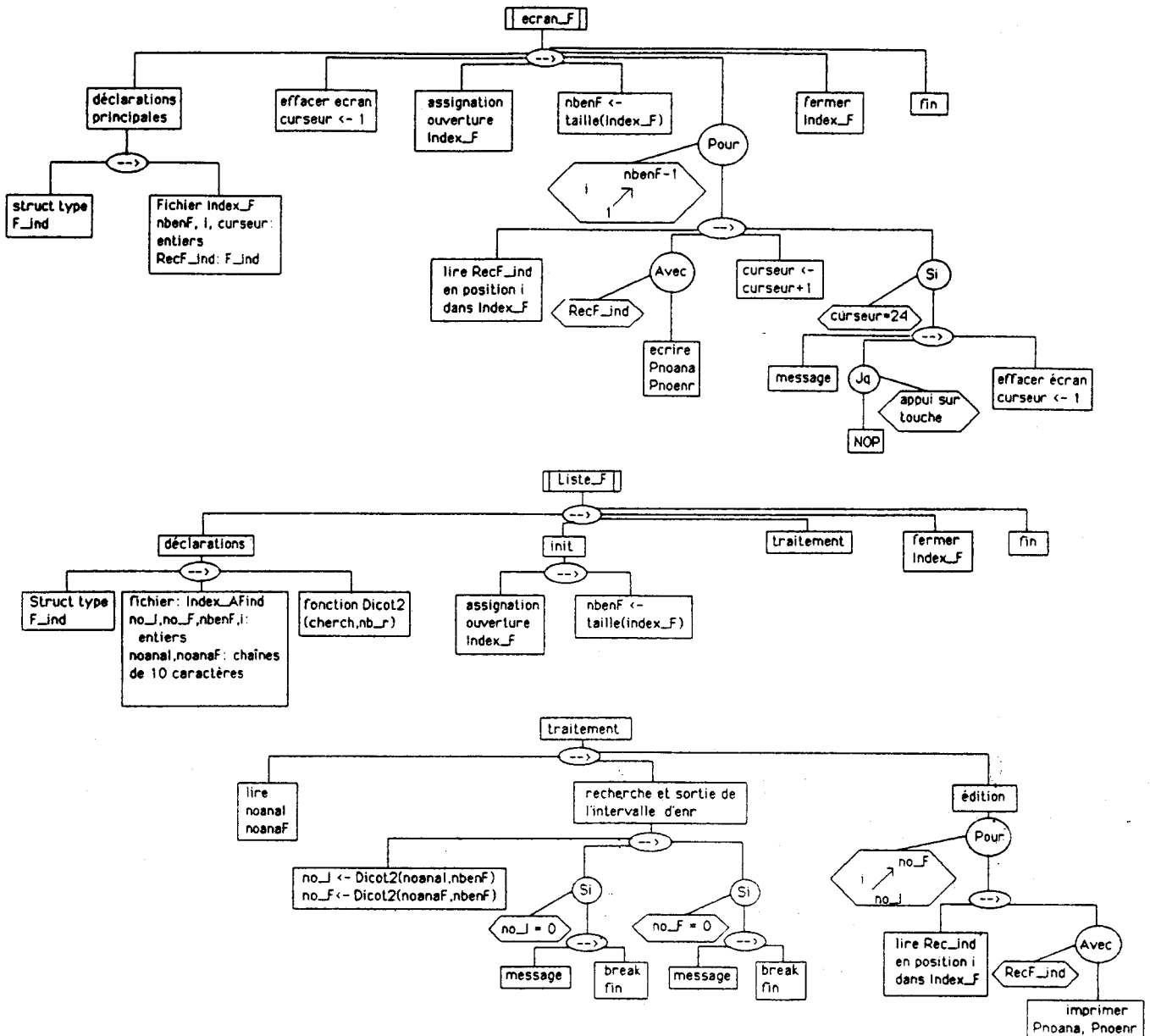
Arbre A7



Arbre A8



Arbre A10



Arbre A11

3- Unité fonctionnelle ACF-AKF.

(structure complète: se référer aux arbres programmatiques A12, A13)

Les représentations triangulaires ACF, AKF, A'KF demandent, pour chaque minéral ou chaque roche, les proportions massiques en Na_2O , K_2O , CaO , Al_2O_3 , FeO , Fe_2O_3 , MgO , MnO . Dans le cas d'un minéral, puisque Fe_2O_3 n'est pas défini par la microsonde, il importe de connaître la formule structurale où Fe^{3+} est exprimé et permet de recalculer la fraction de Fe_2O_3 . Dès lors, l'unité fonctionnelle déclarera les types En-A, A-ind, En-F, F-ind, ainsi que les fichiers Ana-Cbx, Index-A, Fo-Str, Index-F.

L'accès par fichier faisant appel aux fonctions Dicot(cherch,nb-r) et Dicot2(cherch,nb-r), il n'est pas utile de déclarer en variables globales des structures de type A-ind et F-ind. Par contre, les variables globales Rec-A de type En-A et Rec-F de type En-F sont utilisées, la variable Rec-A servant aussi de structure d'entrée des données par le clavier.

a- L'entrée des données.

L'entrée par fichiers (arbre A12) est associée à la procédure entr-fich(nb-E-A, nb-E-F, no-A, no-F); les quatre paramètres sont entiers:

- nb-E-A et nb-E-F, passés par valeur, matérialisent le nombre d'enregistrements sur les fichiers Ana-Cbx et Fo-Str;

- no-A et no-F, passés par variable, constituent les paramètres de sortie et sont les résultats des recherches sur index renvoyés par les fonctions Dicot() et Dicot2().

On remarquera que la procédure laisse le droit à l'erreur dans la saisie de la clef de recherche noana. Cependant, afin de ne pas boucler indéfiniment, l'utilisateur garde toujours la possibilité d'interrompre sa recherche.

L'entrée au clavier (arbre A12) s'effectue par la procédure entr-clavier(An, Fo, Fe3M), où les trois paramètres passés par variables ont les significations suivantes:

- An de type En-A stocke les proportions massiques;
- Fo de type En-F est utilisé lorsque l'opérateur n'a pas de Fe_2O_3 exprimé dans ses données;
- Fe3M de type réel représente la saisie de Fe_2O_3 .

Dans le cas où la valeur affectée à Fe3M est nulle (proportions massiques en Fe_2O_3), l'utilisateur est convié à entrer les variables Fe2 et Fe3 de la formule structurale. S'il ne les connaît pas, il devra entrer 0.

b- Le calcul et l'édition des résultats.

Après l'intervention des procédures entr-fich() et entr-clavier() le traitement général doit maintenant calculer, si nécessaire, la proportion massique en Fe_2O_3 . C'est le rôle de la procédure Cal-Fe3M(ana, form, Fe3M). Dans le cas d'une entrée par fichier, elle succède à l'appel de entr-fich(); dans le cas d'une saisie au clavier, elle est directement appelée par entr-clavier() si Fe3M vaut 0. Cal-Fe3M(ana, form, Fe3M) intervient directement sur la structure stockant les proportions massiques grâce au paramètre ana de type En-A. Form de type En-F permet d'estimer le rapport Fe2/Fe3. Fe3M de type réel constitue le paramètre de sortie qui correspond à un calcul empirique de la proportion massique en Fe_2O_3 lorsque cette dernière n'est pas connue dans l'analyse chimique.

Avant d'aborder la suite du traitement, il faut présenter une nouvelle structure déclarée dans ACF-AKF dont le but sera d'accueillir certaines informations et les résultats des représentations triangulaires. Il s'agit de En-Acf.

En-Acf:

nolam : chaîne de 10 caractères: numéro d'échantillon ou de lame;

noana : chaîne de 10 caractères: numéro d'analyse Camebax;

min : chaîne de 16 caractères: nom du minéral;

Na2OM K2OM Ca2OM Al2O3M réels: proportions massiques en

Fe2O3M FeOM MgOM MnOM oxydes du minéral;

A, C, F: réels: coordonnées de la représentation du minéral sur diagramme ACF;

AA, KK,FF: réels: coordonnées de la représentation du minéral sur diagramme A'KF;

AAA, KKK, FFF: réels: coordonnées de la représentation du minéral sur diagramme AKF.

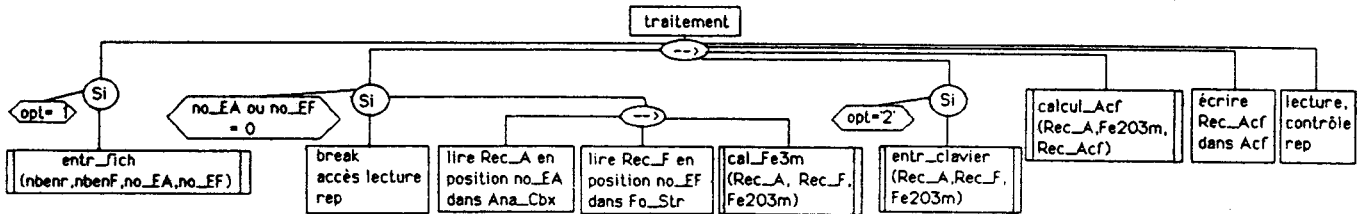
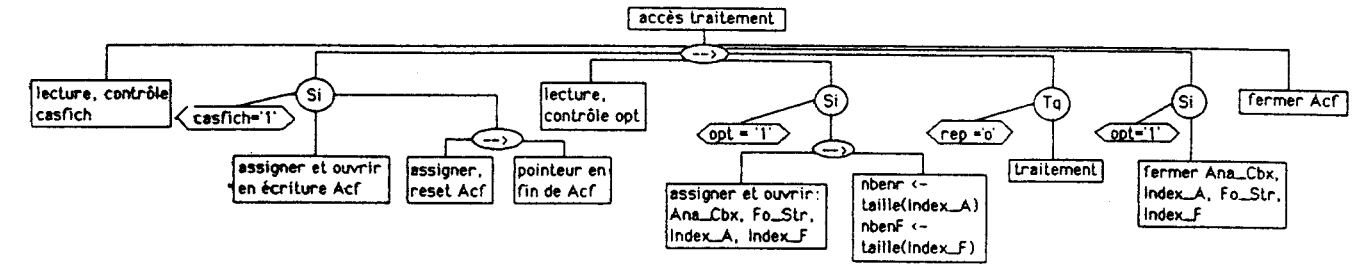
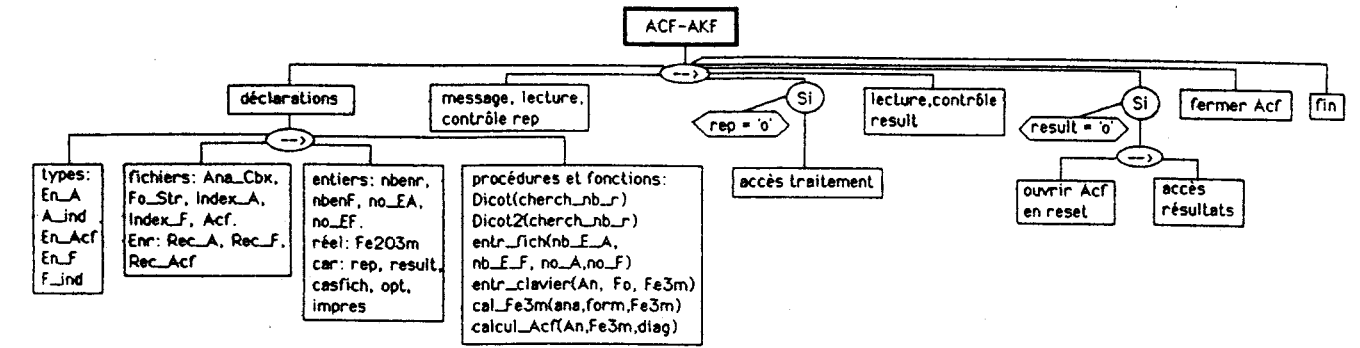
Le fichier Acf servira à stocker ces structures sur disque. Une variable Rec-Acf de type En-Acf est définie globalement pour travailler dans l'unité fonctionnelle.

Le calcul des coordonnées, dans les trois représentations triangulaires, est régi par la procédure calcul-Acf(An, Fe3M, diag):

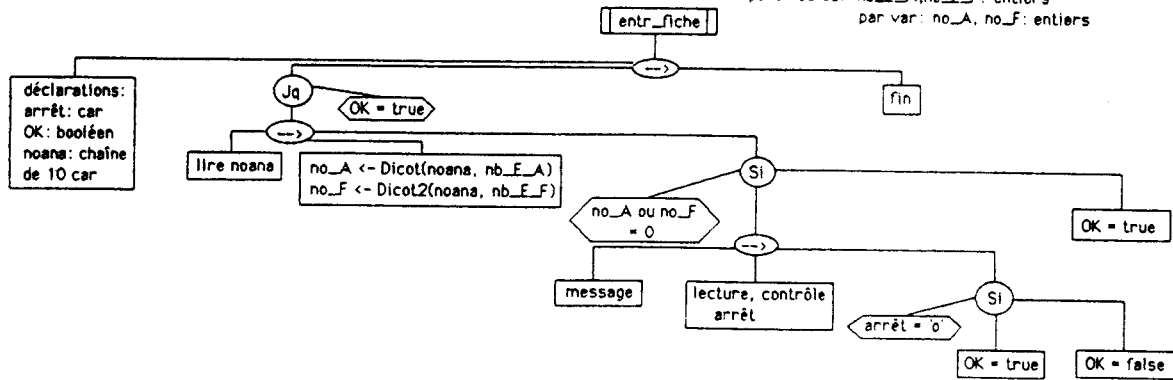
- An de type En-A est le paramètre d'entrée c'est à dire l'analyse chimique exprimée en proportions massiques d'oxydes;
- Fe3M de type réel représente la proportion massique en Fe_2O_3 ;
- diag de type En-Acf représente le paramètre de sortie (informations et résultats du calcul).

La procédure déclare des variables locales, réelles permettant le calcul des proportions molaires ($Na_2OP <- Na_2OM / 61,98 \dots$) ainsi que a1, a2, c1, k1, f1, sum1, sum2, sum3 stockant les intermédiaires du calcul. (arbre A13). On notera que des informations telles nolam, noana, ... sont directement affectées à la variable structurée diag dans la procédure calcul-Acf().

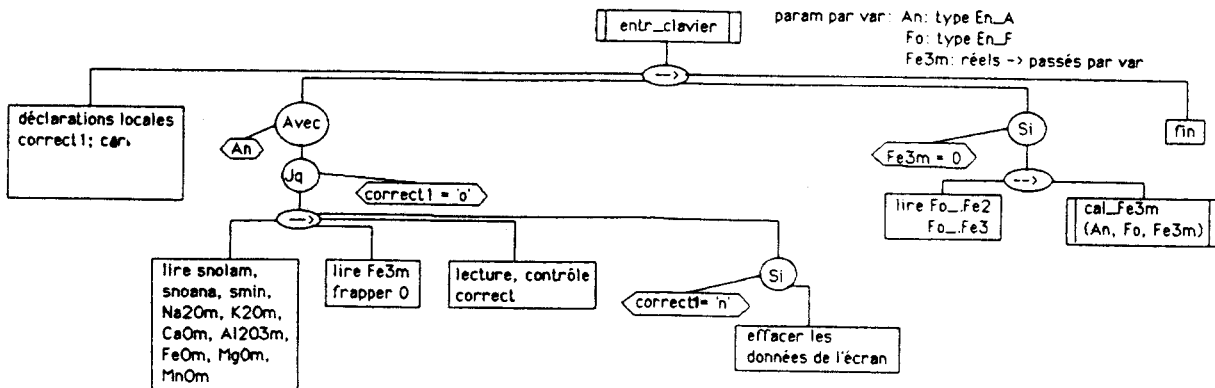
Comme cela avait déjà été signalé dans l'analyse fonctionnelle, l'utilisateur n'a pas immédiatement accès aux résultats. Ceci offre l'avantage de pouvoir enchaîner rapidement une succession de calculs et d'avoir, une fois le travail terminé, tout le loisir de consulter le fichier de sauvegarde qui se comporte comme un véritable tampon d'édition. Les procédures ed-ecran et ed-imp éditeront sur l'écran ou par l'imprimante les résultats, en balayant le fichier Acf. Il faut remarquer qu'une sortie sur imprimante par numéro d'échantillon (nolam) est possible grâce à Outil-03. Nous verrons aussi en fin d'analyse organique comment transformer ces fichiers résultats en créant un index permettant l'accès séquentiel indexé.



paramètres: nb_E_A, nb_E_F: entiers
par var: no_A, no_F: entiers

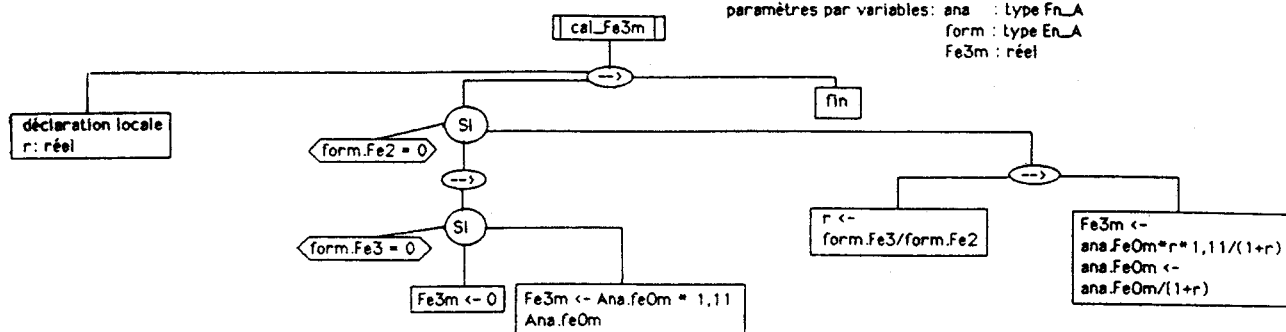


param par var: An: type En_A, Fo: type En_F, Fe3m: réels → passés par var

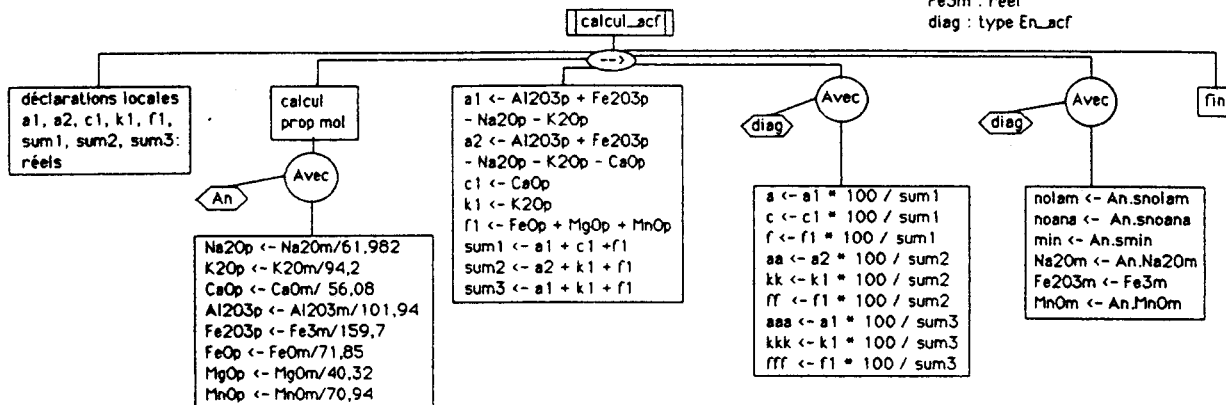


Arbre A12

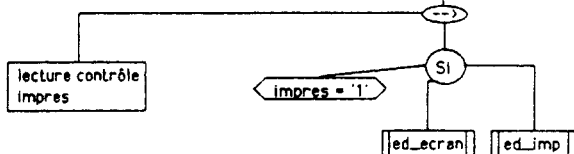
paramètres par variables: ana : type Fn_A
form : type En_A
Fe3m : réel



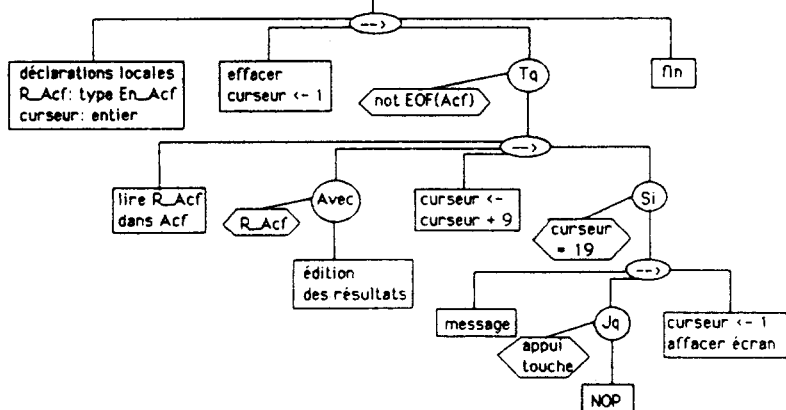
paramètres par variables: An : type En_A
Fe3m : réel
diag : type En_acf



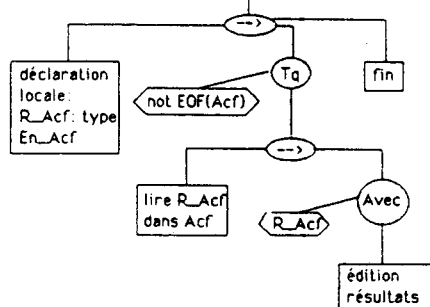
accès_résultats



ed_ecran



ed_imp



Arbre A13

4- Unité fonctionnelle AFM-A'FM.

(Structure complète : se référer aux arbres programmatiques A14 - A15).

L'architecture générale de cette unité ressemble fortement à celle de l'unité ACF-AKF. La procédure ne déclare que En-A et A-ind, les variables associées seront respectivement Rec-A et RecA-ind, cette dernière étant déclarée localement. Les résultats et les informations relatives au calcul seront stockés dans une nouvelle structure: En-Afm.

En-Afm:

- nolam: chaîne de 10 caractères: numéro de lame ou d'échantillon;
- noana: chaîne de 10 caractères: numéro de l'analyse Camebax du minéral;
- min : chaîne de 16 caractères: nom du minéral;
- K2OM - Al2O3M - FeOM : réels: proportions massiques d'oxydes
- MgOM - MnOM du minéral;
- a1 - a2 - XMg : réels: coordonnées de la projection AFM-A'FM.

La procédure entr2-fich(nb-EA, no-EA) permet l'entrée des données par fichier:

- nb-EA: entier passé par valeur, représente le nombre d'enregistrements dans le fichier Ana-Cbx;
- no-EA: entier passé par variable, correspond au paramètre de sortie c'est-à-dire le numéro d'enregistrement de l'analyse recherchée par la fonction Dicot(cherch, nb-r). (voir unité Modif-A: arbre A2).

La procédure contrôle les erreurs de recherche avec possibilité d'interruption en cas d'erreur systématique. Ensuite, la variable Rec-A sera sortie du fichier d'analyses Ana-Cbx.

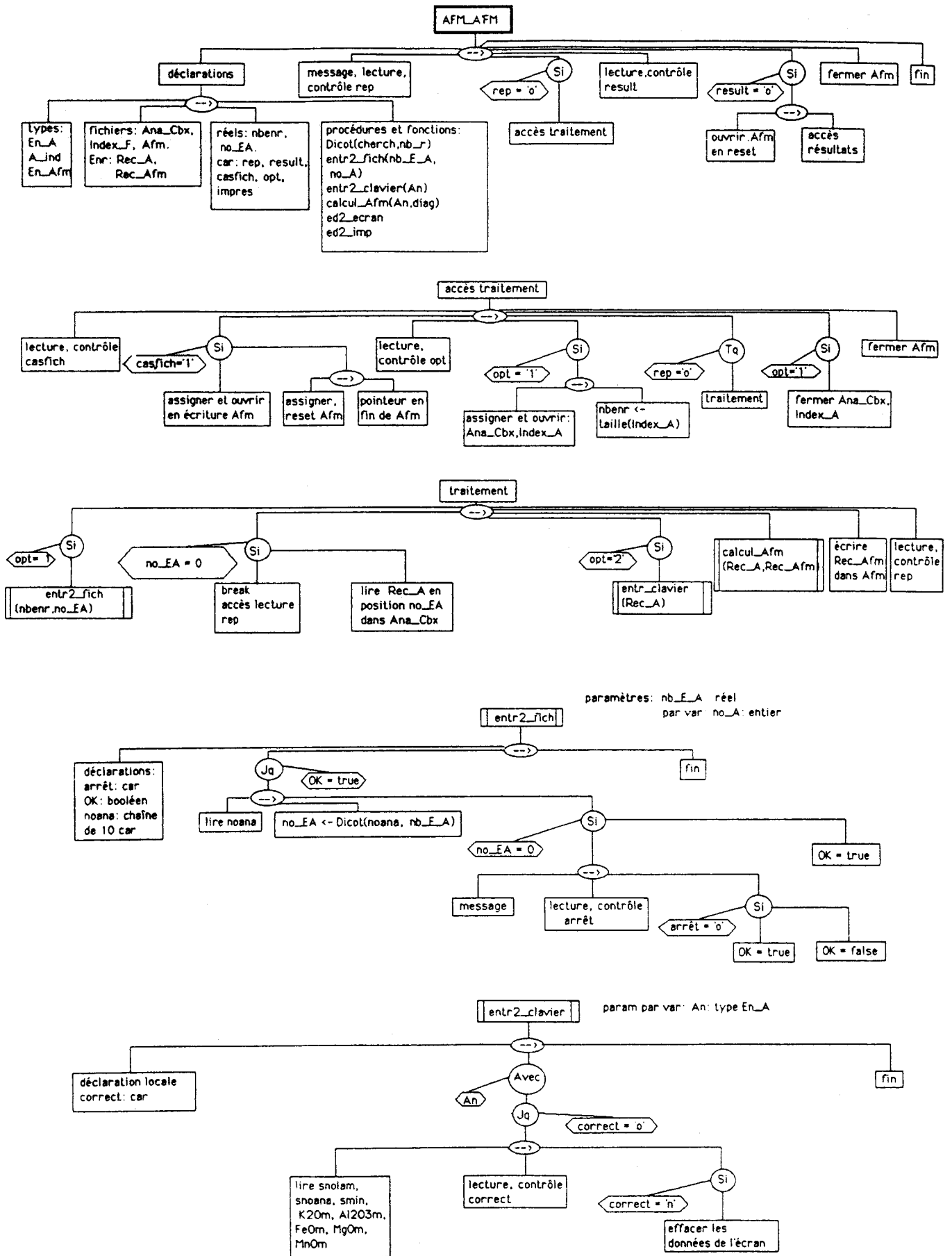
La procédure entr2-clavier(An) autorise l'entrée des données au clavier où An, de type En-A, servira à stocker les données nécessaires. La validité de la saisie est contrôlée par l'utilisateur. Comme nous l'avons déjà signalé, l'effacement des données écran passe par la gestion du positionnement du curseur (cf. unité Struct-M).

La procédure calcul-Afm(An, diag), est lancée dans le traitement général immédiatement après la saisie des données. L'architecture du calcul est simple et peut aisément se suivre sur l'arbre programmatique A15.

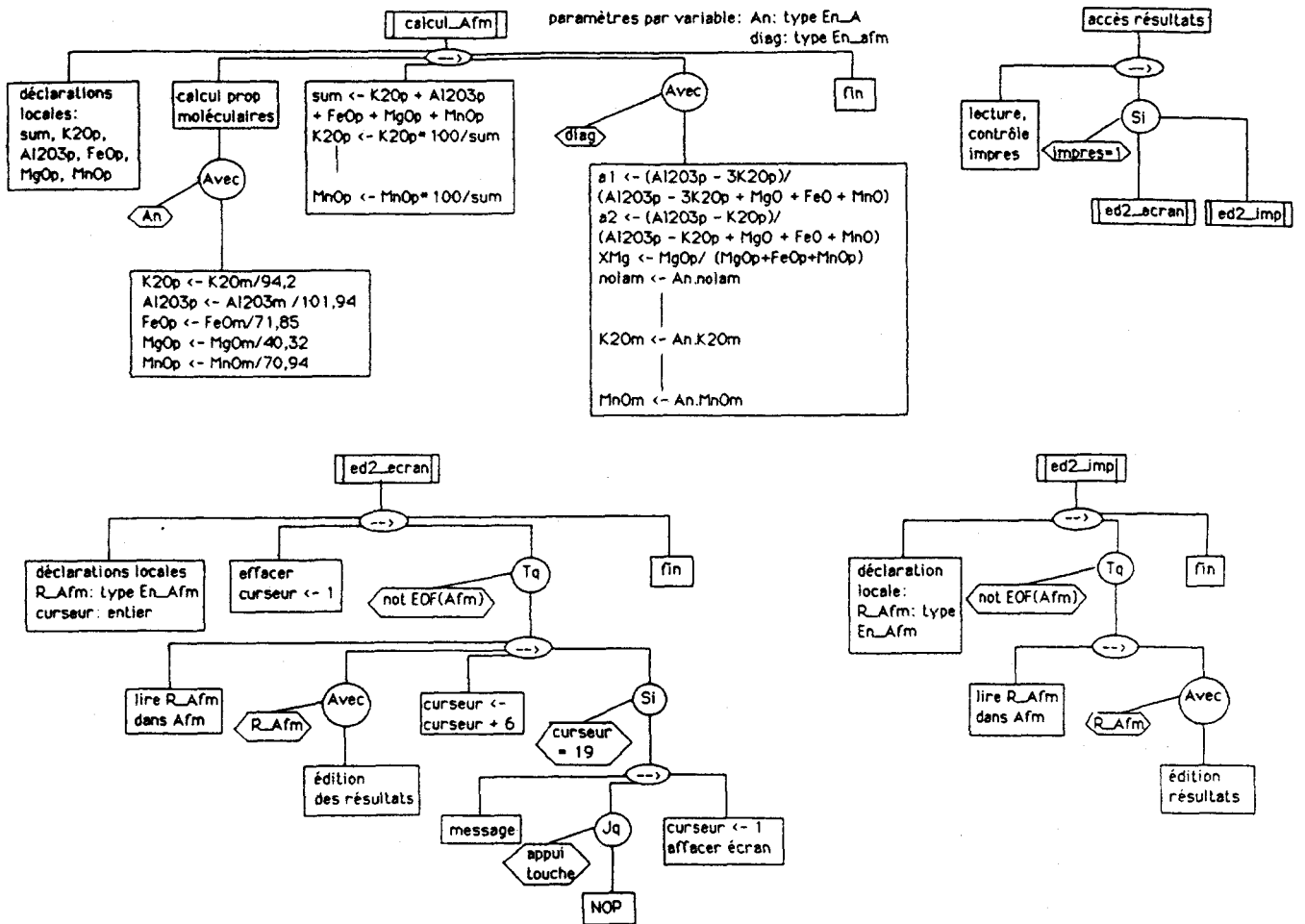
Retenons simplement la signification des paramètres:

- An, de type En-A, passé par variable, constitue l'entrée des éléments du calcul dans la procédure;
- diag, de type En-Afm, passé par variable, sera le paramètre de sortie directement stocké sur disque.

Enfin, les procédures ed2-ecran et ed2-imp liront le fichier Afm en séquence comme un tampon d'édition. L'utilitaire Outil-04 (applications gérées par Menu-O) autorisera une édition par numéro d'échantillon. Comme pour le fichier Acf, nous verrons qu'il est possible de créer sur ces résultats un accès séquentiel indexé.



Arbre A14



Arbre A15

5- Unité fonctionnelle Graph-T.

(Structure complète: se référer aux arbres programmatiques A16 - A17)

Nous abordons le premier des utilitaires graphiques dont la fonction est de représenter un point dans un système barycentré à trois coordonnées. Afin de préserver une certaine polyvalence, cette unité n'est liée à aucune autre application du logiciel et c'est pourquoi les coordonnées se rentrent uniquement au clavier et aucun fichier de sauvegarde n'est créé pour stocker les images vidéo ou les données numériques du tracé.

Comme tout ce qui concerne le graphisme sur calculateur, l'analyse organique de détail est très fortement liée au matériel d'implantation (console graphique, imprimante, traceur, ...) ainsi qu'aux fonctions logicielles disponibles dans le langage ou dans une bibliothèque d'utilitaires. En ce qui nous concerne, la présentation se contentera de donner les lignes directrices d'un programme graphique pouvant résoudre le problème posé, sans entrer dans le détail des contingences matérielles. L'unité déclare tout d'abord deux types structurés principaux:

- **point:** x: réel
y: réel coordonnées planaires d'un point du tracé.
- **trace:** tableau [1 .. 200] de point: tableau stockant un tracé complet.

L'unité utilisera la variable p-fig de type trace ainsi que prem: booléen signifiant lorsqu'il est faux qu'un second tracé se superpose au premier. Passons maintenant en revue les quatre procédures principales utilisées par l'application.

- invite-graph(option).

Option, de type caractère, permet de choisir parmi trois types de triangles:

- '1': type ACF ou n'importe quelle autre représentation barycentrée à trois pôles;
- '2': type A'FM;
- '3': type AFM;

Cette procédure après lecture du paramètre option précise graphiquement sur l'écran quelles sont les significations des deux coordonnées entrées pour la représentation triangulaire choisie.

- entr-donnée(option, fig).

Option, de type caractère, représente le choix du type de tracé défini par l'utilisateur dans l'invite. Fig, de type trace, représente le paramètre de sortie c'est-à-dire les coordonnées rectangulaires des points entrés.

L'entrée des deux coordonnées triangulaires de chaque point passe par la variable locale c-triangle[] du type trace. La variable globale nb (nombre de points entrés) est initialisée puis incrémentée (arbre A16).

Ensuite, suivant la valeur d'option, la variable c-triangle[] est convertie et transférée dans le tableau fig[] assurant ainsi le passage des coordonnées triangulaires aux coordonnées rectangulaires. Notons que le format des coordonnées rectangulaires est directement calculé pour la restitution sur table traçante.

- visu-ecran(option,fig)

Les paramètres ont même signification que précédemment. Le rôle de cette procédure est de visualiser les résultats sur écran. Trois fenêtres sont définies:

- la fenêtre graphique 1: zone principale de l'écran où sera tracé le triangle;
- la fenêtre graphique 2 affiche le(s) symbole(s) utilisable(s) pour matérialiser un point sur l'écran;
- la fenêtre texte permet de saisir les deux variables locales type-p et taille-p, sélectionnant la taille et le symbole d'un point à l'écran.

Suivant la valeur du paramètre option, la procédure définit les contours et les graduations du triangle (un type pour ACF-A'FM, un autre pour AFM), avant de restituer les points du tableau fig[].

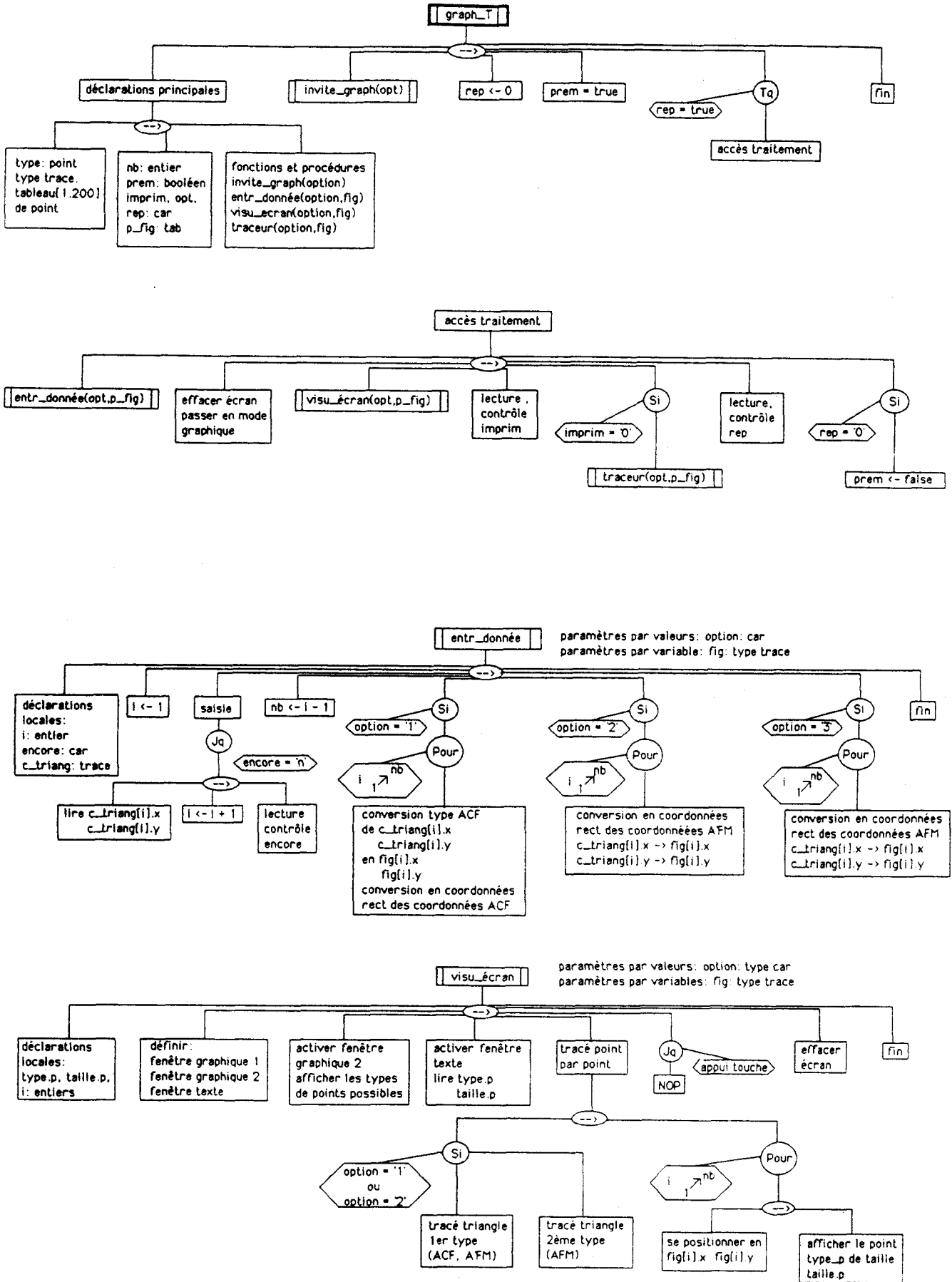
- traceur(option, fig).

La signification des paramètres est similaire à entr-donnée(). Un certain nombre de variables locales sont déclarées:

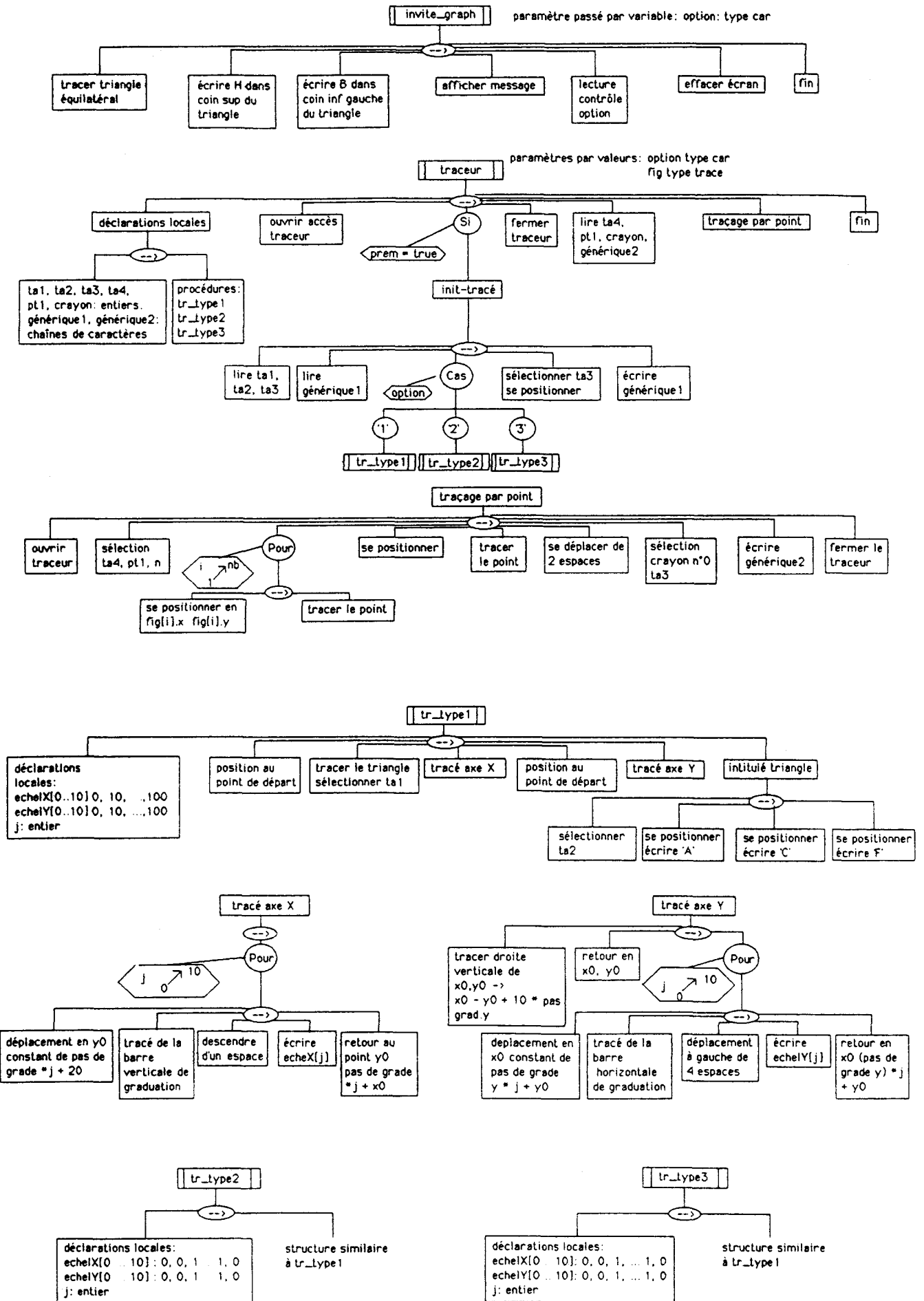
- ta1, ta2, ta3: entiers, donnent au traceur la taille des caractères à employer pour l'écriture des labels de graduations, des labels des pôles du triangle, du titre de la figure (titre saisi sous la variable locale generique1);
- pt1, ta4, crayon: entiers, définissent le type, la taille du point, et le numéro de crayon à utiliser pour le tracé.
- generique2: chaîne de caractères, représente un titre complémentaire lorsque plusieurs tracés se superposent.

Enfin, la procédure déclare, en interne, trois procédures non paramétrées: tr-type1, tr-type2 et tr-type3, qui, suivant la valeur du paramètre option, traceront le triangle, ses axes de coordonnées et les labels de graduations. Notons que ces labels sont déclarés et initialisés sous forme de deux tableaux de chaînes de caractères echelX[], echelY[] (arbre A17).

Au niveau de la structure générale de la procédure traceur(), on constatera que le booléen prem (variable globale) permet de ne s'intéresser qu'au tracé des points lorsqu'il y a superposition de deux figures.



Arbre A16



Arbre A17

6- Unité fonctionnelle graph-R.

(Structure complète: se référer aux arbres programmatiques A18 -> A20)

L'application fournira des diagrammes en coordonnées rectangulaires sur traceur à partir de points isolés ou, à partir de la définition d'une fonction $y = f(x)$. Comme pour l'unité graph-T, la polyvalence de l'application impose une saisie au clavier des points du tracé. Deux types structurés sont définis:

- point: x: réel
y: réel : coordonnées rectangulaires d'un point du tracé;
- trace: tableau [1 .. 200] de point: tableau matérialisant un tracé complet.

La variable globale p-fig de type trace stockera pour l'application l'ensemble des points. Les variables maxX, minX, maxY, minY, réelles, définissent les coordonnées extrêmes des points entrés. Enfin, le booléen prem permet de superposer plusieurs tracés sur la même figure sans reprendre la définition et le traçage du système de coordonnées. L'application fait appel à trois procédures majeures:

- en-données (opt. fig[])

Cette partie du programme s'occupera de l'entrée des données (arbre A18):

- opt de type caractère, définit le tracé:
 - '1': à partir de points isolés;
 - '2': par définition d'une fonction $y = f(x)$ puis entrée des valeurs de x.
- fig[], de type trace, est passé par variable; il constitue le paramètre de sortie de la procédure.

Au niveau des déclarations locales, nous trouvons:

- def-fonction: fichier texte qui "transportera" sur disque le texte déclaratif de la fonction;
- ligne : chaîne de 80 caractères;
- text: tableau [1 .. 100] de ligne qui joue le rôle de buffer d'entrée du texte de définition de la fonction;
- nb-ligne: entier: nombre de lignes saisies dans le buffer.

Si la saisie de points isolés ne pose guère de problèmes, il faut utiliser un subterfuge pour l'entrée par fonction. En effet, cette dernière doit être saisie, puis compilée avec l'application elle-même en cours d'exécution. Si cela est possible en C sous Unix grâce à la puissance du système d'exploitation, il n'en va pas de même dans bien d'autres cas. La solution la plus simple consiste à faire saisir la fonction sous la variable text en l'écrivant dans le langage de programmation. Dans un premier temps text est transférée dans def-fonction et l'application s'interrompt. Ensuite, alors que le fichier disque assigné à def-fonction s'intègre sous la forme d'un fichier inclus, un petit programme système recompilera l'ensemble de l'application et relancera l'exécution. A la reprise, l'utilisateur mettra la variable globale retour à 'o', ce qui permet d'accéder directement à l'entrée des valeurs fig[],x et au calcul (arbre A18).

- trace-ecran(fig[], max-X, min-X, max-Y, min-Y)

Cette procédure permet la visualisation du tracé sur écran graphique (arbre A19):

- fig[] de type trace, passée comme variable d'entrée, représente l'ensemble des points à tracer;
- max-X, ..., min-Y, réels entrés par valeur, constituent les valeurs extrêmes de la variable fig[].

Un certain nombre de variables locales sont déclarées:

- `ecartX`, `ecartY`: réels, serviront de définition à l'intervalle de tracé sur l'axe des x et sur l'axe des y;
- `echelX[0...10]`, `echelY[0...10]`: tableaux de chaînes de caractères: labels des graduations d'axes;
- `val-echX[0...10]`, `val-echY[0...10]`: tableaux de réels: équivalents réels des labels de graduations;
- `type-tr`: caractère: permettra de choisir le type de représentation:
 - '1': tracé par points dispersés
 - '2': tracé des points et jonction de ces derniers par des segments de droite.

La procédure déclare enfin, une fenêtre graphique pour le tracé de la figure, une fenêtre texte pour la saisie de la variable `type-tr`. Notons que les tableaux `echelX[]`, `echelY[]` ne seront à déclarer que lorsque les commandes graphiques sont incapables d'afficher des valeurs numériques sous forme de texte. Dans le cas contraire, seuls `val-echX[]` et `val-echY[]` sont utiles.

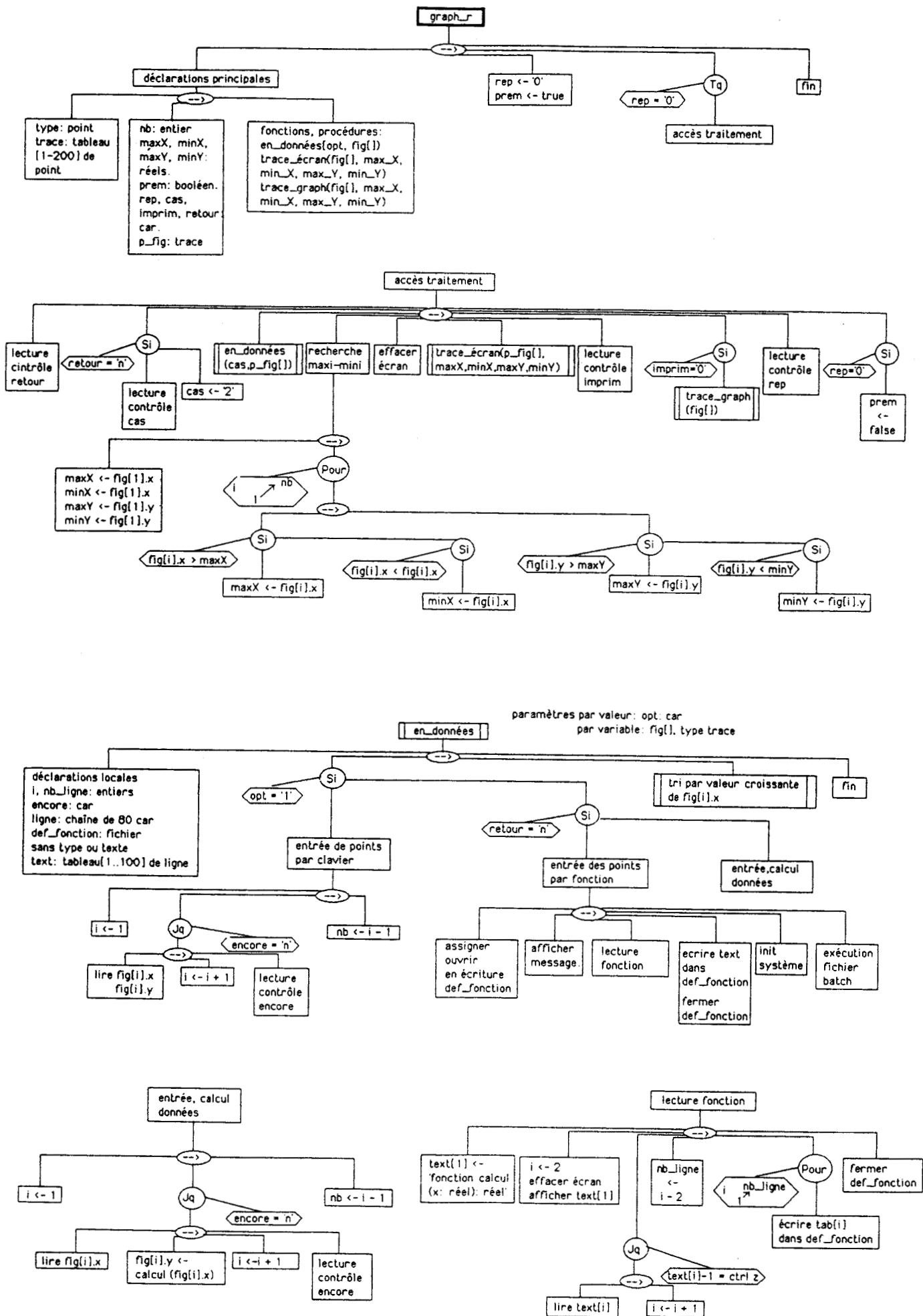
- `trace-graph(fig[], max-X, min-X, max-Y, min-Y)`

Cette partie du programme, chargée de la restitution par traceur, est affectée de paramètres dont la signification et la portée sont identiques à celles de la procédure `trace-ecran()`. Cette fois, on ne se contente pas de faire une "copie" sur traceur de la figure visualisée à l'écran (arbre A19). En fait, l'utilisateur peut entrer tous les paramètres du format de restitution grâce à un certain nombre de variables locales:

- `orX`, `orY`: origines en abscisse et en ordonnée;
- `nX`, `nY`: nombre de graduations, origine comprise, sur chacun des axes;
- `pas-gradX`, `pas-gradY`: pas de graduation;
- `espX`, `espY`: tailles des graduations en mm pour le traceur.

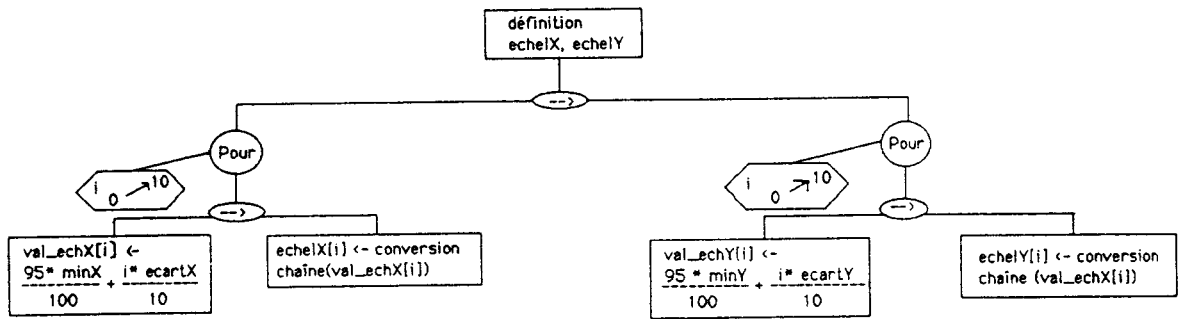
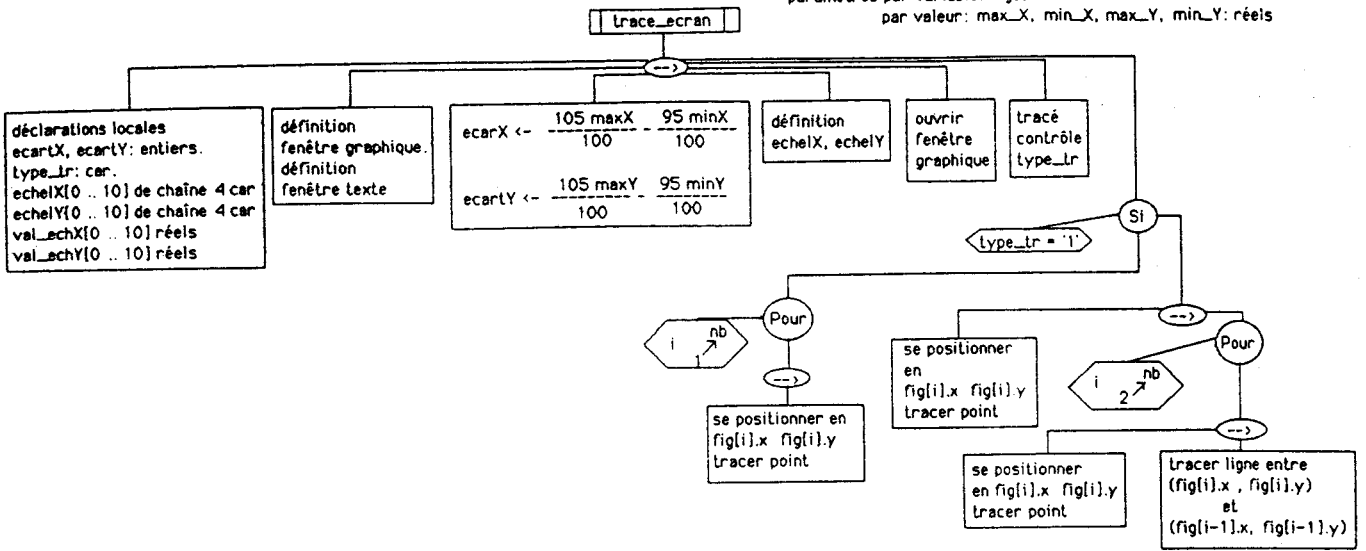
L'entrée de ces variables est contrôlée de manière à ce que le cadre du tracé puisse effectivement contenir les valeurs extrêmes de `fig[]` passées par (`min-X ... max-Y`).

Si la procédure est appelée pour la superposition d'un autre tracé, une structure de contrôle utilisant la variable booléenne `prem` permet de tester la conformité des coordonnées extrêmes de cette nouvelle figure avec le cadrage du premier tracé. Notons que la définition des labels de graduation sous la forme de tableaux de chaînes de caractères (`Gr-X[0 ... nX-1]`, `Gr-Y[0...nY-1]`) n'est utile que lorsque les commandes du traceur sont incapables d'écrire le texte correspondant à des valeurs numériques (ex: traceur HP 7475). Enfin, la structure du programme assignée au tracé des axes, des labels et des points de `fig[]` ne sera pas détaillée car elle dépend entièrement du traceur utilisé.

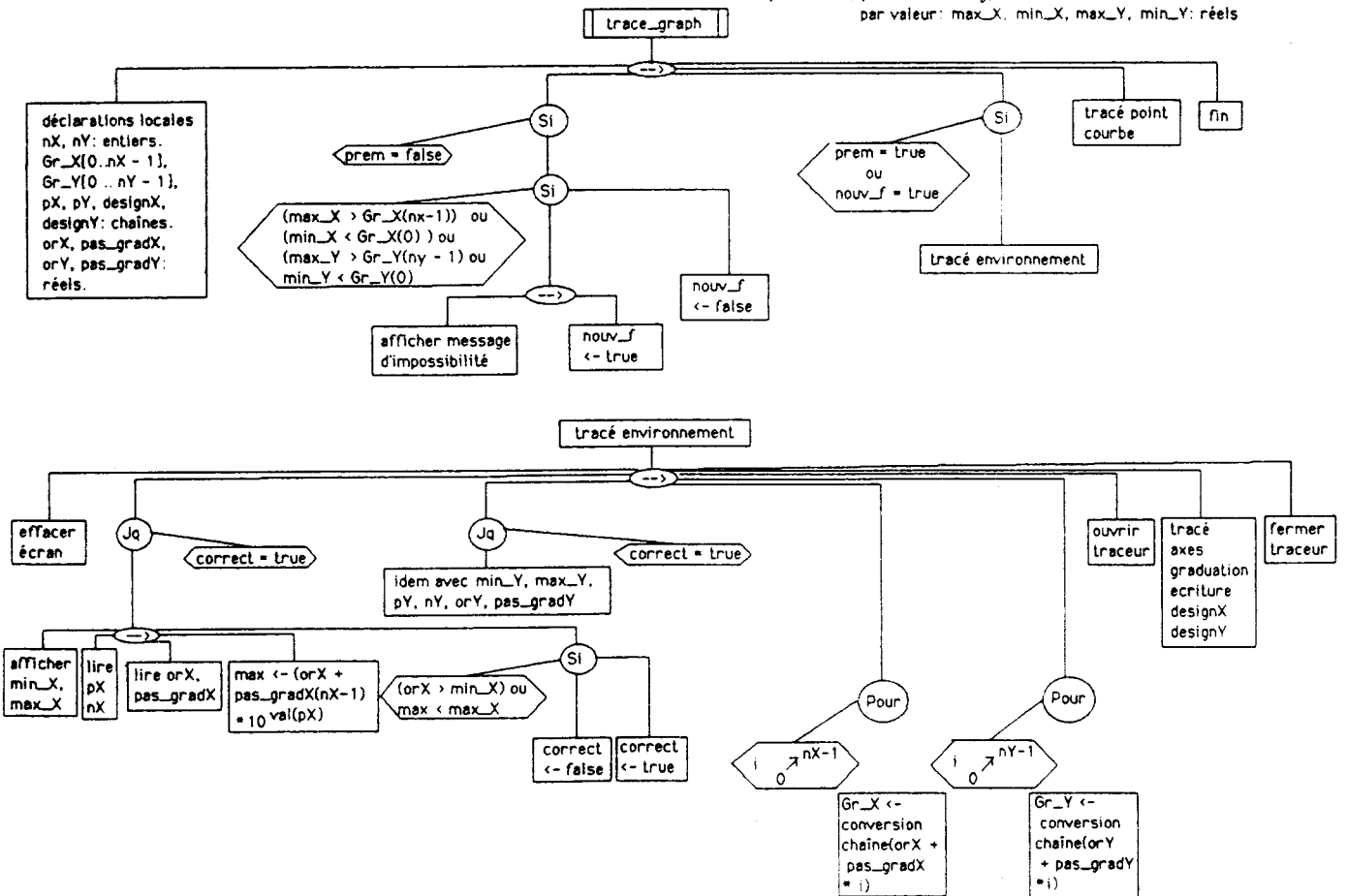


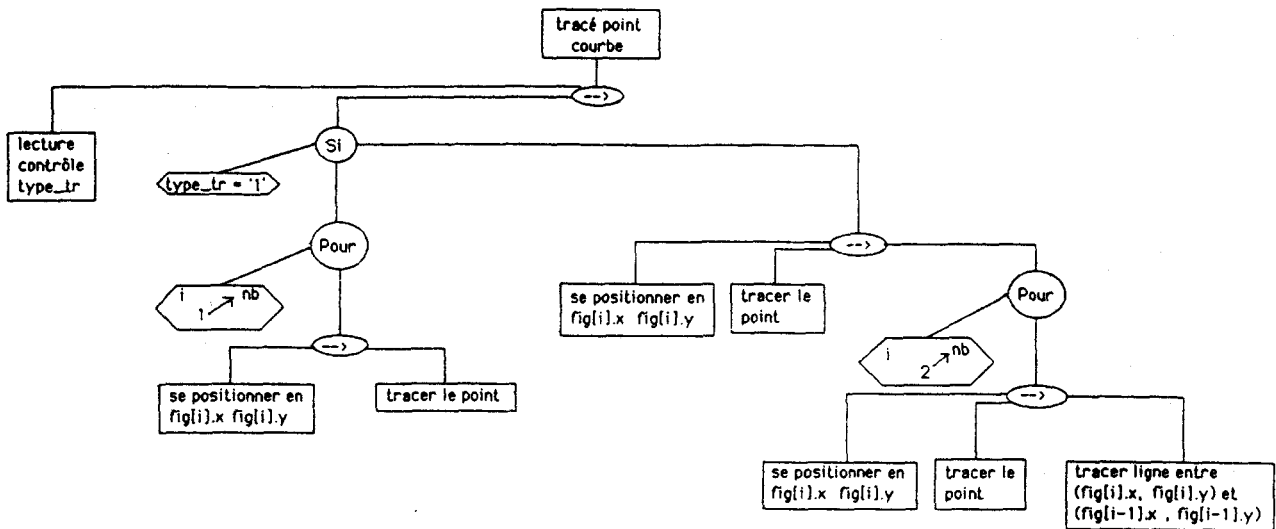
Arbre A18

paramètres par variable: fig[]: trace
par valeur: max_X, min_X, max_Y, min_Y: réels



paramètres par variable: fig[]: trace
par valeur: max_X, min_X, max_Y, min_Y: réels





Arbre A20

IV- Analyse organique des applications associées à Menu-PT

Ce menu gère l'ensemble des unités fonctionnelles liées au calculs thermobarométriques sur associations minérales.

1- Unité fonctionnelle therm-A1.

(Structure complète: se référer aux arbres programmatiques A21 - A22)

Cette unité effectue deux types de calcul:

- les estimations thermiques de l'équilibre [grenat-cordiérite] suivant les calibrations de Thompson (1976) et de Holdaway et Lee (1977);
- les estimations thermiques de l'équilibre [grenat-biotite] suivant les calibrations de Thompson (1976), Holdaway et Lee (1977), Ferry et Spear (1978).

Pour ce faire, les types généraux En-A et A-ind sont déclarés afin d'entrer les paramètres de calcul à partir du fichier Ana-Cbx.

a- L'entrée et l'archivage des données.

L'entrée par fichier est dédiée à la procédure entr2-fich(nb-EA, no-EA) déjà décrite dans l'analyse de l'unité fonctionnelle AFM-A'FM. L'appel en est contrôlé par deux variables globales de type caractère: bool-Bi, bool-Cd qui permettent d'effectuer une sélection entre la cordiérite ou la biotite comme second minéral associé au grenat.

Le contrôle des erreurs de recherche suit le protocole classique mis en oeuvre dans les unités fonctionnelles ACF-AKF, AFM-A'FM (arbres A12, A14).

L'entrée des données au clavier revient à la procédure entr3-clavier(An-G, An-C, An-B) où An-G, An-C et An-B représentent les trois paramètres de sortie de type En-A qui correspondent aux microanalyses respectives du grenat, de la cordiérite, de la biotite (arbre A22).

La procédure utilise les variables bool-Bi et bool-Cd en leur octroyant le même rôle que dans le cas d'une entrée des données par fichier. Si dans le calcul le contenu des variables An-C ou An-B n'est pas utilisée, la procédure entr3-clavier() ne réinitialisera pas les variables; c'est à la procédure de calcul que reviendra la gestion des analyses utilisées grâce aux variables bool-Bi et bool-Cd.

Quelque soit le mode d'entrée des données, ce sont les mêmes variables globales qui stockeront les analyses avec Rec-A-Ga pour le grenat, Rec-A-Cd pour la cordiérite et enfin, Rec-A-Bi pour la biotite.

Avant de suivre le déroulement du calcul, il importe de décrire la structure En-Ga servant à stocker les informations ainsi que les résultats du calcul:

En-Ga:

- nolam: chaîne de 10 caractères: numéro de lame ou d'échantillon;
- noana1: chaîne de 10 caractères: numéro d'analyse du grenat;
- lieu: caractère (C/P): position de l'analyse, en coeur ou en périphérie du grenat;
- noana2, noana3: chaînes de 10 caractères: numéros d'analyses respectifs de la cordiérite et de la biotite;
- MgOG, FeOG: réels: proportions massiques en MgO et FeO du grenat;
- MgOC, FeOC: réels: proportions massiques en MgO et FeO de la cordiérite;
- MgOB, FeOB: réels: proportions massiques en MgO et FeO de la biotite;
- Y, X1, X2: réels: rapport des proportions molaires FeO/MgO du grenat (Y), de la cordiérite (X1) et de la biotite (X2);
- E1, E2: réels: logarithme népérien des constantes d'équilibres des couples Ga-Cd (E1) et Ga-Bi (E2);
- T1t, T1h: entiers: températures en Celsius des équilibres Ga-Cd (T1t \Leftrightarrow Thompson; T1h \Leftrightarrow Holdaway et Lee);
- T2t, T2h, T2f: entiers: températures en Celsius des équilibres Ga-Bi (T2t \Leftrightarrow Thompson; T2h \Leftrightarrow Holdaway et Lee; T2f \Leftrightarrow Ferry et Spear).

La variable globale Rec-Ga de type En-Ga sera utilisée dans l'application.

b- Les calculs et leur restitution.

Les calculs sont pris en charge par la procédure calcul-T(An-G, An-C, An-B, ture). Tous les paramètres sont passés par variable (arbre A21):

- An-G, An-C, An-B de type En-A, constituent l'entrée des données relatives aux analyses du grenat, de la cordiérite, de la biotite;

- ture, de type En-Ga, représente les résultats du calcul.

La procédure déclare deux variables locales réelles Kd1 et Kd2 représentant les constantes d'équilibre respectives des couples [grenat-cordiérite] et [grenat-biotite]. Bool-Cd et bool-Bi gèrent le type de calcul à exécuter suivant les associations minérales employées. De la même façon elles indiqueront à la procédure quels sont les champs de ture non utilisés dans le stockage des résultats et qui doivent être mis à zéro.

entr2_fich

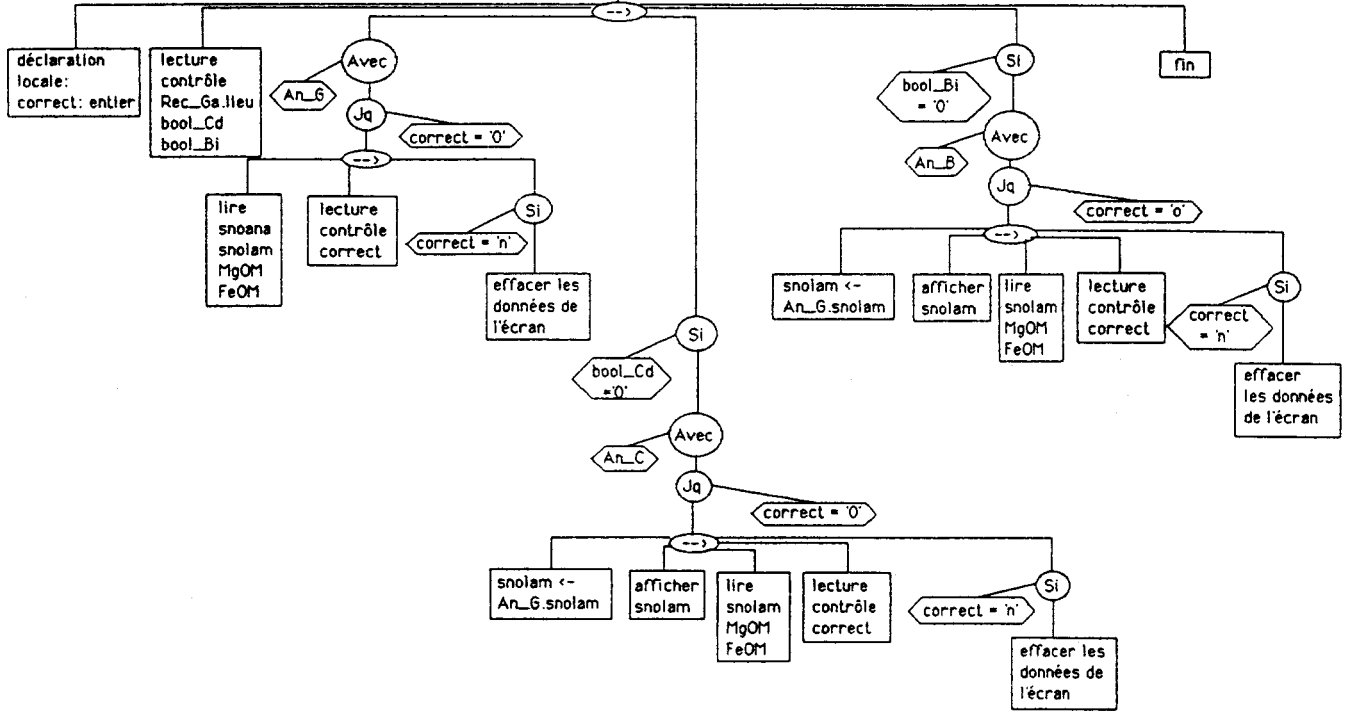
paramètre par variable: no_EA: entier
par valeur: nb_EA: entier



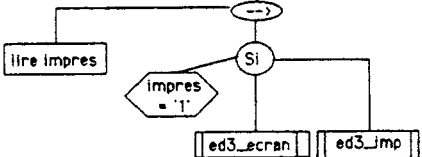
voir arbre correspondant dans l'analyse fonctionnelle de AFM-AFM

entr3_clavier

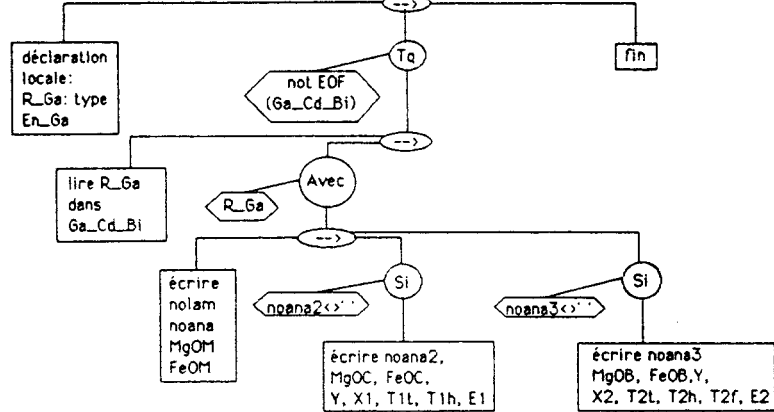
paramètres par variable: An_G, An_C, An_B: type En_A



accès résultats

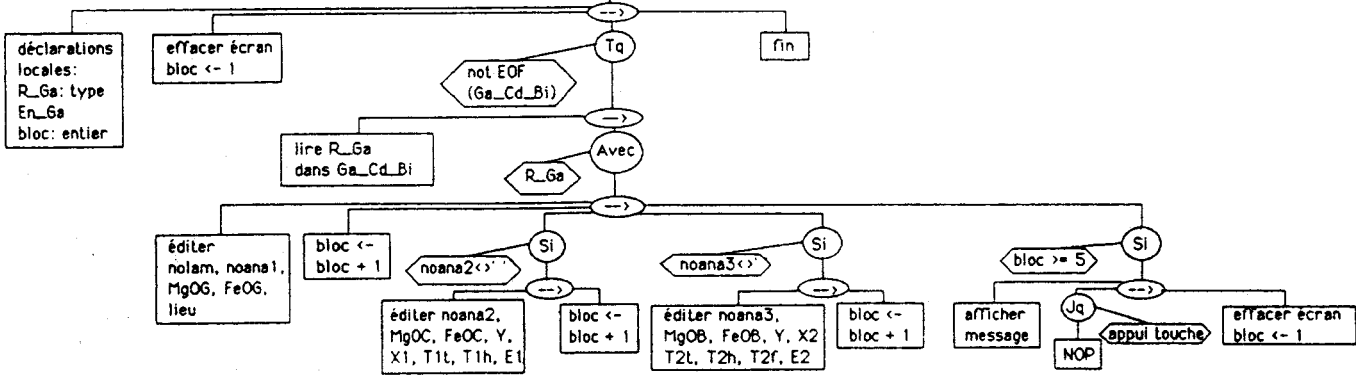


ed3_imp



format d'édition: voir analyse fonctionnelle correspondante

ed3_ecran



Arbre A22

La structure générale du programme ne donne pas un accès immédiat aux résultats, mais écrit la variable globale Rec-Ga dans le fichier de sauvegarde Ga-Cd-Bi. Lorsqu'il n'y a plus de calcul à exécuter, la consultation du fichier est autorisée grâce aux deux procédures ed3-ecran et ed3-imp qui balaient en séquence le fichier de sauvegarde. L'utilitaire Outil-05 (voir applications gérées par Menu-O) permettra une édition par numéro de lame. Comme pour les fichiers Acf ou Afm, il est possible de créer sur ces résultats un accès séquentiel indexé (voir section VI de l'analyse organique).

2- Unité fonctionnelle PT-Ga-Cd.

(Structure complète: se référer aux arbres programmatiques A23 -> A26)

Cette unité est un peu particulière car elle n'obéit pas tout à fait à la même architecture que celle des applications précédemment étudiées. En effet, il n'y a pas d'accès à la base de données constituée par Ana-Cbx, Index-A, Fo-Str, Index-F. Il s'agit, en fait, d'un programme complémentaire à Therm-Al, proposant un plus grand nombre de calibrations sur les thermobaromètres [grenat-cordiérite]. Therm-Al sera utilisée sur de nombreuses associations alumineuses [grenat-biotite], [grenat-cordiérite] afin de déterminer statistiquement les conditions thermiques d'équilibration des phases concernées. Pt-Ga-Cd sera quant-à-elle utilisée de manière beaucoup plus ponctuelle, afin d'apporter à l'utilisateur les compléments d'information, en particulier sur les pressions d'équilibre et les conditions d'hydratation du milieu. Pt-Ga-Cd, regroupe la mise en équation des calibrations thermobarométriques de Currie (1971), Hensen et Green (1971), Hutcheon et al. (1974), Newton et Wood (1979), Thompson (1976), Holdaway et Lee (1977), Martignoles et Sisi (1981), Lonker (1981). Etant donnée la spécificité de l'application, de nouvelles structures et des types spécifiques doivent être déclarés.

a- Les constantes et les types spécifiques

La seule constante définie correspond à celle des gaz parfaits exprimée en Calorie/(Kelvin * mole): $R = 1,98726$.

Par contre, étant donné le nombre de calibrations abordées, des types par énumération qui serviront d'indice de tableaux sont définis:

- pression: P3000, P4000, P5000, P6000, P7000 correspondent à des indices de tableaux définis pour des pressions allant de 3 à 7 kbars (incrément 1 kbar);

- ture: t400, t420, ..., t600, t620, ..., t800, ..., t900 correspondent à des indices de tableaux pour des températures allant de 400 à 900°C (incrément 20 °C);

pression et ture sont uniquement utilisés pour les calculs des teneurs en H₂O de la cordiérite et de la phase fluide dans la calibration de Lonker (1981) .

- auteur1: Currie, Hensen, Hutcheon, Newton: ces quatre auteurs sont regroupés autour d'un type correspondant à la forme commune de mise en équation du thermobaromètre;

- auteur2: Thompson, Holdaway: auteurs de référence dans l'application therm-Al;

- auteur3: Martin0, Martin2, Martin4, Martin6: indices utilisés dans les calibrations de Martignole et Sisi (1981) pour un nombre de molécules de H₂O dans la cordiérite allant de 0,0 à 0,6;

- auteur4: Lonker0, Lonker2, Lonker4, Lonker6, Lonker8: indices utilisés dans les calibrations de Lonker pour un nombre de moles de H₂O dans la cordiérite allant de 0,0 à 0,8.

b- Les structures spécifiques.

Les structure de type param1 sont définies pour le stockage des données nécessaires aux calculs regroupés sous le type auteur1.

- param1:

- ident: chaîne de 10 caractères: identification de la calibration ;

- A-Fe, B-Fe, deltaV-Fe: réels: équations en phases pures pôle Fe:

$$P(\text{Fe}) = A\text{-Fe} + B\text{-Fe} * T$$

$$A\text{-Fe} = - \Delta H / \text{deltaV-Fe}$$

$$B\text{-Fe} = \Delta S / \text{deltaV-Fe}$$

- A-Mg, B-Mg, deltaV-Mg: réels: équations en phases pures pôle Mg:

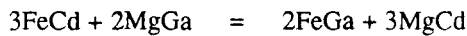
$$P(\text{Mg}) = A\text{-Mg} + B\text{-Mg} * T$$

$$A\text{-Mg} = - \Delta H / \text{deltaV-Mg}$$

$$B\text{-Mg} = \Delta S / \text{deltaV-Mg}$$

- XH₂O, NH₂O: fraction molaire d'H₂O dans la phase fluide et nombre de molécules de H₂O dans la cordiérite;

- a1, b1, a2, b2: variables réelles de calcul de P et T sur la réaction d'équilibre:



- T, P: température et pression calculées.

Les structure de type param2 sont définies pour le stockage des données nécessaires aux calculs regroupés sous le type auteur2.

- param2:

- ident: chaîne de 10 caractères : identification de la calibration;

- A-Fe, B-Fe, deltaV-Fe: réels: équations en phases pures pôle Fe:

$$P(\text{Fe}) = A\text{-Fe} + B\text{-Fe} * T$$

$$A\text{-Fe} = - \Delta H / \text{deltaV-Fe}$$

$$B\text{-Fe} = \Delta S / \text{deltaV-Fe}$$

- deltaH, deltaS, deltaV: réels: réaction en phases naturelles: constantes thermodynamiques;

- XH₂O, NH₂O: fraction molaire de H₂O dans la phase fluide et nombre de molécules de H₂O

dans la cordiérite;

- a1, b1, a2, b2: variables réelles de calcul de P et T;

- T, P: température et pression calculées.

Les structure de type param3 sont définies pour le stockage des données nécessaires aux calculs regroupés sous le type auteur3.

- param3:

- ident: chaîne de 10 caractères: identification de la calibration;

- A-Mg, B-Mg, deltaV-Mg: réels: équations en phases pures pôle Mg:

$$P(\text{Mg}) = A\text{-Mg} + B\text{-Mg} * T$$

$$A\text{-Mg} = - \Delta H / \text{deltaV-Mg}$$

$$B\text{-Mg} = \Delta S / \text{deltaV-Mg}$$

- deltaH, deltaS, deltaV: réels: paramètres thermobarométriques d'équilibre en phases naturelles;
- XH₂O, NH₂O: fraction molaire de H₂O dans la phase fluide et nombre de molécules de H₂O

dans la cordiérite;

- a1, b1, a2, b2: variables réelles de calcul de P et T;
- T, P: température et pression calculées.

Les structure de type param4 sont définies pour le stockage des données nécessaires aux calculs regroupés sous le type auteur4.

- param4:

- ident: chaîne de 10 caractères: identification de la calibration;
- XH₂O, NH₂O: fraction molaire de H₂O dans la phase fluide et nombre de molécules de H₂O

dans la cordiérite;

- T, P: température et pression calculées.

c- Fonctions et procédures utilisées par l'application

- calcul-PT01(auteur, ZFe, ZMg) (arbre A25)

Il s'agit de la procédure de calcul relative calibrations de Currie (1971), Hensen et Green (1971), Hutcheon *et al.* (1974), Newton et Wood (1979):

- auteur, de type param1 représente la variable structurée fournissant à l'entrée de la procédure, les informations nécessaires au calcul;

- ZFe, ZMg, de type réel sont les constantes d'équilibres des phases pures ferrifères et magnésiennes dans le couple [grenat-cordiérite].

En utilisant les identificateurs affectés à param1, on écrira:

$$T = a1 * P + b1 \quad \text{avec } Z\text{Fe} = X\text{Fe}(\text{Ga}) / X\text{Fe}(\text{Cd})$$

$$a1 = \text{deltaV-Fe} / ((-6 * R * \text{Ln}(Z\text{Fe})) + \text{deltaS-Fe})$$

$$b1 = (\text{deltaH-Fe} - \text{deltaV-Fe}) / ((-6 * R * \text{Ln}(Z\text{Fe})) + \text{deltaS-Fe})$$

dans ces calibrations: $\text{deltaH-Fe} = (1 - B\text{-Fe}) * \text{deltaV-Fe}$

$$\text{deltaS-Fe} = A\text{-Fe} * \text{deltaV-Fe}$$

En remplaçant dans a1, b1 les valeurs de deltaH-Fe et de deltaS-Fe par leurs expressions en fonction de A-Fe et B-Fe, nous obtenons:

$$a1 = \text{deltaV-Fe} / ((-6 * R * \text{Ln}(Z\text{-Fe})) + (A\text{-Fe} * \text{deltaV-Fe}))$$

$$b1 = (-B\text{-Fe} * \text{deltaV-Fe}) / ((-6 * R * \text{Ln}(Z\text{Fe})) + (A\text{-Fe} * \text{deltaV-Fe}))$$

En posant $T = a2 * P + b2$ avec $Z\text{Mg} = X\text{Mg}(\text{Ga}) / X\text{Mg}(\text{Cd})$

$$a2 = \text{deltaV-Mg} / ((-6 * R * \text{Ln}(Z\text{-Mg})) + (A\text{-Mg} * \text{deltaV-Mg}))$$

$$b2 = (-B\text{-Mg} * \text{deltaV-Mg}) / ((-6 * R * \text{Ln}(Z\text{-Mg})) + (A\text{-Mg} * \text{deltaV-Mg}))$$

d'où: $P(\text{bars}) = (b2 - b1) / (a1 - a2)$

$$T(\text{°C}) = b2 + a2 * P - 273,15$$

- calcul PT02(auteur, ZFe, Kd) (arbre A25)

C'est la procédure de calcul relative aux calibrations Thompson (1976), Holdaway et Lee (1977):

- auteur de type param2 fournit les données nécessaires au calcul;
- ZFe: réel, représente la constante d'équilibre en phase pures (Fe) de l'association [grenat-cordiérite];
- Kd: réel : constante d'équilibre de la réaction $MgGa + FeCd = FeGa + MgCd$.

En se servant des identificateurs de la variable structurée type param2, nous obtenons:

$$a1 = \Delta V / (\Delta S - 6 \cdot R \cdot \ln(Kd))$$

$$b1 = \Delta H - \Delta V / (\Delta S - 6 \cdot R \cdot \ln(Kd))$$

$$a2 = \Delta V - Fe / ((-6 \cdot R \cdot \ln(Z-Fe)) + A-Fe \cdot \Delta V - Fe)$$

$$b2 = -B-Fe \cdot \Delta V - Fe / ((-6 \cdot R \cdot \ln(Z-Fe)) + A-Fe \cdot \Delta V - Fe)$$

$$P \text{ (bars)} = (b2 - b1) / (a1 - a2)$$

$$T \text{ (°C)} = b2 + a2 \cdot P - 273,15$$

- calcul-PT03 (auteur, ZMg, Kd) (arbre A25)

Il s'agit de la procédure de calcul affectée aux calibrations de Martignoles et Sisi (1981):

- auteur, du type param3, initialise les valeurs numériques nécessaires au calcul;
- ZMg: réel, correspond à la constante d'équilibre en phases pures (Mg) du couple [grenat-cordiérite];
- Kd de type réel, correspond à la constante d'équilibre de la réaction $MgGa + FeCd = FeGa + MgCd$.

Les auteurs de cette calibration fournissent les valeurs de $\Delta V-Mg$, $\Delta S-Mg$, $\Delta H-Mg$ pour quatre valeurs de nH_2O dans la cordiérite. La définition de l'équilibre en phases naturelles reprend la calibration d'Holdaway et Lee (1977).

$$a1 = \Delta V / (\Delta S - 6 \cdot R \cdot \ln(Kd))$$

$$b1 = \Delta H - \Delta V / (\Delta S - 6 \cdot R \cdot \ln(Kd))$$

$$a2 = \Delta V - Mg / ((-6 \cdot R \cdot \ln(ZMg)) + (A-Fe \cdot \Delta V - Mg))$$

$$b2 = -B-Mg \cdot \Delta V - Mg / ((-6 \cdot R \cdot \ln(ZMg)) + (A-Fe \cdot \Delta V - Mg))$$

$$P \text{ (bars)} = (b2 - b1) / (a1 - a2)$$

$$T \text{ (°C)} = b2 + a2 \cdot P - 273,15$$

- calcul-PT4(auteur, ZFe, Kd) (arbre A25)

Cette procédure de calcul utilise les calibrations de Lonker (1981):

- auteur, du type param4, initialise les valeurs numériques nécessaires au calcul;
- ZFe: réel, correspond à la constante d'équilibre en phases pures (Fe) du couple [grenat-cordiérite];
- Kd de type réel, correspond à la constante d'équilibre de la réaction $MgGa + FeCd = FeGa + MgCd$.

L'équilibre en phases naturelles anhydres, fournit la relation P-T basée sur la calibration d'Holdaway et Lee (1977):

$$T = a1 \cdot P + b1$$

$$a1 = 6150 / (2,69 + R * \ln(Kd))$$

$$b1 = 0,0302 / (2,69 + R * \ln(Kd))$$

L'équilibre sur phases pures ferrières hydratées donne:

$$T = a2 * P + b2$$

$$a2 = 22428,26 / \text{deter}$$

$$b2 = -4,0061 / \text{deter}$$

$$\text{deter} = -6 * R * \ln(ZFe) + 15,728 + 3 * R * \ln(AH2O)$$

AH2O = activité de H2O dans la cordiérite

selon Lonker: $AH2O = \ln(1 - nH2O)$, nH2O représentant le nombre de molécules de H2O par molécule de cordiérite. Connaissant a1, a2, b1, b2, on écrit:

$$P \text{ (bars)} = (b2 - b1) / (a1 - a2)$$

$$T \text{ (°C)} = b2 + a2 * P - 273,15.$$

Après ce calcul, la procédure détermine S-P, S-T, respectivement de type pression, ture et qui serviront d'indice de tableaux dans la définition:

- du volume molaire partiel occupé par H2O: vol-cm3 provenant du tableau Zv[]
- de l'enthalpie et de l'entropie de la réaction d'hydratation de la cordiérite: $Mg \text{ Cd} + H_2O = Mg \text{ Cd}(H_2O)$. Ces valeurs sont respectivement conservées dans les tableaux Zh[] et Zs[].

$$NH2O = 0 \implies XH2O = 0$$

$$\text{Si } P > 7500 \text{ bars: } XH2O = 1,0$$

$$\text{sinon } \text{vol-cm3} = Zv [S-P, S-T] * 18,015 / 41,84$$

$$XH2O = \text{Exp} (\ln(NH2O / (1 - NH2O)) + Zh[S-P] / (R * T) - Zs[S-P] / R - \text{vol-cm3} * P / (R * T))$$

d- Eléments attenants au fonctionnement général de l'application.

Les variables globales affectées à des objets dépendants du type de calibration sont groupées sous forme de tableaux dont les indices correspondent aux types par énumération:

- tab1: tableau [auteur1] de param1;
- tab2: tableau [auteur2] de param2;
- tab3: tableau [auteur3] de param3;
- tab4: tableau [auteur4] de param4.

Pour chaque auteur, il existe une procédure d'initialisation des paramètres thermodynamiques (arbre A24) travaillant directement avec les variables globales de l'application. Nous aurons donc:

<u>procédure</u>	<u>variable globale initialisée</u>
init-Currie	tab1[currie]
init-Hensen	tab1[Hensen]
init-Hutcheon	tab1[Hutcheon]
init-Newton	tab1[Newton]
init-Thompson	tab2[Thompson]

init-Holdaway	tab2[Holdaway]
init-Martin0	tab3[Martin0]
init-Martin6	tab3[Martin6]

Notons que l'initialisation des paramètres utilisés dans les calibrations de Lonker (1981) n'affecte que deux valeurs grâce à la procédure unique init-Lonker.

Afin de pouvoir éditer puis stocker les résultats, d'autres types sont créés:

- TPNX1: tableau [auteur1] de réels;
- TPNX4: tableau [auteur4] de réels;
- nom1: tableau [auteur1] de chaînes de caractères;
- nom4: tableau [auteur4] de chaînes de caractères.

Le fichier de sauvegarde est prévu pour stocker les structures type resultat.

resultat:

- S-nolam: chaîne de caractères: n° d'échantillon;
- S-noana-Ga: chaîne de caractères: n° d'analyse du grenat;
- S-noana-Cd: chaîne de caractères: n° d'analyse de la cordiérite;
- S-XFe-Ga: réel: fraction de Fe dans le grenat;
- S-XMg-Ga: réel: fraction de Mg dans le grenat;
- S-XFe-Cd: réel: fraction de Fe dans la cordiérite;
- S-XMg-Cd: réel: fraction de Mg dans la cordiérite;
- S-K-eq: réel: constante d'équilibre de la réaction en phase naturelle;
- S-K-Fe: réel: constante d'équilibre de la réaction en phases pures ferrières;
- S-K-Mg: réel: constante d'équilibre de la réaction en phases pures magnésiennes;
- S1-ident: nom1: identifie l'auteur de la calibration;
- S1-T: TPNX1: tableau de stockage des températures;
- S1-P: TPNX1: tableau de stockage des pressions;
- S1-XH2O: TPNX1: tableau de stockage des fractions de H₂O dans la phase fluide;
- S1-NH2O: TPNX1: tableau de stockage de H₂O dans la cordiérite;
- S2-ident: nom2;
- S2-NH2O: TPNX2;
- S3-ident: nom3;
- S3-NH2O: TPNX3;

- S4-ident: nom4;

- S4-NH2O: TPNX4.

Au contraire des unités fonctionnelles précédentes, cette structure ne sert pas de variable globale dans l'entrée ou la réception des données et résultats des procédures de calcul. Cette opération s'effectue par des variables globales:

tab1, tab2, tab3, tab4 (voir procédures d'initialisation);

at1, at2, at3, at4 respectivement du type auteur1, auteur2, auteur3, auteur4;

M-Fe-Ga, M-Mg-Ga, M-Fe-Cd, M-MCd: proportions massiques en FeO et MgO des phases minérales;

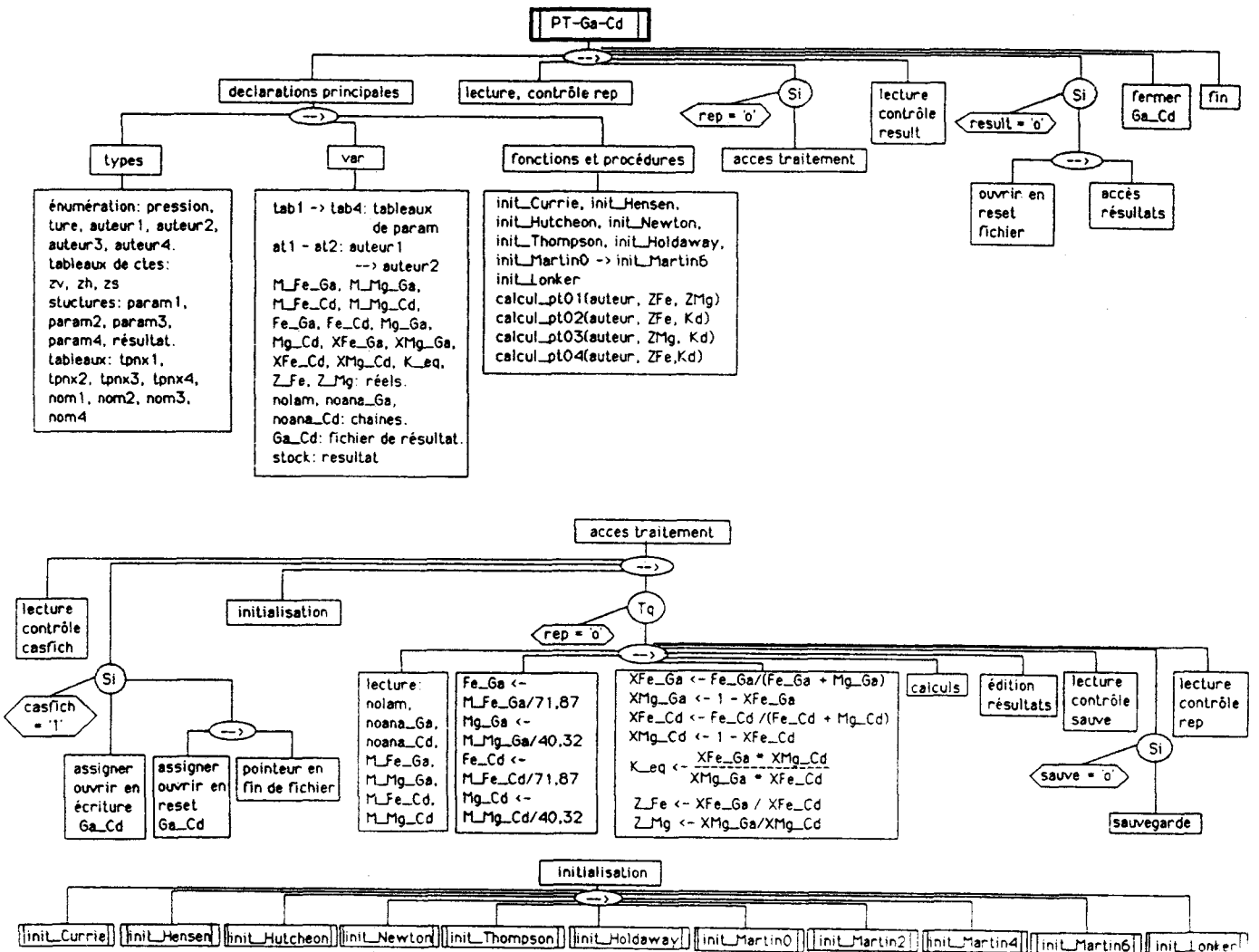
Fe-Ga, Mg-Ga, Fe-Cd, Mg-Cd: proportions molaires de ces mêmes phases;

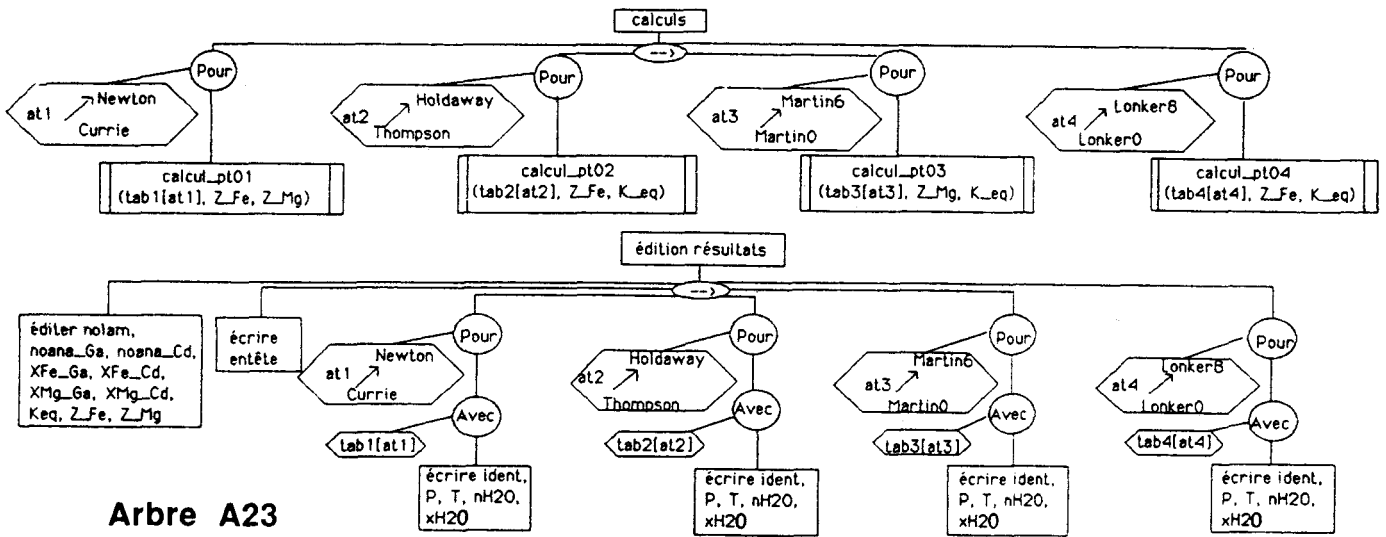
XFe-Ga, XMg-Ga, XFe-Cd, XMg-Cd: fractions molaires de ces mêmes phases;

K-eq, Z-Fe, Z-Mg: constantes d'équilibres;

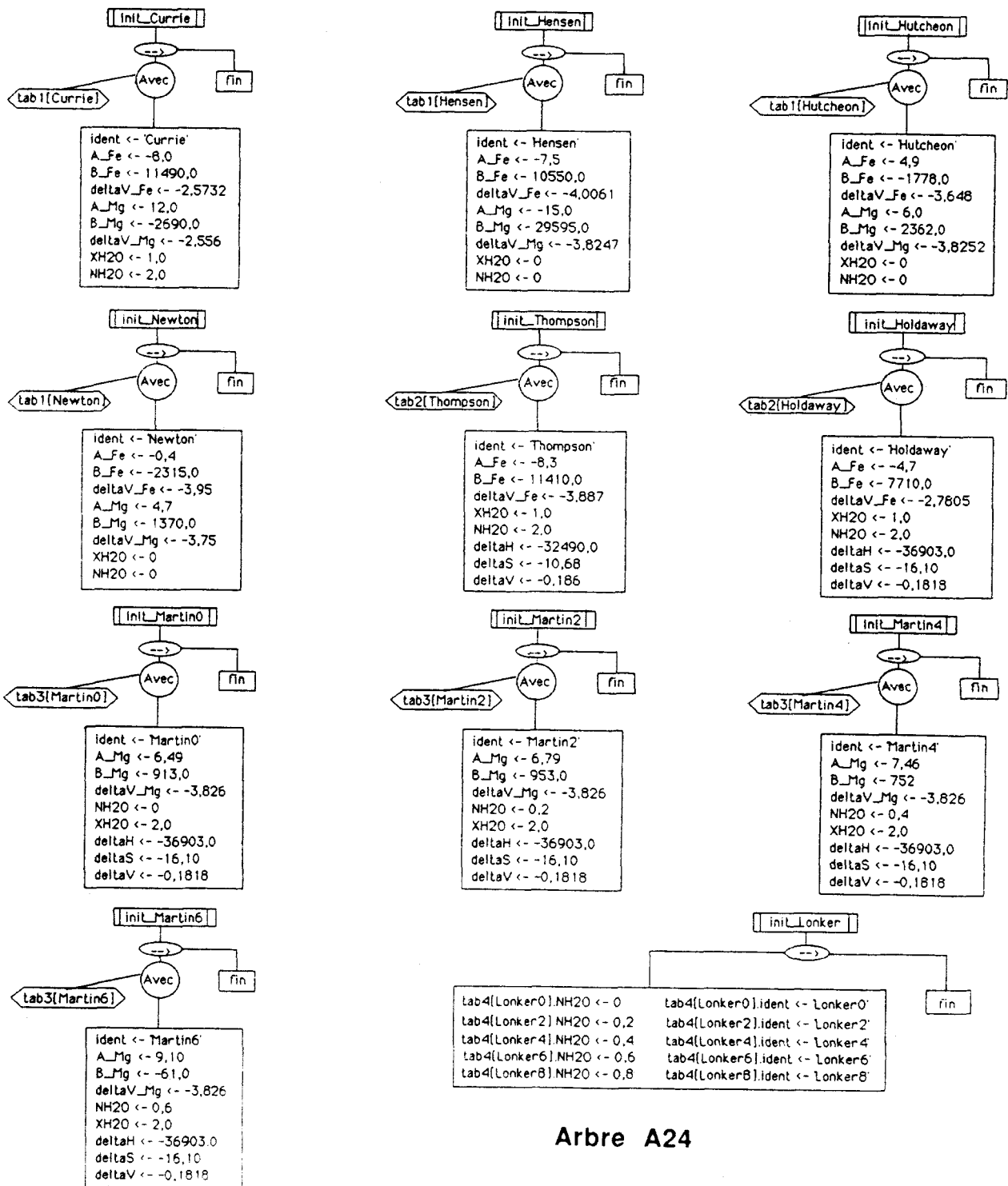
no1am, noana-Ga, noana-Cd: chaînes de caractères: numéros des échantillons et analyses.

En ce qui concerne le fonctionnement général de l'application, rappelons que la sauvegarde des résultats du calcul est laissée sous contrôle de l'opérateur. Ce dernier obtient une visualisation immédiate du résultat avant de pouvoir sauvegarder. Le fichier de sauvegarde se comporte, à la relecture, comme un tampon d'édition géré par les procédures ed5-ecran et ed5-imp. L'édition à l'écran est gérée en défilement page par page, une page correspondant à un enregistrement (arbre A26).

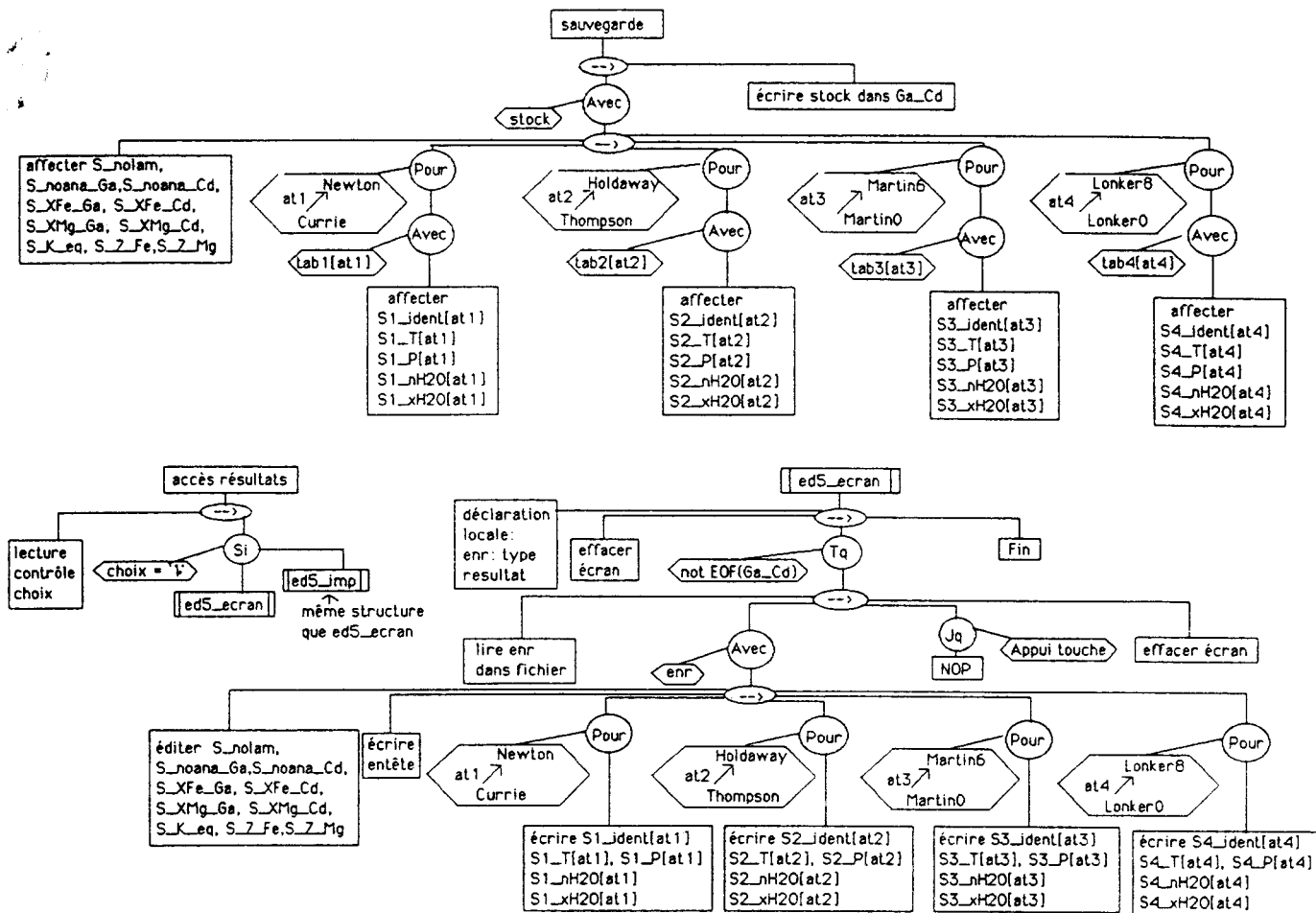




Arbre A23



Arbre A24



Arbre A26

3- Unité fonctionnelle T-OP-CP.

(Structure complète: se référer aux arbres programmatiques A27 -> A29)

Cette unité calcule les températures d'équilibre du couple [ortho - clinopyroxène] suivant deux calibrations: Wood et Banno (1973), et Wells (1977). Pour ce faire, ce sont les formules structurales des minéraux qui sont utilisées et l'unité déclare les types En-F, F-ind, ainsi que les fichiers Fo_Str et Index-F. Cependant, dans le cas d'une entrée de données au clavier, la formule structurale n'est pas forcément connue de l'opérateur. C'est pourquoi il faut pouvoir lancer le calcul à partir de l'analyse chimique. Le type En-A est donc déclaré.

a- L'entrée et l'archivage des données du programme.

L'entrée des données à partir du fichier Fo_Str est assignée à la procédure entr3-fich(nb-EF, no-EFO, no-EFC) (arbre A28). Les trois paramètres sont du type entier:

- nb-EF: passé en entrée par valeur, donne la taille en nombre d'enregistrements du fichier struct-M. nb-EF est utilisé par la fonction Dicot2() (section III-3 de ce chapitre) de recherche dans Index-F;

- no-EFO, no-EFC: passés par variables, constituent les numéros d'enregistrements des formules structurales renvoyés par Dicot2().

nb-enF, no-Op, no-Cp sont les équivalents déclarés en variables globales des paramètres précédents. Leur validité sera soumise à un contrôle d'erreur que l'utilisateur gère lui-même.



L'entrée des données au clavier est contrôlée par la variable de type caractère `typent`.

- `typent = '1'`: entrée des analyses chimiques par `entr4-clavier(An-Op, An-Cp, Fe2O3MO, Fe2O3MC)`

(arbre A27);

- `typent = '2'`: entrée des formules structurales par `entr5-clavier(F-Op, F-Cp)` (arbre A28)

Pour `entr4-clavier(An-Op, An-Cp, Fe2O3MO, Fe2O3MC)` tous les paramètres sont passés par variable:

- `An-Op, An-Cp`: de type `En-A`, correspondent aux analyses de l'orthopyroxène et du clinopyroxène;

- `Fe2O3MO, Fe2O3MC`: réels, représentent les proportions massiques en Fe_2O_3 de l'orthopyroxène et du clinopyroxène.

Les erreurs commises par l'utilisateur sur la saisie des champs de `An-Op, An-Cp` sont contrôlées et nécessitent la gestion du curseur. Notons que les valeurs `Fe2O3MO` et `Fe2O3MC` sont entrées en données brutes; aucun calcul correctif du type de celui de l'unité `ACF-AKF` n'est effectué si les valeurs sont nulles.

La procédure `entr5-clavier(F-Op, F-Cp)` passe ses deux paramètres de type `En-F` par variables. Ils correspondent respectivement aux formules structurales de l'ortho et du clinopyroxène. Un contrôle de l'entrée des champs de `F-Op` et `F-Cp`, similaire à celui mis en oeuvre dans `entr4-clavier()` est employé.

Afin de procéder aux calculs et d'en conserver les résultats, le programme déclare deux nouvelles structures. Tout d'abord, les pyroxènes disposent de trois sites de répartition de leurs cations dans la formule structurale:

- le site T (tétraédrique) constituant la charpente silicatée,

- le site M1 dédié aux cations métalliques,

- le site M2 dédié aux alcalins et à Fe^{2+} et Mg^{2+} .

La structure `cation2` stockera les valeurs numériques affectées aux ions pouvant se répartir sur deux sites.

`cation2`:

- `Fe3M1, Fe3T`: réels: Fe^{3+} respectivement en site M1 et T;

- `TiM1 TiT`: réels: Ti^{4+} respectivement en site M1 et T;

- `Fe2M1, Fe2M2`: réels: Fe^{2+} respectivement en site M1 et M2;

- `MgM1, MgM2`: réels: Mg^{2+} respectivement en site M1 et M2.

L'unité fonctionnelle a ensuite besoin d'une structure conservant les informations relatives aux calculs ainsi que leurs résultats: ce sera le rôle de `En-Opx`.

`En-Opx`:

- `nolam`: chaîne de 10 caractères: numéro de lame ou d'échantillon;

- `noana1`: chaîne de 10 caractères: numéro d'analyse de l'orthopyroxène;

- `noana2`: chaîne de 10 caractères: numéro d'analyse du clinopyroxène;

- `OXFe, CXFe`: réels: fraction $Fe/(Fe+Mg)$ dans l'ortho- et le clinopyroxène;

- OFeM1, OFeM2: réels: nombre de cations Fe^{2+} en site M1 et M2 dans l'orthopyroxène;
- OMgM1, OMgM2: réels: nombre de cations Mg^{2+} en site M1 et M2 dans l'orthopyroxène;
- CFeM1, CFeM2: réels: nombre de cations Fe^{2+} en site M1 et M2 dans le clinopyroxène;
- CMgM1, CMgM2: réels: nombre de cations Mg^{2+} en site M1 et M2 dans le clinopyroxène;
- OAC: réel: activité de l'enstatite (pôle Mg) dans l'orthopyroxène;
- CAC: réel: activité de l'enstatite (pôle Mg) dans le clinopyroxène;
- TWB1, TWB2, TWB3: réels: températures en Celsius selon les calibrations de Wood et Banno (1973);
- TW: réel: température en Celsius selon la calibration de Wells (1977).

b- L'architecture du calcul.

Lorsque ce sont les analyses chimiques qui sont entrées au clavier, il faut tout d'abord calculer les formules structurales par la procédure form-S(An, F-S, Fe2O3M), (arbre A29):

- Fe2O3M, de type réel passé par valeur, représente la proportion massique en Fe_2O_3 du pyroxène;
- An, de type En-A, représente l'entrée de l'analyse chimique dans la procédure.
- F-S, de type En-F, représente le paramètre de sortie c'est-à-dire la formule structurale.

Form-S obéit aux conditions de calcul déjà exposées dans l'unité fonctionnelle Struct-M (section III-1 de ce chapitre). Elle déclare donc:

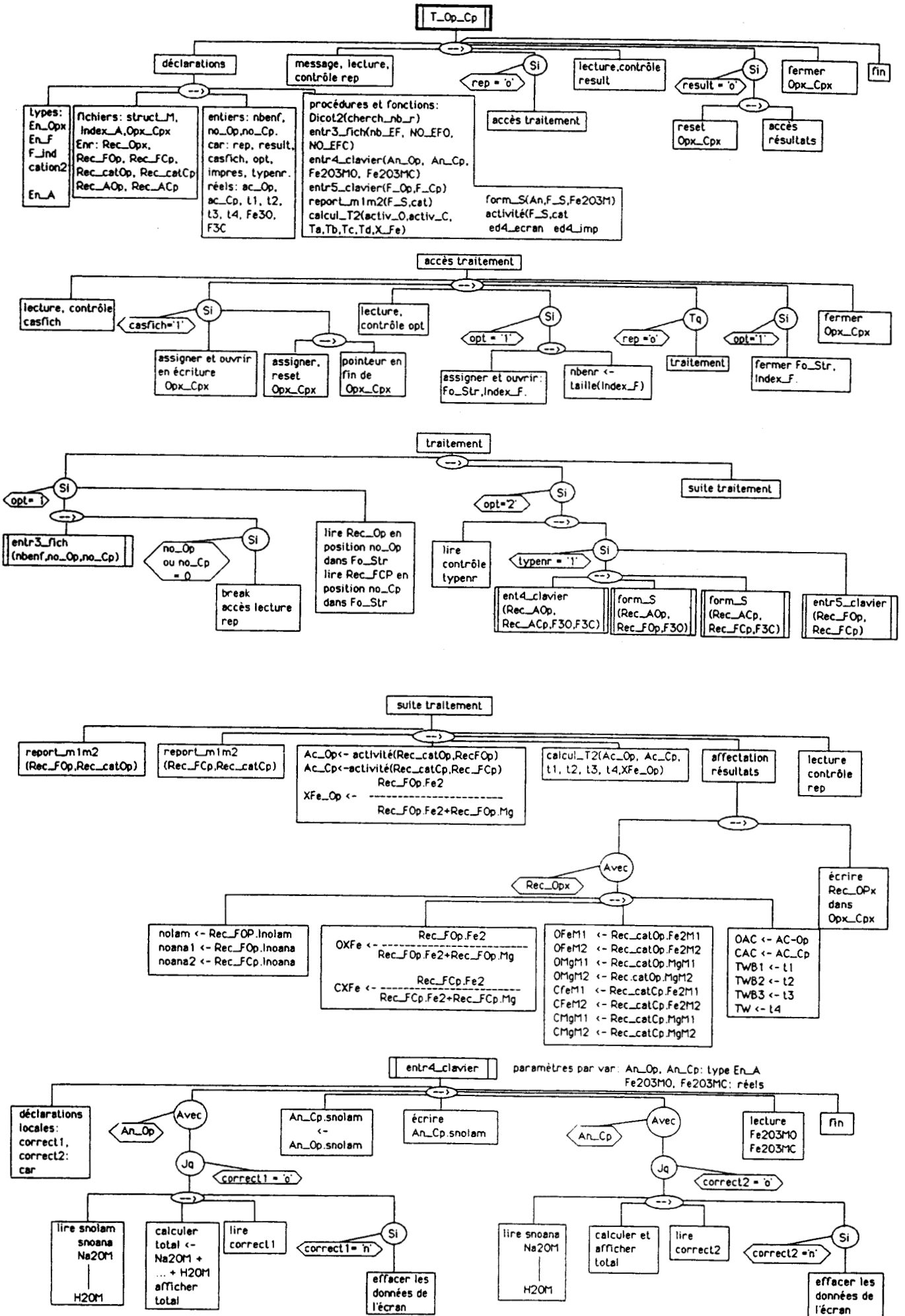
- les variables Na2OP, K2OP, MnOP, MgOP, Al2O3P, SiO2P, FeOP, Fe2O3P, NiOP, ZnOP, Cr2O3P, TiO2P, CaOP, H2OP, qui correspondent aux diverses proportions molaires d'oxydes dans le minéral;
- cal-cation(q) procédure locale qui effectue le calcul cationique de la formule structurale (arbre A29). Le paramètre q représente un coefficient d'itération entier utilisé pour calculer Fe^{3+} . Rappelons que la valeur de z, somme des cations du pyroxène, conditionne l'incrémentement de q et l'itération sur l'appel de la procédure cal-cation(q). Le calcul de répartition de Al4 <-> Al6 est conforme à celui décrit dans Struct-M.

A ce niveau du traitement, quelque soit le type d'entrée fournie, l'application possède deux formules structurales sous la forme des variables globales Rec-FOP et Rec-FCP. Il faut maintenant définir la répartition des cations sur les sites M1 et M2. Ce travail est affecté à la procédure repart-M1M2(F-S, cat) dont les deux paramètres sont passés par variable :

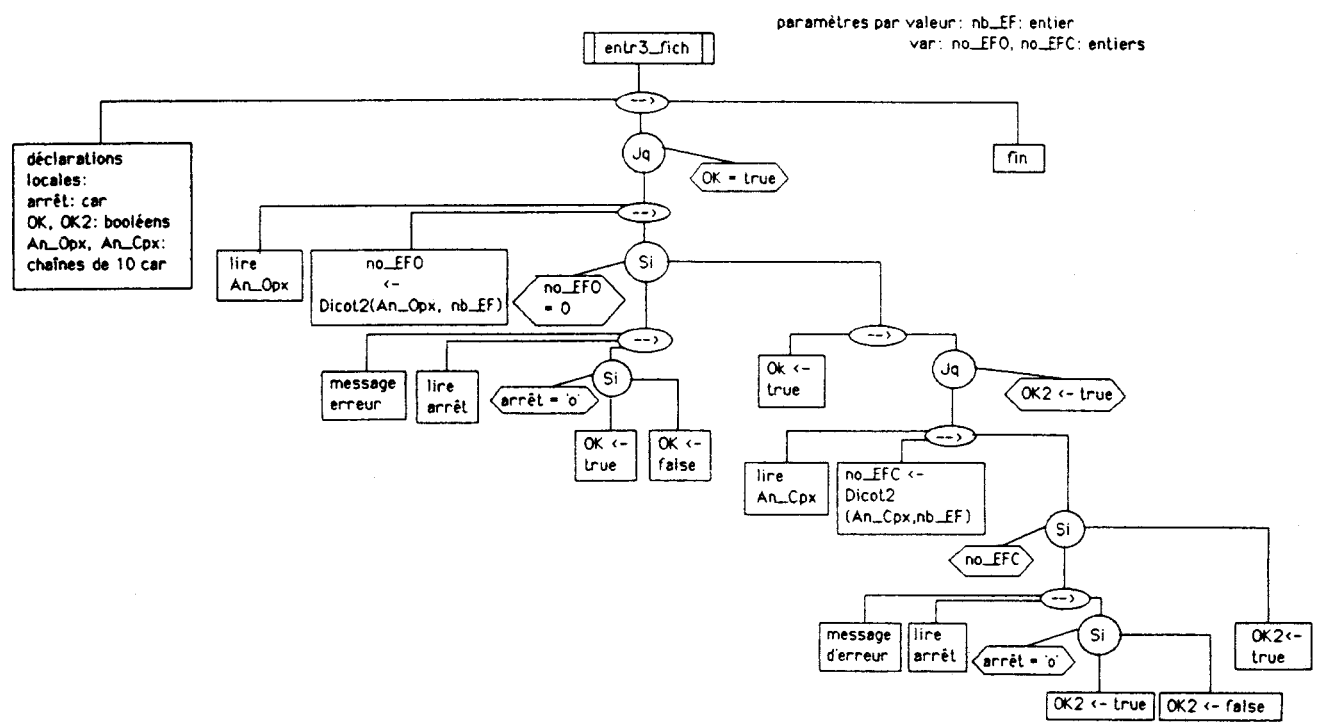
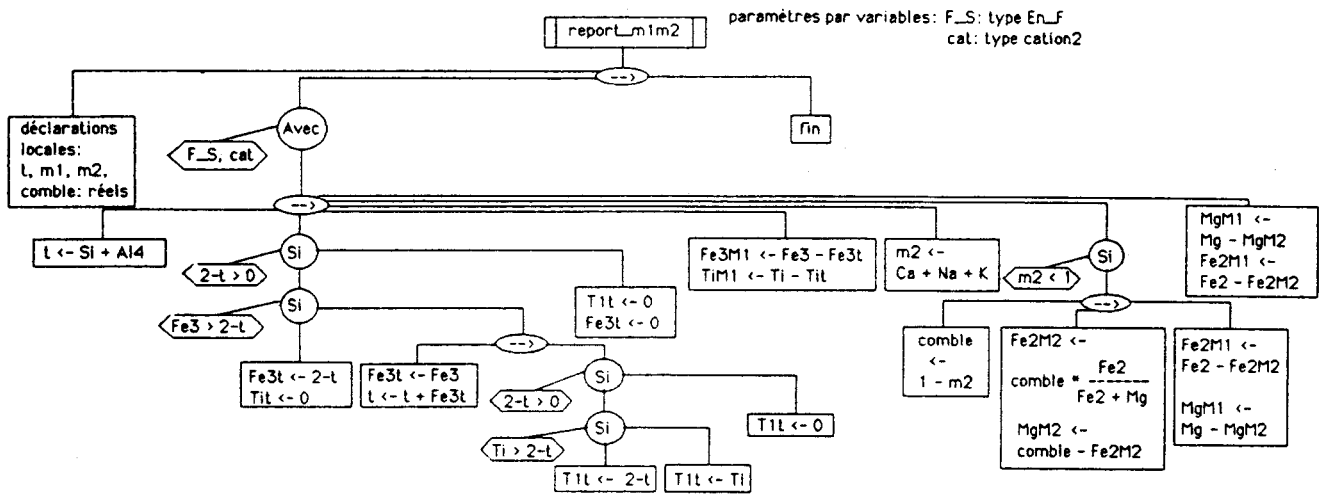
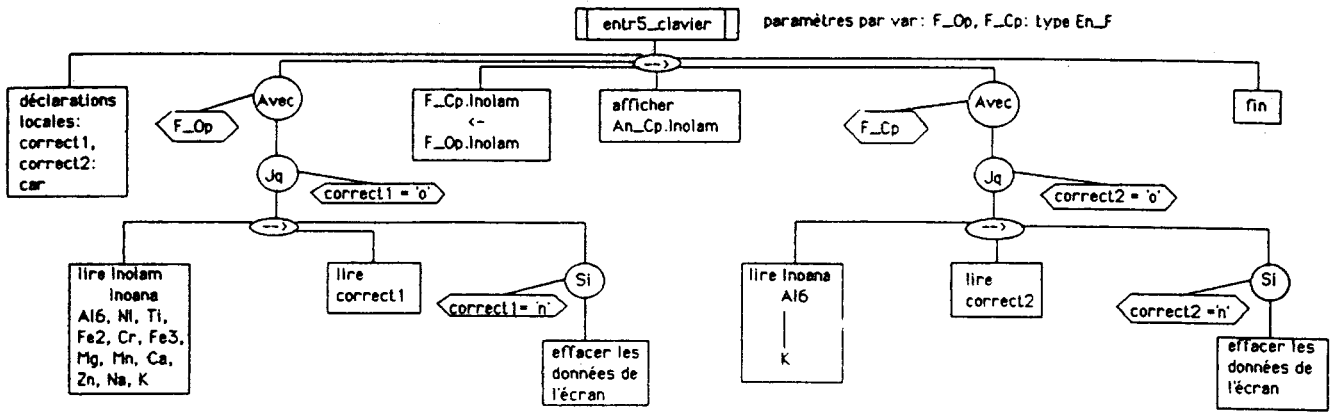
- F-S, de type En-F, représente l'entrée de la formule structurale;
- cat, de type cation2, paramètre de sortie, contient le résultat de la répartition sur sites.

Le calcul ne présente rien de particulier hormis le fait que cette répartition doit préserver sur chaque site la valeur du XFe global du pyroxène (arbre A28).

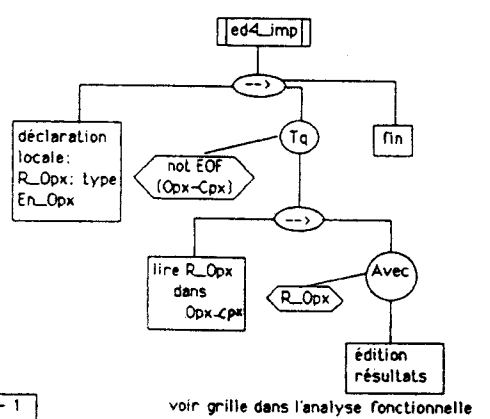
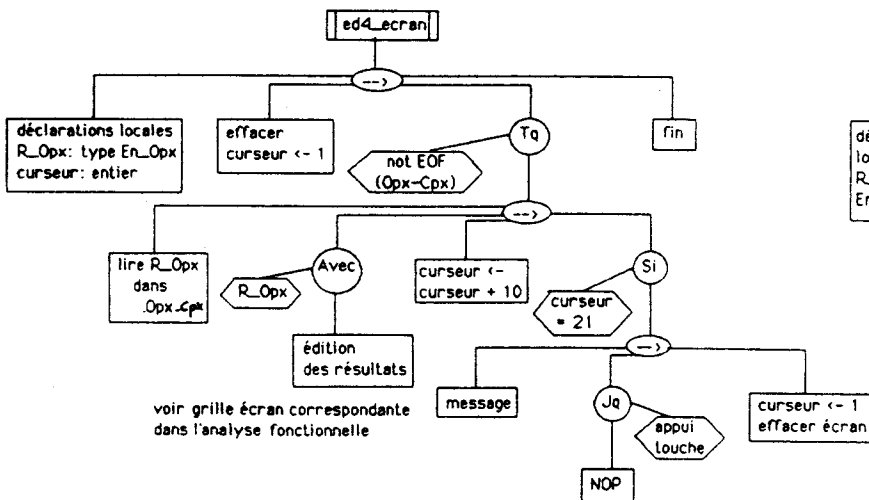
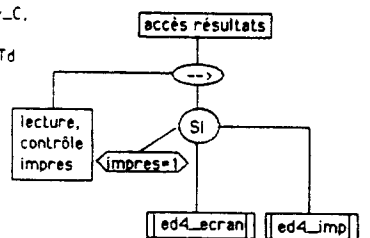
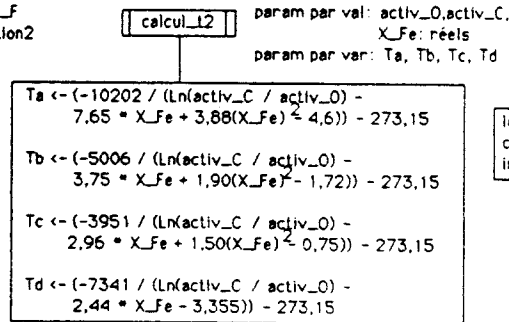
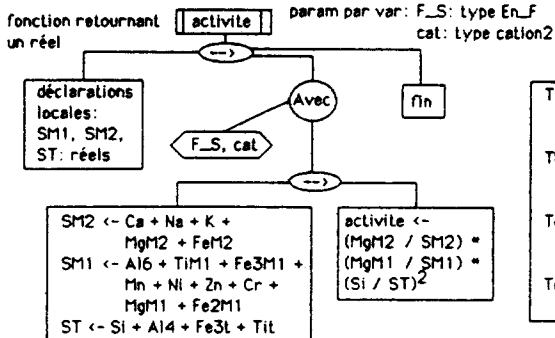
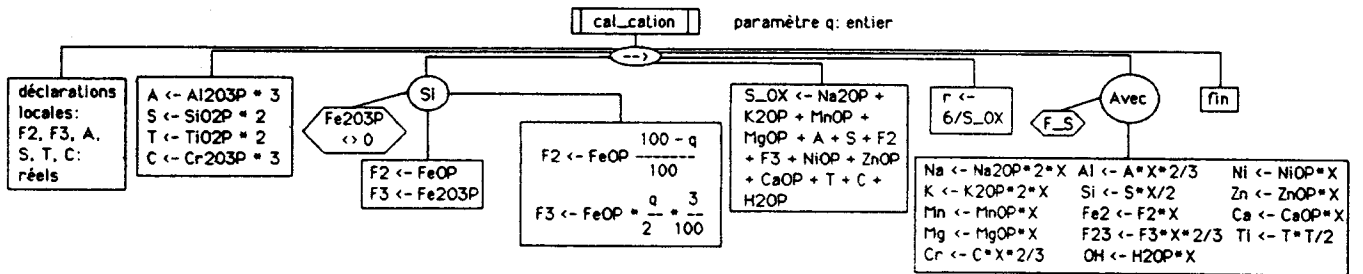
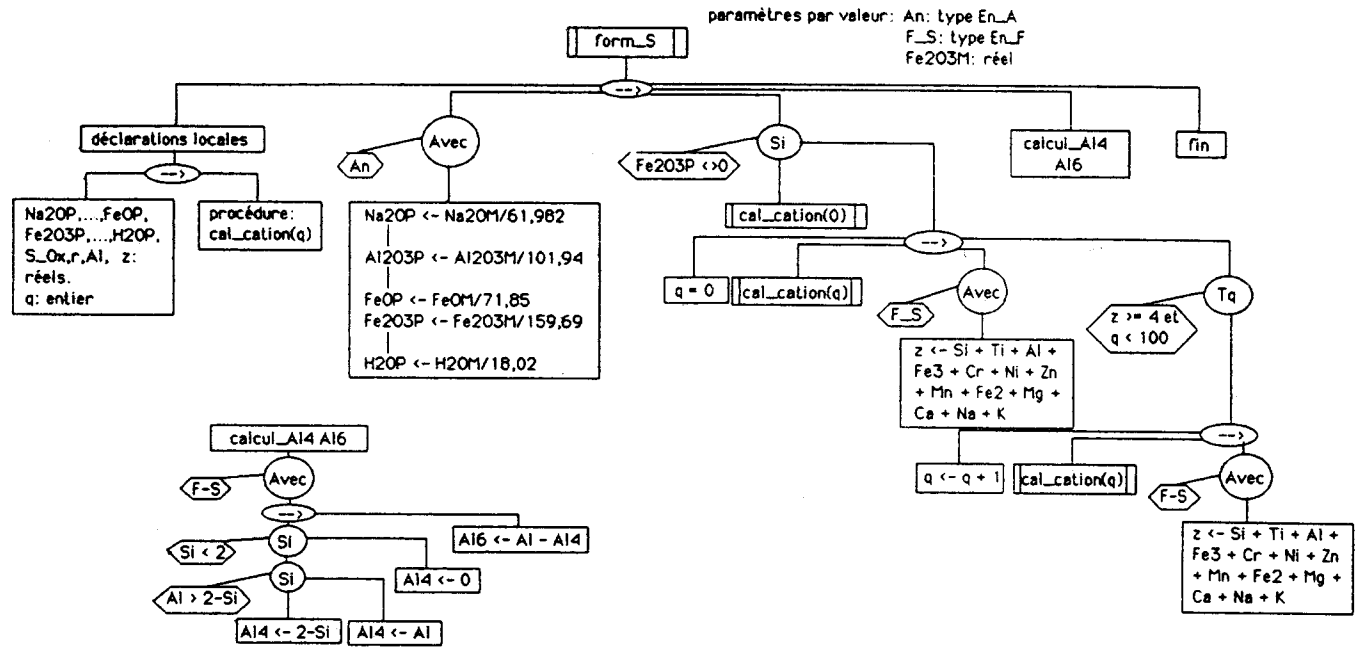
L'activité des pôles purs magnésiens dans les deux pyroxènes est calculée par l'intermédiaire de la fonction activité(F-S, cat) renvoyant un réel. Les deux paramètres passés par variables ont la même signification que leurs homologues de repart-M1M2(). Les variables globales réelles Ac-Op, Ac-Cp conservent dans le traitement général le résultat de la fonction pour l'ortho et le clinopyroxène.



Arbre A27



Arbre A28



Arbre A29

La variable globale XFe-Op correspondant à la fraction Fe/(Fe+ Mg) dans l'orthopyroxène est initialisée avant d'activer le calcul des températures par l'appel à la procédure calcul-T2 (activ-O, activ-C, XFe, Ta, Tb, Tc, Td):

- activ-O, activ-C: réels passés par valeur représentent les activités calculées pour l'ortho et le clinopyroxène;
- Ta, Tb, Tc, Td, réels passés par variables, représentent les quatre températures calculées exprimées en Celsius .

En ce qui concerne la sauvegarde des résultats, l'affectation des informations à la variable globale Rec-Opx (type En-Opx) n'est liée à aucune procédure; elle fait partie du corps majeur de traitement. Rec-Opx est écrite dans le fichier Opx-Cpx dont l'accès est autorisé lorsque l'utilisateur a fini ses calculs. Les procédures ed4-Ecran, ed4-Imp éditeront en séquence ce fichier. Par contrôle de la position du curseur, ed4-Ecran affiche deux enregistrements à la fois sur l'écran. L'utilitaire Outil-06 permet l'édition sur imprimante des résultats par numéro de lame. Comme pour tous les autres fichiers de sauvegarde, nous pourrions, si nécessaire, créer l'algorithme imposé par un accès séquentiel indexé.

4- Unité fonctionnelle P-Ga-Pl.

(Structure complète: se référer aux arbres programmatiques A30 -> A32)

C'est à cette application que revient le calcul des pressions de l'équilibre [grenat-plagioclase-silicate d'alumine-quartz]. Les deux calibrations utilisées seront celle de Ghent (1976) et celle de Newton et Haselton (1981).

a- L'entrée des données et les structures de sauvegarde des résultats.

Les entrées par fichier se font à partir de Index-A et Ana-Cbx par la procédure entr4-fich(nb-EA, no-G, no-P) (arbre A31). La signification des paramètres est la suivante:

- nb-EA: nombre d'enregistrements du fichier analyse;
- no-G: numéro d'analyse du grenat;
- no-P: numéro d'analyse du plagioclase.

les variables globales afférentes à ces paramètres seront respectivement nbenr, no-AGa, no-API, la procédure utilisant dans l'initialisation des numéros d'analyses, la fonction de recherche Dicot() (voir arbre A2).

L'entrée au clavier sur une structure type En-A affecte deux variables: Rec-AG, Rec-Pl, passées comme paramètres à la procédure entr6-clavier (An-Ga, An-Pl) avec An-Ga et An-Pl correspondant respectivement aux analyses chimiques du grenat et du plagioclase (arbre A31).

Indépendamment du mode de saisie, l'utilisateur devra sélectionner au clavier le type de silicate d'alumine

participant à l'équilibre chimique en initialisant la variable Sil-Al:

- 'A' = andalousite;
- 'S' = sillimanite;
- 'D' = disthène.

Le calcul des pressions étant réalisé pour trois températures; l'opérateur n'entrera qu'une valeur sous la variable t définie en Celcius et les calculs se feront pour t, t + 100, t + 200. De ce fait on définit un tableau à trois éléments afin de collecter chaque résultat numérique dépendant des trois températures utilisées. Le type défini sera: tab: tableau [1 .. 3] de réels.

L'ensemble des résultats est emmagasiné au cours de l'exécution dans une structure type En-P-Ga-Pl qui sert aussi de base à la sauvegarde sur fichier:

- En-PGa-Pl:
 - nolan: chaîne de 10 caractères: numéro d'échantillon;
 - noana1: chaîne de 10 caractères: numéro d'analyse du grenat;
 - noana2: chaîne de 10 caractères: numéro d'analyse du plagioclase;
 - Sil-Al : caractère: code du silicate d'alumine;
 - Tk : tab: températures en Kelvins;
 - A-G: tab: activités du grenat;
 - A1-Pl : réel: activité du plagioclase selon Ghent (1976);
 - A2-Pl : tab: activités du plagioclase selon Newton et Haselton (1981);
 - Kd-G: tab: constantes d'équilibre selon Ghent (1976);
 - Kd-N : tab: constantes d'équilibre selon Newton et Haselton (1981);
 - P1, P2: tab: valeurs calculées des pressions.

b- Les calculs.

Ils sont décomposés en fonctions et procédures.

- La fonction activite1-Pl(XAn) calcule l'activité de l'anorthite dans le plagioclase pour la calibration de Ghent (1976). Cette valeur est indépendante de la température et n'est établie que par l'utilisation du paramètre XAn, réel, correspondant à la fraction d'anorthite dans le plagioclase (arbre A32).
- La fonction activite2-Pl (XAn, t): calcule l'activité de l'anorthite dans le plagioclase pour la calibration de Newton et Haselton (1981). Cette valeur dépendante de la température nécessite le passage des paramètres XAn: réel: fraction d'anorthite dans le plagioclase et t : réel: température en Kelvins (arbre A32).
- La fonction activité-Ga (XFe, XMg, XCa, t): calcule l'activité du grossulaire dans le grenat en utilisant les paramètres (arbre A32):
 - XFe: réel: fraction d'almandin dans le grenat;
 - XMg : réel: fraction de pyrope dans le grenat;

- XCa: réel: fraction de grossulaire dans le grenat.
- t: réel: température en Kelvins.

- La fonction delta2-V(XFe, XMg, XCa, Sil-Al) retourne un réel, et calcule, pour la calibration de Newton et Haselton (1981), la variation de volume molaire partiel des phases pures dans une réaction impliquant des solutions solides naturelles:

- XFe, XMg, XCa : réels, sont les fractions respectives d'almandin, de pyrope, de grossulaire dans le grenat;
- Sil-Al : caractère, correspond au type de silicate d'alumine.

Les variables locales suivantes sont définies:

- VG-Py, VG-Al: volumes molaires partiels du grossulaire dans les solutions solides symétriques grossulaire-pyrope et grossulaire-almandin;
- VG: volume molaire partiel du grossulaire dans le grenat

$$VG = XMg * VG-Py / (XFe + XMg) + XFe * VG-Al / (XFe + XMg).$$

Le calcul de delta2-V se fait en appliquant:

$$\text{delta2-V} = VG - V\text{-An} \text{ (V-An volume molaire partiel de l'anorthite dans le plagioclase).}$$

$$V\text{An} = V^\circ\text{An}$$

deltaV° = V°G - V°An: (V°G volume molaire du grossulaire pur en conditions standards, V°An volume molaire de l'anorthite dans les mêmes conditions)

$$V^\circ\text{An} = V^\circ\text{G} - \text{deltaV}^\circ$$

delta2-V = VG + deltaV° - V°G (avec V°G = 2,993 cal/bar, deltaV° = 1,5816 cal/bar pour une réaction impliquant le disthène et 1,2649 cal/bar pour une réaction impliquant la sillimanite).

- La procédure calcul-P(Kd1, Kd2, D-V, t, Sil-Al, P1, P2) renvoie les paramètres de sortie:

- P1: réel: pression suivant le baromètre de Ghent (1976);
- P2: réel: pression suivant le baromètre de Newton et Haselton (1981).

Les paramètres passés en entrée correspondent à :

- Kd1, Kd2: réels: constantes d'équilibre de la réaction calculées respectivement selon Ghent (1976), Newton et Haselton (1981);
- D-V: réel: variation de volume molaire partiel de la réaction en phases pures dans l'équilibre des solutions solides naturelles;
- T : réel: température en Kelvins;
- Sil-Al: caractère: code du silicate d'alumine.

La procédure définit localement la fonction log10(x): logarithme décimal. Notons que la réaction n'étant pas calibrée par Newton et Haselton (1981) lorsque le silicate d'alumine est de l'andalousite, Calcul-P() affectera, dans ce cas, la valeur zéro au paramètre P2 .

Afin de compléter notre revue de l'application, donnons maintenant la signification des principales

variables globales utilisées:

- Fe-Ga: proportion molaire de FeO dans le grenat;
- Mg-Ga: proportion molaire de MgO dans le grenat;
- Mn-Ga: proportion molaire de MnO dans le grenat;
- Ca-Ga: proportion molaire de CaO dans le grenat;
- K-Pl: proportion molaire de K₂O dans le plagioclase;
- Na-Pl: proportion molaire de Na₂O dans le plagioclase;
- Ca-Pl: proportion molaire de CaO dans le plagioclase;
- XFe-Ga: fraction d'almandin dans le grenat;
- XMg-Ga: fraction de pyrope dans le grenat;
- XCa-Ga: fraction de grossulaire dans le grenat;
- XAn-Pl: fraction d'anorthite dans le plagioclase;
- t: température de base pour le calcul (entier en Celsius);
- D-Vol: variation de volume molaire de la réaction .

L'affectation des champs de la variable globale Rec-P de type En-PGa-Pl se déroule au cours du traitement lors de leur passage comme paramètres dans les appels aux procédures et fonctions. Rec-P est visualisé par la procédure ed6-ecran avant d'envisager une sauvegarde (arbre A31). Cette variante permet à l'utilisateur de contrôler l'accès au fichier P-GaPl, et d'éviter, étant donnée la taille de la variable Rec-P, l'encombrement du disque avec des résultats sans intérêt. L'édition en séquence du fichier P-GaPl reste cependant accessible en fin de session de calcul par l'intermédiaire des procédures ed6-ecran() et ed6-imp(). Comme pour tous les fichiers de résultats, il sera possible de créer un accès par index.

5- Unité fonctionnelle P-G-Py-P.

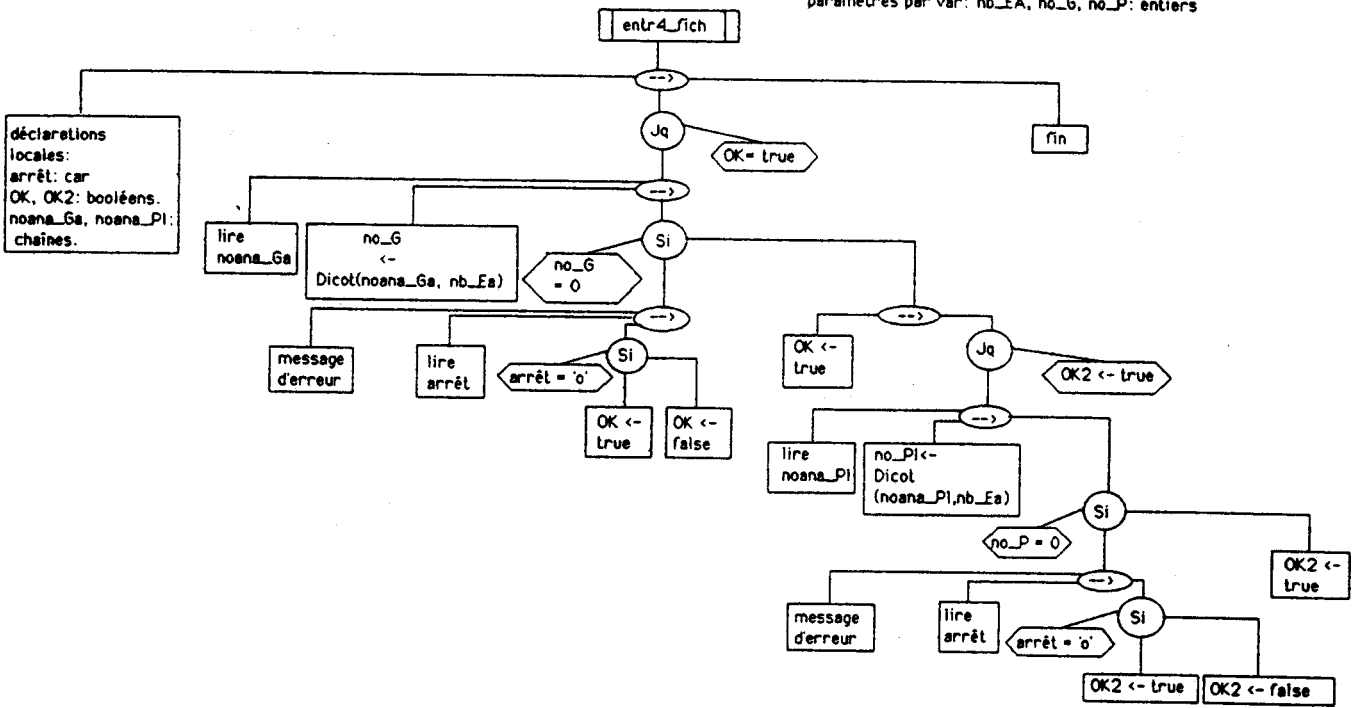
(Structure complète: se référer aux arbres programmatiques A33 -> A36)

Nous allons étudier l'application qui fournit des estimations de pression sur l'équilibre [grenat-orthopyroxène-plagioclase-quartz] ou l'équilibre [grenat-clinopyroxène-plagioclase-quartz] dans les calibrations de Newton et Perkins (1981) et Bohlen et al. (1983)

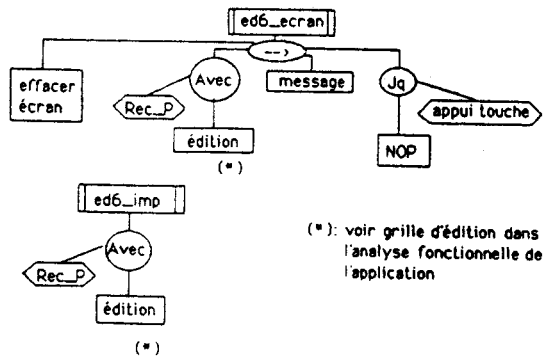
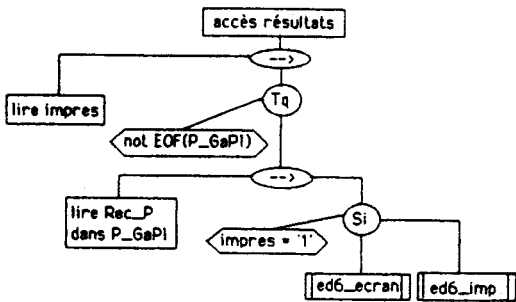
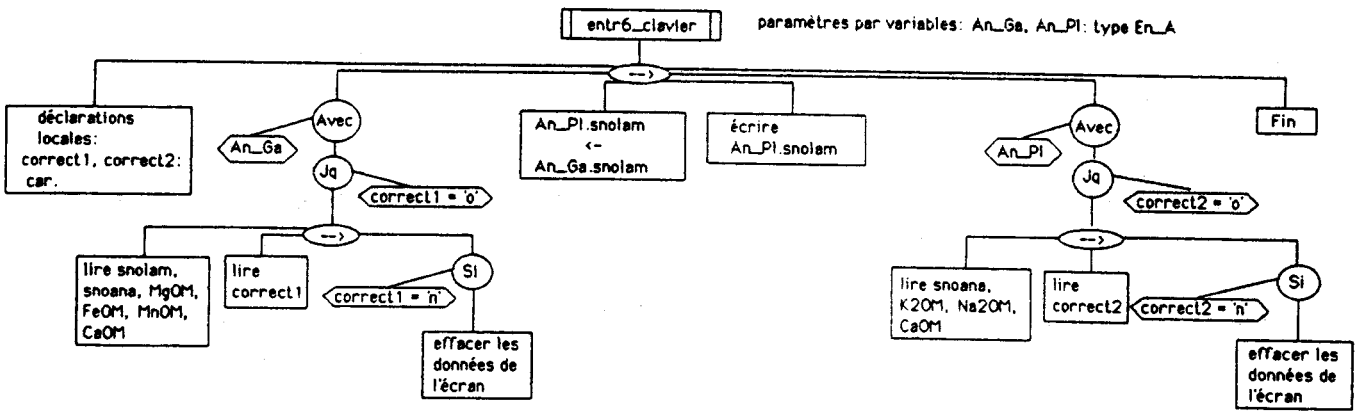
a- L'entrée des données.

L'entrée par fichier concerne les analyses chimiques. Dans cette application, il faut pourtant obtenir la formule structurale du pyroxène, ce qui serait possible en la recherchant dans le fichier Fo-Str. Cependant, l'application comporte obligatoirement une procédure de calcul de formule structurale utilisée après une entrée de données au clavier, lorsque l'opérateur n'a que l'analyse chimique à sa disposition. Les tests de vitesse d'exécution montrent que la recherche dans Fo-Str prend plus de temps que le calcul de la formule structurale. On optera donc pour une entrée de l'analyse et un calcul, ce qui, au delà du gain de temps, réduit la taille de l'application. La procédure entr5-fich (nb-EA, no-Py, no-G,no-P) utilise les fichiers Ana-Cbx, Index-A ainsi que les paramètres

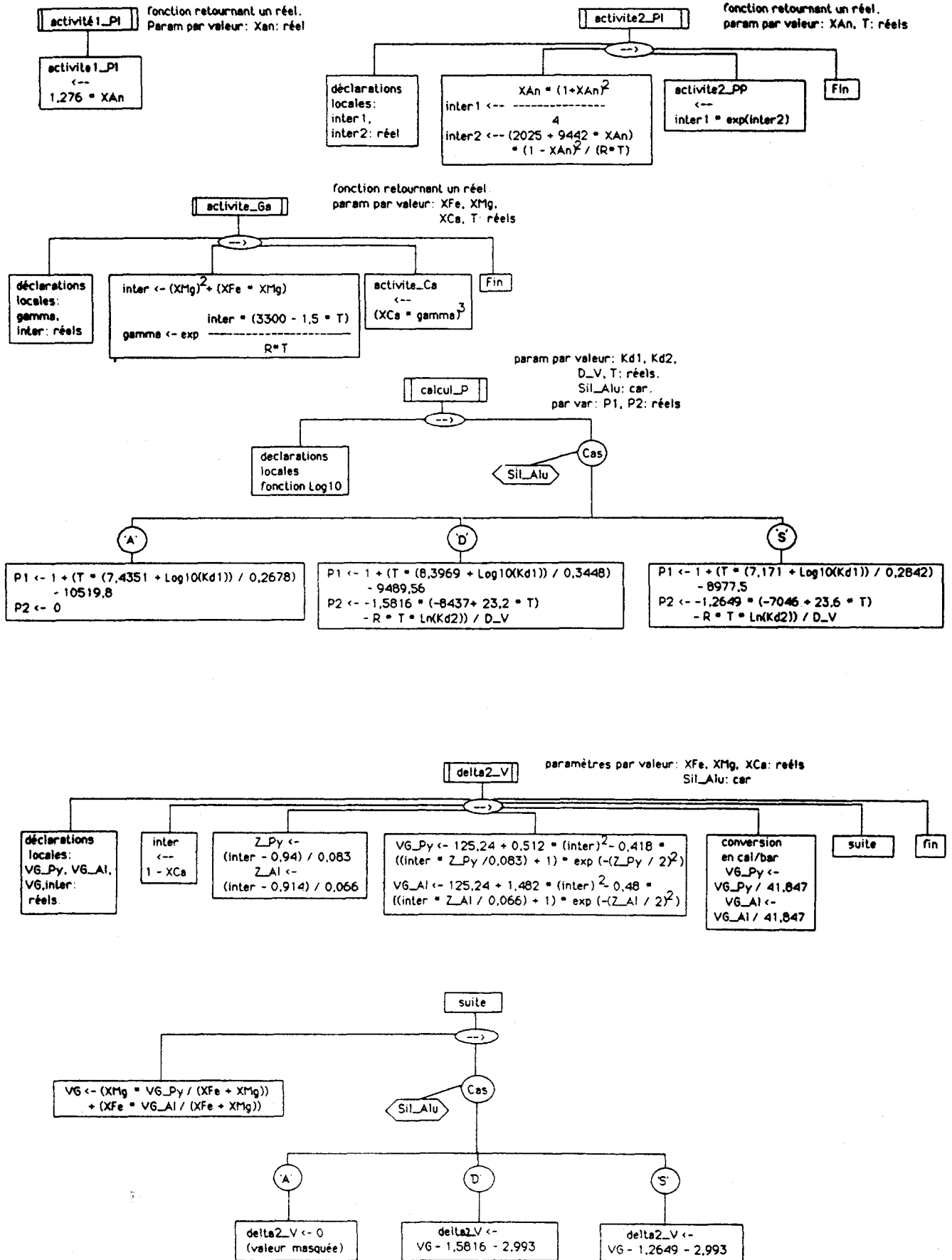
paramètres par var: nb_EA, no_G, no_P: entiers



paramètres par variables: An_Ga, An_Pi: type En_A



(*) voir grille d'édition dans l'analyse fonctionnelle de l'application



Arbre A32

suivants (arbre A34):

- nb-EA: entier: nombre d'enregistrements dans le fichier Ana-Cbx
(variable globale correspondante: nbenr);
- no-Py: entier: numéro d'enregistrement de l'analyse du pyroxène
(variable globale correspondante: no-APy);
- no-G: entier: numéro d'enregistrement de l'analyse du grenat
(variable globale correspondante: no-AG);
- no-P: entier: numéro d'enregistrement de l'analyse du plagioclase
(variable globale correspondante: no-AP).

La procédure entr5-fich fait appel à la fonction Dicot() et ensuite, les analyses chimiques sont archivées dans les trois variables globales Rec-APy pour le pyroxène, Rec-AG pour le grenat et Rec-AP pour le plagioclase.

L'entrée au clavier concerne la procédure entr7-clavier (An-Py, An-Ga, An-Pl) dont les paramètres An-Py, An-Ga, An-Pl de type En-A permettront aux variables globales Rec-APy, Rec-AG, Rec-AP de stocker les analyses. La procédure fait lire une variable globale Fe2O3M: masse de Fe₂O₃ dans le pyroxène. Suivant la valeur attribuée, les teneurs en Fe³⁺ du pyroxène seront calculées soit par itération grâce à la procédure cal-cat() quand Fe2O3M=0, soit directement par calcul des proportions molaires en Fe2O3 quand Fe2O3M <> 0.

b- Le calcul des formules structurales.

Ce calcul est développé par la procédure form-S(An, F-S, Fe2O3M) déjà utilisée dans l'application T-Op-Cp (arbre A29). Rappelons que l'opération nécessite les paramètres suivants:

- An: de type En-A, correspondant à l'entrée de l'analyse dans la procédure;
- F-S: de type En-F, correspondant à la sortie de la formule structurale;
- Fe2O3M: réel: paramètre d'entrée de la masse de Fe₂O₃ dans l'analyse. Si cette dernière valeur est inconnue, l'opérateur entrera zéro.

La répartition des cations sur les sites M1, M2 du pyroxène revient à la procédure repart-M1M2(F-S, cat) déjà employée dans l'application T-Op-Cp (arbre A28):

- F-S: paramètre d'entrée type En-F correspond à la formule structurale brute;
- cat: paramètre de sortie type cation2 correspond au résultat de la répartition.

c- Les calculs barométriques.

Un certain nombre de variables globales sont nécessaires:

- Fe-Ga: proportion molaire en FeO du grenat;
- Mg-Ga: proportion molaire en MgO du grenat;
- Mn-Ga: proportion molaire en MnO du grenat;
- Ca-Ga: proportion molaire en CaO du grenat;
- K-Pl: proportion molaire en K₂O du plagioclase;
- Na-Pl: proportion molaire en Na₂O du plagioclase;

- Ca-Pl: proportion molaire en CaO du plagioclase;
- XFe-Ga: fraction d'almandin dans le grenat;
- XMg-Ga: fraction de pyrope dans le grenat;
- XCa-Ga: fraction de grossulaire dans le grenat;
- XAn-Pl: fraction d'anorthite dans le plagioclase.

Les calculs se faisant pour trois températures, un type tab: tableau[1..3] de réels, est défini afin d'associer, sous la même variable, chacun des composants du calcul dépendant de la température. Les variables globales type tab: gam-Ca-G1[], gam-Fe-G1[], gam-Mg-G1[], gam-Ca-G2[], gam-Fe-G2[], gam-Mg-G2[] représentent les divers coefficients d'activité du grenat.

Afin de réceptionner les calculs mais aussi de pouvoir les sauvegarder sur fichier, une structure spécifique est définie.

- En-P-GPy:

- nolam: chaîne de 10 caractères: numéro d'échantillon;
- noana1:
- noana2: chaînes de 10 caractères: numéros des analyses minérales;
- noana3:
- Tk : tab: températures en Kelvin;
- ACa-G1:
- ACa-G2: tab: représentent pour chaque température les activités de l'almandin,
- AMg-G1: du pyrope, du grossulaire dans le grenat. G1 correspond
- AMg-G2: au calcul suivant Newton et Perkins (1981), G2 correspond
- AFe-G1: au calcul suivant Bohlen et al. (1983);
- AFe-G2:
- A-Pl : tab: activité de l'anorthite dans le plagioclase.
- > Union par sélecteur: sel (car).
- sel = '1' (calcul sur Opx)
- AFe-Py: réel: activité de la ferrosilite dans le pyroxène;
- AMg-Py: réel: activité de l'enstatite dans le pyroxène;
- KdN1: tab: constantes d'équilibre, N1 <=> baromètre "Newton..." - coefficient d'activité
"Newton...";
- KdN2: tab: constantes d'équilibre, N2 <=> baromètre "Newton..." - coefficient d'activité
"Bohlen...";
- KdB1: tab: constantes d'équilibre, B1 <=> baromètre "Bohlen..." - coefficient d'activité
"Newton...";
- KdB2: tab: constantes d'équilibre, B2 <=> baromètre "Bohlen..." - coefficient d'activité
"Bohlen...";
- PON1:

- PON2: tab: pressions de l'équilibre [orthopyroxène- grenat-
- POB1: plagioclase-quartz] pour les Kd cités précédemment.
- POB2:

sel = '2' (calcul sur Cpx):

- A-Py: réel: activité du diopside dans le clinopyroxène;
- Kd1: tab: constantes d'équilibre, N1 \Leftrightarrow baromètre "Newton..."- coefficient d'activité "Newton...";
- Kd2: tab: constantes d'équilibre, N2 \Leftrightarrow baromètre "Newton..." - coefficient d'activité "Bohlen...";
- PCN1: tab: pressions de l'équilibre [clinopyroxène-grenat-plagioclase-quartz] pour Kd1;
- PCN2: tab: pressions de l'équilibre [clinopyroxène-grenat-plagioclase-quartz] pour Kd2.

Dans l'application, on utilisera la variable globale Rec-P.

La procédure coef1-Ga (XFe, XMg, XCa, T, gamma-Ca, gamma-Mg, gamma-Fe) calcule les coefficients d'activité dans le grenat par la méthode Newton et Perkins (1981) (arbre A35):

- XFe, XMg, XCa sont les paramètres d'entrée de la procédure correspondant aux fractions d'almandin , de pyrope et de grossulaire du grenat;
- T sera la température en Kelvins;
- gamma-Ca, gamma-Mg, gamma-Fe, réels, sont les paramètres de sortie représentant les coefficients d'activité calculés. On leur associe les variables globales gam-Ca-G1, gam-Mg-G1, gam-Fe-G1.

La procédure coef2-Ga (XFe, XMg, XCa, Tc, gamma-Ca, gamma-Mg, gamma-Fe) calcule les coefficients d'activité du grenat, par la méthode Bohlen et al. (arbre A35). La signification des paramètres est identique à celle décrite pour la procédure précédente, mis à part Tc qui représente la température en degrés Celsius. Les variables globales associées aux coefficients d'activité sont gam-Ca-G2, gam-Mg-G2, gam-Fe-G2.

La fonction activité2-Pl (XAn, T) calculera l'activité de l'anorthite dans le plagioclase en fonction de XAn: fraction d'anorthite dans le plagioclase et T: température en Kelvins.

Pour les trois fonctions qui suivent, la signification des paramètres est la suivante:

- F-S de type En-F représente le paramètre d'entrée de la formule structurale;
- cat, de type cation2, représente le paramètre d'entrée de répartition des cations sur les sites du pyroxène.

La fonction activitéMg-Opx (F-S, cat) renvoie l'activité de l'enstatite dans l'orthopyroxène (arbre A36).

La fonction activitéFe-Opx (F-S, cat) renvoie l'activité de la ferrosilite dans l'orthopyroxène (arbre A36).

La fonction activité-Cpx (F-S, cat) renvoie l'activité du diopside dans le clinopyroxène (arbre A36).

Pour les trois fonctions de calcul des pressions d'équilibres (arbre A36), les paramètres auront pour signification:

- K: la constante d'équilibre;
- T: la température en Kelvins;
- Tc: est la température en Celsius.

la fonction pres-Newton-Opx (K, T) calcule la pression de l'équilibre [orthopyroxène-grenat-plagioclase-quartz] avec la calibration de Newton et Perkins (1981).

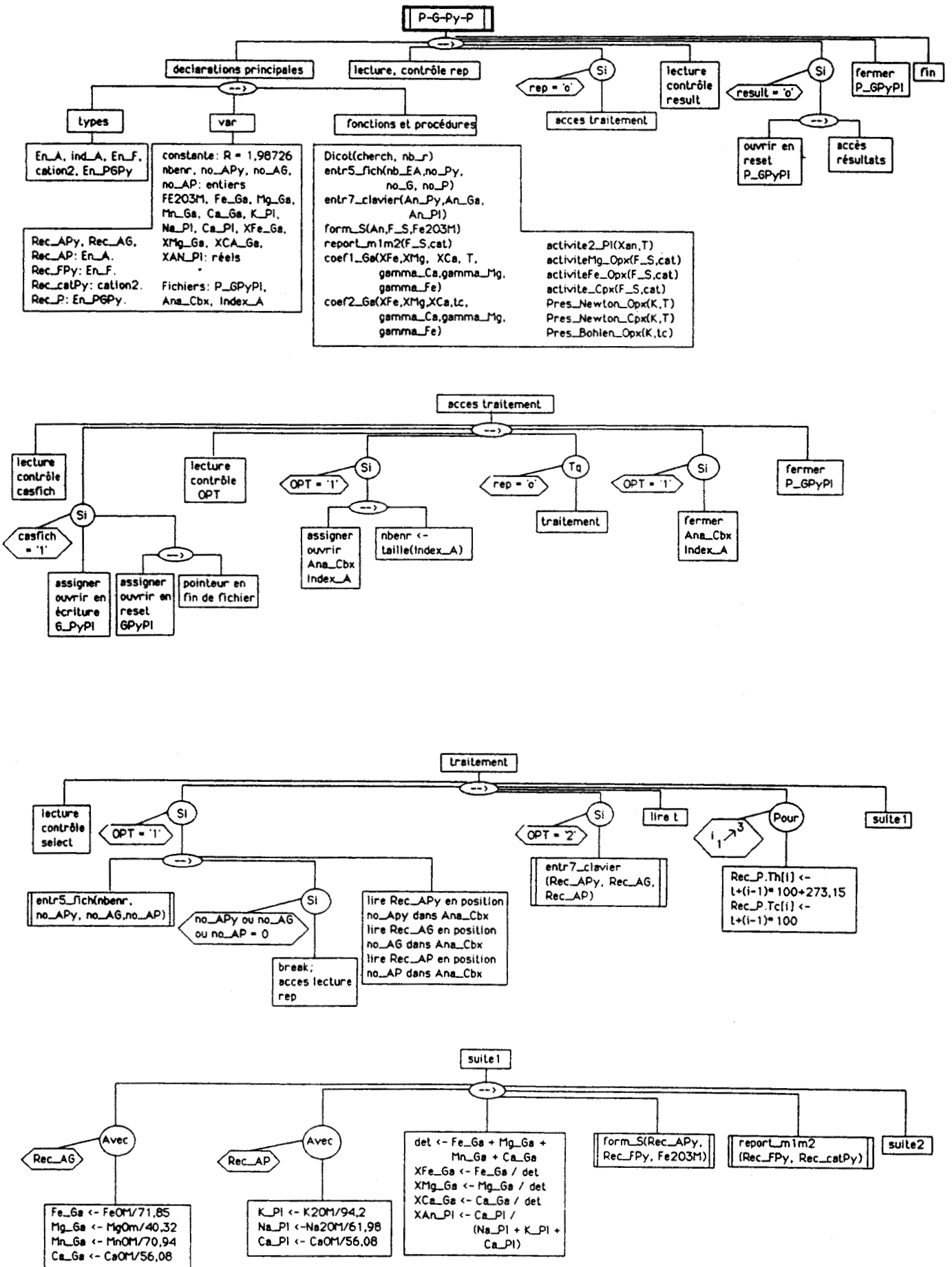
La fonction pres-Newton-Cpx (K, T) calcule la pression de l'équilibre [clinopyroxène-grenat-plagioclase-quartz] avec la calibration de Newton et Perkins (1981).

Enfin, la fonction pres-Bohlen-Opx (K, Tc) détermine la pression de l'équilibre [orthopyroxène-grenat-plagioclase-quartz] avec la calibration de Bohlen et al. (1983).

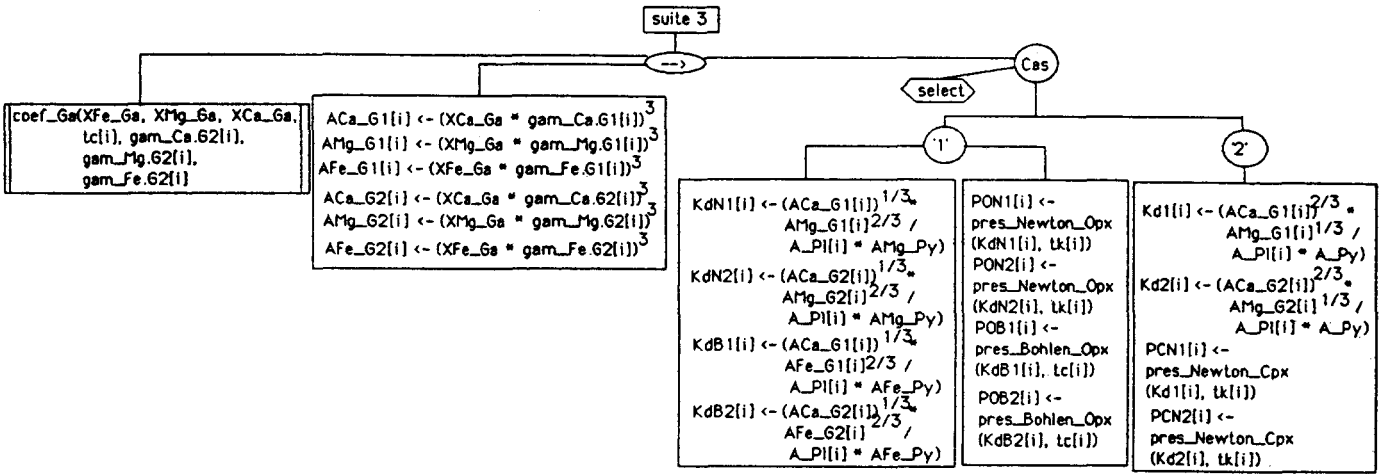
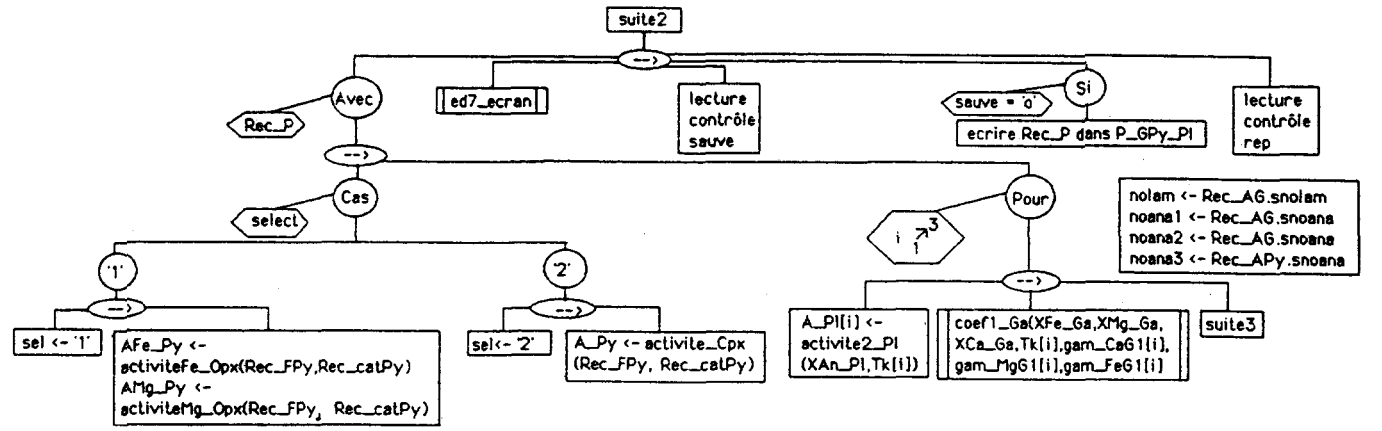
Le nombre de fonctions et de procédures nécessaires au calcul est important, c'est pourquoi, dans la construction générale du traitement, les champs de la variable globale Rec-P de type En-PGPY sont initialisés au fur et à mesure du calcul. Ceci se fait simplement en passant les champs comme paramètres lors des appels aux fonctions et procédures. Etant donnée sa taille, Rec-P sera éditée par la procédure ed7-ecran() (arbre A36) immédiatement après le calcul. La sauvegarde sur fichier P-GPYPl est contrôlée par l'utilisateur dans le but de ne pas saturer le disque par des résultats jugés non significatifs ou inutiles. La restitution complète du fichier P-GPYPl reste accessible lorsque la session de calcul est terminée. Les procédures ed7-ecran() ou ed7-imp() sont utilisées pour balayer en séquence le fichier. Nous verrons qu'il est possible de créer, sur ce fichier de résultats, un appel par index.

v- analyse organique des applications associées à Menu-O

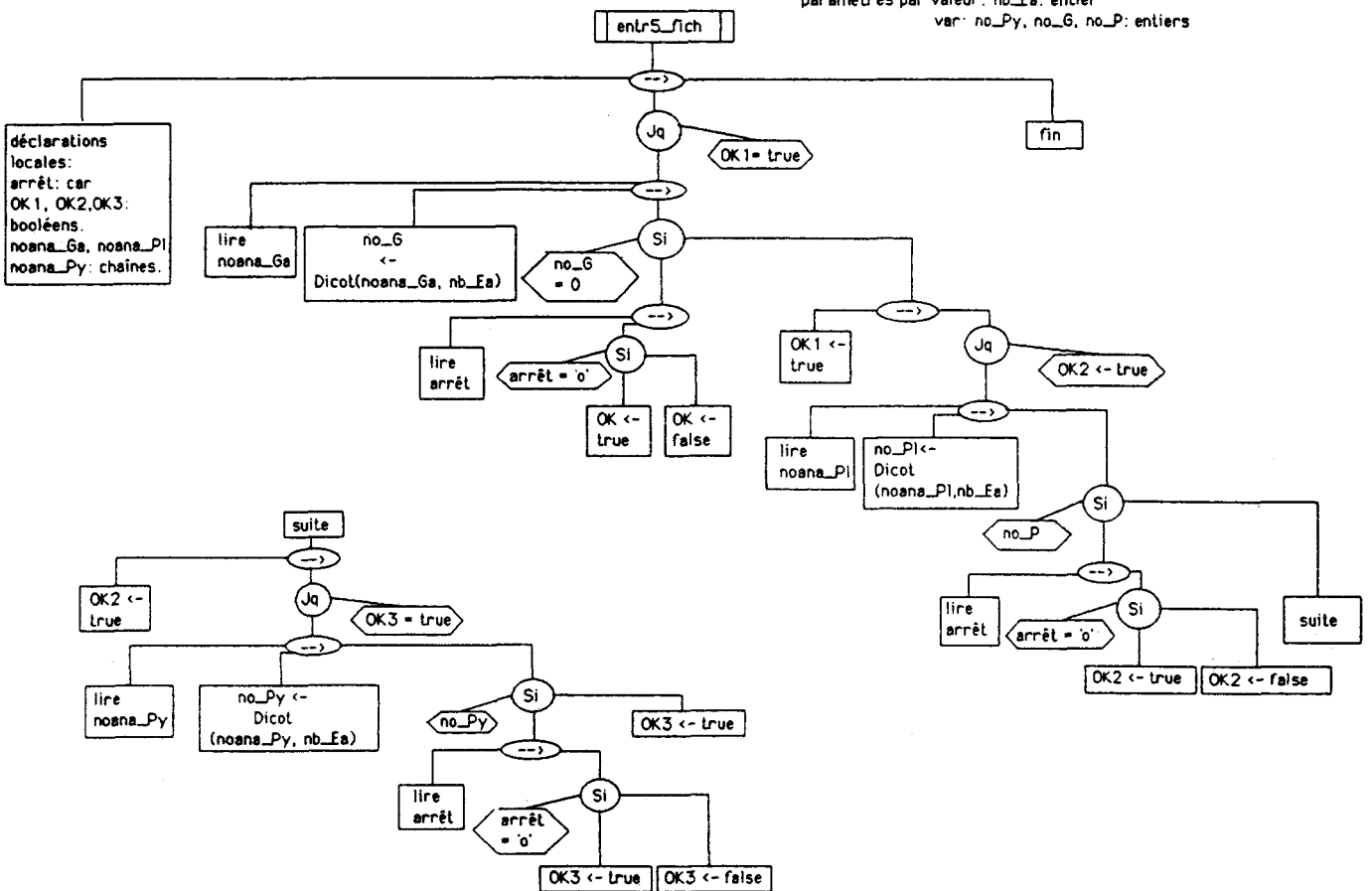
Les utilitaires Outil-01 à Outil-06 sont de courts programmes très simples qui ne nécessitent pas d'explications particulières. Les arbres programmatiques sont amplement suffisant pour comprendre leur fonctionnement, en se rappelant que les types structurés et les fichiers auxquels ils font référence sont décrits dans les unités fonctionnelles précédentes. Outil- 01 et Outil-02 sont destinés à modifier les fichiers Index-A et Index-F lorsque la clef (n°d'analyse) est mal formatée ou endommagée ce qui induit des confusions lors de recherches dans la base de données. Les applications Outil-03 à Outil-06 éditeront par numéro d'échantillon les résultats stockés sur les fichiers issus des applications ACF-AKF, AFM-A'FM, Therm-AI, T-OP-CP. La programmation de ces utilitaires est consignée sur l'arbre A37.



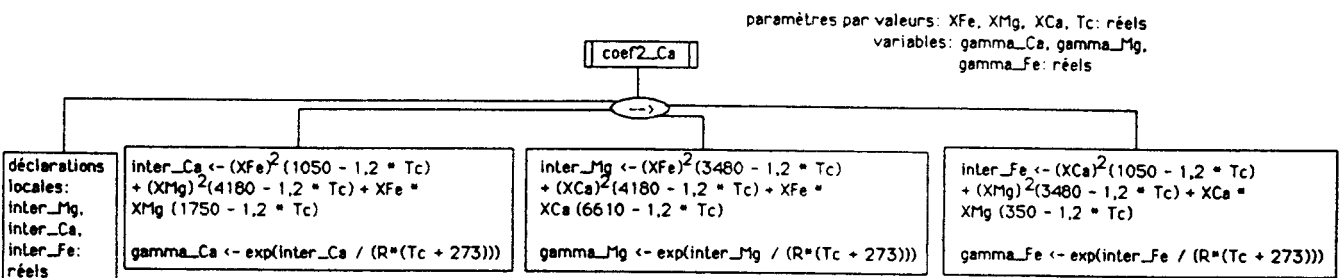
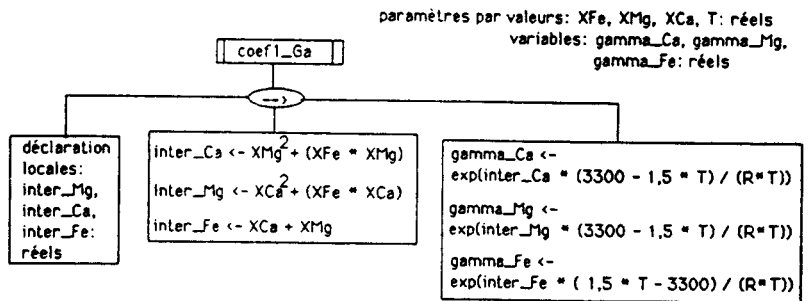
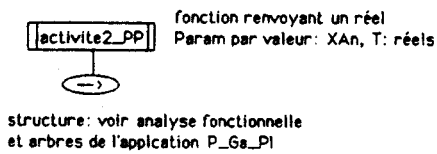
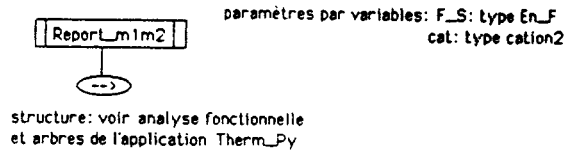
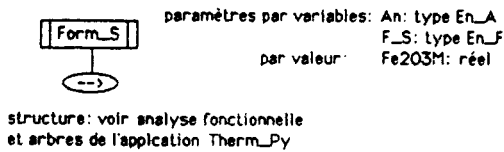
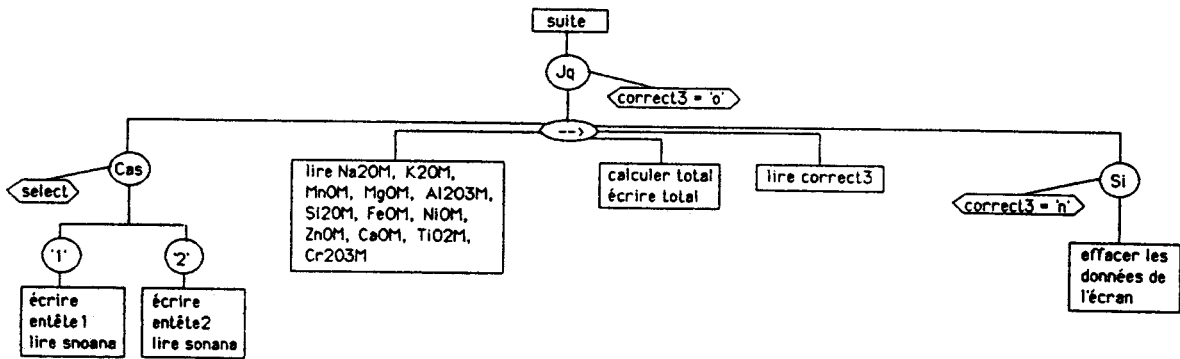
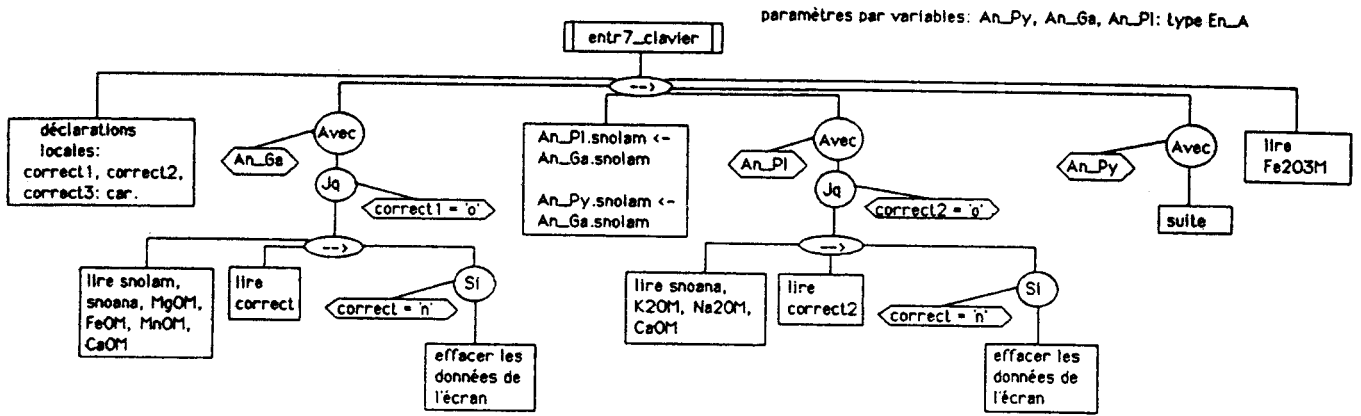
Arbre A33



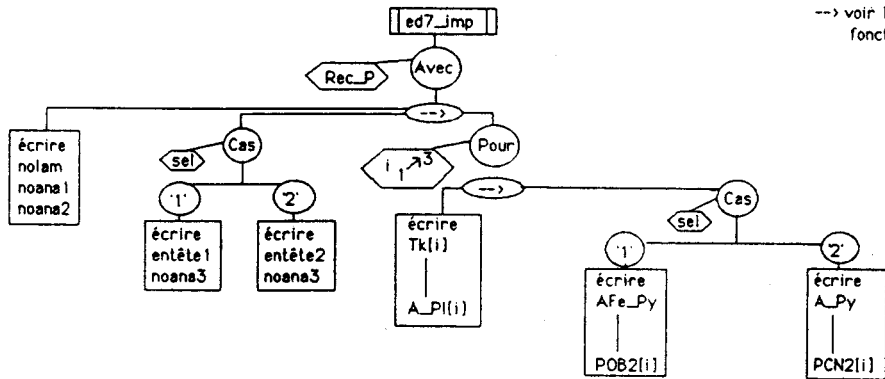
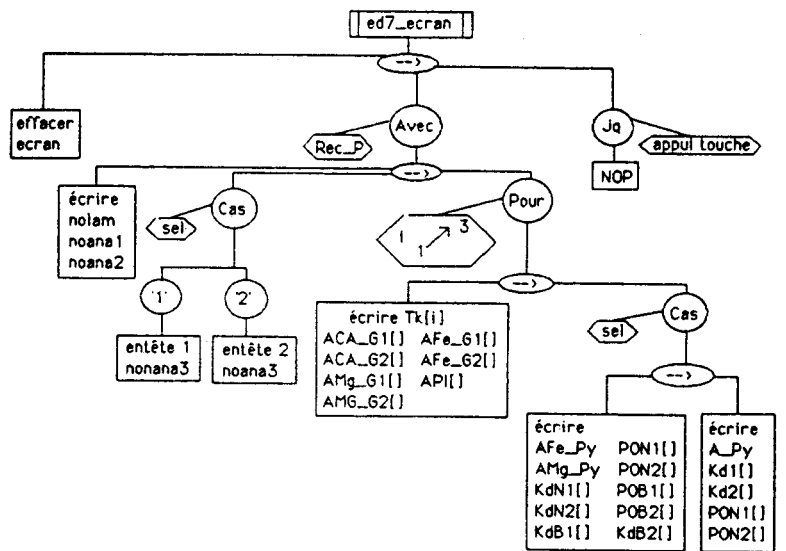
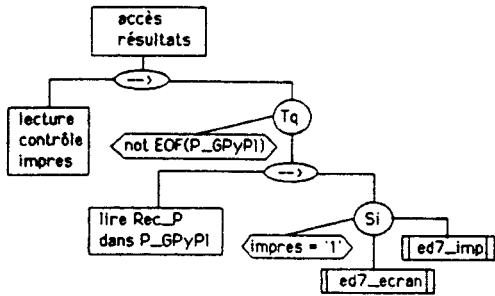
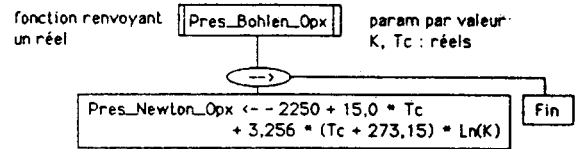
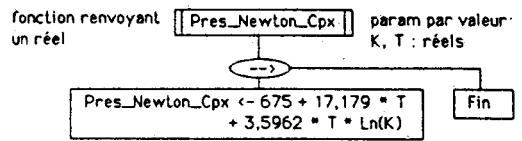
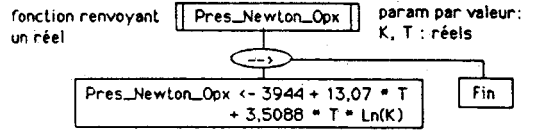
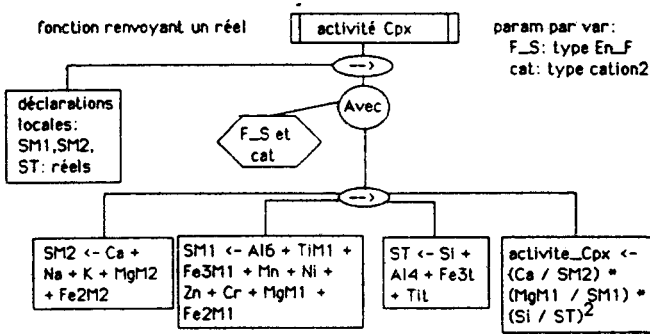
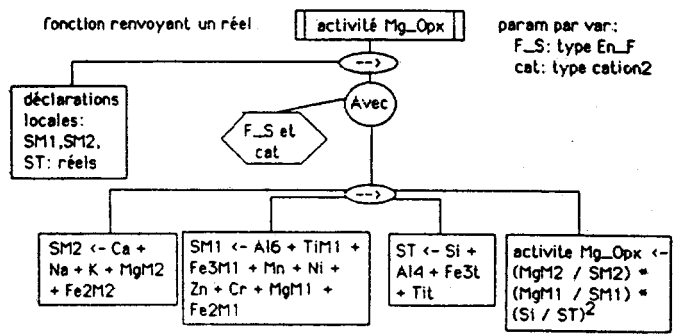
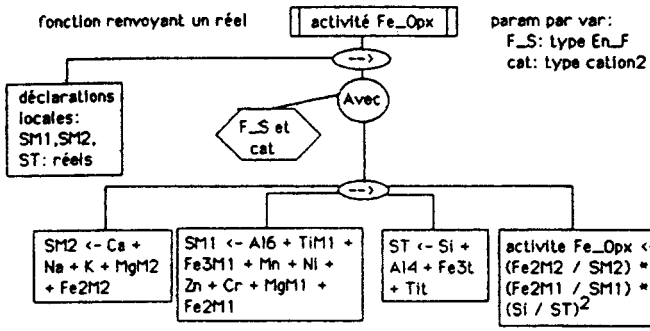
paramètres par valeur: nb_Ea: entier
var: no_Py, no_G, no_P: entiers



Arbre A34

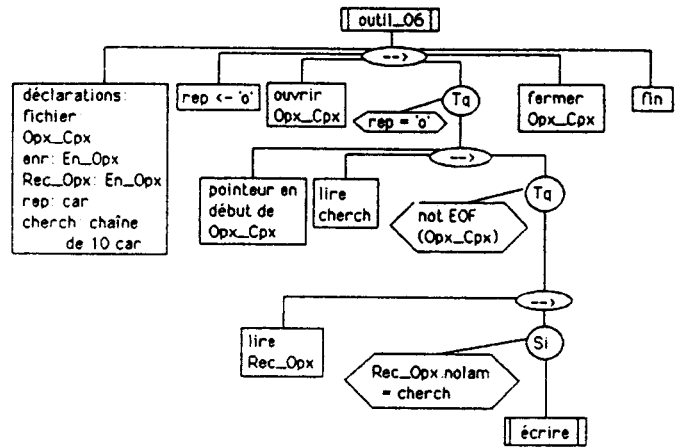
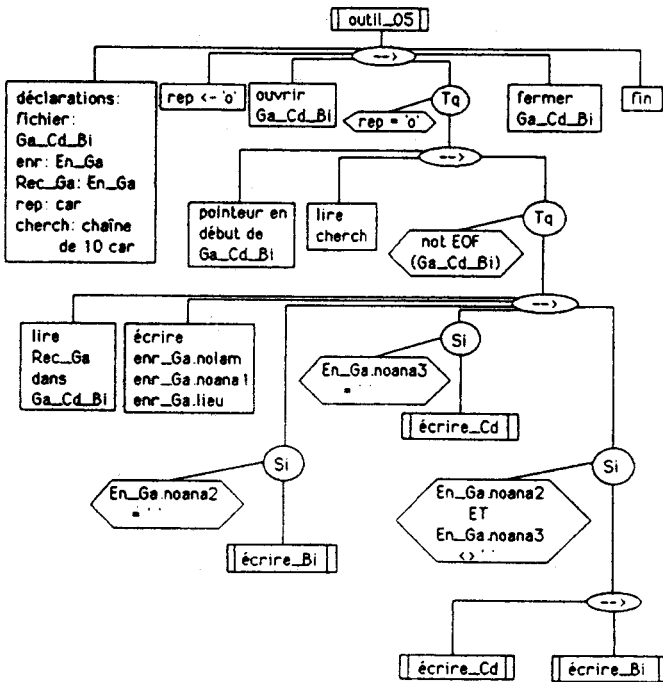
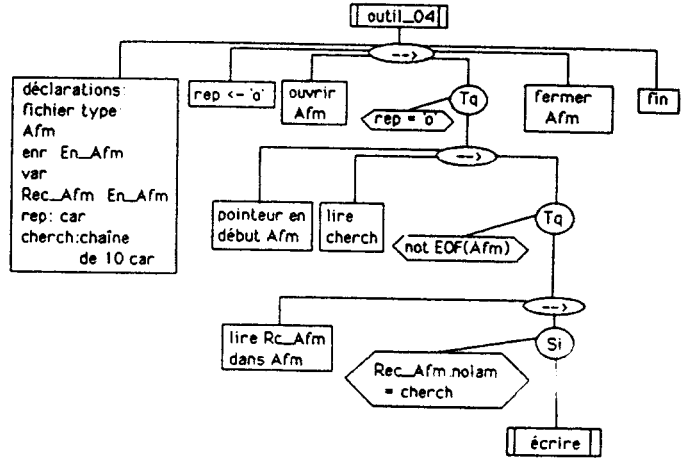
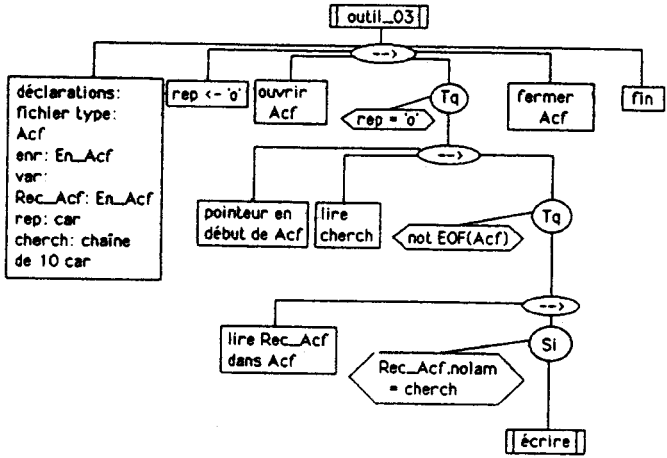
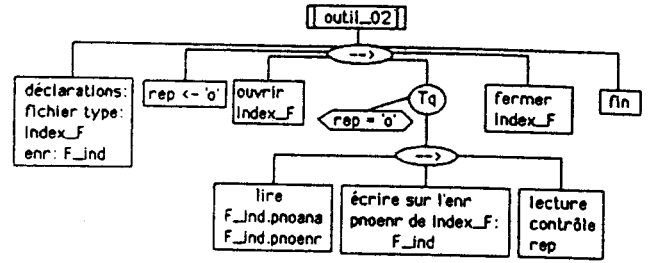
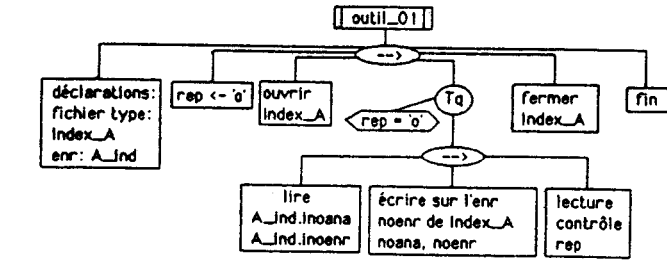


Arbre A35



--> voir la grille dans l'analyse fonctionnelle.

Arbre A36



Arbre A37

1- Unité fonctionnelle Outil-07.

Cette unité (arbre A38) va trier par ordre croissant les fichiers Index-F et Index-A. L'algorithme de tri est de type "qwick-sort". Il partage l'index en deux sous-listes contenant respectivement les éléments supérieurs et inférieurs à une médiane. Cette dernière se trouve ainsi classée. En répétant le processus par récursion sur chaque partition créée, on obtient de proche en proche un classement complet. Afin d'éviter les problèmes de confusion entre homonymes, les numéros d'analyses sont standardisés sous la forme: ££-\$£££

- année: les 2 premiers caractères numériques;
- le symbole ' - ';
- le numéro de série dans l'année: 1 caractère majuscule (de A à Z);
- le numéro d'analyse dans la série de 001 à 999.

Outil-07 déclare deux types:

- la structure ind: - clef: chaîne de 10 caractères: clef d'index;
- no-r: entier: numéro d'enregistrement.
- table: tableau de [1 .. 2000] de ind = table mémoire de l'index.

Les variables utilisées seront:

- index: de type table;
- enr: de type ind;
- fichier: fichier d'éléments de type ind;
- nb-enr: nombre d'enregistrements de l'index.

Comme l'application est écrite en compatibilité avec des fichiers du BASIC standard, l'enregistrement n°0 des langages type C, PASCAL, ADA est laissé vide. L'unité fonctionnelle utilisera deux procédures:

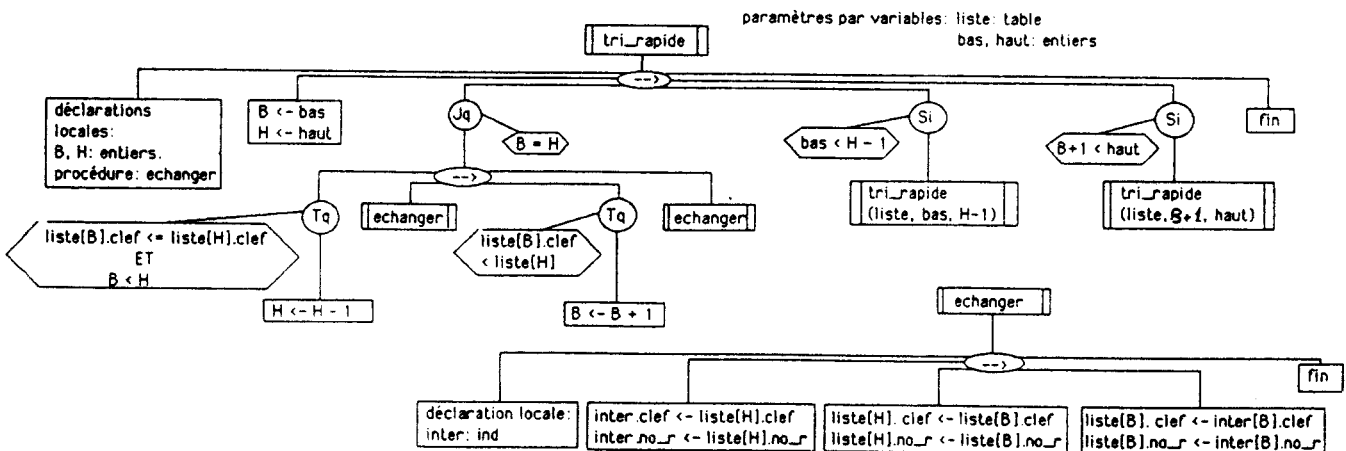
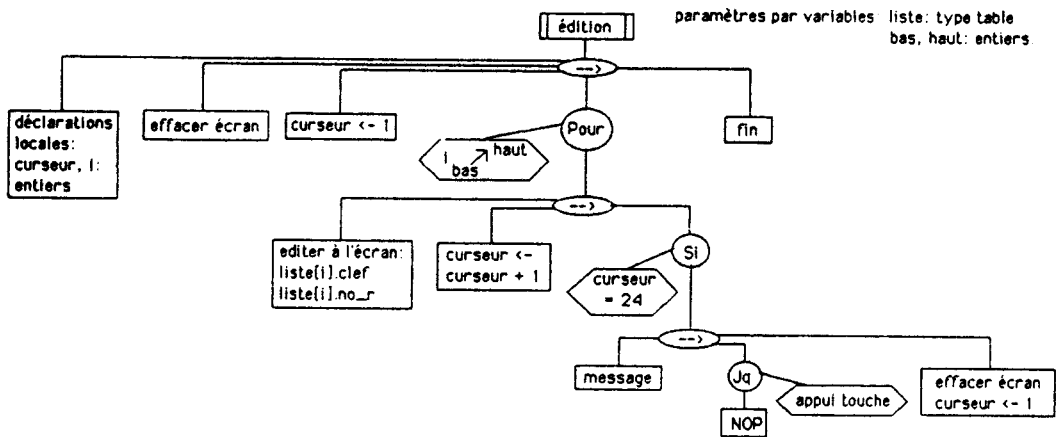
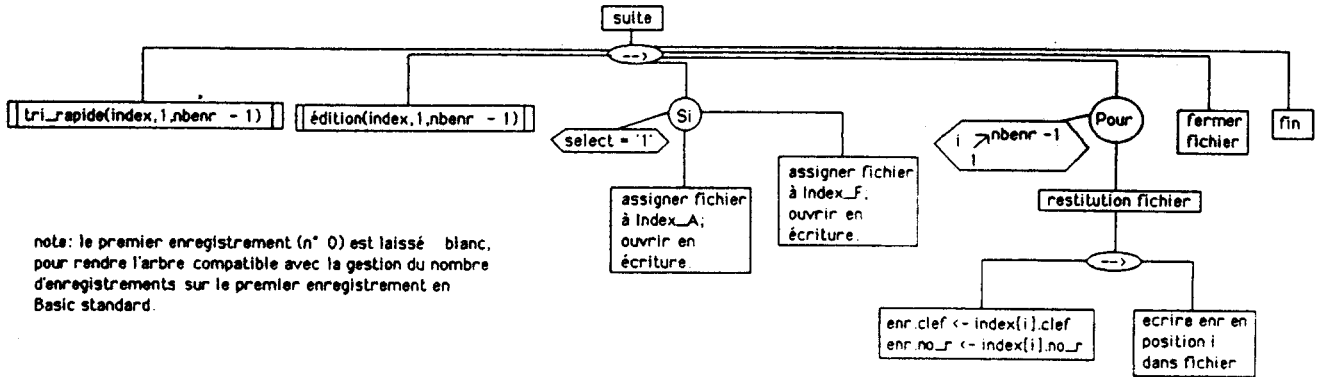
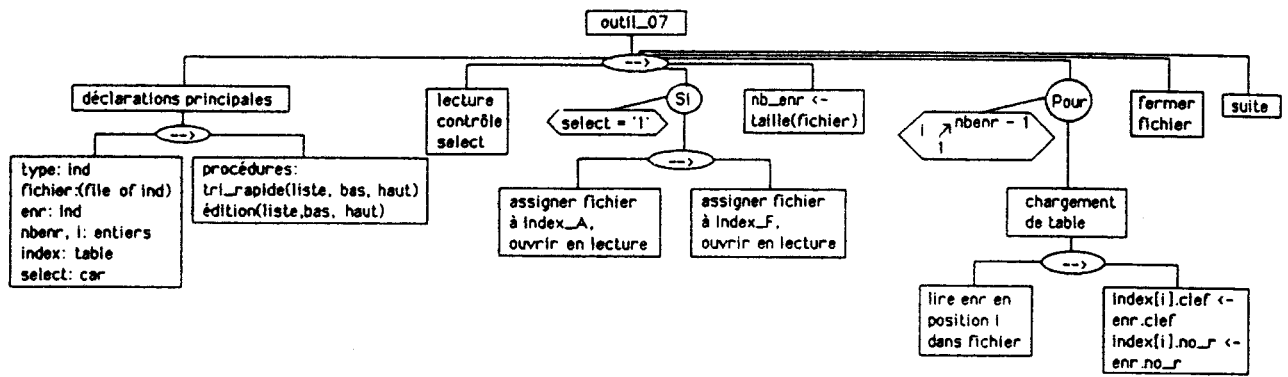
- la procédure édition (liste.bas, haut) dont la fonction est de fournir une édition contrôlée à l'écran du paramètre liste de type table, entre les indices entiers bas et haut. Elle sera utilisée pour éditer l'index trié;

- la procédure tri-rapide (liste, bas, haut) où la signification des paramètres est identique à celle de la procédure édition(). Tri-rapide () déclare la procédure échange() dont le but, comme son nom l'indique, est d'échanger les champs de deux variables de type ind. La procédure tri-rapide() est récursive. Deux indices H (haut), B (bas), sont considérés et représentent les limites de la série à classer. On compare les valeurs de clef pour ces deux indices en décrémentant H tant que liste[B].clef < liste[H].clef. Lorsque la condition n'est plus vraie, les deux variables sont échangées. Dès qu'il y a eu échange, la procédure repart dans l'autre sens, toujours en comparant liste[B].clef et liste[H].clef mais en incrémentant B. Le processus est répété jusqu'à ce que B = H.

A ce niveau, la liste est divisée en deux partitions de borne commune: la variable liste[B] = liste[H]. L'algorithme précédent est alors appliqué à chacune de ces deux partitions.

Le fonctionnement général de l'unité reste simple et réalisera successivement:

- la sélection du fichier index à trier;
- le chargement du fichier en mémoire par la variable index[];
- le tri de la variable index[];
- l'édition;
- enfin, le rechargement du fichier avec la variable index[]



Arbre A38

2- Unités fonctionnelles Trans-01 à Trans-04.

(Structure complète: se référer aux arbres programmatiques A39 - A40)

Ces unités ont été écrites pour transformer les fichiers Ana-Cbx, Index-A, Fo-Str, Index-F en fichiers textes ASCII. En effet, pour certains langages et/ou compilateurs, les fichiers d'accès directs sont écrits sous une forme compactée qui les rend intransportables d'un matériel à l'autre. Par contre, une fois sous forme de texte, il est très facile de les transférer puis de les recomparer. Rappelons que:

- Trans-01 assure le passage compacté --> texte pour les fichiers Ana-Cbx et Index-A;
- Trans-02 assure le passage texte --> compacté pour les fichiers Ana-Cbx et Index-A;
- Trans-03 assure le passage compacté --> texte pour les fichiers Fo-Str et Index-F;
- Trans-04 assure le passage texte --> compacté pour les fichiers Fo-Str et Index-F.

a- Unité Trans-01.

Bien évidemment, nous retrouvons la déclaration des fichiers Ana-Cbx et Index-A, ainsi que des types structurés En-A et A-ind (arbre A39). Les types An-S, Ind-AS représentent les fichiers ASCII; ce sont des fichiers séquentiels simples pour BASIC ou FORTRAN, des fichiers texte ou fichiers d'octets pour PASCAL et C. Deux procédures sont déclarées:

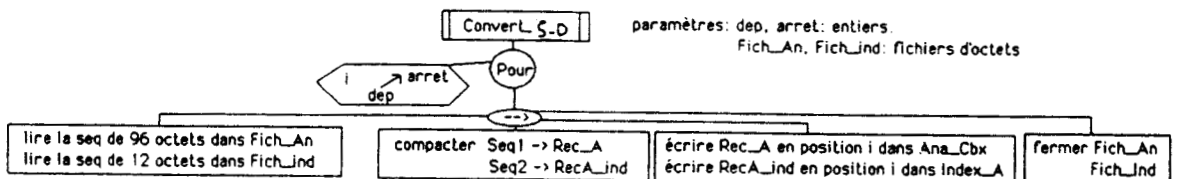
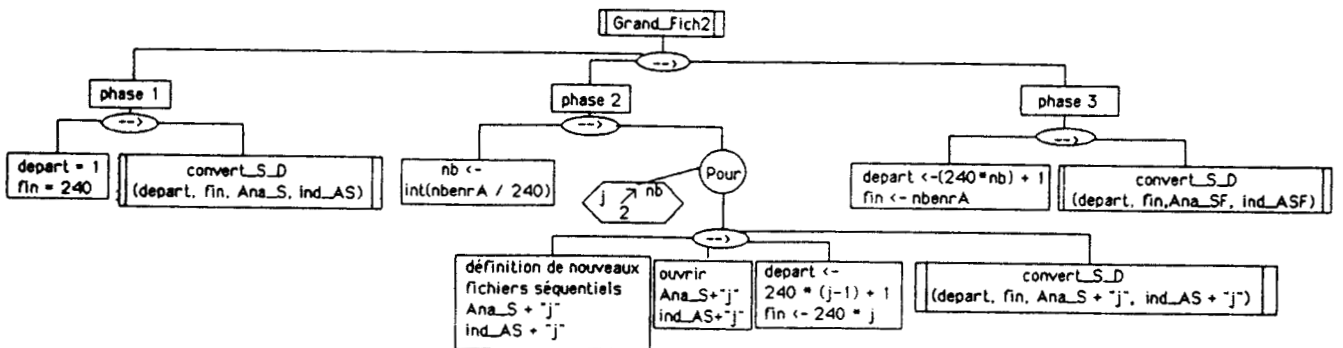
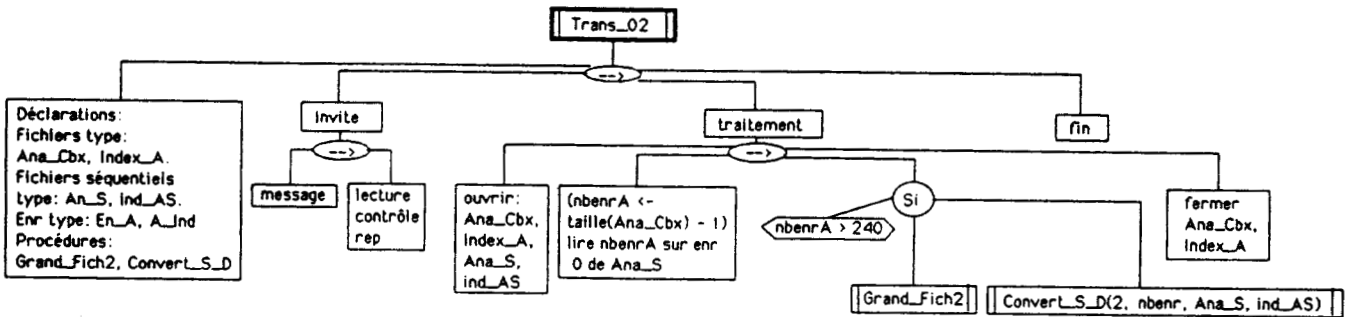
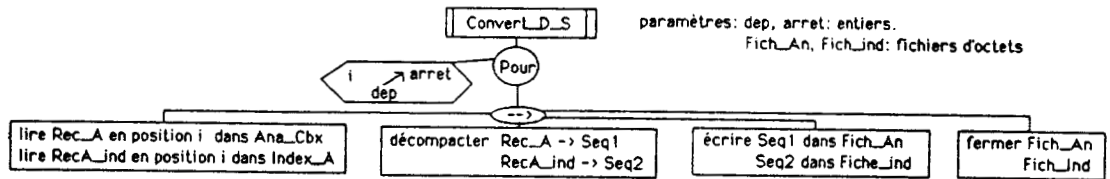
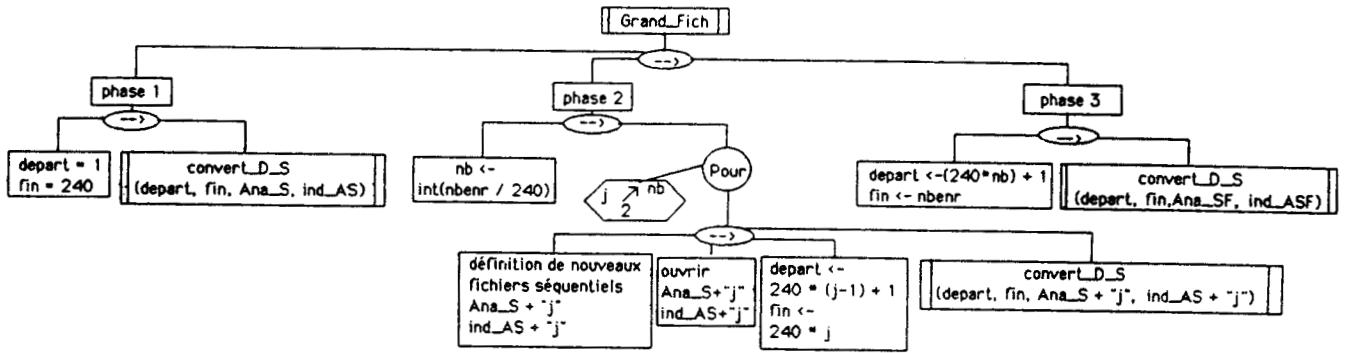
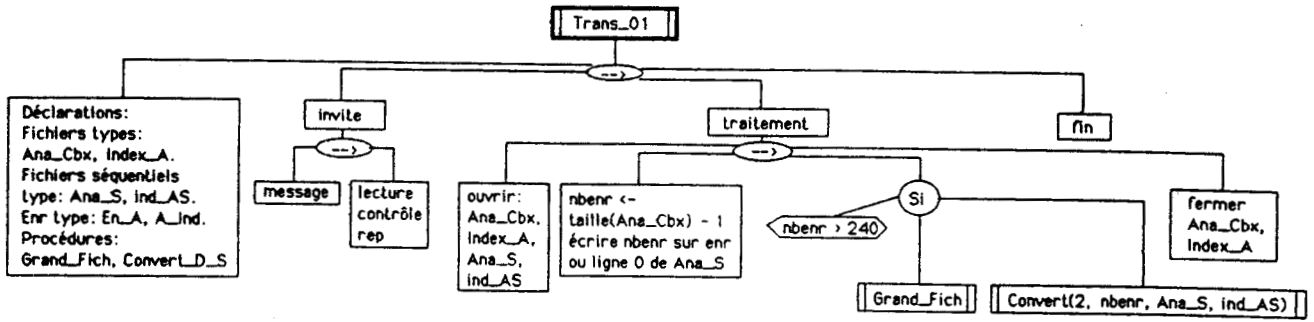
- convert-D-S (dep, arrêt, fich-An, fich-Ind): dep et arrêt sont des entiers passés par valeur qui correspondent respectivement au premier et au dernier numéros d'enregistrements à convertir. Fich-An du type An-S et passé par variable, constitue le fichier texte issu de la conversion de Ana-Cbx. fich-Ind, passé par variable et du type Ind-AS, représente le fichier texte issu de la conversion d'Index-A.

La décompaction n'affecte pas les champs de type chaîne, par contre les champs numériques sont convertis en chaînes de cinq caractères après avoir écrit les réels sous la forme ###.##. La décompaction utilisera pour les champs numériques une fonction de conversion du type str() en PASCAL;

- Grand-fich: Cette procédure non paramétrée a pour but de segmenter Ana-Cbx et Index-A en plusieurs fichiers textes. En effet, les fichiers textes destinés à être transférés, ont une taille inférieure à 64 Ko et ceci pour deux raisons:

- il y a moins de risques d'erreurs de transmission lorsque les fichiers sont petits;
- l'autre raison provient d'un défaut inhérent à la plupart des compilateurs sur micro-ordinateurs: la taille d'une variable ne peut pas excéder 64 Ko (segmentation limitée de la mémoire). Dans le transfert, nous utilisons un tampon mémoire de l'organe récepteur pour stocker les envois du transmetteur. Ce tampon qui est une variable du programme, ne pourra donc pas dépasser 64 Ko, d'où la taille limitée des fichiers transférables.

Le rôle de la procédure Grand-Fich sera de segmenter un gros fichier en n fichiers textes de moins de 64 Ko (l'application segmente ici tous les 240 enregistrements). Lorsque la segmentation est fixée, la procédure appelle Convert-D-S() pour transformer ces fichiers en texte ASCII.



Arbre A39

b- Unité Trans-02 (arbre A39)

Les fichiers séquentiels/texte An-S, Ind-AS vont être compactés pour reconstituer, sur le récepteur, les fichiers Ana-Cbx et Index-A. Deux procédures sont déclarées:

- Convert-S-D (dep, arret, fiche-an, fiche-ind) dep, arret: entiers passés par valeurs, vont correspondre aux bornes inférieure et supérieure des numéros d'enregistrements à reconstituer sur les fichiers Ana-Cbx et Index-A. fiche-an, fiche-ind, respectivement de type An-S et Ind-AS, sont les fichiers textes d'où proviennent les informations.

L'opération de compaction n'affecte que les chaînes de caractères correspondant à de futures valeurs numériques en utilisant des fonctions de conversion du type Val() en PASCAL;

- Grand-Fich2, non paramétrée, est appelée lorsque les fichiers à reconstituer ont une taille supérieure à 64 Ko. Grand-fich de Trans-01 a segmenté et fourni plusieurs fichiers textes An-Sx et Ind-ASx (x = n° du segment de fichier). Grand-fich2 recherche ces fichiers textes pour les passer comme paramètres à la procédure Convert-S-D.

c- Les unités Trans-03 et Trans-04.

Leurs structures sont respectivement comparables aux unités Trans-01 et Trans-02, tout en s'appliquant aux fichiers Fo-Str et Index-F. Le détail des opérations menées par les deux applications ne sera pas passé en revue. On pourra cependant se référer à l'arbre A40 en ce qui concerne leur programmation.

3- Unité fonctionnelle Com-Txt.

(Structure complète: se référer aux arbres programmatiques A41 - A42)

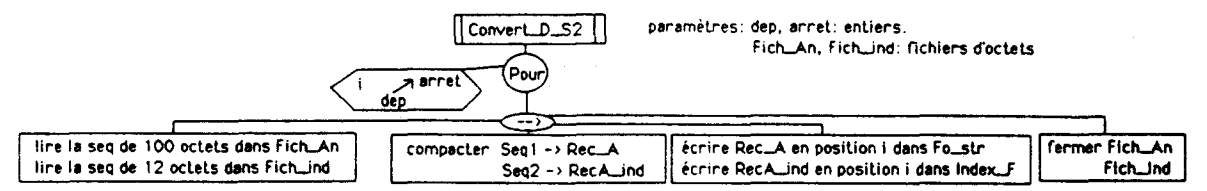
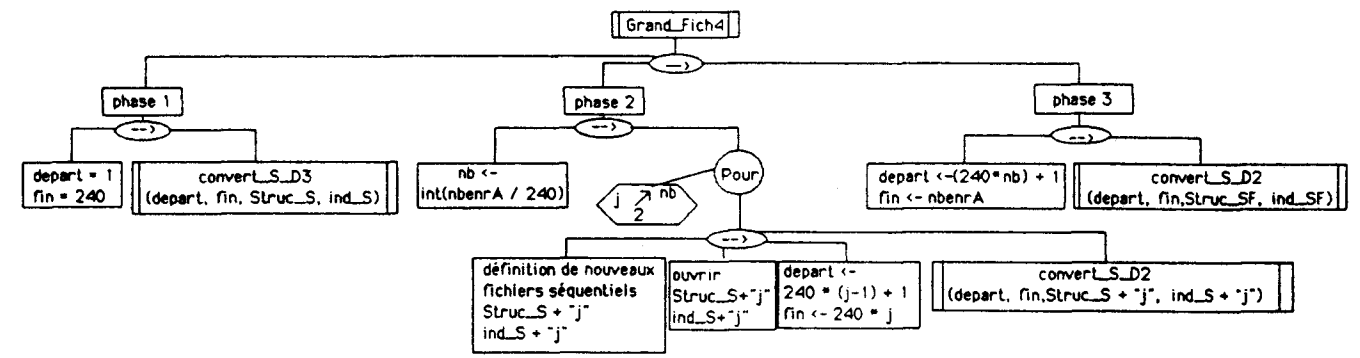
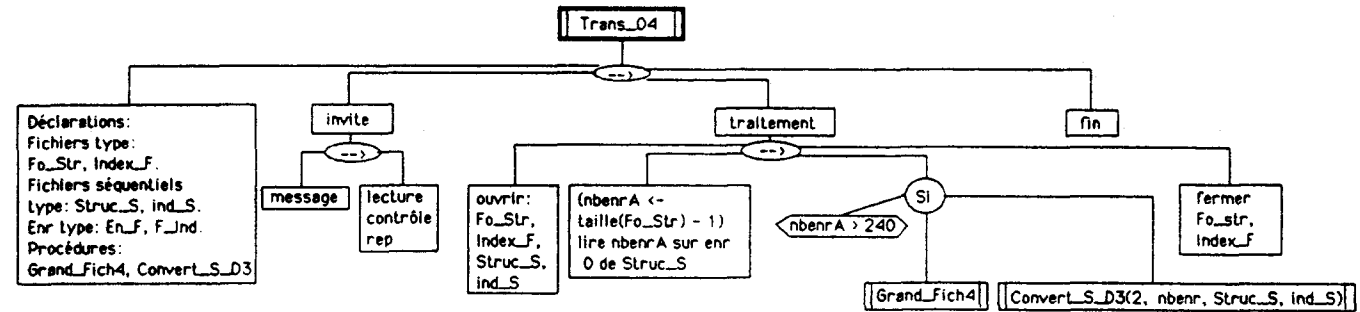
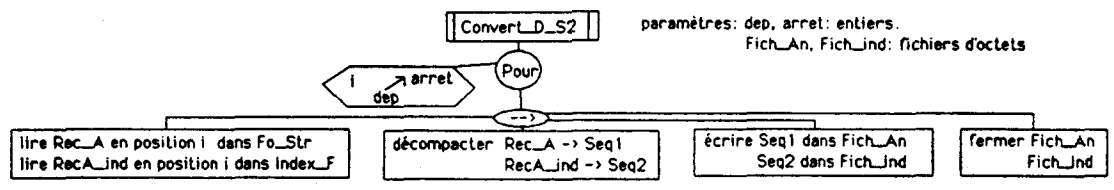
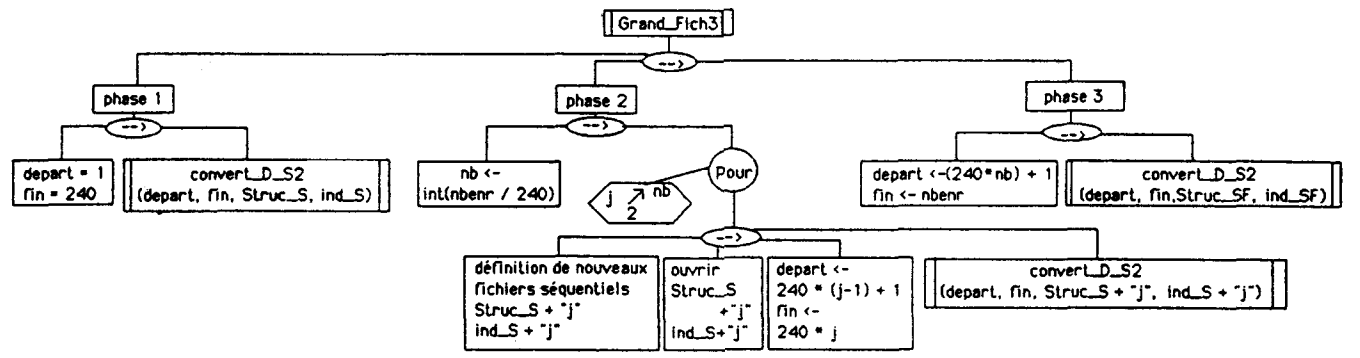
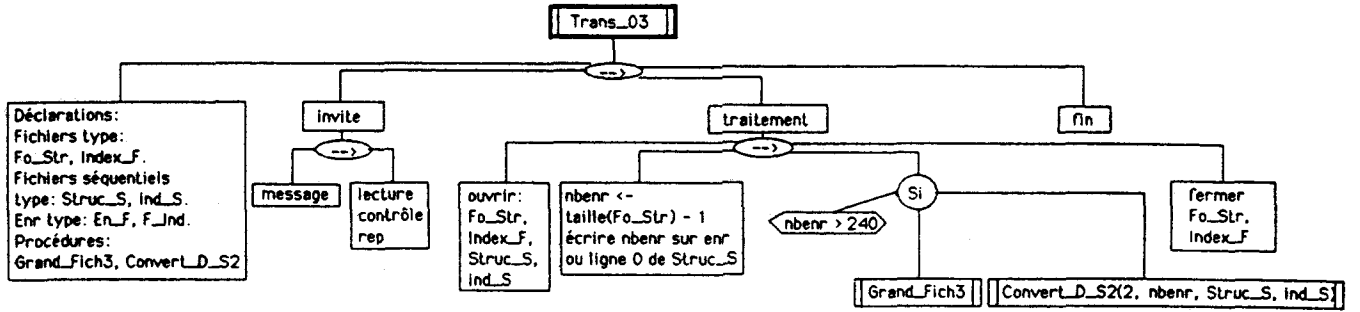
C'est à cette unité que nous allons demander de transformer un matériel type IBM AT3, COMPAQ DESKPRO-386, en simple périphérique d'un élément serveur, afin de recevoir des séquences ASCII. Le récepteur est muni d'un processeur INTEL 8250 dédié aux processus d'entrées/sorties. Sous MS-DOS, la programmation du fonctionnement des canaux de transmission série, peut se faire directement en travaillant sur les registres 8 bits du 8250. Quatre canaux sont programmables de COM1 à COM4. A chaque canal correspondent 7 registres du 8250 dont les adresses hexadécimales sont les suivantes

	LSB	RWR	EIR	LCR	MCR	LSR	MSR
COM1	3E9	3F8	3F9	3FB	3FC	3FD	3FE
COM2	2E9	2F8	2F9	2FB	2FC	2FD	2FE
COM3	361	370	371	373	374	375	376
COM4	261	270	271	273	274	275	276

avec

LSB: Line Signal Buffer:(non utilisé par la programmation)

RWR: Read Write Register



Arbre A40

EIR: Enable Interrupt Register

LCR: Line Control Register

MCR: Modem Control Register

LSR: Line Signal Register

MSR: Modem Signal Register

La programmation d'une ligne de transmission série s'effectue en entrant un certain nombre de codifications au niveau de ces registres. Le choix du type de ligne de transmission s'est arrêté, pour son universalité, sur le protocole de l'interface RS232 norme CTTY V24. Il est présent sur la quasi-totalité des calculateurs depuis les gros systèmes jusqu'aux "ordinateurs personnels" et correspond, sur un connecteur type DB 25, au câblage suivant:

1 <--> 1

2 <--> 3

3 <--> 2

4 <--> 5 et 8

6 <--> 20

5 et 8 <--> 4

20 <--> 6

Afin de stocker rapidement en mémoire les éléments transmis par le serveur, l'unité fonctionnelle définit les éléments suivants:

- DD: chaîne de n caractères, n étant le nombre maximum de caractères sur une ligne du fichier texte transmis;

- Ligne: variable de type DD;

- La mémoire tampon en réception est représenté par le variable globale Buffer [] : tableau [1.. n] de chaîne type DD;

- Parité: (S,P,I) représente un type par énumération qui définit le contrôle des chaînes d'octets transmises sur la ligne:

- S: sans test de parité;

- I: parité impaire de l'octet transmis;

- P: parité paire de l'octet transmis.

Le programme fonctionne ensuite par appel de procédures.

La procédure banniere fournit à l'écran l'invite générale de l'unité fonctionnelle.

La procédure directives constitue un appel optionnel géré par l'utilisateur. Ce dernier reçoit les informations relatives au câblage et surtout la manière dont sont envoyés les fichiers depuis le serveur. En fait, il suffit, sur le serveur, de rediriger l'édition sous système de fichiers textes vers l'interface RS232. Il faudra tout de même vérifier que les définitions de vitesse de transmission, parité, nombre de bits de données, nombre de bits de stop, sont identiques à celles qui sont définies sur l'élément receveur.

La procédure init-vitesse (baud). Baud, de type entier est un paramètre passé par valeur définissant la vitesse de transmission en bits par seconde (9600, 4800, 2400, 1200, 600, 300). La procédure déclare l'entier Diviseur-debit permettant d'affecter les valeurs correctes aux registres du 8250 utilisés dans la définition de la vitesse de transmission (arbre A41).

La procédure init-contrôle-ligne (nb-bit-donne, nb-bit-arret, par) définira les entités nécessaires à l'interface RS 232 pour vérifier la qualité de transmission:

nb-bit-donne: entier passé par valeur, donne le nombre de bits sur lequel est défini un caractère;

nb-bits-arret: entier passé par valeur, indique le nombre de bits utilisés pour définir la fin d'un caractère;

Par: de type parité, ce paramètre contrôle la parité de la somme des bits transmis pour un caractère, bits de stop inclus.

Le contrôle de la ligne se fait par définition d'un octet qui sera affecté au registre LCR du processeur (arbre A42).

La procédure interruption évite d'accéder au registres du 8250 tant que l'unité Com-Txt est en fonctionnement. Cette opération utilise les deux registres MCR et EIR (arbre A42).

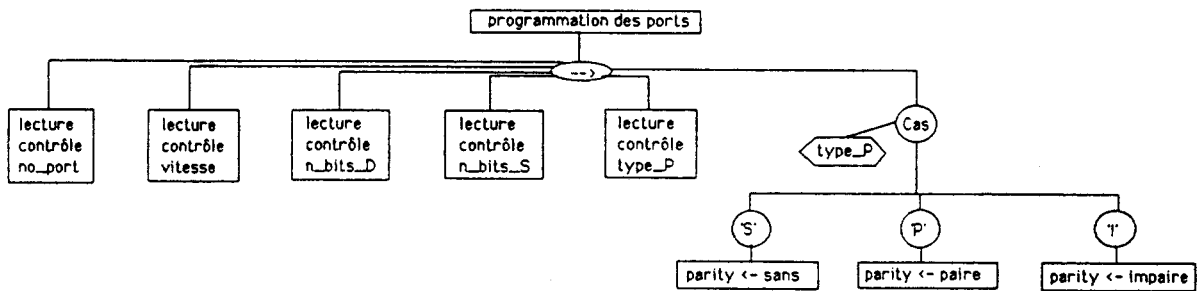
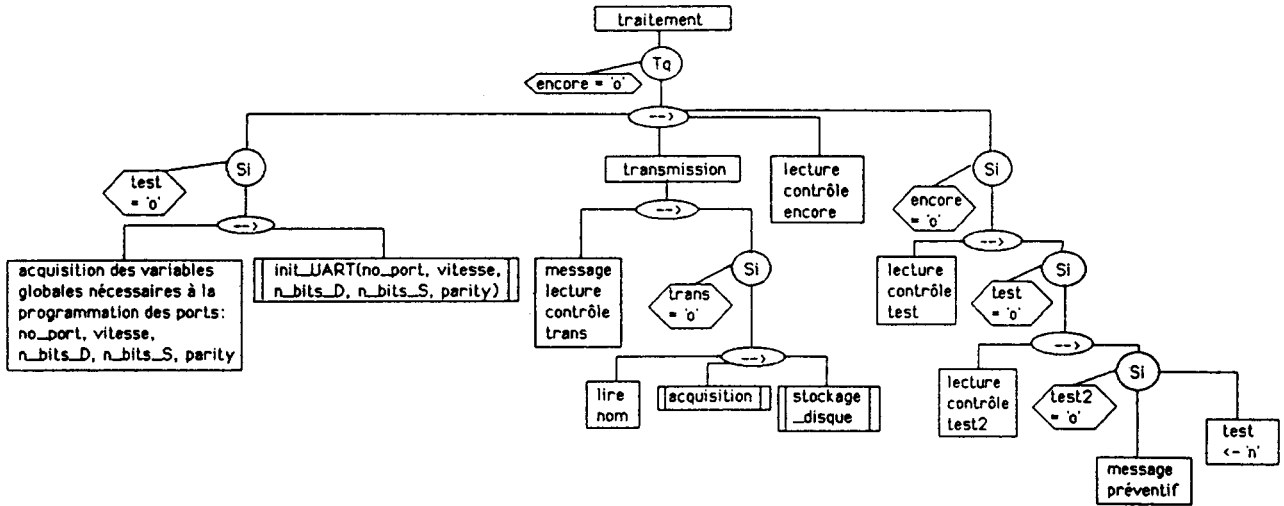
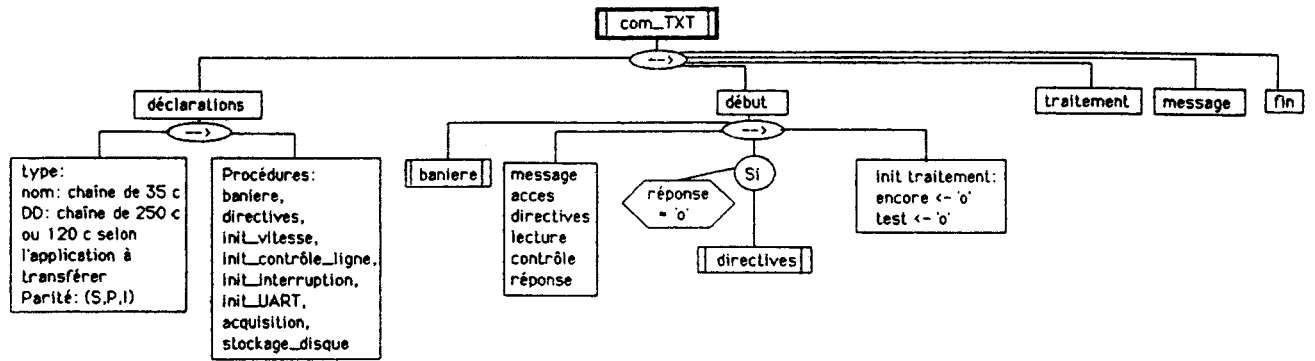
La procédure Init-Uart (numport, nb-bits-donne, nb-bits-arret, par) supervise les trois procédures précédentes en les appelant successivement (arbre A41). L'entier Numport introduit la définition des adresses des registres suivant le numéro de canal choisi (1 --> 4). Les autres paramètres ont même signification que leurs homologues dans la procédure init-contrôle-ligne().

La procédure Acquisition succède à l'initialisation du processeur 8250 dans le déroulement du programme. Son fonctionnement est simple et débute par l'initialisation de la variable buffer[]. Ensuite elle enregistre une ligne buffer [i] de la façon suivante:

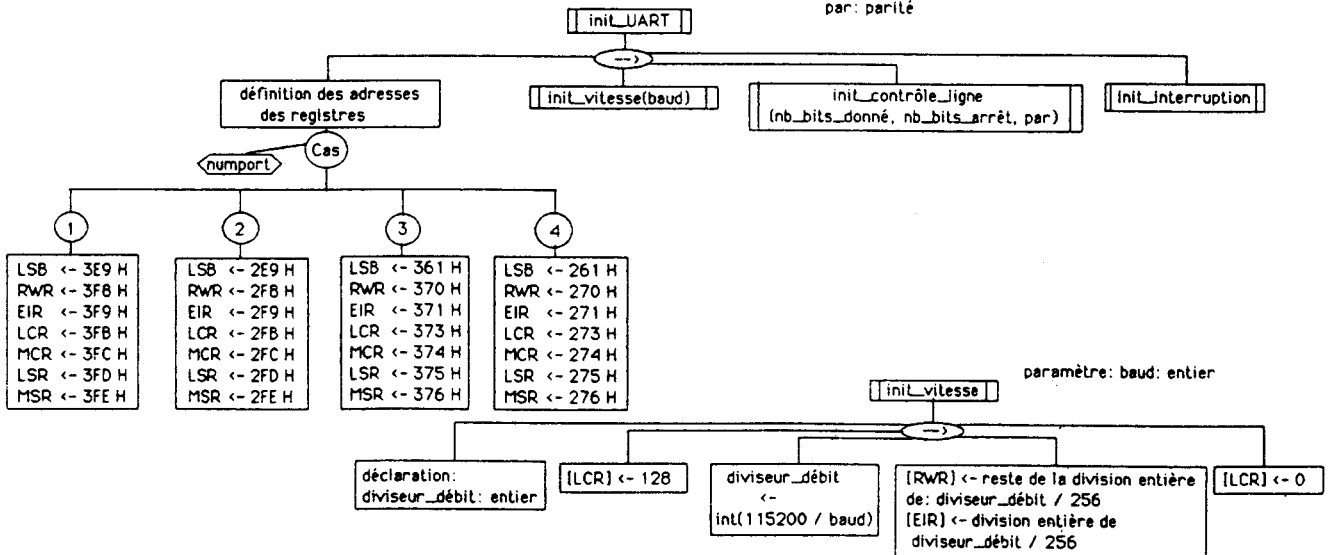
- boucle d'attente d'un caractère à l'entrée de la ligne de transmission (1 au registre LSR);
- acquisition de l'octet présent sur le registre RWR;
- transformation de l'octet lu en caractère ASCII et concaténation à la ligne Buffer [i];
- Cette séquence est répétée jusqu'à ce que l'octet OD_H(line feed) soit reçu.

L'opération d'acquisition d'une ligne est répétée jusqu'à ce que les dernières lignes correspondent à " l'invite système" de l'élément transmetteur, signifiant alors la fin de la séquence envoyée.

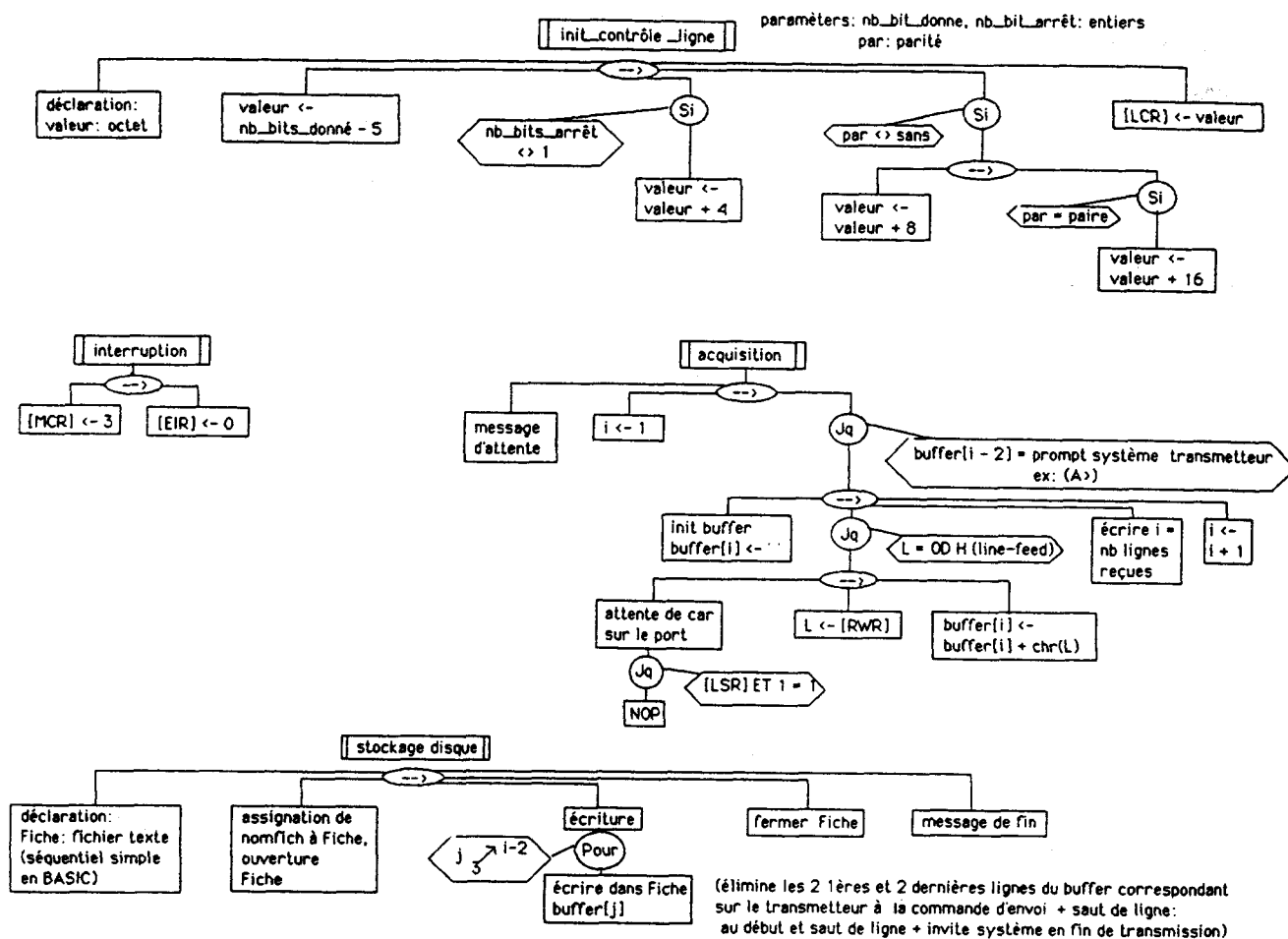
Suite à cette acquisition, la procédure stockage-disque transférera la variable buffer dans un fichier local de type texte (en PASCAL) ou séquentiel simple (en FORTRAN). Entre chaque flux transmis, l'utilisateur peut, s'il le désire, reprogrammer l'organe récepteur. Etant donné qu'une telle possibilité impose aussi des modifications sur l'élément transmetteur, la manipulation sur le 8250 est contrôlée par un double test, limitant ainsi les erreurs de manipulation.



paramètres: numport, baud, nb_bits_donne, nb_bits_arrêt: entiers.
par: parité



Arbre A41



Arbre A42

4 Unités fonctionnelles Charg-01 et Trans-M.

Charg-01, unité de chargement des fichiers à partir du PDP 11 de la sonde CAMEBAX, figure en cette place car elle correspond à une adaptation spécifique des unités fonctionnelles Com-Txt et Trans-02.

Alors que les procédures de pilotage du fonctionnement mécanique de la sonde sont, pour partie, intégrées à la machine sous forme de programmes en ROM, le PDP11 assure, quant-à-lui, l'interface utilisateur. C'est donc le calculateur externe qui reçoit les informations de la machine, effectue les calculs analytiques et transmet ces derniers au terminal utilisateur. Ce terminal est un peu particulier puisqu'il s'agit d'un clavier et d'une grosse imprimante mise en mode transparent lors de l'utilisation du clavier. Toutes les sorties du PDP11 vers l'imprimante sont épiées par une interface RS232 permettant, entre-autres, la conduite des résultats vers un autre périphérique que le terminal standard.

C'est à ce niveau qu'intervient le logiciel pour collecter ces informations ASCII, éliminer les données inutiles au fichier Ana-Cbx et les stocker dans un fichier texte de type An-S. Ce fichier séquentiel sera ensuite compacté en fichier de type Ana-Cbx, via une application similaire à Trans-02. Etudions les quelques adaptations utilisées pour interfacier le PDP11 à un calculateur type COMPAQ 386.

a- L'unité fonctionnelle Charg-01.

Les modifications apportées à Com-Txt sont essentiellement liées au format d'envoi d'une analyse en sortie du PDP11. Comme on peut le constater sur la figure 27, un bon nombre de lignes et de colonnes sont

inutiles, puisque seules les valeurs analytiques exprimées en fraction massique d'oxyde intéressent le fichier des analyses.

POINT N : 32					
ELEMENT	POSITION	PEAK	BACKGR.	K.RATIO	
K	42738.	14.2	14.0	0.0000	
NA	46338.	9.8	7.3	0.0001	
MN	52195.	9.0	6.9	0.0004	
CA	38378.	30.8	17.8	0.0006	
MG	38488.	3512.7	35.8	0.0783	
FE	48078.	909.3	10.0	0.1539	
TI	31434.	33.8	24.0	0.0005	
AL	32456.	864.3	28.0	0.6147	
NI	41168.	10.2	10.0	0.0000	
CR	36224.	32.8	26.8	0.0004	
SI	27733.	9696.8	50.0	0.1707	
ZN	35652.	17.4	15.8	0.0008	
TOTAL :				0.4202	
ELEMENT	I.X./I.STD.	K.RATIO	W.F. CONCEN.	NORMALIZED ATOM. C	ELEM. % O COMP. C
NA :	0.0018	0.0001	0.0002	0.0002	0.0003
K :	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
MN :	0.0013	0.0004	0.0005	0.0002	0.0006
MG :	0.1647	0.0783	0.1301	0.1196	0.2156
AL :	0.1939	0.6147	0.9237	0.6197	0.9449
SI :	0.8546	0.1727	0.2373	0.1889	0.5077
FE :	0.2343	0.1539	0.1765	0.0706	0.2270
NI :	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
ZN :	0.0008	0.0006	0.0007	0.0002	0.0009
CA :	0.0018	0.0006	0.0006	0.0003	0.0008
TI :	0.0016	0.0005	0.0006	0.0003	0.0009
CR :	0.0006	0.0004	0.0004	0.0002	0.0006
O			0.4294	0.5998	BY DIFFERENCE
TOTAL :			1.0000		0.9995

Fig. 27: Format de sortie d'une analyse sur le PDP 11 de la microsonde. Les nombres en marge renvoient à des numéros de ligne/colonne.

La procédure `acquis-stock()` remplaçant `acquisition()` et `sauvegarde()` constitue la modification majeure apportée (arbre A43):

- un buffer texte est créé: `buff-acq []` : tableau de lignes de 80 caractères;
- la séquence à réceptionner est constituée des variables locales Na, K, Mn, Mg, Al, Si, Fe, Ni, Zn, Ca, Ti, Cr, OH, total qui sont toutes des chaînes de six caractères;
- le fichier texte ou séquentiel Ana-S est déclaré en local.

`Buff-Acq []` commence par enregistrer toutes les informations d'une analyse de sonde. La fin de séquence est signalée par une invite transmetteur : 'ANALYSIS ?'. Avant de répondre sur la console du PDP, le récepteur envoie à l'utilisateur un message d'attente. Il s'agit d'une sécurité donnant au récepteur le temps d'effectuer son traitement sur `Buff-Acq []` avant de reprendre la réception d'informations provenant du PDP11. En fait cette sécurité n'est pas souvent utilisée car le temps de réaction de l'utilisateur suite à l'invite 'ANALYSIS ?', est beaucoup plus long que le temps demandé par le récepteur pour effectuer son traitement entre deux analyses.

Les 23 premières lignes ainsi que les lignes 36 et 37 de `Buff-Acq[]` ne sont pas traitées car elles n'intéressent pas le fichier Ana-Cbx. Les lignes 24 à 35 contiennent les informations relatives aux proportions d'oxydes de l'analyse, sur les caractères 55 à 60. Le total est situé sur ces mêmes caractères à la ligne 38. L'étape

de transformation initialisera donc les chaînes Na, K,...., total avec les caractères correspondants de Buff-Acq [] (exemple: Na chargé par les caractères 55 à 60 de Buff-Acq[24]). Ces chaînes Na, K,...., Total sont ensuite écrites en séquence dans le fichier texte Ana-S.

En fin de traitement, lorsque l'utilisateur ne souhaite plus faire d'analyses, il répond 'N' à l'invite du PDP11. Ce dernier va alors renvoyer le caractère '*' Après réception de ce signal par la procédure acquis-stock(), la lecture du port de communication RS 232 est interrompue par l'unité fonctionnelle.

b- Transformation du fichier Ana-S en fichier Ana-Cbx: unité Trans-M.

L'unité fonctionnelle nécessaire à cette réalisation reprend le processus de compaction évoqué dans Trans-02. Elle déclare les types structurés En-A et A-Ind (arbre A43) auxquels correspondent les variables globales Rec-A et RecA-Ind. Les fichiers Ana-Cbx, Index-A sont déclarés et ouverts. Les variables Na, K,...., total déjà citées dans la procédure acquis-stock() constitueront la séquence de lecture sur le fichier Ana-S. Les variables entet: chaîne de quatre caractères et compteur: entier donneront, par concaténation, le numéro d'analyse constituant la clef du fichier Index-A. Le déroulement de l'unité fonctionnelle est le suivant:

- après assignation et ouverture des fichiers, le sélecteur Option permet, soit de réécrire de nouveaux fichiers Ana-Cbx, Index-A, soit d'ajouter en fin de fichier les données issues de Ana-S;
- la variable entet est initialisée par l'opérateur:
 - l'année sur deux caractères;
 - le caractère '-';
 - le numéro de série de l'analyse : une lettre majuscule.
- l'application boucle ensuite jusqu'à parcourir tout le fichier Ana-S:
 - lecture de la séquence Na,K,...., total dans le fichier Ana-S;
 - compactage des données;
 - entrée au clavier les champs snolam (N° d'échantillon), smin (nom du minéral), nbo (nombre d'atomes d'oxygène de la formule structurale);
 - les champs snoana, inoana (n° d'analyses dans les fichiers Ana-Cbx et Index-A) sont automatiquement créés par concaténation de entet et compteur
 - enfin RecA, RecA-Ind sont écrits en position noenr sur leurs fichiers respectifs, puis noenr et compteur sont incrémentés.

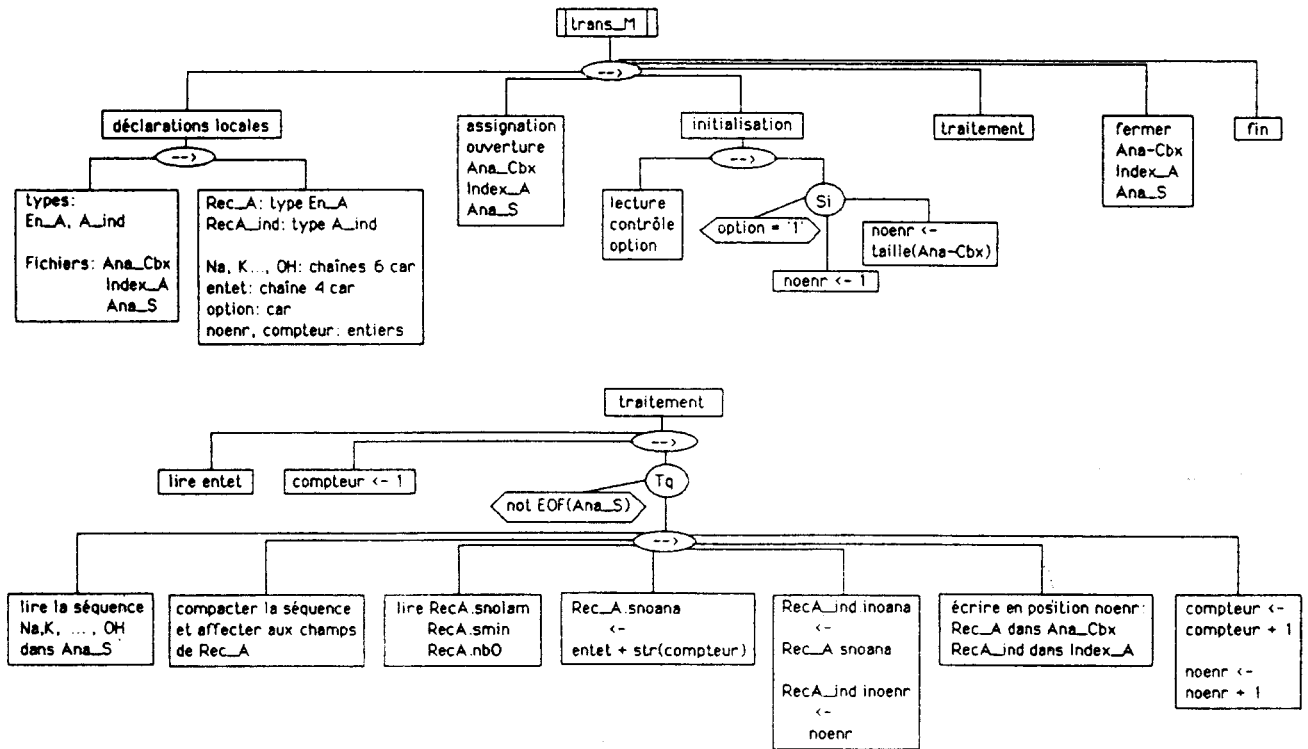
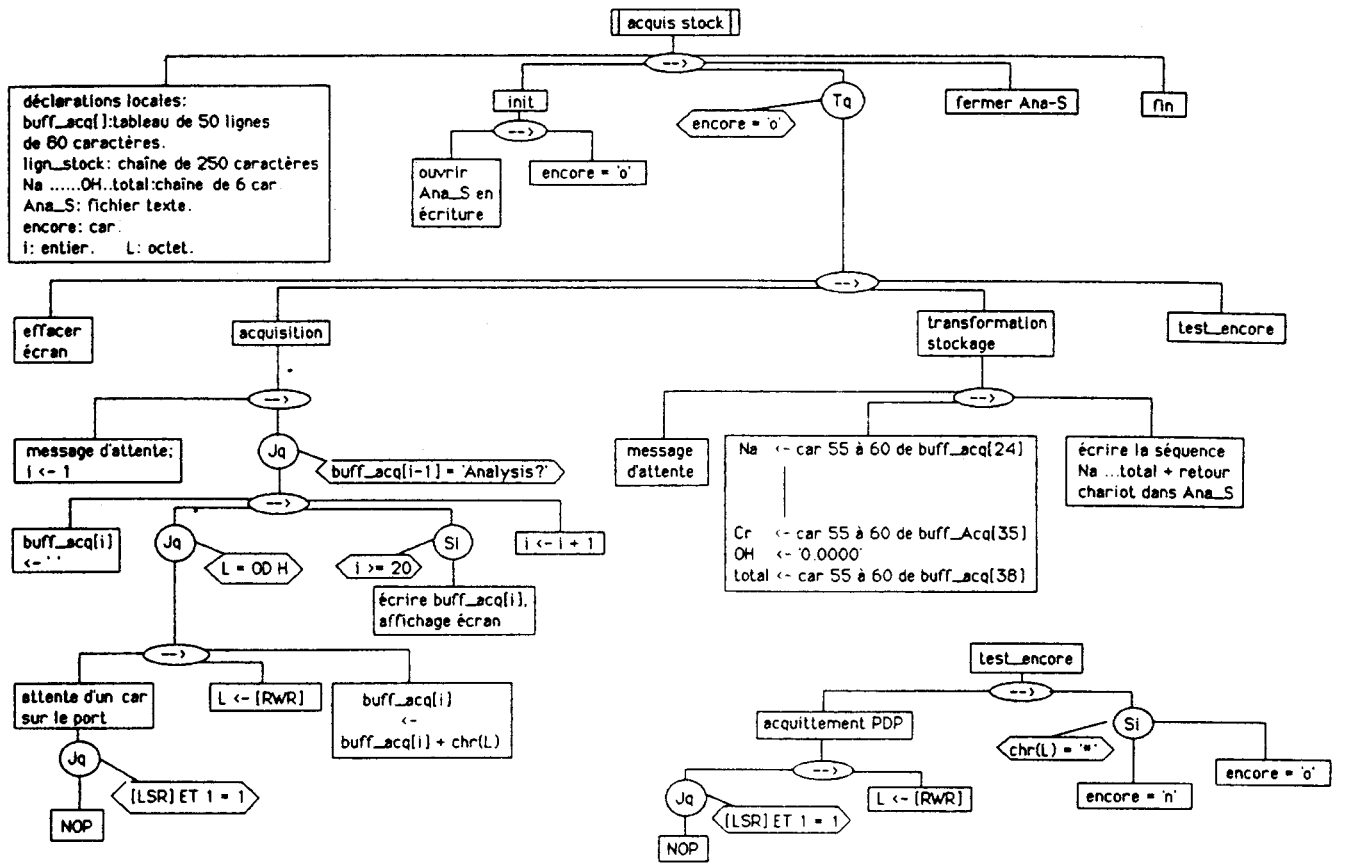
VI- Remarque concernant les fichiers de résultats: création d'accès indexés.

Tout au long de l'analyse organique, nous avons utilisé les fichiers de stockage de résultats suivants:

Acf: dans l'application ACF-AKF

Afm: dans l'application AFM-A'FM

Ga-Cd-Bi: dans l'application THERM-AL



Arbre A43

Ga-Cd: de l'application PT-GA-CD

Opx-Cpx: de l'application T-OP-CP

P-GaPl: de l'application P-GA-PL

P-GPyP: de l'application P-G-PY-P.

Comme le voulait l'analyse fonctionnelle, ces fichiers se sont comportés comme de véritables tampons d'édition, destinés à stocker les résultats, à proposer une édition différée par rapport au traitement, puis à être détruits afin de libérer l'espace disque. Cependant tous ces fichiers sont construits sur la base de variables parfaitement structurées et dimensionnées qui permettent un accès direct, ou, mieux encore, un accès séquentiel indexé. Evidemment cette possibilité est réservée aux systèmes disposant de suffisamment d'espace disque, ou encore, aux utilisateurs désireux d'agrandir leur base de données à tous les calculs d'exploitation des analyses.

Afin d'éviter la fastidieuse opération de tri d'index nécessaire à une recherche dichotomique, l'accès indexé qui sera défini se contentera de balayer l'index en séquence. Pour augmenter la souplesse d'utilisation de la base de données, l'index sera bâti sur deux clefs: le numéro de lame ou d'échantillon et le numéro d'analyse. Deux types d'implantations peuvent s'envisager:

- la modification du traitement dans chaque application possédant un fichier résultats;
- la réalisation de petites unités externes au traitement pour créer l'index.

1- Première méthode: modification du traitement dans chaque application.

L'étude est basée sur l'exemple du fichier Acf de l'application ACF-AKF. Il faudra déclarer:

- un type Acf-Ind:
 - Nola: chaîne de 10 caractères;
 - Noana : chaîne de 10 caractères;
 - Noenr: entier.
- un fichier Index-Acf dont les enregistrements sont du type Acf-Ind;
- Les variables No-Racf: entier, RecAcf-ind: de type Acf-ind.

Les modifications nécessaires à la création de l'index se situent à deux niveaux de l'application ACF-AKF et sont consignées sur l'arbre programmatique A44:

- lors de l'accès au traitement, il faudra assigner et ouvrir les fichiers Acf et Index-Acf;
- la fin du traitement devra affecter les champs de la variable RecAcf-ind et écrire cette dernière au fichier Index-Acf.

L'intérêt de cette première méthode tient essentiellement dans la possibilité de modifier directement les procédures d'édition (Ed_x-Ecran, Ed_x-Imp), afin de lire les index et d'éditer les résultats sans faire intervenir d'outils externes. Mais cette façon de procéder comporte deux inconvénients de taille:

- tout d'abord, elle oblige le programmeur à modifier les sources de chaque application, ce qui est fastidieux;
- ensuite, le système est rendu beaucoup moins souple puisqu'il ne permet plus de considérer les fichiers comme de simples tampons d'édition, même si les résultats inscrits n'ont pas à être conservés définitivement.

2- Seconde méthode: création d'index par une unité externe.

Nous allons développer une nouvelle unité fonctionnelle, dissociée des autres applications, dont le but sera de créer les index. Cette unité peut être lancée au gré de l'utilisateur et par conséquent, ne générer des index que lorsqu'ils sont vraiment nécessaires. L'unité fonctionnelle déclare tous les fichiers résultats: Acf, Afm,..., P-GPyP, ainsi que les types structurés et leurs variables globales associées: En-ACF,..., En-P; Rec-ACF,..., Rec-PGPY. A ces déclarations s'ajoutent :

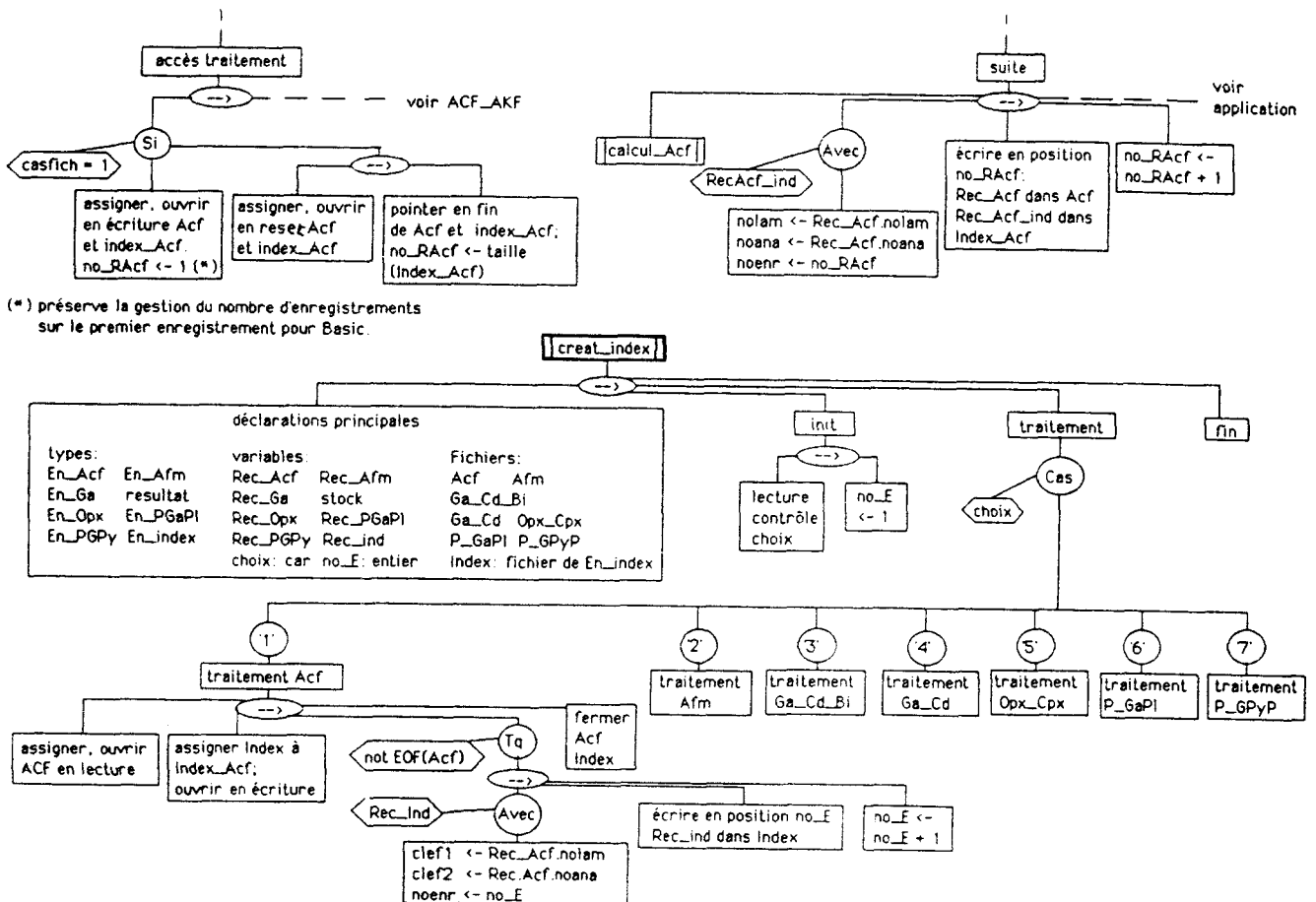
- le type En-Index:

- clef1,clef2: chaîne de 10 caractères représentant les deux clefs d'index possibles (n° d'échantillon, n° d'analyse);

- noenr: entier: n° d'enregistrement sur le fichier et l'index.

Lors de l'accès au traitement l'utilisateur décide, par la variable choix, du fichier sur lequel il désire créer un index. Ce dernier est construit par lecture en séquence du fichier résultats concerné et initialisation des champs de la variable Rec-Index de type En-Index (arbre A44).

Cette deuxième méthode est beaucoup plus souple que la première puisqu'elle laisse le choix de créer ou non un index. Pour lire de manière séquentielle indexée les fichiers résultats, il suffira de créer, pour chacun d'eux, un petit utilitaire basé sur les procédures Edx-Ecran, Edx-Imp. L'utilisateur entrera sa clef de détermination et accèdera aux résultats lorsque le programme aura balayé l'index jusqu'à correspondance entre la clef entrée et le champ équivalent dans l'index.



Arbre A44

CHAPITRE IV: CONCLUSION

Le logiciel n'a pas proposé de modules concernant des traitements numériques comme par exemple une critique statistique des données analytiques et des principaux résultats. Il ne s'agit pas d'un oubli, mais plutôt d'une liberté laissée à chaque utilisateur, de développer les traitements qui lui sembleront nécessaires ou qui conviendront le mieux. De par l'architecture générale et la méthode structurée de programmation employée, ces nouvelles applications seront très faciles à greffer sur la base préexistante. A titre d'exemple on pourra adjoindre différents modules de calcul permettant la critique du fonctionnement de la sonde et des résultats analytiques ou encore, celle des résultats obtenus à partir des fonctions logicielles de base. A titre d'exemple on peut assez facilement implanter:

- le calcul de moyennes, variances, écarts types et de quantiles sur des populations homogènes d'une seule variable ;
- des calculs de corrélation linéaire, logarithmique et exponentielle entre deux variables ;
- des tests d'homogénéité de populations, corrélés par un seuil de probabilité à une fonction de distribution de type loi de Pearson ou loi de Galton;
- un ajustement multivariées;
- un calcul de convolution déconvolution entre deux fonctions.

L'utilisateur garde pourtant la possibilité d'utiliser un certain nombre de logiciels ou de progiciels commercialisés. En effet, que ce soit dans le domaine de la micro-informatique, ou sur de plus gros systèmes, il existe actuellement d'excellents produits permettant la résolution de calculs statistiques complexes. Ces résolutions se font, soit par lancement d'un module pré-programmé auquel l'utilisateur adjoint sa liste de paramètres, soit par le développement de macro-instructions écrites dans le langage de programmation du produit. Le caractère commun à toutes ces applications est qu'elles permettent une entrée des données "exotiques" (c'est à dire issues d'un autre type de développement), dans la plupart des cas, sous forme de fichiers, de structures ou de variables A.S.C.I.I. (texte). Les paramètres de sortie pourront aussi avoir un format dédié, en fonction de leur future utilisation. Si les résultats sont destinés à être exportés vers d'autres types de développement, le codage se fera aussi en caractères A.S.C.I.I.

De par sa structure, le logiciel de traitement d'analyses CAMEBAX, que nous venons d'étudier, simplifie l'utilisation de produits commerciaux. La préparations des données se limitera le plus souvent, à une simple conversion des fichiers de la base de données en fichiers A.S.C.I.I. Chaque champ significatif de ce nouveau fichier est positionné en colonnes dans le tableau d'entrées du logiciel de calcul statistique. Notons que le passage à la ligne suivante dans ce tableau se fait par un classique <RETOUR CHARIOT> (013_H). Il conviendra donc lors de la conversion du fichier importé de séparer chaque structure complète par ce caractère. Pour certains compilateurs, le FORTRAN IV par exemple, la conversion ne sera même pas nécessaire, puisque tous les fichiers séquentiels écrits par le langage sont, sauf directive de compilation contraire, directement écrits en codes A.S.C.I.I.

Enfin dans le cas où l'utilisateur aurait à utiliser sur les résultats acquis par le logiciel CAMEBAX, des tableurs ou des logiciels graphiques, la procédure à mettre en oeuvre sera identique, puisque la plupart des produits du marché proposent une entrée de données importées, sous forme de fichiers A.S.C.I.I.

En conclusion à cette étude, il apparaît donc primordial, et ce, pour n'importe quel développement, de réaliser une analyse fonctionnelle particulièrement soignée. C'est elle qui évitera, l'utilisation des astuces de programmation qui portent préjudice à la facilité de maintenance du logiciel. C'est encore elle qui imposera la définition précise du format des objets manipulés par l'application. Ce format sera particulièrement important, nous venons de le voir, si l'on veut éviter le caractère hermétique d'une application, en particulier dans le but de la rendre compatible avec d'autres traitements soit développées par l'utilisateur soit issus de produits du commerce. C'est d'ailleurs face à la mise en oeuvre, sans cesse croissante, de ces produits performants et adaptables à l'utilisation de chacun, que se sont développées les méthodes d'analyses par arborescence. Elles permettent de structurer l'idée mais aussi le développement organique d'une application dans le but de la rendre la plus ouverte possible. Notons enfin que ces méthodes s'avèrent particulièrement bien adaptées aux récents langages structurés que sont par exemple C (en tête au classement des langages de programmation scientifique et industrielle), PASCAL, ou encore PL1.

BIBLIOGRAPHIE

BIBLIOGRAPHIE

- CURRIE K.L. (1971): The reaction $3 \text{ cordierite} = 2 \text{ garnet} + 4 \text{ sillimanite} + 5 \text{ quartz}$ as a geological thermometer in the Opinicon Lake region, Ontario. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 33, p. 215 - 226.
- DAVIS B.T.C. ET BOYD F.R. (1966): The join $\text{Mg}_2\text{Si}_2\text{O}_6 - \text{CaMgSi}_2\text{O}_6$ at 30 kilobars pressure and its application to pyroxenes from kimberlites. *J. Geophys. Res.*, 71, p. 3567 - 3576.
- DEER W.A., HOWIE R.A., ZUSSMAN J. (1980): An introduction to the rock forming minerals., London Longman Group Limited, 12^{ème} ed., 528 p.
- FERRY J.M. ET SPEAR F.S. (1978): Experimental calibration of the partitioning of Fe and Mg between biotite and garnet. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 66, p. 113 - 117.
- GHENT E.D. (1976): Plagioclase - garnet - Al_2SiO_5 - quartz: a potential geothermometer-geobarometer. *Am. Miner.*, 61, p. 710 - 714.
- HENSEN B.J. ET GREEN D.H. (1971): Experimental study of the stability of cordierite and garnet in pelitic compositions at high pressures and temperatures. I - Compositions with excess alumino-silicate. *Contrib. Mineral. petrol.*, 33, p. 309 - 330.
- HENSEN B.J. ET GREEN D.H. (1972): Experimental study of the stability of cordierite and garnet in pelitic compositions at high pressures and temperatures. II - Compositions with excess alumino-silicate. *Contrib. Mineral. petrol.*, 35, p. 331 - 354.
- HENSEN B.J. ET GREEN D.H. (1973): Experimental study of the stability of cordierite and garnet in pelitic compositions at high pressures and temperatures. III - Compositions with excess alumino-silicate. *Contrib. Mineral. petrol.*, 38, p. 151 - 166.
- HOLDAWAY M.J. ET LEE S.M. (1977): Fe-Mg cordierite stability in high grade pelitic rocks based on experimental theoretical and natural observations. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 63, p. 175 - 198.
- HUTCHEON I., FROESE E., GORDON T.M. (1974): The assemblage quartz-sillimanite-garnet-cordierite as an indicator of metamorphic conditions in the Daly Bay Complex, N.W.T. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 44, p. 29 - 34.
- LONKER S.W. (1981): The P - T - X relations of the cordierite - garnet - sillimanite - quartz equilibrium. *Am. J. Sci.*, 281, p. 1056 - 1090.
- MARTIGNOLE J. ET SISI J-CH. (1981): Cordierite - garnet - H₂O equilibrium: a geological thermometer, barometer, and water fugacity indicator. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 77, p. 38 - 46.
- NEWTON R.C. ET HASELTON H.T. (1981): Thermodynamics of garnet-plagioclase- Al_2SiO_5 -quartz geobarometer. In R.C. Newton, A. Navrotsky and B.J. Wood, Eds., *Thermodynamics of Minerals and Melts*, Springer (New-York), p. 129 - 145.
- NEWTON R.C. ET PERKINS D. (1982): Thermodynamic calibration of geobarometers based on the assemblage garnet - plagioclase - orthopyroxene (clinopyroxene) - quartz. *Am. Miner.*, 67, p. 203 - 222.
- NEWTON R.C. ET WOOD B.J. (1979): Thermodynamics of water in cordierite and some petrologic consequences of cordierite as hydrous phase. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 68, p. 391 - 405.
- THOMPSON J.B. (1957): The graphical analysis of mineral assemblages in pelitic schists. *Am. Miner.*, 42, p. 842 - 858.

- THOMPSON A.B. (1976): Mineral reactions in pelitic rocks. I - Prediction of P - T - X(Fe-Mg) phase relations. II - Calculation of some P - T - X(Fe-Mg) phase relations . *Am. J. Sci.* , 276, p. 401- 454.
- WELLS P.R.A. (1977): Pyroxene thermometry in simple and complex systems. *Contrib. Mineral. Petrol.* , 62, p. 129 - 139.
- WOOD B.J. ET BANNO S. (1973): Garnet - orthopyroxene and orthopyroxene - clinopyroxene relationships in simple and complex systems. *Contrib. Mineral. Petrol.* , 42, p. 109 - 124.

**LISTE DES FIGURES ET DES
ARBRES PROGRAMMATIQUES**

LISTE DES FIGURES ET DES ARBRES PROGRAMMATIQUES

Fig. 1: Architecture d'organisation des fonctions logicielles liées au développement d'un fichier d'analyses CAMEBAX.....	7
Fig. 2: Architecture d'organisation des fonctions logicielles liées au développement d'un fichier de formules structurale et aux calculs de base sur les analyses CAMEBAX.....	8
Fig. 3: Architecture d'organisation des fonctions logicielles attribuées aux calculs thermobarométriques sur équilibres minéraux.....	9
Fig. 4: Architecture d'organisation des fonctions utilitaires associées aux applications du logiciel de traitement des analyses CAMEBAX.....	10
Fig. 5: Masques de saisie des menus: MENU-SUPERVISEUR , MENU-A, MENU-M , MENU-PT.....	16
Fig. 6: Masques de saisie du menu : MENU-O.....	17
Fig. 7: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application CHARG-02.....	18
Fig. 8: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application MODIF-A.....	19
Fig.9. Masques d'édition (saisie/résultats) des applications ECRAN-I, LISTE-I.....	20
Fig. 10: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application STRUCT-M.....	21
Fig. 11: Masques d'édition (saisie/résultats) des applications ECRAN-F, LISTE-F.....	22
Fig. 12: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application ACF-AKF.....	23
Fig. 13: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application AFM-A'FM.....	25
Fig. 14: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application GRAPH-T.....	27
Fig. 15: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application GRAPH-R.....	29
Fig. 16: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application THERM-AL.....	31
Fig. 17: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application PT-GA-CD.....	33
Fig. 18: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application T-OP-CP.....	35
Fig. 19: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application P-G-PY-P.....	37
Fig. 20: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'application P-GA-PL.....	39
Fig. 21: Masques d'édition (saisie/résultats) des utilitaires OUTIL-03 -> OUTIL-06.....	40
Fig. 22: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'utilitaire OUTIL-07.....	41
Fig. 23: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'utilitaire COM-TXT.....	43
Fig. 24: Masques d'édition (saisie/résultats) de l'utilitaire CHARG-01.....	44
Fig. 25: Symbolique utilisée dans la réalisation des arbres programmatiques.....	52
Fig. 26: Mode de fonctionnement d'un accès séquentiel indexé.....	53
Fig. 27: Format de sortie d'une analyse sur le PDP 11 de la microsonde.....	130

Arbre A1: Application Charg-02.....	55
Arbres A2, A3: Application Modif-A.....	58, 59
Arbre A4: Application Ecran-I.....	60
Arbre A5: Application Liste-I.....	61
Arbres A6, A7, A8, A9, A10: Application Struct-M.....	66, 67, 68, 69, 70
Arbre A11: Applications Ecran-F, Liste-F.....	70
Arbres A12, A13: Application ACF-AKF.....	73, 74
Arbres A14, A15: Application AFM-A'FM.....	76, 77
Arbres A16, A17: Application Graph-T.....	78, 79
Arbres A18, A19, A20: Application Graph-R.....	83, 84, 85
Arbres A21, A22: Application Therm-Al.....	87, 88
Arbres A23, A24, A25, A26: Application PT-Ga-Cd.....	95, 96, 97, 98
Arbres A27, A28, A29: Application T-Op-Cp.....	101, 102, 103
Arbres A30, A31, A32: Application P-Ga-Pl.....	108, 109, 110
Arbres A33, A34, A35, A36: Application P-G-Py-P.....	115, 116, 117, 118
Arbre A37: Applications Outil-01 à Outil-06.....	119
Arbre A38: Application Outil-07.....	121
Arbre A39: Applications Trans-01 et Trans-02.....	123
Arbre A40: Applications Trans-03 et Trans-04.....	125
Arbres A41, A42: Application Com-Txt.....	128, 129
Arbre A43: Applications Charg-01 et Trans-M.....	132
Arbre A44: création d'un accès séquentiel indexé sur les fichiers de stockages des résultats des différentes applications.....	134

TABLE DES MATIERES

TABLE DES MATIERES

CHAPITRE I: PRESENTATION, ANALYSE CONCEPTUELLE DU LOGICIEL DE TRAITEMENT DES ANALYSES A LA MICROSONDE

I- Présentation, généralités.....	5
II- Aspect conceptuel de l'application.....	6
1- Le menu dédié au développement du fichier d'analyses: Menu-A.....	6
2- Le menu dédié aux calculs de formules structurales et aux traitements de base: Menu-M.....	7
3- Le menu dédié aux calculs thermobarométriques: Menu-PT.....	8
4- Le menu dédié aux fonctions utilitaires: Menu-O.....	9

CHAPITRE II: ASPECT FONCTIONNEL DU LOGICIEL

I- Remarques préliminaires.....	15
II- La grille de visualisation des menus de gestion du logiciel.....	15
III- Les unités gérées par Menu-A.....	17
1- Unité fonctionnelle Charg-02.....	17
2- Unité fonctionnelle Modif-A.....	18
3- Unités fonctionnelles Ecran-I, Liste-I.....	19
IV- Les unités gérées par Menu-M.....	20
1- Unité fonctionnelle Struct-M.....	20
a- Le module de calcul.....	20
b- Le module de consultation.....	20
2- Unités fonctionnelles Ecran-F, Liste-F.....	22
3- Remarques préliminaires à l'étude des autres fonctions gérées par Menu-M.....	22
4- Unité fonctionnelle ACF-AKF.....	23
a- Le module de calcul.....	24
b- La consultation des résultats.....	24
5- Unité fonctionnelle AFM-A'FM.....	24
6- Unité fonctionnelle Graph-T.....	26
7- Unité fonctionnelle Graph-R.....	28

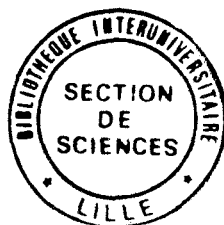
V- Les unités gérées par Menu-PT	28
1- Unité fonctionnelle Therm-Al.....	28
a- L'entrée des données au clavier.....	30
b- L'entrée des données par fichier.....	30
c- Le calcul puis l'enregistrement automatique des résultats.....	30
d- L'édition écran ou par imprimante.....	30
2- Unité fonctionnelle PT-Ga-Cd.....	31
a- L'entrée des données et le module de calcul.....	32
b- L'édition des résultats à l'écran.....	32
3- Unité fonctionnelle T-Op-Cp.....	34
a- L'entrée au clavier des formules structurales.....	34
b- L'entrée au clavier des analyses.....	34
c- L'entrée des données par fichier.....	34
d- Le calcul et la sauvegarde automatique des résultats.....	34
e- La restitution des calculs.....	34
4- Unité fonctionnelle P-G-Py-P.....	36
a- L'entrée des données au clavier.....	36
b- L'entrée des données par fichier.....	36
c- L'édition des résultats.....	36
5- Unité fonctionnelle P-Ga-Pl.....	38
VI- Les unités gérées par Menu-O	38
1- Unités fonctionnelles Outil-01, Outil-02.....	38
2- Unités fonctionnelles Outil-03 à Outil-06.....	39
3- Unité fonctionnelle Outil-07.....	41
VII- Les unités gérées par Menu-T et l'acquisition automatique des données analytiques en sortie de microsonde	41
1- Unité fonctionnelle Com-Txt.....	42
2- Unité fonctionnelle Charg-01.....	43

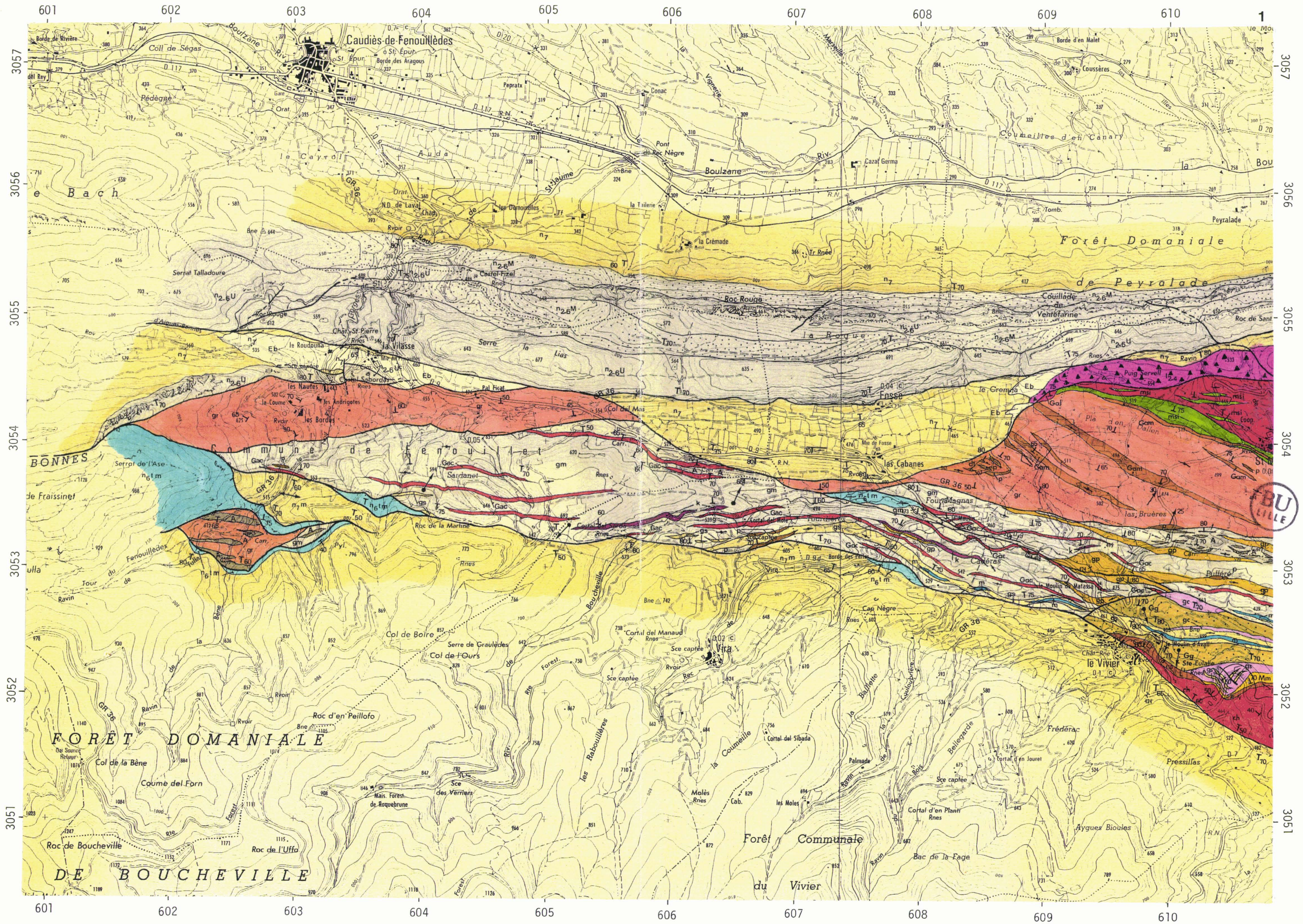
CHAPITRE III: ANALYSE ORGANIQUE

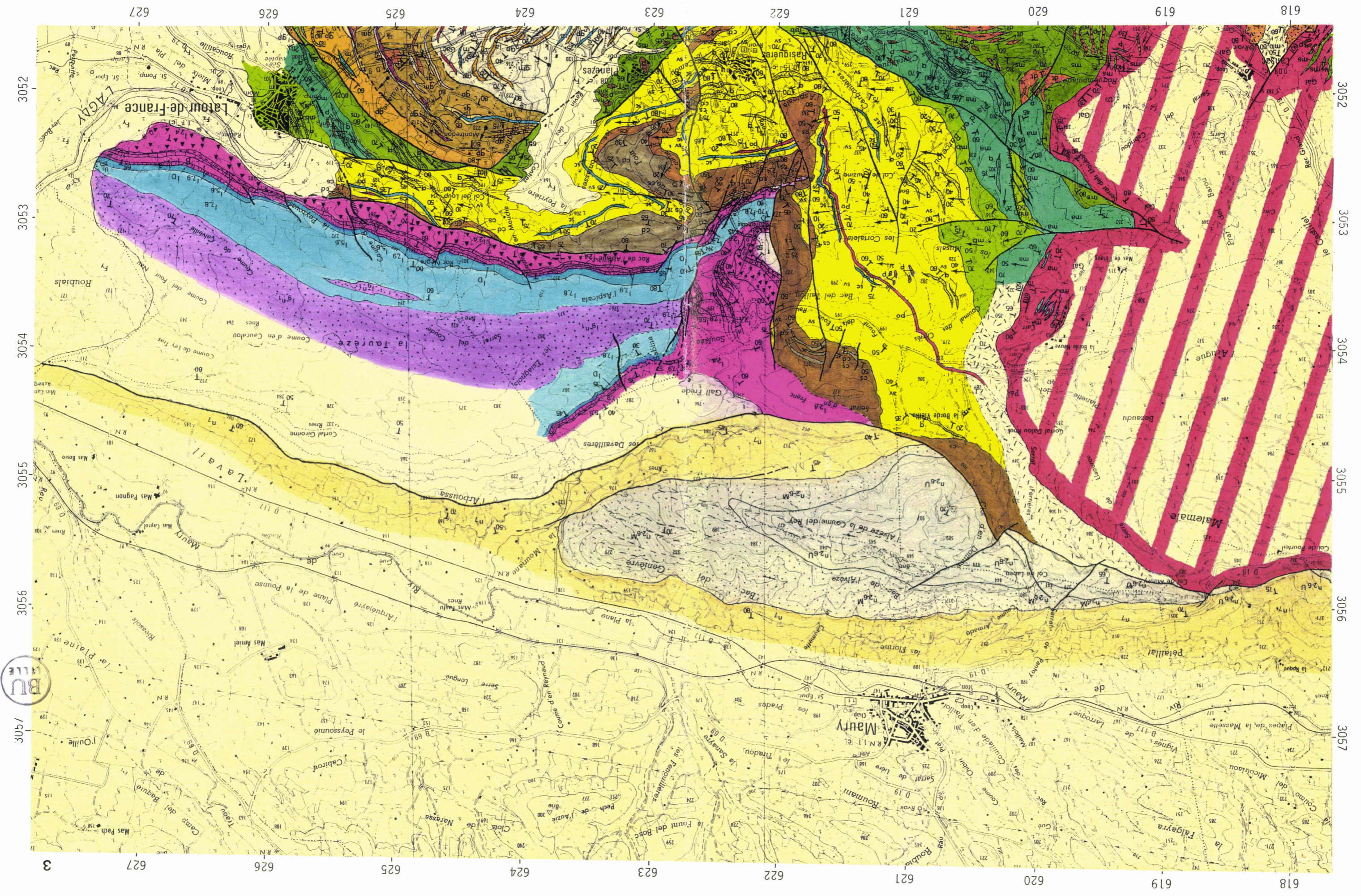
I- Considérations préliminaires	47
1- Langages d'implantation.....	47
2- Remarques concernant les menus.....	47
a- Premier cas: exemple d'utilisation du langage C.....	47
b- Deuxième cas: exemple sous système MS DOS.....	49

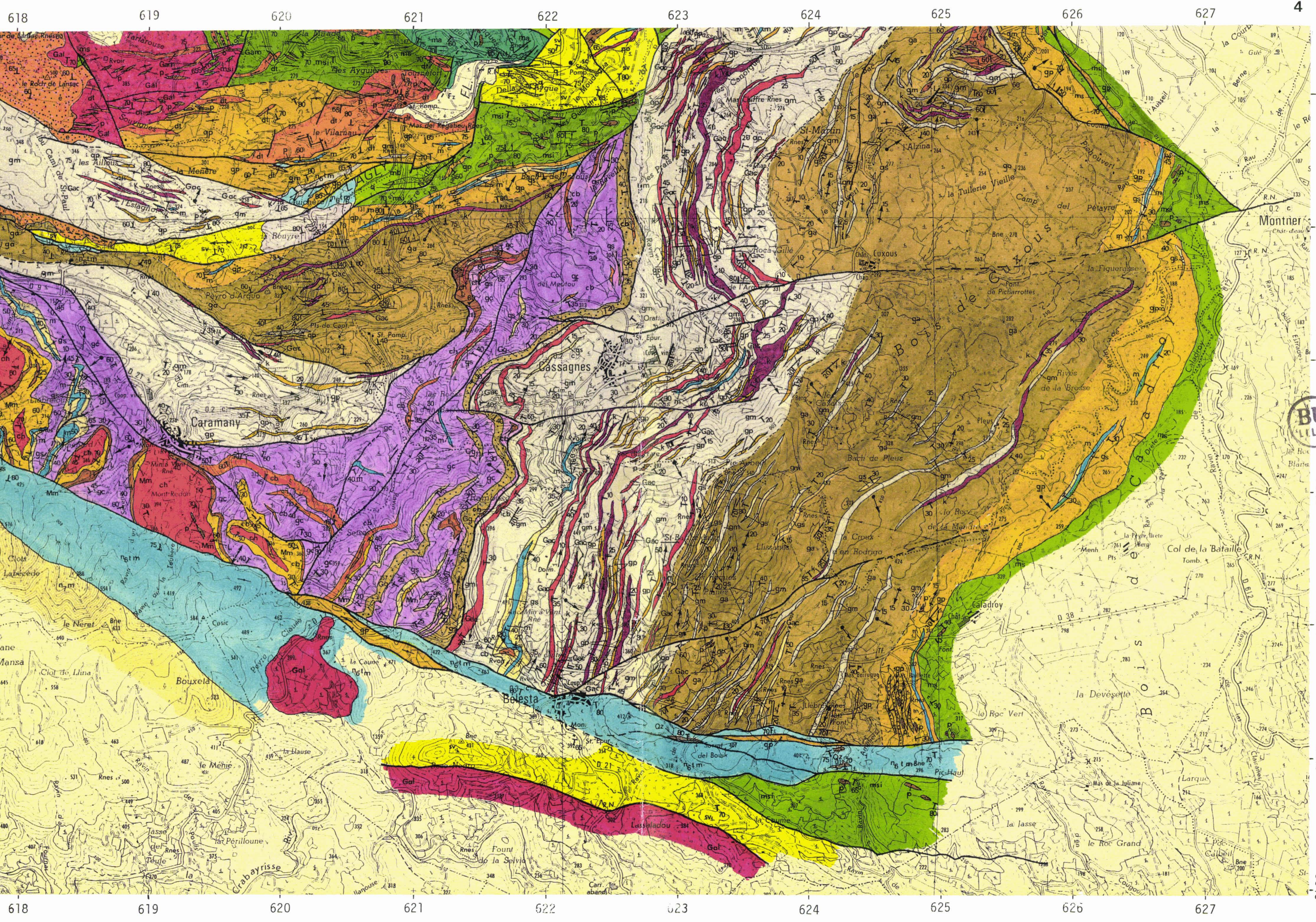
3- Symbolisme utilisé dans les arbres programmatiques.....	51
4- Objets généraux manipulés par l'ensemble du logiciel.....	51
a- Le fichier Ana-Cbx.....	53
b- Le fichier Fo-Str.....	53
II- Analyse organique des applications associées à Menu-A.....	54
1- Unité fonctionnelle Charg-02.....	54
2- Unité fonctionnelle Modif-A.....	57
3- Unité fonctionnelle Ecran-I.....	60
4- Unité fonctionnelle Liste-I.....	60
III- Analyse organique des applications associées à Menu-M.....	61
1- Unité fonctionnelle Struct-M.....	61
a- Les entrées de données.....	62
b- Etablissement de la formule structurale.....	62
c- Edition des formules structurales.....	65
2- Unités fonctionnelles Ecran-F, Liste-F.....	65
3- Unité fonctionnelle ACF-AKF.....	71
a- L'entrée des données.....	71
b- Le calcul et l'édition des résultats.....	71
4- Unité fonctionnelle AFM-A'FM.....	75
5- Unité fonctionnelle Graph-T.....	77
6- Unité fonctionnelle Graph-R.....	81
IV- Analyse organique des applications associées à Menu-PT.....	85
1- Unité fonctionnelle Therm-AI.....	85
a- L'entrée et l'archivage des données.....	85
b- Les calculs et leur restitution.....	86
2- Unité fonctionnelle PT-Ga-Cd.....	89
a- Les constantes et les types spécifiques.....	89
b- Les structures spécifiques.....	90
c- Fonctions et procédures utilisées par l'application.....	91
d- Eléments attenants au fonctionnement général de l'application..	93
3- Unité fonctionnelle T-Op-Cp.....	98
a- L'entrée et l'archivage des données du programme.....	98
b- L'architecture du calcul.....	100
4- Unité fonctionnelle P-Ga-Pl.....	104
a- L'entrée des données, les structures de sauvegarde des résultats..	104

b- Les calculs.....	105
5- Unité fonctionnelle P-G-Py-P.....	107
a- L'entrée des données.....	107
b- Le calcul des formules structurales.....	111
c- Les calculs barométriques.....	111
V- Analyse organique des applications associées à Menu-O.....	114
1- Unité fonctionnelle Outil-07.....	120
2- Unités fonctionnelles Trans-01 à Trans-04.....	122
a- Unité Trans-01.....	122
b- Unité Trans-02.....	124
c- Les unités Trans-03 et Trans-04.....	124
3- Unité fonctionnelle Com-Txt.....	124
4- Unités fonctionnelles Charg-01 et Trans-M.....	129
a- L'unité fonctionnelle Charg-01.....	129
b- Transformation du fichier Ana-S en fichier Ana-Cbx:	
unité Trans-M.....	131
VI- Remarque concernant les fichiers de résultats:	
création d'accès indexés.....	131
1- Première méthode: modification de traitement dans chaque application.....	133
2- Seconde méthode: création d'index par une unité externe.....	134
 CHAPITRE IV: CONCLUSION.....	137
 BIBLIOGRAPHIE.....	139
 LISTE DES FIGURES ET DES ARBRES PROGRAMMATIQUES.....	143

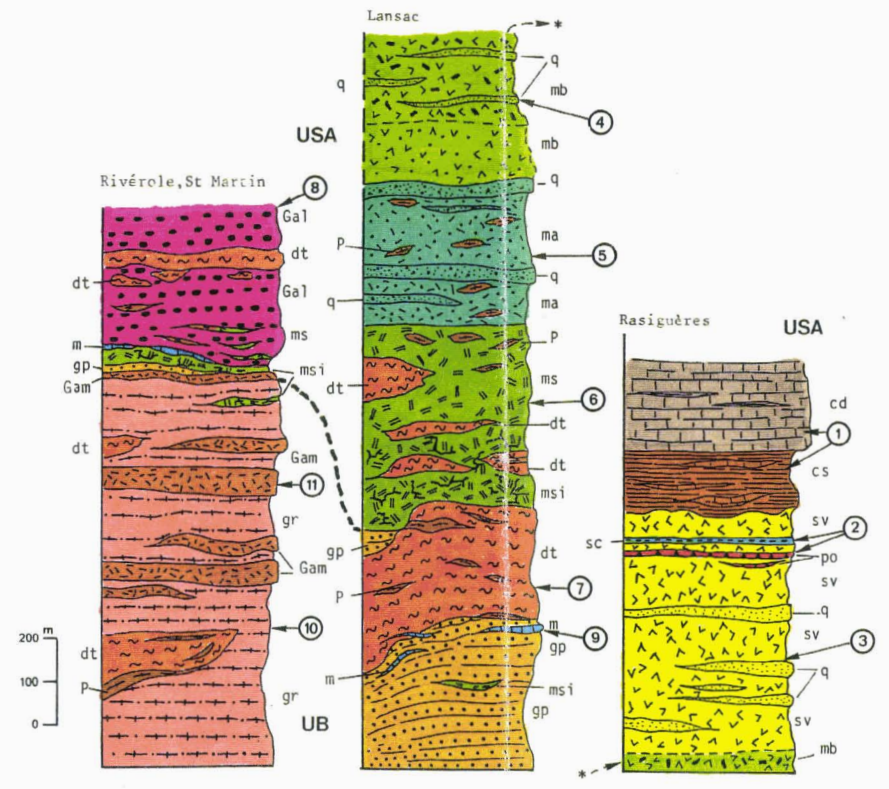
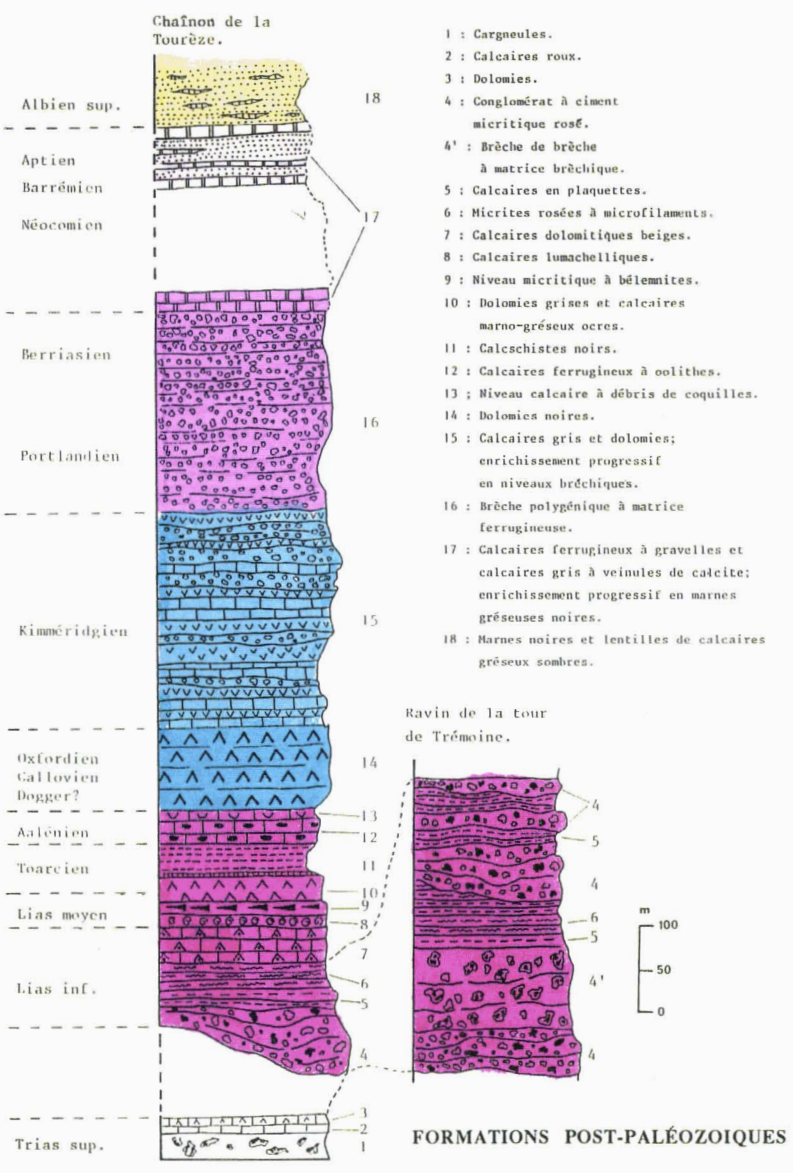




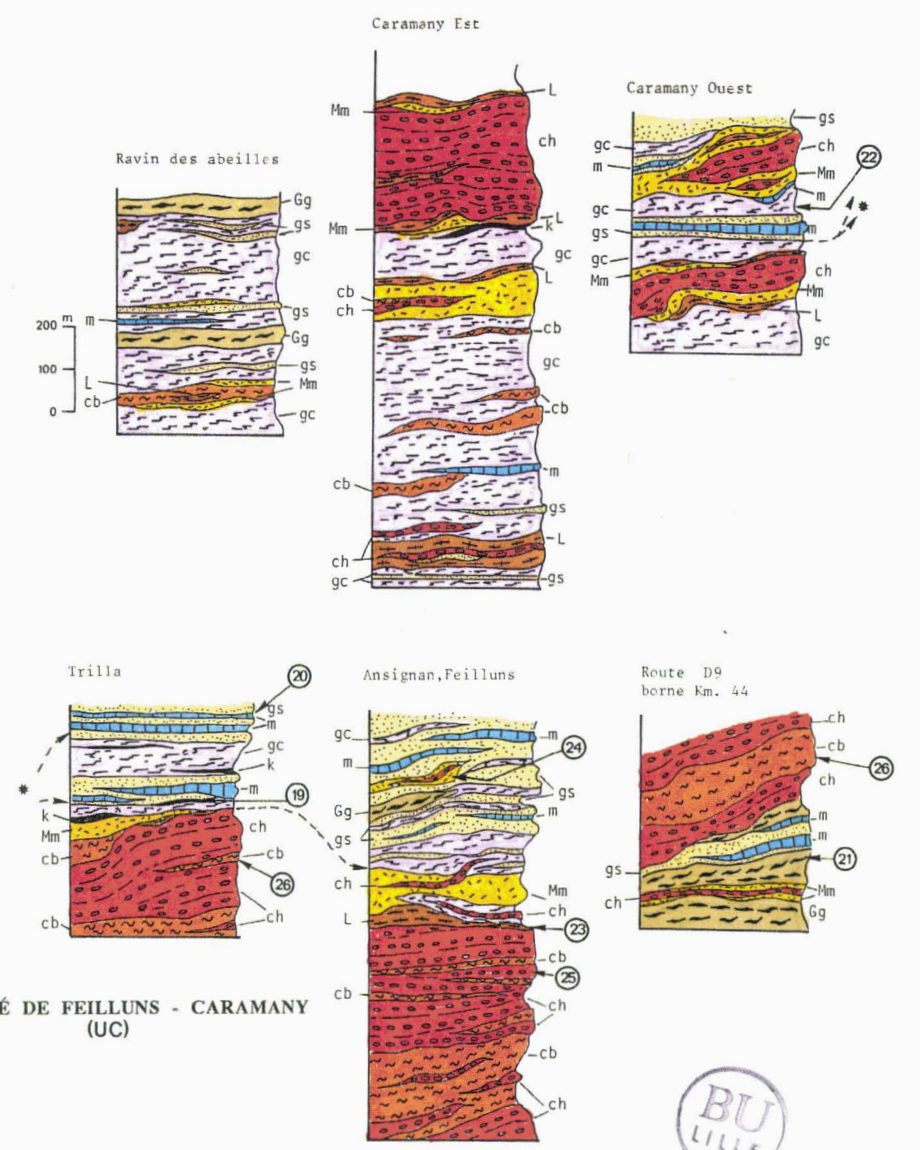




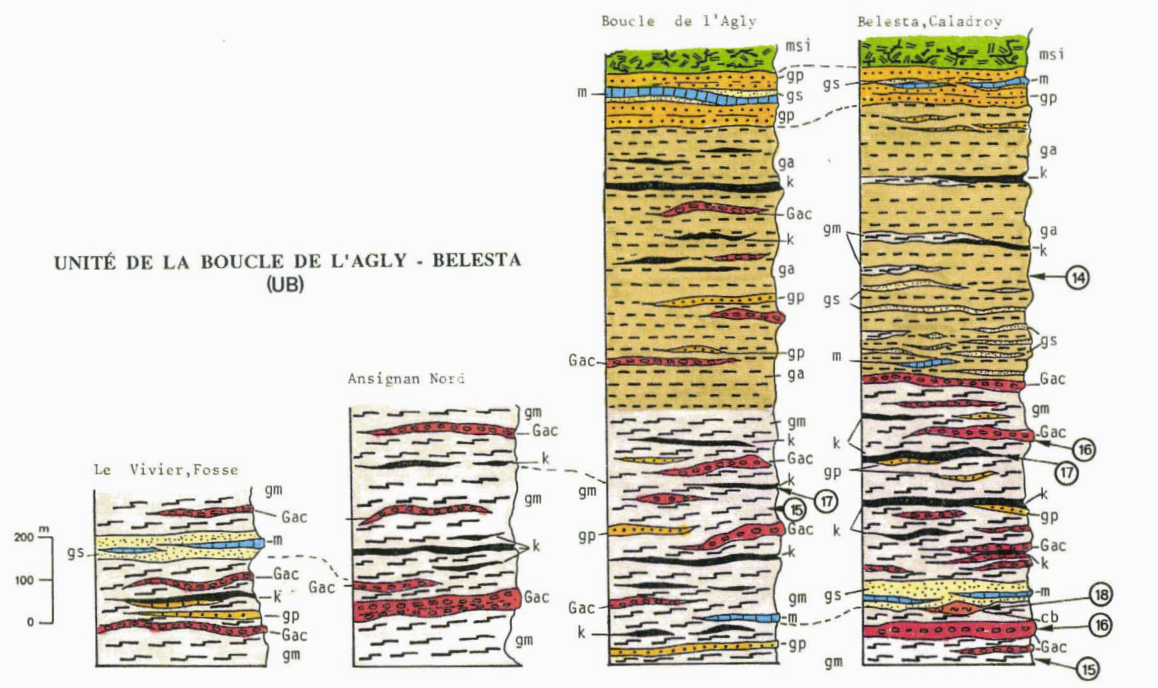
BU
LILLE



UNITÉ SUPÉRIEURE DE L'AGLY (USA)
UNITÉ DE LA BOUCLE DE L'AGLY - BELESTA (UB)

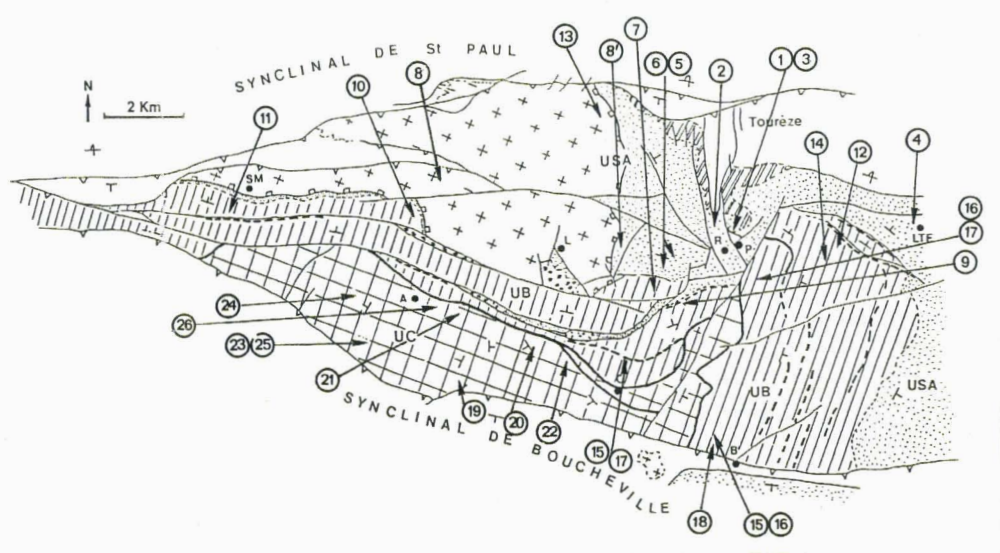


UNITÉ DE FEILLUNS - CARAMANY (UC)



UNITÉ DE LA BOUCLE DE L'AGLY - BELESTA (UB)

COORDONNÉES LAMBERT III DES PRINCIPAUX LITHOTYPES HERCINIENS
(INDICES EN RÉFÉRENCE SUR LES COLONNES LITHOLOGIQUES)



- 1: cd - cs: 622,625 / 3052,175
- 2: po - sc: 622,000 / 3052,500
- 3: sv: 622,500 / 3052,000
- 4: mb: 625,800 / 3052,200
- 5: ma: 620,750 / 3051,850
- 6: ms - msi: 620,425 / 3051,350
- 7: dt: 621,075 / 3051,000 - 620,825 / 3050,950
- 8: Gal: 615,200 / 3053,675
- 8': Ap (non positionné sur les colonnes): 619,075 / 3051,675
- 9: gs - m: 621,600 / 3050,400
- 10: gr: 614,875 / 3052,800
- 11: Gam: 609,950 / 3053,700
- 12: L (non positionné sur les colonnes): 625,050 / 3051,800
- 13: A (non positionné sur les colonnes): 620,125 / 3054,075
- 14: ga: 624,525 / 3050,725
- 15: gm: 621,425 / 3047,350 - 619,825 / 3048,925
- 16: Gac: 621,450 / 3047,050 - 623,525 / 3050,800
- 17: k: 619,725 / 3049,125 - 623,250 / 3051,100
- 18: cb: 621,675 / 3046,800
- 19: k: 615,625 / 3049,075
- 20: gs - m: 617,350 / 3049,475
- 21: Gg: 615,475 / 3050,600
- 22: gc: 618,325 / 3048,950
- 23: L: 613,000 / 3050,425
- 24: Mm: 613,000 / 3051,450
- 25: ch: 613,000 / 3051,425
- 26: cb: 614,950 / 3051,050 - 614,450 / 3050,475

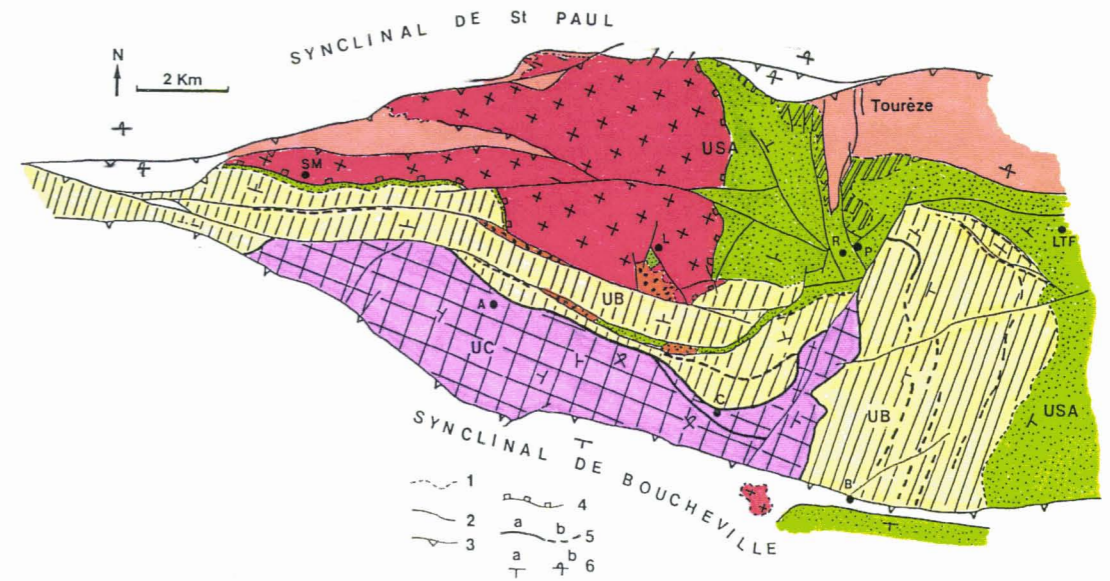
USA: Unité Supérieure de l'Agly; UB: Unité de la Boucle de l'Agly - Belesta; UC: Unité de Feilluns - Caramany; A: Ansignan; B: Belesta; C: Caramany; L: Lansac; LTF: Latour de France; P: Planèzes; R: Rasigières; SM: St-Martin.

FORMATIONS POST - PALÉOZOIQUES

Eb	Eboulis
Fz	Alluvions récentes
Fy	Alluvions anciennes
c	Formations bréchiqes éocènes d'Ansignan et d'Estagel
n ₇ n _{7m}	Albo - Cénomanién n ₇ : Marnes noires n _{7m} : Marnes noires métamorphiques
n _{2-6M}	Marnes et calcaires du Barrémo - Aptien
n _{2-6U}	Calcaires barrémo - aptiens du faciès Urgonien
n _{6tm}	Formations secondaires métamorphiques anté - Albien
j ₉ n ₁	Brèche limite du Portlandien - Berriasien
j _{7,8}	Calcaires et dolomies grises du Kimméridgien
j _D	Dolomies noires du Dogger - Oxfordien
a 1 _{7,9} b	Lias supérieur a: Calcaires oolitiques roux de l'Aalénién b: Dolomies grises et calcschistes noirs du Toarcien
a 1 ₅₋₆ b	Lias moyen a: Dolomies grises et calcaires ocre b: Lumachelles et niveaux à bélemnites
a 1 ₂₋₄ b	Lias inférieur a: Dolomies grises et beiges b: Niveaux conglomératiques à ciment micritique rosé c: Niveaux bréchiqes d: Calcaires micritiques rosés à microfilaments

UNITÉ SUPÉRIEURE DE L'AGLY

cd	Marbres bleus siluro-dévoiens
* cs	Calcschistes siluro-dévoiens
* po	Porphyrite du Caradoc
* sc	Schistes gréseux à chloritoïde
q	Bancs de quartzites dans les schistes verts et les micaschistes
* sv	Schistes verts
* mb	Micaschistes à biotite et/ou cordiérite
* ma	Micaschistes à andalousite
ms	Micaschistes à sillimanite
msi	Micaschistes injectés à sillimanite
p	Pegmatites à muscovite, tourmaline
Ap	Aplites à grenat
A	Filons et imprégnations albitiques
dt	Corps dioritiques foliés type diorite de Tournefort - Taichac
Gal	Granodiorite de St-Arnac - Lansac (figuré pour la variété porphyroïde en filons individualisés)
*	Auréole du métamorphisme de contact par hydratation à proximité de la granodiorite de St-Arnac - Lansac



USA: Unité Supérieure de l'Agly; UB: Unité de la Boucle de l'Agly - Belesta; UC: Unité de Feilluns - Caramany; A: Ansignan; B: Belesta; C: Caramany; L: Lansac; LTF: Latour de France; P: Planèzes; R: Rasiguères; SM: St-Martin.
1: contact stratigraphique; 2: zones cataclásées; 3: failles limitant le massif hercynien, le crochon est dirigé vers le compartiment supérieur; 4: éponte du granite intrusif de St-Arnac - Lansac; 5: zones blasto et ultramylonitiques, a: 30 à 50% de matériaux déformés, b: moins de 30% de matériaux déformés dans un volume de référence; 6: pendages, a: normal, b: inverse.

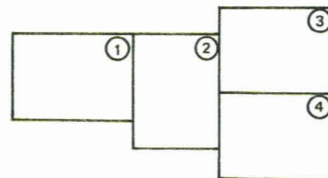
UNITÉ DE LA BOUCLE DE L'AGLY - BELESTA

m	Marbres
gs	Gneiss à silicates calciques et gneiss plagioclasiqes
dt	Corps dioritiques foliés type diorite de Tournefort - Taichac
gp	Gneiss perlés (figuré pour la variété à gros feldspaths détritiques)
gr	Gneiss clairs de la Rivérole
Gam	Granitoïde leucocrate à biotite, muscovite
L	Leucogranite à grenat, biotite
P	Pegmatites à muscovite
Qz	Filons de quartz
A	Filons et imprégnations albitiques
ga	Gneiss perlés anatectiques bancs par bancs
gm	Gneiss migmatitiques
k	Kinzigites
Gac	Granodiorite porphyroïde type granite de Cassagnes
cb	Corps basiques à ortho - clinopyroxène

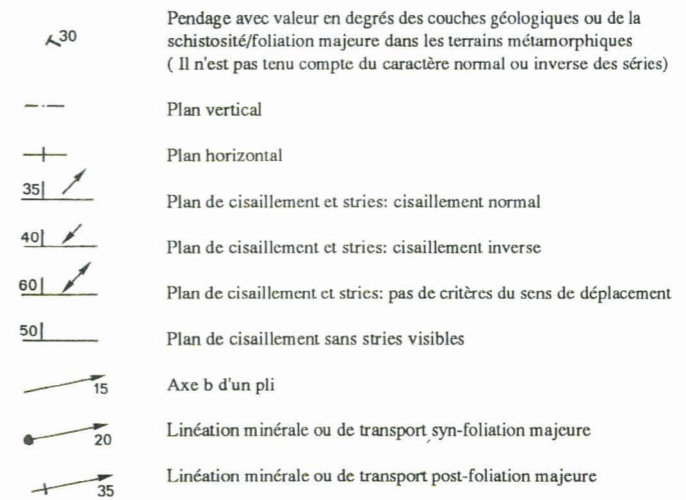
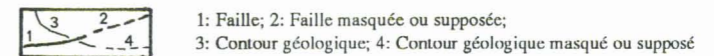
UNITÉ DE FEILLUNS - CARAMANY

Qz	Filons de quartz
k	Kinzigites
m	Marbres
gs	Gneiss à silicates calciques et gneiss plagioclasiqes
Gg	Granito-gneiss type gneiss du Pont de Trilla
gc	Gneiss anatectiques alumineux type gneiss de Caramany
P	Pegmatites à biotite
L	Leucogranite à grenat de bordure des charnockites
Mm	Migmatites de bordure des charnockites
ch	Granodiorite porphyroïde à orthopyroxène: charnockites
cb	Corps basiques à ortho - clinopyroxène

ASSEMBLAGE DES FEUILLETS DE LA CARTE



Quadrillage kilométrique Lambert zone III, latitudes et longitudes exprimées en grades



Echelle : 1/25 000

Carte levée et dessinée par Frédéric Delay 1986 - 1988

Documents consultés: - Carte géologique de la France 1/80 000 feuille de Quillan 1967 (3^{ème} édition)

- Document cartographique dans Fontailles M. 1970 : Bull. B.R.G.M. n° 3, section 4

Fonds topographiques I.G.N. : - Feuille 1/25 000 n° 2348 Est (1984)
- Feuille 1/25 000 n° 2448 Ouest (1980)

