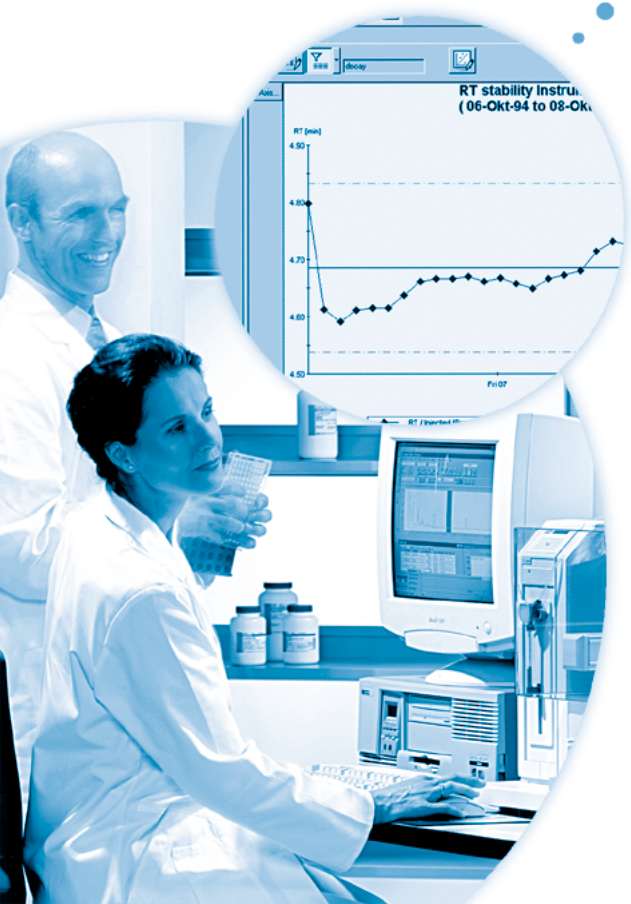
# Agilent ChemStore C/S




## Guide des concepts

Agilent Technologies

# Avertissements

© Agilent Technologies, Inc. 2002, 2004

Conformément aux lois nationales et internationales relatives à la propriété intellectuelle, toute reproduction totale ou partielle de ce manuel sous quelque forme que ce soit, par quelque moyen que ce soit, voie électronique ou traduction, est interdite sans le consentement écrit préalable de la société Agilent Technologies, Inc.

Microsoft® est une marque déposée de Microsoft Corporation aux Etats-Unis.

## Référence du manuel

G2181-93010

## Edition

03/04

Imprimé en Allemagne

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn, Allemagne

## Révision du logiciel

Ce manuel concerne un module du logiciel Agilent ChemStation Plus. La section « Contenu de ce manuel » page 4 contient des informations détaillées concernant ce module et en particulier le numéro de version du logiciel auquel il se rapporte.

## Garantie

**Les informations contenues dans ce document sont fournies « en l'état » et pourront faire l'objet de modifications sans préavis dans les éditions ultérieures. Dans les limites de la législation en vigueur, Agilent exclut en outre toute garantie, expresse ou implicite, quant à ce manuel et aux informations contenues dans ce dernier, notamment, mais sans s'y restreindre, toute garantie marchande et aptitude à un but particulier. En aucun cas, Agilent ne peut être tenu responsable des éventuelles erreurs contenues dans ce document, ni des dommages directs ou indirects pouvant découler des informations contenues dans ce document, de la fourniture, de l'usage ou de la qualité de ce document. Si Agilent et l'utilisateur ont souscrit un contrat écrit distinct dont les conditions de garantie relatives au produit couvert par ce document entrent en conflit avec les présentes conditions, les conditions de garantie du contrat distinct se substituent aux conditions stipulées dans le présent document.**

## Licences technologiques

Le matériel et le logiciel décrits dans ce document sont protégés par un accord de licence et leur utilisation ou reproduction sont soumises aux termes et conditions de ladite licence.

## Limitation des droits

L'utilisation du logiciel dans le cadre d'un contrat principal ou de sous-traitance avec le Gouvernement américain est soumise à la réglementation fédérale des Etats-Unis régissant les logiciels informatiques commerciaux (DFAR 252.227-7014, juin 1995) ou les produits commerciaux (FAR 2.101(a)) ou les logiciels informatiques sous licences (FAR 52.227-19, juin 1987) ou toute réglementation ou clause de contrat équivalente. L'utilisation, la duplication ou la publication de ce logiciel est soumise aux termes de la licence commerciale standard délivrée par Agilent Technologies. Conformément à la directive FAR 52.227-19(c)(1-2) (juin 1987), les droits d'utilisation accordés aux départements et agences rattachés au Gouvernement américain sont limités aux termes de la présente limitation des droits. Les droits d'utilisation accordés au Gouvernement américain dans le cadre des données techniques sont limités conformément aux directives FAR 52.227-14 (juin 1987) ou DFAR 252.227-7015 (b)(2) (novembre 1995).

## Mentions de sécurité

**ATTENTION**

Une mention **ATTENTION** signale un danger. Si la procédure, le procédé ou les consignes ne sont pas exécutés correctement, le produit risque d'être endommagé ou les données d'être perdues. En présence d'une mention **ATTENTION**, vous devez continuer votre opération uniquement si vous avez totalement assimilé et respecté les conditions mentionnées.

**AVERTISSEMENT**

**Une mention AVERTISSEMENT signale un danger. Si la procédure, le procédé ou les consignes ne sont pas exécutés correctement, les personnes risquent de s'exposer à des lésions graves. En présence d'une mention AVERTISSEMENT, vous devez continuer votre opération uniquement si vous avez totalement assimilé et respecté les conditions mentionnées.**

# Dans ce guide...

Ce manuel est une introduction aux principaux concepts de ChemStore C/S Agilent révision *B.03.01*. Il aborde les principales fonctionnalités du produit et vous donne des indications pour définir vos études et gérer vos données. Il est organisé comme suit :

### 1 Présentation du logiciel ChemStore C/S

Ce chapitre vous donne un aperçu des fonctionnalités de ChemStore C/S Agilent afin de guider vos premiers pas.

**Informations destinées aux opérateurs**

Si vous êtes opérateur de ChemStore C/S Agilent et si vous souhaitez en savoir plus sur le fonctionnement détaillé de ChemStore C/S Agilent, lisez les Chapitre 2, Chapitre 3 et Chapitre 4.

### 2 Concepts de ChemStore C/S

Ce chapitre expose les concepts d'utilisation de la base de données ChemStore C/S dans le laboratoire analytique et indique comment en exploiter les avantages principaux.

### 3 Utilisation du calculateur personnalisé

Ce chapitre donne une vue d'ensemble de la création et de l'utilisation des modèles de calcul.

### 4 Utilisation de l'éditeur de modèle de rapport

Ce chapitre donne une vue d'ensemble de la création et de l'utilisation des modèles de rapports.

**Informations destinées aux administrateurs**

Si vous êtes administrateur du système ChemStore C/S Agilent et que vous voulez apprendre à préparer et à configurer ChemStore C/S Agilent afin qu'il réponde aux attentes des différents laboratoires et utilisateurs, lisez le Chapitre 5 et le Chapitre 6.

### 5 Sécurité des données

Ce chapitre décrit les différentes fonctions de ChemStore C/S destinées à assurer la sécurité des données de la base.

## 6 Gestion des données

Ce chapitre décrit la gestion de votre base de données à l'aide des fonctions de sauvegarde, de restauration et d'archivage des données.

## 7 Calculs ChemStore C/S

ChemStore C/S Agilent dispose de toute une série de calculs statistiques. Vous trouverez tous les détails sur la manière dont ces calculs sont effectués dans ce chapitre. Il décrit les calculs statistiques, les commandes et codes d'erreur du calculateur personnalisé, les calculs à l'aide de champs personnalisés et les calculs de temps effectués par ChemStore C/S.

# Sommaire


1 Présentation du logiciel ChemStore C/S

ChemStations et ChemStore C/S 12

Présentation rapide de ChemStore C/S 13

2 Concepts de ChemStore C/S

Organigramme des tâches ChemStore C/S 20

Organigramme des flux de données dans ChemStore C/S 21

Organisation des résultats 22

- Regroupement des résultats dans une Etude 22
- Utilisation des champs personnalisés 23

Transfert de données depuis la ChemStation 26

Extraction des données de la base 27

- Définition d'une requête 28
- Filtrage des ensembles de données 31

Revue et approbation des résultats 33

- Etat d'approbation des analyses 34

Interface utilisateur graphique 38

- Vue Sample (Echantillons) 41
- Vue des composés 46
- Configuration des tables 50
- Calculs intra-échantillon 51
- Statistiques 51
- Elaboration des graphiques de contrôle 52
- Réglages de l'interface utilisateur 53

Transfert des données vers la ChemStation 55

Numéros de version 56

Suppression d'analyses de la base de données 58

3 Utilisation du calculateur personnalisé

Qu'est-ce que le calculateur personnalisé ? 60

Préparation à l'utilisation de l'éditeur de script du calculateur personnalisé 61

Recherche du jeu de données de calcul 61

Compréhension des vues de l'éditeur de script du calculateur personnalisé 61

Editeur de script du calculateur personnalisé 64

Pour comprendre les assistants de script de calcul personnalisé 64

Exemple : Création d'un script de calcul de rapport 72

Utilisation de l'éditeur de script du calculateur personnalisé 83

4 Utilisation de l'éditeur de modèle de rapport

Présentation de l'éditeur de modèle de rapport 92

Préparation de l'utilisation de l'éditeur 94

Extraction des données de rapport 94

Arborescences de l'éditeur de modèle de rapport 95

Utilisation de l'éditeur de modèle de rapport 97

Création des sections de rapport à l'aide de boîtes de dialogue 97

Arborescences pour des tableaux et des graphiques 99

Composants du modèle de rapport 100
En-têtes et pieds de pages 100
Sections de données 101
En-têtes de sections 104
Eléments de sections 104

Tableaux 110
Regroupements et récapitulatifs de tableaux 110
Types de tableaux 112
Création d'un rapport à l'aide d'un modèle 125
Utilisation des rapports automatiques 125

5 Sécurité des données

Introduction 128
Sécurité 129

Définition et gestion des utilisateurs 131

Définition des informations organisationnelles 135
Configuration et gestion des études 135
Configuration et gestion des champs personnalisés 136

Configuration et gestion des éléments ChemStore C/S 138

Archivage et restauration 139
Archivage automatisé 139
Archivage interactif 143
Archive Units (Unités d'archivage) 145
Suppression d'analyses 147
Réouverture d'analyses 147
Restauration des analyses 148
Interface d'archivage XML générique 148
Etats d'archivage 150
Revue des états et rapports d'archivage 152
Etude détaillée d'un exemple de cycle d'archivage/restauration 154

Gestion de l'archivage et de la restauration sur Admin Client 156
Présentation du processus d'archivage et de suppression 157
Exécution des tâches d'archivage/restauration sur Admin Client 158
Journal d'audit 160
Notification par e-mail 162
Journal de la base de données 165
Validation et sécurité des fichiers imprimés 166
Validation de fichiers en fonctionnement 166
Fonctions de validation des fichiers 167
Remplacement de la procédure de sécurité intégrée par une procédure personnalisée 167

6 Gestion des données

Sauvegarde de votre base de données 170
Sauvegarde ou archivage ? 171
Sauvegarde de la version autonome 172
Sauvegarde Windows 2000/XP 173
Automatisation et programmation de la sauvegarde Windows 2000/XP 173
Lecteurs de bandes 174
CD-ROM 175
Sauvegarde de la version client/serveur 176
Types de sauvegarde Oracle 176
Maintenance de l'ordinateur ChemStation 178
Nettoyage des fichiers temporaires subsistants 178
Maintenance du système de fichiers de l'ordinateur 179
Fonctionnement en continu 180

Plan de récupération après incident 181
Panne de disque dur 181
Panne de courant 181
La base de données est endommagée 182

7 Calculs ChemStore C/S

Calculs statistiques 184
Calculs de valeurs simples 184
Calculs de régressions 185
Modèle de régression linéaire 186
Solution matricielle de la régression 186
Valeurs statistiques et associées 187
Modification de la régression linéaire pondérée 188
Modification des fonctions non linéaires 190

Commandes du calculateur personnalisé 191
Codes d'erreur et description 200

Calculs faisant appel aux champs personnalisés 205
Facteur de réponse original 205
Liste des fonctions intégrées 206

Calcul de temps 208
Synchronisation du temps 208
Horodatage 208
Fuseaux horaires 209
Configuration du fuseau horaire sur le PC 210

Index 211

# Sommaire

# 1
# Présentation du logiciel ChemStore C/S

ChemStations et ChemStore C/S 12
Présentation rapide de ChemStore C/S 13

# ChemStations et ChemStore C/S

ChemStore C/S est un module d'évaluation et de stockage de données qui vient s'ajouter à votre ChemStation pour les systèmes CPL, CPL/SM, CPG, EC, EC/SM ou A/N. A partir de fonctions de base de données standard, ChemStore C/S ajoute des fonctions de stockage et d'extraction dans une base de données relationnelle et permet l'élaboration de rapports et de calculs de révision inter-échantillons et inter-instruments.

Dès que l'installation est terminée, il suffit de cocher la case Connection to Database (Connexion à la base de données), pour que ChemStore C/S mette à disposition ces fonctionnalités nouvelles sur votre ChemStation. Ce module exploite une session spécifique sur la ChemStation et ajoute à l'interface utilisateur les fonctionnalités permettant de transférer les résultats des analyses vers la base de données, de les réexaminer et de les mettre à disposition de la ChemStation pour effectuer une revue de lots, les retraiter, etc.

L'interface du logiciel ChemStore C/S client est installée comme une application séparée. Elle permet d'extraire les informations d'une base de données ChemStore C/S à l'aide de requêtes et de créer des calculs inter-échantillons, des rapports et des graphiques.

ChemStore C/S est disponible soit en version autonome fonctionnant sur une seule ChemStation, soit en version client/serveur. La version autonome repose sur une base de données Microsoft Access installée sur une ChemStation unique. La version client/serveur utilise une base de données Oracle installée sur un serveur Microsoft Windows ou Unix. Les deux versions procurent un espace de stockage centralisé des données brutes et des résultats ainsi que des métadonnées (fichiers de méthode et de séquence) utilisées pour obtenir ces résultats.

Dans les deux cas, le logiciel ChemStore C/S client et la base de données communiquent au travers d'un pilote ODBC (Open DataBase Connectivity) standard. Le logiciel ChemStore C/S client est identique pour les deux configurations ; la version client/serveur possède des fonctions supplémentaires pour l'archivage et la restauration. Les deux versions assurent la traçabilité des analyses et des traitements successifs en conservant la version actuelle et les versions précédentes dans un ordre strictement chronologique et disposent de fonctions de maintien de l'intégrité des données en liant les données brutes aux méthodes et aux séquences.

# Présentation rapide de ChemStore C/S

ChemStore C/S est un module de base de données qui vient s'ajouter à votre ChemStation pour les systèmes CPL, CPL/SM, CPG, EC et A/N.

Il apporte les fonctionnalités suivantes :

### Organisation des données

ChemStore C/S est conçu pour organiser vos données de manière souple et efficace dans une base de données. Vous pouvez définir des Etudes (Studies) dans lesquelles vous pouvez regrouper toutes les analyses se rapportant à un projet spécifique. Les études peuvent n'être rendues accessibles qu'à certains utilisateurs pour assurer la sécurité des données et faciliter l'utilisation. ChemStore C/S permet en outre de spécifier des champs personnalisés dans lesquels vous pouvez intégrer des données ainsi que des informations de structure supplémentaires ayant un rapport avec l'analyse ou l'étude.

### Transfert des résultats

Le logiciel ChemStore C/S est étroitement intégré au logiciel de votre ChemStation. Après avoir analysé vos résultats, vous pouvez aisément transférer l'information d'une simple analyse, d'une séquence ou d'un lot de manière automatique ou interactive vers ChemStore C/S. Les informations transférées peuvent également comprendre les chromatogrammes et les spectres, les données brutes réelles, ainsi que les informations contenues dans les méthodes et les séquences.

### Extraction des ensembles de données

Une fois que vous avez enregistré les données dans la base, vous pouvez extraire les données qui vous intéressent au moyen du générateur de requêtes (Query Builder) pour spécifier facilement les critères de recherche. Grâce à son interface graphique, le générateur de requêtes vous permet d'élaborer des requêtes plus facilement qu'avec une instruction SQL (Structured Query Language) complexe.

Pour faciliter votre travail, vous pouvez également enregistrer ces requêtes pour les réutiliser ultérieurement.

Une fois que vous avez spécifié les groupes de données que vous voulez extraire, ce qui constitue la requête ( query ), vous pouvez travailler sur ces données : révision et approbation, calculs inter-échantillons, graphique de contrôle, transfert vers une ChemStation pour un retraitement par lots et création de rapports. Vous pouvez aussi exporter les données vers d'autres applications (par exemple, Microsoft Excel) ou un système de gestion de laboratoire (LIMS).

### Revue et approbation des données

La revue en ligne des données extraites au moyen d'une requête vous permet d'examiner un groupe de résultats d'analyses dans leur contexte. A partir de cette information condensée, vous pouvez utiliser les fonctions d'approbation ou de rejet et également marquer des analyses pour effectuer un retraitement par lots sur ChemStation et affiner ainsi votre examen. La fonction d'approbation permet d'utiliser jusqu'à trois signatures électroniques par version de résultat.

### Suivi des modifications

Un journal d'audit indépendant des données d'analyse permet de conserver la trace de toutes les modifications effectuées sur les analyses ; vous pouvez afficher ou imprimer un journal d'audit avec les détails des modifications effectuées sur n'importe quelle analyse.

### Elaboration des graphiques de contrôle

Pour visualiser les tendances dans les groupes de résultats sélectionnés, vous pouvez utiliser le module de graphiques de contrôle. Vous pouvez examiner n'importe quelle combinaison de résultats avec son contexte et des graphiques superposés si nécessaire. Vous pouvez également personnaliser les graphiques selon vos besoins.

### Exécution de calculs personnalisés

Un calculateur personnalisé intégré permet de définir vos propres calculs et statistiques inter-échantillons. Le calcul se base sur un script de calcul qui peut être développé facilement à l'aide d'assistants de script de calcul.

L'enregistrement de ces scripts leur attribue un numéro de version. Ils peuvent être réutilisés pour des jeux de données comparables. Les résultats et graphiques de calculs peuvent être inclus dans des rapports.

### Création de rapports

Après extraction et approbation de vos données, vous souhaiterez probablement créer un rapport. Un bouton de la barre d'outils principale permet de créer rapidement un rapport basé sur l'un des modèles standard. Les rapports peuvent être imprimés ou enregistrés dans un fichier dans l'un des formats disponibles.

### Personnalisation des rapports

Si les modèles standard de rapport fournis avec ChemStore C/S ne correspondent pas exactement à vos besoins, vous pouvez les modifier facilement à l'aide de l'éditeur de modèles de rapports. Vous pouvez également utiliser l'éditeur de modèles de rapports pour créer vos propres modèles. Le rapport peut inclure quasiment toutes les données visibles dans ChemStore ainsi que des données supplémentaires obtenues par des calculs définis par l'utilisateur.

### Exportation des données vers d'autres applications

Pour aller plus loin dans le traitement de données, ChemStore C/S vous permet d'exporter des données vers Microsoft Excel ou de les imprimer dans un fichier au format html, xml ou csv. Vous pouvez également exporter les données vers le Presse-papiers pour les reprendre dans d'autres applications Windows.

### Archivage et restauration des analyses

La version client/serveur vous permet également de copier les données dans une archive et, si vous le souhaitez, de supprimer de la base les analyses archivées. Les analyses archivées, qui ne sont pas supprimées de la base, sont verrouillées et ne peuvent être modifiées, à moins d'être réouvertes. Il est toujours possible de restaurer et de rouvrir les analyses archivées supprimées de la base.

L'archivage permet de séparer le stockage à long terme des données du serveur de base de données. La limitation des analyses actives dans la base de données est cruciale pour maintenir la taille et les performances de cette base de données.

L'archivage peut être effectué de façon interactive ou à la demande ; il est aussi possible de configurer un archivage automatique à intervalles réguliers. Vous pouvez faire appel à l'utilitaire d'archivage interne de ChemStore ou à un outil d'archivage XML d'autres fournisseurs. Un utilitaire d'archivage XML générique est proposé sur le CD d'installation. Pour plus de détails, prenez contact avec votre interlocuteur Agilent.

### Protection et intégrité des données

Pour empêcher les accès non autorisés à la base de données ou la manipulation des résultats, chaque utilisateur ChemStore C/S reçoit un mot de passe et des droits d'accès définissant les fonctionnalités qu'il pourra utiliser. Seul l'administrateur (ou un autre utilisateur doté des droits d'accès suffisants) peut modifier les droits d'accès des autres utilisateurs. Si un accès non autorisé conduit au verrouillage d'un compte, ChemStore peut être configuré pour avertir tous les utilisateurs concernés par e-mail.

Chaque analyse enregistrée dans la base de données est associée à un journal d'audit permettant l'analyse rétrospective de toutes les modifications effectuées. En outre, un système intégré de gestion des versions permet de garantir que les injections qui sont retraitées plusieurs fois seront regroupées dans ChemStore C/S et pourront être extraites dans un ordre strictement chronologique. Vous pouvez choisir d'extraire toutes les versions (c'est-à-dire l'ensemble complet des données retraitées) ou bien de restreindre l'extraction à la dernière version. Si vous optez pour la première solution, vous pouvez choisir d'afficher seulement la dernière version. Quand une analyse est présente en plus d'une version dans la base, elle apparaît annotée d'un astérisque*.

En outre, toutes les interactions de base de données ayant une incidence sur la sécurité des données sont consignées dans un journal que vous pouvez afficher si vous disposez du droit d'accès suffisant.

### Extensibilité

La base de données grandit au fur et à mesure de vos besoins. Vous pouvez démarrer avec un système autonome reposant sur une base de données Microsoft Access et effectuer ensuite une mise à niveau vers la version client/serveur reposant sur Oracle si vous ajoutez d'autres systèmes. Une série d'utilitaires vous permet de réaliser la migration de votre base autonome vers la version client/serveur qui présente le double avantage supplémentaire de pouvoir archiver/restaurer les données et de travailler avec des bases de données de beaucoup plus grande taille. Le système évolue avec vos besoins en ce qui concerne l'organisation des données et les rapports, tout en préservant votre investissement en matière de stockage et de formation car l'interface utilisateur reste inchangée.

# 1 Présentation du logiciel ChemStore C/S

## Présentation rapide de ChemStore C/S

# 2
# Concepts de ChemStore C/S

Organigramme des tâches ChemStore C/S 20
Organigramme des flux de données dans ChemStore C/S 21
Organisation des résultats 22
Transfert de données depuis la ChemStation 26
Extraction des données de la base 27
Revue et approbation des résultats 33
Interface utilisateur graphique 38
Transfert des données vers la ChemStation 55
Numéros de version 56
Suppression d'analyses de la base de données 58

# Organigramme des tâches ChemStore C/S

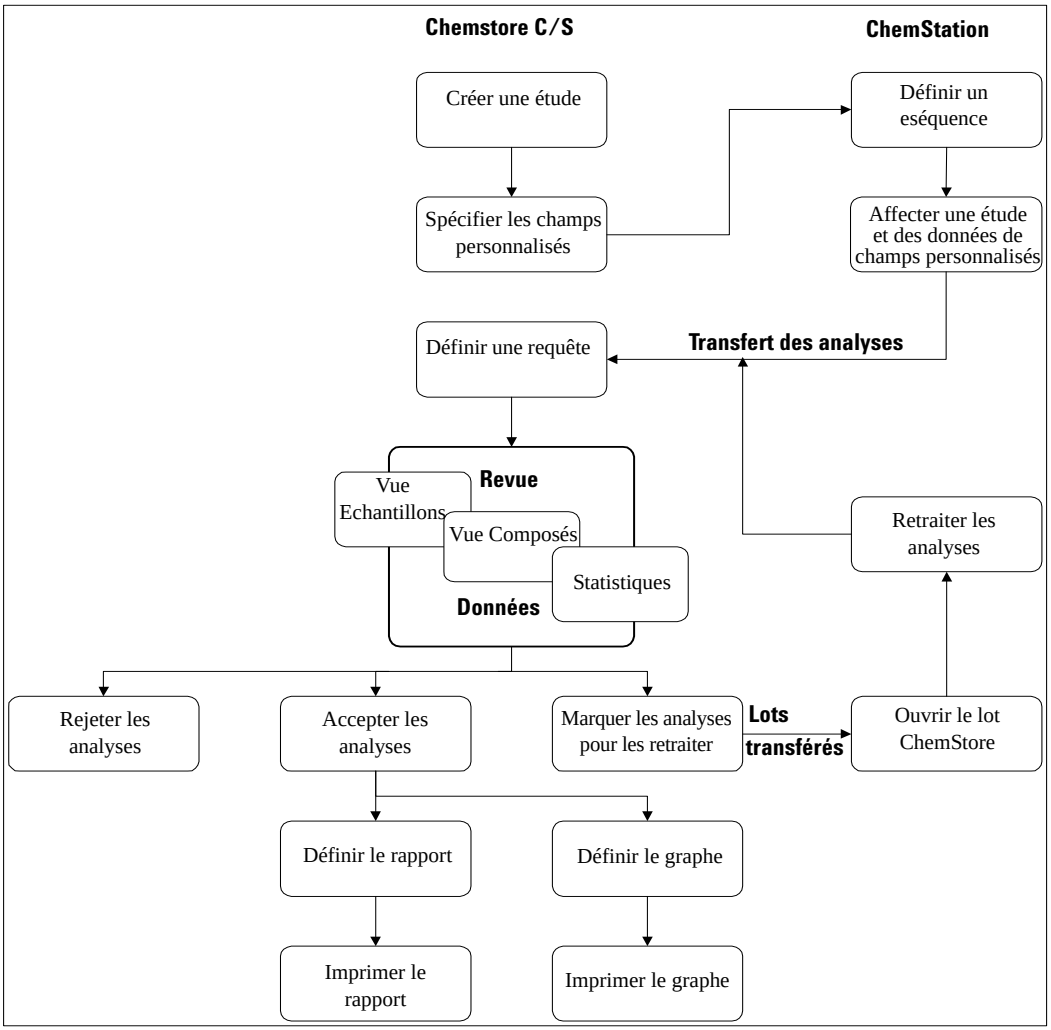



**Figure 1** Organigramme de fonctionnement type de ChemStore C/S

# Organigramme des flux de données dans ChemStore C/S

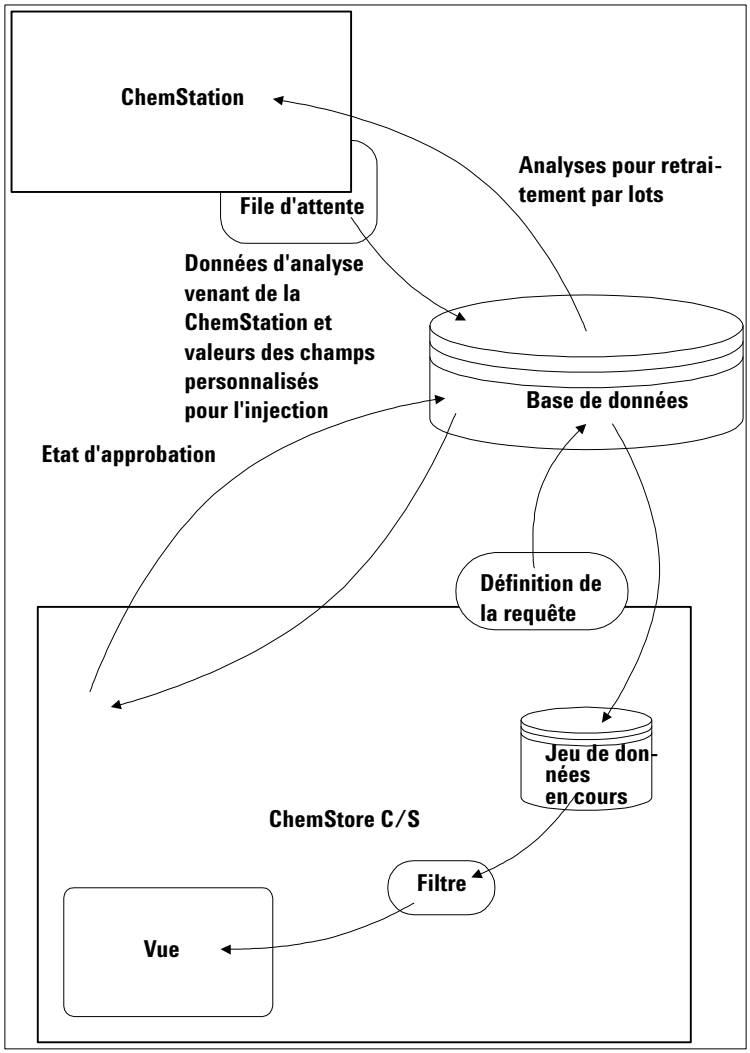



**Figure 2** Organigramme des flux de données dans ChemStore C/S

# Organisation des résultats

L'élément central de l'organisation de ChemStore C/S est l'analyse. Une analyse est définie comme un groupe de résultats obtenus à partir d'une méthode de traitement des données brutes acquises sur une seule injection. Quand une analyse est insérée dans la base de données ChemStore C/S, toutes les informations associées sont enregistrées avec (injection, échantillon etc). C'est la seule méthode pour insérer des données dans la base.

## Regroupement des résultats dans une Etude

Dans la base de données de ChemStore C/S, les analyses peuvent être regroupées logiquement en fonction d'un objectif déterminé. Par exemple, il peut être intéressant de regrouper tous les résultats d'analyses relatifs à un essai clinique ou à une étude de stabilité. Un tel regroupement d'analyses est appelé Etude (Study) ; un utilisateur ayant les droits d'accès nécessaires (voir « Sécurité » page 129), peut définir autant d'études qu'il le désire, pour autant que chacune d'elles soit identifiée par un nom unique. Quand les résultats sont transférés de la ChemStation à ChemStore C/S, les analyses individuelles (ou les groupes d'analyses) sont affectées à une étude ; elles viennent s'ajouter à des analyses déjà affectées à cette étude ; l'ensemble constitue alors un tout logique pour l'extraction de données.

Vous pouvez choisir d'enregistrer des données supplémentaires avec les résultats comme les chromatogrammes ou les spectres. Vous pouvez aussi, si vous le souhaitez, enregistrer les données brutes non traitées, les fichiers de méthodes et de séquences, ce qui garantit la conservation intégrale des données.

Pour faciliter l'organisation des résultats et l'élaboration des rapports, vous pouvez associer à une étude un ensemble de champs personnalisés (voir « Utilisation des champs personnalisés » page 23). Ces champs personnalisés peuvent être soit propres à l'étude, soit partagés avec d'autres études. Chaque fois que vous spécifiez un nouveau champ personnalisé pour une étude, il devient automatiquement disponible pour les autres.

Quand vous définissez une étude qui utilise un champ personnalisé, vous devez également spécifier comment les données du champ personnalisé devront être saisies. Vous pouvez choisir de les entrer automatiquement (avec une macro ChemStation) ou manuellement. Si vous choisissez de saisir les données manuellement, vous pouvez spécifier si la saisie d'une valeur est obligatoire ; dans le cas contraire, il faut spécifier une valeur par défaut. Si vous indiquez qu'une valeur est obligatoire, il est nécessaire de valider la saisie avant que le transfert des résultats analytiques vers ChemStore C/S soit autorisé. Vous pouvez en outre spécifier certaines caractéristiques de certains types de champs (valeurs maximales et minimales pour des champs numériques, nombre maximal de caractères pour un champ texte). Les caractéristiques de la saisie de données sont spécifiques à l'étude ; si le champ personnalisé est utilisé dans une autre étude, ses caractéristiques de saisie peuvent être différentes.

L'accès aux études est restreint à une liste d'utilisateurs. Seuls les utilisateurs qui se sont vu attribuer le droit de travailler sur une étude peuvent accéder à ses données ou en ajouter. Ceci permet à plusieurs équipes d'utiliser une même base de données en garantissant la sécurité des données de leurs études vis-à-vis de ceux qui ne sont pas autorisés à y accéder. La restriction de l'accès aux études facilite aussi l'utilisation du produit car l'utilisateur ne voit que les données des études auxquelles il est autorisé à accéder. L'attribution d'études aux utilisateurs est réservée à un administrateur ou à un utilisateur disposant des autorisations ChemStore nécessaires.

## Utilisation des champs personnalisés

En plus des données normalement associées aux résultats d'analyses fournis par la ChemStation, des données externes peuvent être ajoutées à chaque enregistrement de la base. Ces données sont ajoutées sous forme de Champs personnalisés (Custom Fields) ; ces champs sont définis par l'utilisateur et peuvent contenir des données de n'importe quel type. Vous pouvez utiliser ce type de champ pour organiser les résultats en définissant les champs personnalisés pour qu'ils correspondent aux types d'analyses que vous effectuez normalement.

Voici un exemple pour une pré-étude clinique : vous voulez spécifier des champs complémentaires d'information pour chaque groupe d'analyse ; il peut s'agir des éléments suivants :

- Valeur du pH
- Nom du patient
- Age du patient
- Non-fumeur
- Date du test
- Sexe du patient
- Posologie
- etc.

Vous pouvez alors utiliser ces données pour extraire un ensemble particulier de résultats analytiques, par exemple tous les résultats concernant un patient donné.

Les champs personnalisés sont de six types :

| | |
|---|---|
| **True/False (Vrai/Faux)** | Ce type de champ peut prendre seulement la valeur « vrai » ou « faux » ; dans l'exemple, la variable non-fumeur pourra être de ce type. |
| **Liste de sélection** | Les seules valeurs possibles sont celles d'une liste définie par l'utilisateur ; dans l'exemple, le sexe du patient pourra être choisi entre Male (masculin) ou Female (féminin). |
| **Entier** | Ce champ peut prendre seulement une valeur entière ; dans l'exemple, l'âge du patient pourra être donné sous la forme d'un entier. |
| **Réel** | Ce type de champ peut contenir n'importe quelle valeur numérique ; dans l'exemple, la posologie utilisée pourra être un nombre réel (non entier). |
| **Texte** | Ce type de champ ne peut contenir que du texte ; dans l'exemple, le nom du patient pourra être un champ de ce type. |
| **Date/Heure** | Ce type de champ ne peut contenir qu'une information date et heure ; dans l'exemple, la date du test pourra être de ce type. |

L'organisation des informations d'une base de données est utile non seulement pour conserver les résultats des analyses dans un emplacement de stockage centralisé, mais aussi pour augmenter la souplesse de création de rapports inter-échantillons ou inter-instruments, les calculs et analyses de tendance sur un ensemble de résultats.

En suivant l'exemple de la structure ébauchée ci-dessus, vous pourriez, par exemple, comparer les résultats pour certaines posologies et construire un graphique de contrôle à partir des concentrations calculées pour le composé actif.

Les champs personnalisés sont disponibles pour l'ensemble de la base de données, c'est-à-dire qu'un champ personnalisé peut être ajouté à n'importe quelle étude dès qu'il a été défini. Les champs personnalisés peuvent posséder deux états, **activé** ou **désactivé** ; lorsqu'un champ personnalisé est désactivé, cela n'a aucun effet sur les études qui l'utilisent, il devient simplement indisponible pour les études ultérieures.

Les champs personnalisés utilisés dans une étude peuvent être configurés comme « toujours requis ». Il est obligatoire d'entrer des valeurs correctes dans ce type de champ pour que le transfert des résultats de l'analyse vers ChemStore C/S puisse avoir lieu.

Les champs personnalisés sont protégés par des droits d'accès et des mots de passe (voir « Sécurité » page 129). Seuls les utilisateurs disposant des droits d'accès appropriés peuvent créer ou modifier les champs personnalisés, les modifications doivent être confirmées par une signature électronique

# Transfert de données depuis la ChemStation

Les résultats des analyses peuvent être transférés de la ChemStation à ChemStore C/S de manière interactive ou automatique dans le cadre d'une séquence, pour un lot d'échantillons ou un échantillon unique. Après l'analyse, les données sont transférées dans la base de données par un gestionnaire de transfert ; ce gestionnaire enregistre les données et travaille en arrière-plan, ce qui permet de libérer la ChemStation. Ce processus garantit que la ChemStation ne sera pas ralentie par le processus de transfert et protège des pertes de données, en cas d'erreur d'insertion dans la base.

Le transfert interactif des données se fait à partir de la vue Data Analysis (Traitement des données) de la ChemStation, soit fichier par fichier en retraitant une séquence, soit avec l'utilitaire de revue de lots. Vous pouvez transférer le fichier de données en cours vers toute étude active qui vous est attribuée. Les valeurs requises pour les champs personnalisés sont saisies au moment du transfert. A cet instant, il est aussi possible de changer les valeurs par défaut des champs personnalisés qui en ont reçu une lors de leur définition.

Le transfert automatique des données s'effectue soit à partir d'une séquence, soit à partir d'un lot. Chaque analyse de la séquence ou du lot est affectée à une étude (il est possible d'utiliser plusieurs études pour affecter chaque analyse à une étude différente) ; vous fournissez les valeurs des champs personnalisés associés à l'étude au cours de la préparation de la séquence ou au moment du traitement par lots.

**REMARQUE** Que le transfert soit interactif ou automatique, vous devez fournir des valeurs pour tous les champs personnalisés *obligatoires* avant que le transfert des données puisse avoir lieu. Les en-têtes de ces champs sont marqués d'un astérisque *.

Toutes les données sélectionnées pour être enregistrées avec les résultats (chromatogrammes, spectres ou données brutes, fichiers de méthode et de séquences) sont transférées en même temps que les résultats de traitement.

# Extraction des données de la base

ChemStore C/S extrait les données de la base au moyen d'une Requête (Query) (voir « Définition d'une requête » page 28). Une requête est une demande d'extraction d'un groupe d'analyses, parmi les dizaines de milliers que peut contenir votre base de données, selon certains critères ; un exemple de critère pourrait être « tous les échantillons qui contiennent de la Procaïne ». Plus le ou les critères spécifiés sont contraignants et plus le nombre d'analyses extraites sera petit. Avant d'extraire le groupe d'analyses, Chemstore C/S confirme le nombre d'analyses conformes aux critères de la requête.

Les données conformes aux critères définis dans la requête sont rassemblées et copiées par ChemStore C/S sous la forme d'un ensemble de données – un instantané des données que vous voulez examiner (voir la Figure 2 page 21).

La manière dont les données enregistrées dans la base sont organisées ainsi que la nature des informations enregistrées avec chaque analyse peuvent permettre d'augmenter considérablement l'efficacité de l'extraction des données. L'affectation des analyses à des études conçues d'après le mode d'organisation du laboratoire peut conduire à une extraction optimisée des résultats d'analyses. La mise en œuvre d'un jeu de champs personnalisés structuré en fonction de vos besoins d'extraction se révèle très efficace.

Par exemple, si vous regroupez normalement les résultats par participant au test, vous pouvez définir un champ personnalisé « participant au test ». Le champ personnalisé peut alors être utilisé avec d'autres critères d'extraction, comme le nom de l'opérateur ou de l'instrument, qui sont enregistrés par défaut dans la base de données.

## Définition d'une requête

ChemStore C/S comporte deux niveaux de requête : Simple (Simple) et Advanced (Avancé). Les deux niveaux bénéficient d'un assistant graphique qui vous aide à préciser les critères de recherche sans qu'il soit besoin d'apprendre le langage SQL (Structured Query Language), le langage structuré standard, permettant de spécifier des critères de recherche dans les bases de données relationnelles. L'éditeur graphique permet de sélectionner les catégories de données qui vous intéressent et de choisir soit des données existantes, soit des données entrées manuellement. Une sélection d'études permet de limiter le nombre des données affichées dans la boîte de dialogue. La requête la plus simple utilise un seul élément d'une seule catégorie de données, (par exemple « extraire les échantillons de l'étude nommée Beta1 » où « étude » représente la catégorie des données et « Beta1 » est l'élément). Si la requête la plus simple ne permet pas d'extraire les données que vous recherchez, vous pouvez développer la requête pour sélectionner soit plusieurs éléments, soit plusieurs catégories. Si vous sélectionnez plusieurs éléments d'une même catégorie de données, ils sont combinés dans la requête simple par un OR (OU) logique (par exemple « extraire les échantillons de l'étude Beta1 OU Beta2 »). Si vous sélectionnez plusieurs catégories de données, elles sont combinées dans la requête simple par un AND (ET) logique (par exemple « extraire les échantillons qui contiennent de la procaïne AND (ET) qui sont des échantillons de contrôle »). La requête avancée permet d'étendre les spécifications en utilisant d'autres opérateurs logiques tels que OR (OU), NOT (NE PAS), et également de spécifier des plages de valeurs (par exemple « extraire les échantillons qui contiennent de la procaïne ET qui NE sont PAS des échantillons de contrôle »).

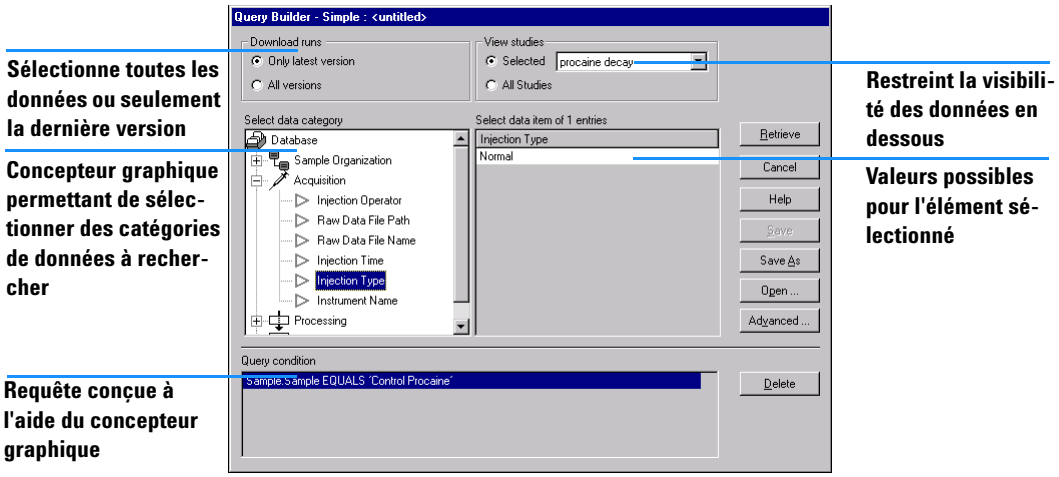



**Figure 3** Générateur de requêtes

ChemStore C/S dispose de deux types de générateurs de requêtes :

- La forme simple (voir ci-dessus la Figure 3) permet de formuler une requête en sélectionnant les éléments de données et leurs valeurs à l'aide de l'interface graphique. Les divers critères sont reliés par un ET logique qui permet donc de retrouver les analyses qui répondent à toutes les conditions.
- La forme évoluée utilise la même interface graphique mais ajoute la possibilité d'étendre le critère à l'aide de clauses Where absolues et relatives, l'opérateur OR et la négation. La disponibilité de la clause Where (où) dépend du type de données, conformément aux indications de la Figure 1 page 20.

**Tableau 1** Clauses Where dans le générateur de requêtes avancé

| | Numérique | Date/Heure | Texte | Liste de sélection |
|---|---|---|---|---|
| is equal (Est égal) | Oui | Oui | Oui | Oui |
| is greater than (Est supérieur à) | Oui | Oui | | |
| is less than (Est inférieur à) | Oui | Oui | | |
| is between (Est compris entre) | Oui | Oui | | |

**Tableau 1** Clauses Where dans le générateur de requêtes avancé (suite)

| | Numérique | Date/Heure | Texte | Liste de sélection |
|---|---|---|---|---|
| contains (Contient) | | | Oui | |
| clause relative | | not older than (pas plus ancien que) | | utilisateur actuellement connecté, ordinateur actuel, |

L'opérateur NOT (NE PAS) permet de mettre ces critères à la forme négative : is not equal (n'est pas égal), is not greater than (n'est pas supérieur à), is not less than (n'est pas inférieur à), is not between (n'est pas compris entre) et does not contain (ne contient pas).

Une fois la requête formulée, les données sont extraites et disponibles pour toutes les tâches ultérieures :

- revue à l'écran et approbation ;
- calculs personnalisés ;
- élaboration des graphiques de contrôle ;
- élaboration des rapports.

Comme les mêmes requêtes sont généralement utilisées plusieurs fois, elles peuvent être enregistrées pour être réexécutées ultérieurement.

Les requêtes sont des éléments de ChemStore C/S pouvant être partagés entre plusieurs utilisateurs définis. Lorsqu'une requête a été spécifiée et enregistrée, elle peut aussi être affectée aux autres utilisateurs. Les requêtes sont aussi protégées contre l'utilisation abusive des droits d'accès (voir « Sécurité » page 129) ; seuls les utilisateurs possédant les droits d'accès nécessaires sont autorisés à enregistrer les requêtes et à les affecter à d'autres utilisateurs.

## Filtrage des ensembles de données

Il arrive fréquemment que l'ensemble des données extraites par une requête contienne des analyses non nécessaires pour produire un graphique de contrôle ou un rapport déterminé. Dans de tels cas, il est possible d'utiliser un filtre pour extraire les analyses nécessaires et masquer les informations inutiles. Par exemple, une requête peut extraire 50 analyses effectuées par deux opérateurs différents ; vous pouvez alors appliquer un filtre qui prend en compte les résultats de l'un des deux opérateurs seulement. Le filtre n'opère que sur le jeu de données extraites (et pas sur la base de données complète), mais il ne change pas le contenu du jeu de données. L'utilisation d'un filtre permet aussi d'accélérer les opérations.

Deux filtres sont disponibles :

- Un filtre personnalisé peut être spécifié à l'aide d'un assistant comparable à celui utilisé pour la requête ; ce filtre peut être appliqué au jeu de données selon des critères semblables à ceux des requêtes (voir la Figure 4). Les critères de recherche disponibles sont les colonnes configurées dans la table des résultats.
- Le filtre standard contient un jeu de filtres prédéfinis choisis en raison de leur fréquence d'utilisation. Les critères disponibles sont l'état d'approbation, l'état d'archivage et la version d'analyse (voir la Figure 5 page 32). Le filtre de version d'analyse est utile si vous avez choisi d'extraire toutes les versions d'une analyse mais que, par exemple, vous souhaitez consulter les résultats de la dernière version seulement.

Si un filtre standard et un filtre personnalisé sont appliqués simultanément, les critères sont combinés au moyen d'un opérateur ET.

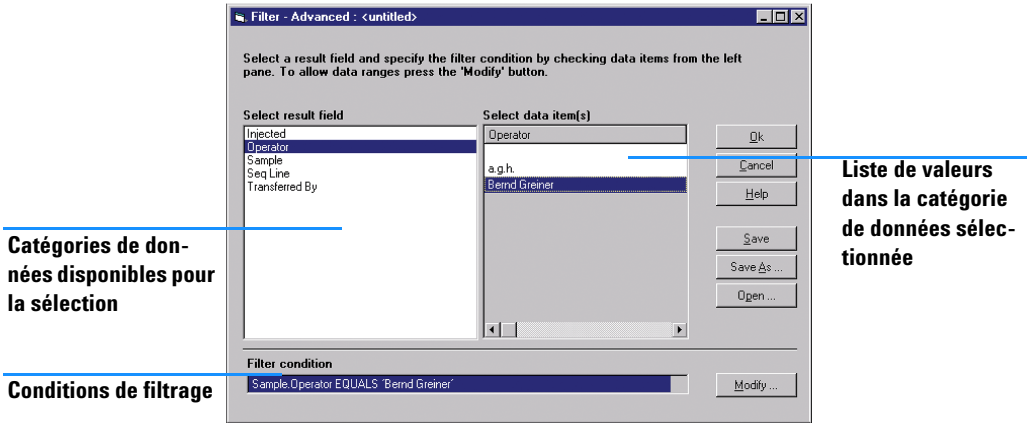



**Figure 4** Assistant graphique de création de filtres

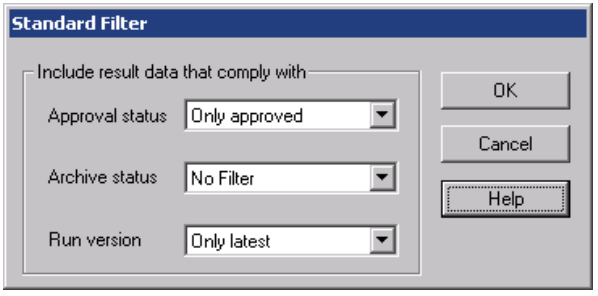



**Figure 5** Rubriques de sélection des filtres standard

Les filtres sont disponibles sous deux états :

- Filter state (état du filtre normal) affiche seulement les analyses qui remplissent les conditions, celles qui ne remplissent pas les conditions sont masquées.
- Complement Filter state (état du filtre complémentaire) affiche seulement les analyses qui ne remplissent *pas* les conditions, celles qui les remplissent sont masquées.

Les deux états de filtre sont définis de manière similaire et chaque état peut être activé ou désactivé. Vous pouvez passer du filtre normal au filtre complémentaire pour afficher les deux jeux d'analyses complémentaires formant le jeu de données.

Comme les requêtes, les filtres personnalisés font partie des paramètres ChemStore C/S pouvant être partagés entre plusieurs utilisateurs définis. Lorsqu'un filtre personnalisé a été spécifié et enregistré, il peut aussi être affecté aux autres utilisateurs. Les filtres personnalisés sont aussi protégés contre l'utilisation abusive des droits d'accès (voir « Sécurité » page 129) ; seuls les utilisateurs possédant les droits d'accès nécessaires sont autorisés à enregistrer les spécifications de filtre et à les affecter à d'autres utilisateurs.

# Revue et approbation des résultats

ChemStore C/S est conçu pour revoir les résultats d'analyses dans leur contexte. La fonction Batch Review (revue de lots) de la ChemStation est un outil idéal pour revoir et transférer les données depuis la ChemStation vers la base de données ChemStore C/S.

Une fois les résultats dans la base de données, vous pouvez les regrouper et les revoir dans leur contexte. Lorsque vous avez extrait les données dont vous avez besoin au moyen d'une requête et que, si nécessaire, vous les avez filtrées pour obtenir un sous-ensemble de l'extraction, vous pouvez afficher les résultats des analyses conformes à ces critères en les classant soit par échantillon (revue d'échantillons - sample review) soit par composé (revue de composés - compound review).

## Etat d'approbation des analyses

Lors du transfert d'une analyse de la ChemStation vers ChemStoreC/S, elle reçoit l'état d'approbation Approval Pending (Attente d'approbation). Selon la configuration de l'étude, toutes les analyses de cette étude pourraient faire l'objet d'une approbation et d'une signature électronique par un ou plusieurs approbateurs de 1er niveau et un ou deux approbateurs de 2ème niveau. L'approbation peut aussi être refusée par l'option « Reject » (Rejet). Un rejet par un utilisateur a priorité sur l'approbation des autres approbateurs.

Les droits des utilisateurs pour les 1er et 2ème niveau d'approbation (voir « Sécurité » page 129) peuvent être attribués individuellement. Les deux approbations de 2ème niveaux sont équivalentes pour ce qui est de l'ordre d'exécution. Une approbation de 2ème niveau peut aussi être effectuée sur des analyses sans approbation de 1er niveau.

Un utilisateur doté des droits d'accès nécessaires peut approuver ou rejeter les analyses, individuellement ou par groupes entiers. La procédure d'approbation ou de rejet est divisée en deux étapes détaillées sur la Figure 6 page 35.

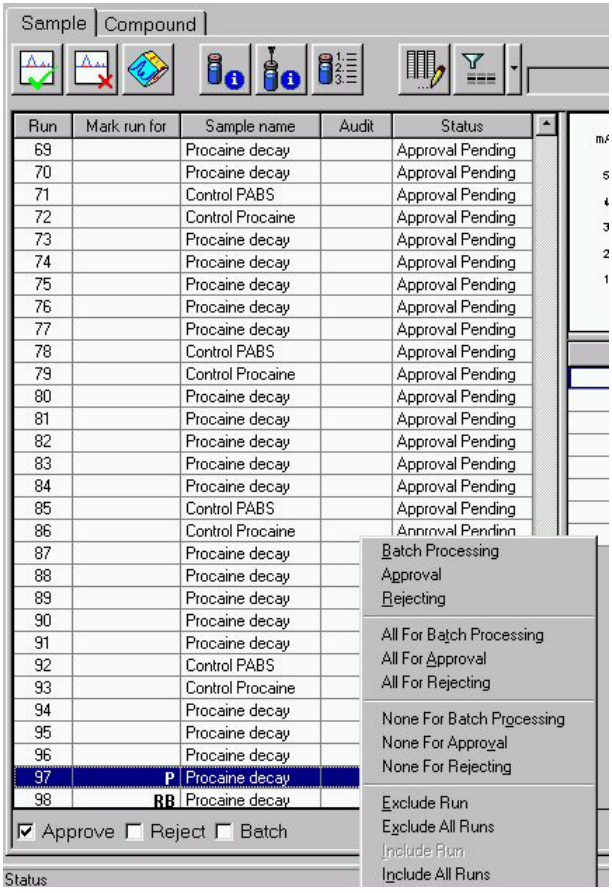



**Figure 6** Marquage des analyses pour approbation

**L'étape 1** marque les analyses pour approbation ou rejet pendant la revue de résultats.

**L'étape 2** applique la signature électronique et les commentaires d'approbation ou de rejet aux analyses individuelles ou à toutes les analyses marquées dans l'étape 1. Pour harmoniser les commentaires d'approbation, les administrateurs peuvent prédéfinir un ensemble de motifs standard dans le menu **Approval configuration (configuration d'approbation)** (Figure 7 page 36). Mais l'utilisateur peut ajouter un autre commentaire, modifier ou développer les motifs prédéfinis pendant la procédure d'approbation.

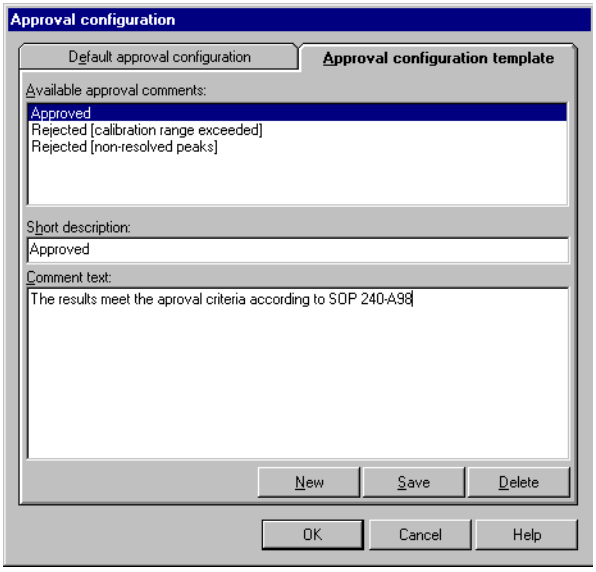



**Figure 7** Boîte de dialogue Approval Comments configuration (Configuration de motifs d'approbation)

Chaque action de l'étape 2 est documentée dans le journal d'audit (voir Figure « Journal d'audit » page 161) avec l'heure de l'action, l'état de l'analyse, le nom de l'opérateur et un commentaire fourni ou sélectionné par cet opérateur. Les modifications de l'état d'approbation sont confirmées sous la forme « 1st level approved » (Approbation 1er niveau), « 2nd level approved » (Approbation 2ème niveau) ou « Rejected » (Rejeté).

Une analyse approuvée peut ensuite être rejetée et vice-versa ; cependant, chacune de ces actions, à l'instar des approbations et des rejets, doit être motivée. La modification de l'état d'approbation génère automatiquement un enregistrement dans le journal d'audit.

Les analyses peuvent aussi être verrouillées automatiquement lorsqu'elles atteignent un état d'approbation particulier. Le verrouillage d'une analyse empêche tout retraitement par lot de cette analyse. Pour annuler le verrouillage, l'approbation doit être rejetée.

Si des modifications sont effectuées dans les valeurs des champs personnalisés d'une analyse approuvée, son état d'approbation repasse automatiquement à Approval Pending (Attente d'approbation) ; dans la version client/serveur, la réouverture d'une analyse réinitialise également son état en Approval Pending (Attente d'approbation).

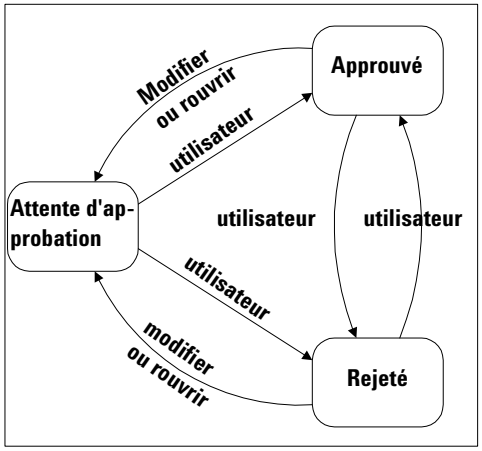



**Figure 8** Diagramme des transitions d'états d'approbation

# Interface utilisateur graphique

La fenêtre de ChemStore C/S est divisée en quatre parties (voir la Figure 9 page 41 et la Figure 10 page 46) :

- la barre d'outils principale ;
- la seconde barre d'outils ;
- le panneau gauche de la fenêtre ;
- le panneau droit de la fenêtre.

Les réglages de l'interface utilisateur, y compris ceux de tous les éléments personnalisables, peuvent être enregistrés pour rappel ultérieur (voir « Réglages de l'interface utilisateur » page 53).

### Barre d'outils principale

La barre d'outils principale est juste sous la barre de menu dans la fenêtre ChemStore C/S. Elle contient les outils pour définir les requêtes et les filtres, changer les vues et leur agencement ainsi que pour définir et imprimer les rapports. Toutes les actions disponibles dans les barres d'outils existent sous forme de commandes de menus.

Les outils suivants sont disponibles dans tous les modes :

Active les vues Sample View/Compound View (Vue des échantillons/Vue des composés) ; il est utilisé pour revoir, approuver ou rejeter et marquer les analyses pour le traitement par lots.

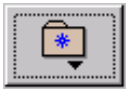
Active la fonction Delete View (Suppression de vues) dans la version autonome ou Archive/Delete (archivage/suppression) dans la version client/serveur ; il est utilisé pour marquer les analyses en vue de leur archivage ou de leur suppression. Ce bouton est absent si l'utilisateur n'a pas les droits d'accès nécessaires pour l'archivage ou la suppression.

Cet outil apparaît deux fois. Dans le contexte du calculateur personnalisé, ainsi que dans le contexte du rapport. Il affiche un menu contextuel permettant de choisir entre la création d'un modèle de calcul ou de rapport, la modification d'un modèle de calcul ou de rapport existant ou la gestion des modèles de calcul ou de rapport.

Affiche un aperçu des résultats de calcul en cours à l'aide du modèle de calcul sélectionné.

Permet une prévisualisation du rapport en cours selon le format du modèle actif.

Imprime le rapport des résultats en cours selon le modèle de rapport actif sur l'imprimante sélectionnée.



Ouvre un menu permettant d'enregistrer les réglages en cours de l'interface utilisateur pour les réutiliser plus tard, de gérer les réglages d'interface précédemment enregistrés ou de sélectionner l'un de ces réglages.

Les deux onglets, Sample (Echantillons) et Compound (Composés), permettent de passer de la vue des échantillons à la vue des composés et vice-versa. Chaque fenêtre comporte une seconde barre d'outils dont la composition dépend de la vue sélectionnée (voir « Vue Sample (Echantillons) » page 41 et « Vue des composés » page 46).

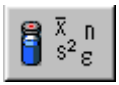
Les outils suivants sont disponibles dans la vue Sample (Echantillons) :

Active le mode Sample Review (Revue d'échantillons)

Active le mode Sample Table (Table d'échantillons)

Active le mode Sample Chart (Graphique d'échantillons)

Lorsque les statistiques de régression sont sélectionnées dans la vue Sample (Echantillons), deux outils supplémentaires apparaissent :



Affiche le tableau des résultats de la régression et des statistiques

Affiche le graphique des résidus de régression

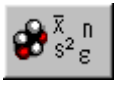
Les outils suivants sont disponibles dans la vue Compound (Composés) :

Active le mode Compound Review (Revue de composés)

Active le mode Compound Table (Table de composés)

Active le mode Compound Chart (Graphique de composés)

Lorsque les statistiques de régression sont sélectionnées dans la vue des composés, deux outils supplémentaires apparaissent :



Affiche le tableau des résultats de la régression et des statistiques

Affiche le graphique des résidus de régression

# Vue Sample (Echantillons)

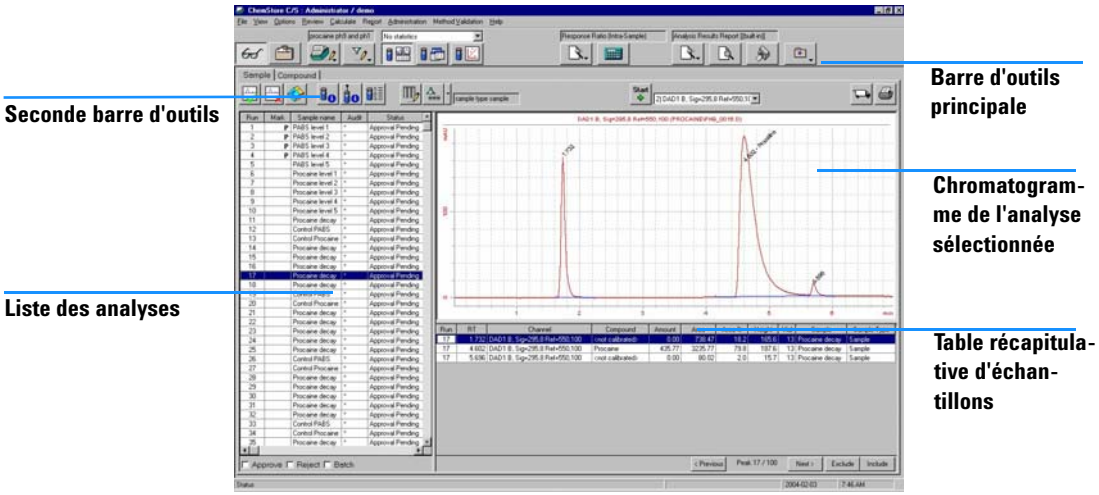



**Figure 9** Ecran de la revue d'échantillons

Dans la vue Sample (Echantillons), les analyses extraites sont disposées selon des critères relatifs aux échantillons. Elle propose trois modes, qui donnent des informations différentes sur le jeu de données en cours :

- Le mode Sample Review (Revue d'échantillons) divise la fenêtre en trois parties : à gauche apparaît la liste des analyses, dans la partie supérieure droite apparaissent les chromatogrammes et dans la partie inférieure droite la table récapitulative d'échantillons (voir la Figure 9 page 41).
- Le mode Sample Table (Table d'échantillons) divise la fenêtre en deux parties : la liste des analyses à gauche et la table d'échantillons à droite.
- Le mode Sample Chart (Graphique d'échantillons) divise la fenêtre en deux parties : la liste des analyses à gauche et les graphiques d'échantillons à droite.

La vue Sample (Echantillons) peut en outre afficher deux sortes de résultats statistiques :

- Le Summary Statistics (Récapitulatif des statistiques) scinde le panneau droit de la table d'échantillons ; il affiche la table d'échantillons en haut et le récapitulatif des résultats statistiques en bas.
- Les statistiques de régression existent sous deux formes possibles :

  Le mode Regression Results (Résultats de régression) divise la fenêtre en trois parties ; à gauche apparaît la liste des analyses, en haut à droite apparaît le tableau des résultats et en bas à droite les statistiques de régression calculées.

  Le mode résidus de régression divise la fenêtre en deux parties : à gauche la liste des analyses et à droite les graphiques de résidus.

### Seconde barre d'outils de la vue des échantillons

Les outils disponibles dans la seconde barre d'outils de la vue des échantillons dépendent du mode sélectionné.

Les outils suivants sont disponibles dans toutes les vues des échantillons :

Permet d'attribuer l'état « Approuvé » à toutes les analyses marquées « à approuver ».

Permet d'attribuer l'état « Rejeté » à toutes les analyses marquées « à rejeter ».

Permet de définir un ou plusieurs lots pour les analyses marquées « à retraiter par lots ».

Affiche les informations sur l'échantillon de l'analyse en cours, notamment les paramètres de traitement de l'échantillon.

Affiche les informations sur l'analyse et le traitement des données de l'analyse en cours.

Affiche le journal d'audit de toutes les versions de l'analyse en cours.

Affiche les paramètres de méthode ChemStation pour l'analyse sélectionnée. N'est actif que pour les versions d'analyses transférées vers ChemStore révision B.02.02 ou ultérieure.

Ouvre la boîte de dialogue de sélection des colonnes de la table pour choisir les colonnes à inclure dans la table d'échantillons.

Affiche un menu qui permet de passer du filtre normal au filtre complémentaire et vice-versa.

Active ou désactive le filtre normal en cours.

Active ou désactive le filtre complémentaire.

Permet d'exporter les données, soit vers le Presse-papiers de Windows, soit dans un fichier au format Microsoft Excel.

Permet d'imprimer sur l'imprimante sélectionnée une ou plusieurs parties de la vue en cours.

La fenêtre de revue d'échantillons ajoute un outil au jeu précédent :

Démarre le passage automatique d'une analyse à l'autre. Cliquez sur le bouton Stop (Arrêt), qui remplace le bouton Start (Démarrer) dès que celui-ci a été actionné, pour arrêter le passage automatique. Vous pouvez configurer l'intervalle de temps entre deux passages automatiques.

La fenêtre des tables d'échantillons ajoute deux outils au jeu précédent :

Trie les résultats par ordre alphanumérique ou chronologique des données figurant dans la colonne sélectionnée de la table d'échantillons.

Trie les résultats par ordre alphanumérique ou chronologique inverse des données figurant dans la colonne sélectionnée de la table d'échantillons.

La fenêtre des graphiques d'échantillons ajoute un outil au jeu précédent :

Permet de spécifier les options graphiques.

La fenêtre des statistiques de régression ajoute un outil au jeu précédent :

Permet de définir les paramètres des calculs des statistiques et résidus de régression.

### Liste des analyses

La liste des analyses (voir Figure 9 page 41) est une table qui contient les informations concernant les analyses du jeu de données en cours. Cette table comporte cinq colonnes :

- Run (Analyse) indique le numéro de l'analyse dans le jeu de données.
- Mark run for (Marquage de l'analyse) indique la façon dont l'analyse est marquée :
  - Un P indique que cette analyse a été marquée pour approbation ;
  - Un R indique que cette analyse a été marquée pour rejet ;
  - Un B indique que cette analyse a été désignée pour faire partie d'un lot (Batch) de données à retraiter sur la ChemStation ;
  - EXC indique que cette analyse a été exclue des calculs statistiques et des rapports.
- Sample name présente le nom de l'échantillon.
- Audit indique si l'analyse a déjà été retraitée :
  - Si seule la dernière version de l'analyse a été extraite, un astérisque indique qu'il existe plusieurs versions de cette analyse.
  - Si toutes les versions ont été extraites, elles sont numérotées en séquence, par ordre chronologique, 1 pour la version la plus ancienne et pour la version la plus récente.
  - Affiche les paramètres de méthode ChemStation pour l'analyse sélectionnée. N'est active que pour les versions d'analyses transférées vers ChemStore révision B.02.02 ou ultérieure.

- Status indique l'état en cours de l'analyse (état d'approbation dans la revue des données, état d'archivage dans la vue Archive/Delete (Archivage/suppression)).

Utilisez les cases à cocher en bas ou le menu contextuel (bouton droit de la souris) pour marquer l'approbation, le rejet ou le retraitement par lots. Le marquage ne modifie pas l'état d'approbation des analyses (voir « Etat d'approbation des analyses » page 34), ni ne transfère les analyses dans un lot. L'état d'approbation des analyses n'est modifié que par l'outil prévu à cet effet (l'outil d'approbation modifie l'état des analyses marquées pour l'approbation tandis que l'outil de rejet modifie l'état des analyses marquées pour le rejet). Le transfert dans un lot n'est effectif qu'après l'utilisation de l'outil de traitement par lots. Si vous approuvez ou rejetez une analyse, vous devez fournir un motif pour ce changement d'état ; cette information figurera à côté de l'état dans le journal d'audit de l'analyse concernée.

### Table Summary Sample (Table récapitulative d'échantillons)

La table récapitulative d'échantillons contient des informations sur chaque pic de l'analyse sélectionnée dans la liste. Vous pouvez configurer la table récapitulative d'échantillons et sélectionner les informations affichées (voir « Configuration des tables » page 50). Vous pouvez utiliser les boutons Next (Suivant) et Previous (Précédent) au bas de la table pour parcourir manuellement les analyses. Le bouton Exclude (Exclure) sert à indiquer que l'analyse est exclue ; il efface l'analyse de la partie droite (revue d'échantillons) ; la marque d'exclusion peut être effacée à l'aide du bouton Include (Inclure).

### Sample Table (Table d'échantillons)

La table d'échantillons de la vue Présentation de table contient des informations sur chaque analyse de la liste. Vous pouvez configurer la table d'échantillons et sélectionner les informations à afficher (voir « Configuration des tables » page 50). Le plus souvent cette vue permet d'afficher l'équivalent dans la table de séquence avec un diagramme orienté séquence.

# Vue des composés

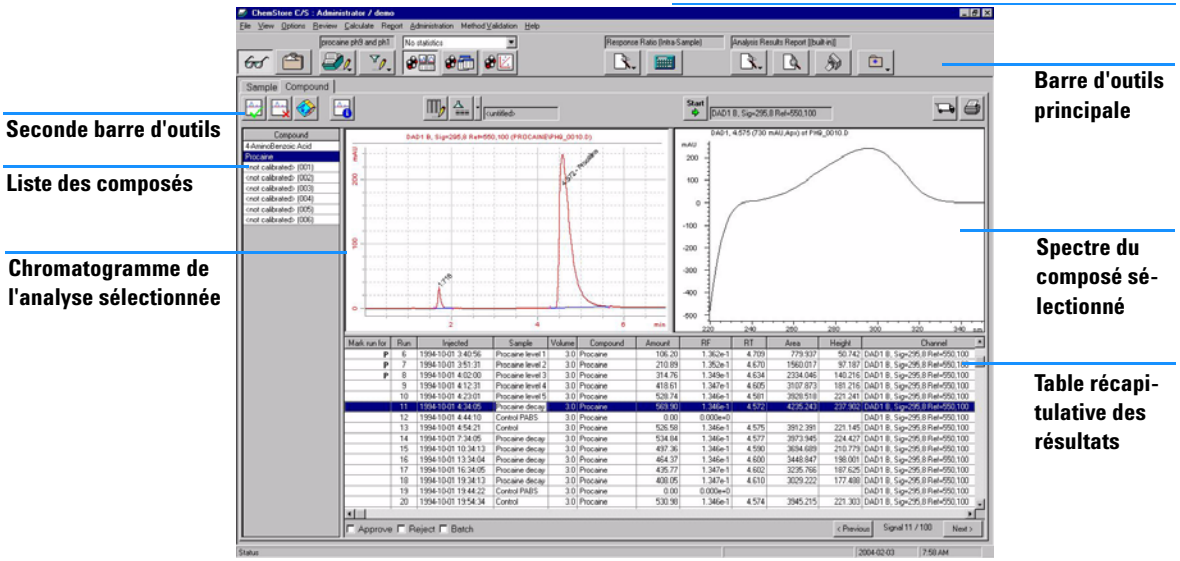



**Figure 10** Ecran de la revue de composés

Dans la vue des composés, les analyses extraites sont disposées selon des critères relatifs aux composés. Elle offre trois modes possibles donnant des informations différentes sur le jeu de données en cours :

- Le mode revue d'échantillons divise la fenêtre en quatre parties : à gauche apparaît la liste des composés, sur la gauche de la partie supérieure droite apparaissent les chromatogrammes, à leur droite apparaissent les spectres et sur la partie inférieure droite la table récapitulative de résultats (voir la Figure 10 page 46).
- Le mode table de composés divise la fenêtre en deux parties : à gauche la liste des composés et à droite la table des résultats.
- Le mode graphique de composés divise la fenêtre en deux parties : à gauche la liste des composés et à droite les graphiques des composés.

La vue des composés peut en outre afficher deux sortes de résultats statistiques :

- Le récapitulatif des statistiques (Summary) scinde la partie droite de la table des composés ; il affiche la table des résultats en haut et le récapitulatif des résultats statistiques en bas.
- Les statistiques de régression existent sous deux formes possibles :
  - Le mode résultats de régression divise la fenêtre en trois parties ; à gauche apparaît la liste des composés, dans la partie supérieure droite apparaît le tableau des résultats et dans la partie inférieure droite les statistiques de régression calculées.
  - Le mode résidus de régression divise la fenêtre en deux parties ; à gauche la liste des composés et à droite les graphiques de résidus.

### Seconde barre d'outils de la vue des composés

Les outils disponibles dans la seconde barre d'outils de la vue des composés dépendent du mode d'affichage sélectionné.

Les outils suivants sont disponibles dans toutes les vues des composés :

Ouvre la boîte de dialogue de sélection des colonnes de la table pour choisir les colonnes à inclure dans la table des résultats.

Affiche un menu qui permet de passer du filtre normal au filtre complémentaire et vice-versa.

Active ou désactive le filtre normal en cours.

Active ou désactive le filtre complémentaire.

**REMARQUE** Seules les données relatives aux échantillons sont disponibles pour ce filtre.

Permet d'exporter les données, soit vers le Presse-papiers de Windows, soit dans un fichier au format Microsoft Excel.

Permet d'imprimer sur l'imprimante sélectionnée une ou plusieurs parties de la vue en cours.

La fenêtre de revue de composés ajoute un outil au jeu précédent :

Permet d'attribuer l'état « Approuvé » à toutes les analyses marquées « à approuver ».

Permet d'attribuer l'état « Rejeté » à toutes les analyses marquées « à rejeter ».

Permet de définir un ou plusieurs lots pour les analyses marquées « à retraiter par lots ».

Affiche les informations sur les pics du composé en cours.

Démarre le passage automatique d'une analyse à l'autre. Cliquez sur le bouton Stop (Arrêt), qui remplace le bouton Start (Démarrer) dès que celui-ci a été actionné, pour arrêter le passage automatique. Vous pouvez configurer l'intervalle de temps entre deux passages automatiques.

La fenêtre des tables de composés ajoute deux outils au jeu précédent :

Trie les résultats par ordre alphanumérique ou chronologique des données figurant dans la colonne sélectionnée de la table des résultats.

Trie les résultats par ordre alphanumérique ou chronologique inverse des données figurant dans la colonne sélectionnée de la table des résultats.

La fenêtre des graphiques des composés ajoute un outil au jeu précédent :

Permet de spécifier les options graphiques.

La fenêtre des statistiques de régression ajoute un outil au jeu précédent :

Permet de définir les paramètres des calculs des statistiques et résidus de régression.

### Liste des composés (Compound List)

La liste des composés contient une liste (voir Figure 10 page 46) de tous les composés (analytes) du jeu de données en cours. Les composés étalonnés sont identifiés par leur nom tandis que les composés non étalonnés sont affectés de la mention Uncalibrated (Non étalonnés). Vous sélectionnez le composé à afficher dans la liste. La fenêtre de revue de composés ne permet de sélectionner qu'un seul composé, cependant, la fenêtre des tables de composés permet d'effectuer une sélection multiple grâce à une colonne supplémentaire. Dans la fenêtre des graphiques de composés, vous pouvez tracer plusieurs paramètres d'un seul composé ou un seul paramètre pour plusieurs composés. Si vous effectuez le tracé de plusieurs paramètres pour un seul composé, les tracés sont normalisés sur la valeur la plus grande du jeu de données.

### Table récapitulative des résultats (Summary Results Table)

La table récapitulative des résultats comporte les informations relatives à chaque analyse du composé sélectionné. Vous pouvez configurer la table récapitulative des résultats et sélectionner les informations qui y sont affichées (voir « Configuration des tables » page 50). Utilisez les cases à cocher situées en bas de la table pour marquer les analyses pour l'approbation, le rejet ou le retraitement par lots. Le marquage ne modifie pas l'état d'approbation des analyses (voir « Etat d'approbation des analyses » page 34), ni ne transfère les analyses dans un lot. L'état d'approbation des analyses n'est modifié que par l'outil prévu à cet effet (l'outil d'approbation modifie l'état des analyses marquées pour l'approbation tandis que l'outil de rejet modifie l'état des analyses marquées pour le rejet). Le transfert dans un lot n'est effectif qu'après l'utilisation de l'outil de traitement par lots.

### Table de résultats (Results Table)

La table des résultats comporte les informations de chaque analyse pour tous les composés sélectionnés. Vous pouvez configurer la table des résultats et sélectionner les informations qui y sont affichées (voir « Configuration des tables » page 50). Vous pouvez utiliser la table des résultats pour sélectionner les données source pour les axes x et y de vos graphiques (voir Figure 11 page 50).

## Configuration des tables

Vous pouvez configurer toutes les tables affichées dans la partie droite de la fenêtre ChemStore C/S. A l'aide d'une boîte de dialogue, vous pouvez sélectionner les colonnes qui composent chaque table ainsi que leur position dans la table. Pour les lignes et colonnes numériques des résultats statistiques, vous pouvez aussi sélectionner le format et la précision du nombre ; pour les colonnes de date, vous pouvez aussi sélectionner le style d'affichage. La boîte de dialogue de configuration ne contient que les colonnes valides pour la table sur laquelle vous travaillez.

La boîte de dialogue de configuration des colonnes comporte également des cases à cocher permettant de spécifier les axes x et y de vos graphiques. Les données source pour les axes x et y peuvent être choisies parmi les colonnes incluses dans la table. L'axe x ne peut comporter qu'une seule colonne source mais l'axe y peut comporter autant de colonnes sources que nécessaire.

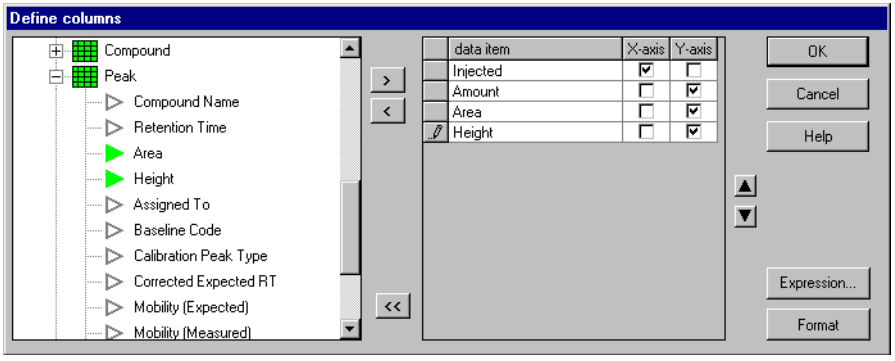



**Figure 11** Boîte de dialogue Column configuration (Configuration de colonne)

En plus des résultats standard disponibles sur la ChemStation, vous pouvez aussi définir des colonnes dont le contenu est le résultat de calculs numériques sur les données disponibles dans la table configurée.

## Calculs intra-échantillon

Dans vos tables de résultats, vous pouvez configurer une colonne contenant une expression mathématique permettant d'effectuer un calcul intra-échantillon simple, par exemple une somme ou un rapport, sur les résultats de chaque analyse ou composé.

Ces calculs intra-échantillons concernent l'analyse ou le pic de la ligne de la table. Pour les calculs sur plusieurs échantillons ou intra-échantillons évolués (sur une colonne de la table), voir « Statistiques » page 51 et « Préparation à l'utilisation de l'éditeur de script du calculateur personnalisé » page 61.

Dans vos calculs personnalisés, vous pouvez faire intervenir n'importe quel élément de la table ; les expressions mathématiques peuvent comprendre des opérateurs arithmétiques et des fonctions mathématiques ainsi que des constantes numériques.

## Statistiques

ChemStore C/S comporte deux niveaux de statistiques :

- Les statistiques globales sont affichées sous la table d'échantillons dans la fenêtre de revue d'échantillons ou sous la table des résultats dans la fenêtre de revue de composés.
- Les statistiques de régression sont affichées dans deux fenêtres différentes : la fenêtre de la table des résultats de régression et la fenêtre graphique des résidus de régression.
- Si des résultats statistiques doivent être utilisés pour des calculs ultérieurs, les statistiques récapitulatives et de régression peuvent aussi être effectuées par le calculateur personnalisé. Voir « Exemple : Création d'un script de calcul de rapport » page 72.

### Statistiques globales

Les statistiques récapitulatives sont calculées et affichées pour chaque colonne de la table d'échantillons ou de résultats. Les grandeurs statistiques affichées sont :

| | |
|---|---|
| **Count (Compteur)** | Nombre de valeurs dans le jeu de données |
| **Max** | Valeur maximale du jeu de données |
| **Mean (Moyenne)** | Valeur moyenne du jeu de données |
| **Min** | Valeur minimale du jeu de données |
| **RSD** | Ecart type relatif des valeurs du jeu de données |
| **Std. Dev (Ecart type)** | Ecart type des valeurs du jeu de données |
| **Sum (Somme)** | Somme des valeurs du jeu de données |
| **Variance** | Variance des valeurs du jeu de données |

Pour les détails sur les calculs utilisés dans les statistiques globales, consultez la section « Calculs statistiques » page 184.

### Statistiques de régression

Pour les détails sur les calculs utilisés dans les statistiques de régression, consultez la section « Calculs de régressions » page 185.

## Elaboration des graphiques de contrôle

Vous pouvez élaborer des graphiques à partir des résultats que vous choisissez d'inclure dans la table d'échantillons (revue d'échantillons) ou dans la table de résultats (table de composés). Les données sources des axes x et y que vous choisissez lorsque vous définissez la table, sont transférées sur le graphique. Vous pouvez cependant utiliser les boutons sur les axes x et y pour modifier les sélections, par exemple, pour simplifier le graphique.

En utilisant la boîte de dialogue Chart Options (Options des tracés), disponible à partir du menu des options ou de la barre d'outils, vous pouvez définir la couleur, le style et la forme des lignes et des points pour chacun des graphes à construire. Vous pouvez également choisir le style, la taille et la position du titre, des légendes des axes et du graphique.

Par défaut, les graphiques sont affichés avec une échelle automatique sur les deux axes : l'échelle des abscisses va du minimum au maximum des valeurs de la colonne source, celle des ordonnées va du minimum au maximum des valeurs de l'ensemble des données source. Vous pouvez modifier les échelles en imposant un minimum et un maximum, vous pouvez également spécifier la précision de la graduation des axes. Vous pouvez aussi choisir d'afficher les données en échelle logarithmique, dans ce dernier cas les réglages de la précision n'ont aucun effet. Il est impossible d'afficher les axes des temps sous forme logarithmique. Les points de données inférieurs ou égaux à 0 n'apparaissent pas sur les tracés logarithmiques.

### Ajout de lignes de seuil

En plus des graphiques, vous pouvez tracer jusqu'à cinq lignes de seuil sur les graphiques : ligne médiane, valeurs supérieure et inférieure de seuils d'alarme, valeurs supérieure et inférieure de seuils critiques. Pour définir les positions de ces lignes sur l'axe y, vous pouvez utiliser soit des valeurs calculées (moyenne et écart type), soit des valeurs spécifiées :

| | |
|---|---|
| **Center Line (Ligne médiane)** | Elle peut être définie comme la valeur moyenne de l'une des colonnes sources de l'axe y ou être fixée à une valeur spécifiée. |
| **Limit Lines (Lignes de seuil)** | Il peut s'agir de valeurs fixes spécifiées, ou d'écarts spécifiés par rapport à la ligne médiane. Un écart peut être spécifié en valeur absolue ou basé sur l'écart type des valeurs de la colonne source y sélectionnée. |

## Réglages de l'interface utilisateur

Une fois que vous avez revu vos données, défini vos tables, vos calculs personnalisés, les graphiques de contrôle et les options de statistiques, vous pouvez enregistrer tous les réglages de l'interface utilisateur et les réutiliser à volonté (voir Figure 12). Les informations ainsi enregistrées incluent non seulement la configuration et le format des tables et graphiques paramétrables (par exemple, la liste des analyses et la liste des composés), mais aussi les tailles des panneaux de chacune des fenêtres. Les réglages sont enregistrés avec le nom de l'utilisateur et sont donc disponibles pour une utilisation ultérieure ; un utilisateur ayant les droits d'administration des paramètres d'interface peut permettre à d'autres utilisateurs d'en disposer également.

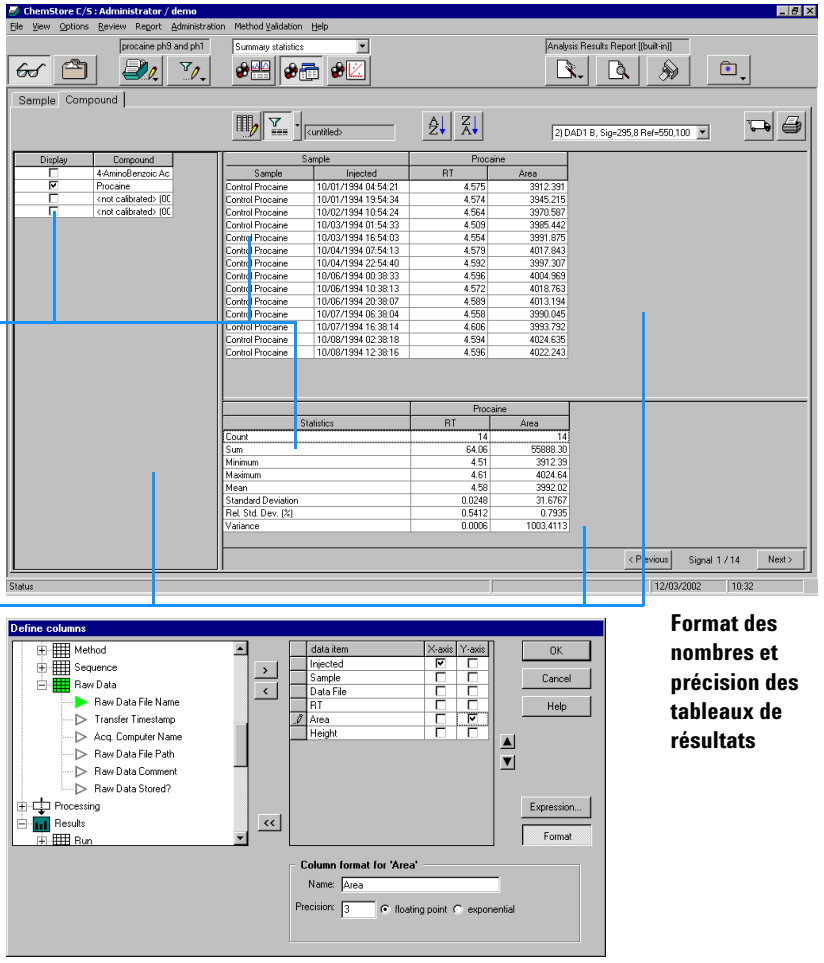



**Figure 12** Paramètres modifiables de l'interface utilisateur

# Transfert des données vers la ChemStation

Le transfert des données de ChemStore C/S vers la ChemStation s'effectue en deux étapes.

La première étape se déroule pendant le processus de revue dans ChemStore C/S quand vous sélectionnez les analyses qui doivent être transférées à la ChemStation pour être retraitées. L'addition d'une analyse à une requête de traitement par lots génère une entrée dans le journal d'audit de cette analyse. Quand vous avez sélectionné toutes les analyses souhaitées, elles sont transférées en un ou plusieurs lots, avec toutes les informations associées (nom de l'étude, valeurs et attributs des champs personnalisés). Avant que les analyses ne soient transférées, le système cherche si des fichiers identiques existent à l'emplacement d'origine ; si les fichiers existent déjà et s'ils sont identiques, aucun transfert n'est effectué. Si les fichiers n'existent pas à l'emplacement d'origine, et s'ils sont disponibles dans la base de données, ils sont transférés sur la ChemStation vers un emplacement de stockage temporaire.

La seconde étape se déroule dans la ChemStation lorsque vous choisissez de charger un lot ChemStore C/S dans le module de revue de lots de la ChemStation. Si plus d'un lot a été défini précédemment dans ChemStore C/S, vous devez choisir le lot à charger à partir d'une liste de lots en attente. Dans la liste affichée par la ChemStation apparaissent seulement les lots qui lui sont affectés ainsi que ceux affectés à l'ensemble des utilisateurs.

Vous pouvez aussi choisir de rouvrir de manière interactive un ou tous les fichiers enregistrés avec une analyse ou une séquence complète à partir de l'interface d'information des analyses (données brutes, fichiers de méthode ou de séquence). Dans ce cas, si les fichiers existent dans ChemStation, le programme vous propose de modifier le chemin de destination ou d'annuler le transfert.

Les analyses retraitées qui sont retransférées vers ChemStore C/S sont enregistrées dans la base de données comme des analyses nouvelles ; elles ne viennent pas remplacer les analyses dont elles sont issues. Les résultats originaux sont conservés dans la base de données et peuvent éventuellement être extraits (s'ils remplissent les critères de la requête d'extraction). Vous pouvez utiliser le filtre standard pour afficher toutes les versions (la dernière plus toutes les versions précédentes) ou seulement la dernière version.

# Numéros de version

ChemStore C/S conserve toutes les versions précédentes des fichiers retraités par la ChemStation. Si vous choisissez d'enregistrer les données brutes, les fichiers de méthode et les fichiers de séquence avec les données, seuls les fichiers ayant été modifiés sont enregistrés avec la nouvelle version, c'est-à-dire que les données brutes ne sont pas réenregistrées, le fichier de méthode est réenregistré seulement si la méthode a été modifiée et le fichier de séquence est réenregistré seulement si l'analyse est transférée dans une séquence. Ce fichier n'est pas réenregistré si l'analyse est transférée dans un lot ou manuellement.

Quand vous définissez une requête, vous pouvez choisir d'extraire toutes les versions d'une analyse ou seulement la dernière. Si vous choisissez d'extraire toutes les versions de l'analyse, vous pouvez utiliser un filtre standard pour n'afficher que la dernière version.

Quand toutes les versions de l'analyse sont affichées, la colonne d'audit de la liste des analyses affiche le numéro de version de l'analyse : 1 pour la plus ancienne, 2 pour la suivante ; l'analyse marquée + est la version la plus récente.

Si seule la dernière version de l'analyse est affichée, un astérisque * dans la colonne d'audit de la liste des analyses indique qu'il existe plusieurs versions de cette même analyse dans la base de données.

Un <A> dans la colonne d'audit signale généralement que des informations plus détaillées pour cette analyse sont disponibles, en plus de l'ajout de la version à la base de données (événement : NEW). Les événements suivants déclenchent l'apparition de la lettre <A> :

- ajout de l'analyse à nouveau lot
- modification de l'état d'approbation de l'analyse au rejet de cette approbation
- réouverture de l'analyse
- modification de la valeur d'un champ personnalisé
- changement du nom d'échantillon

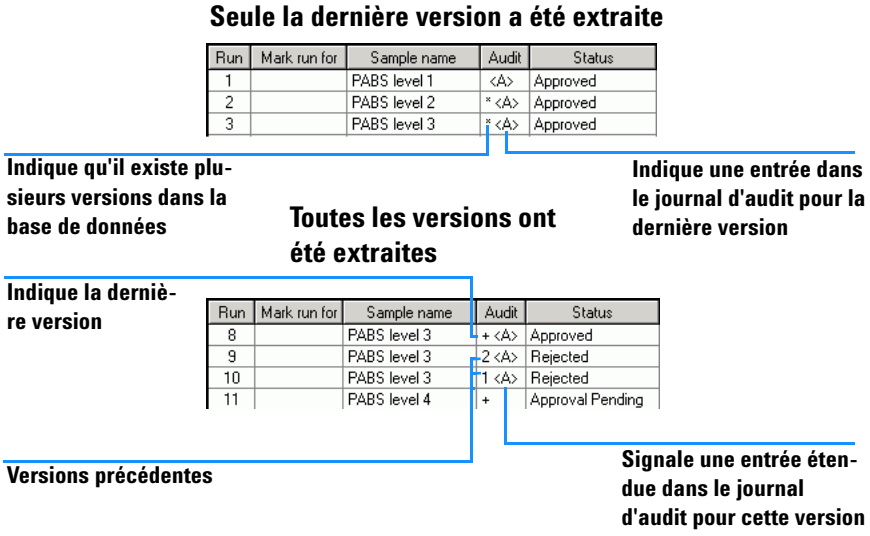



**Figure 13** Extraction et affichage des versions

# Suppression d'analyses de la base de données

Vous pouvez supprimer des analyses de la base de données ChemStore C/S à l'aide de la vue Delete (Suppression) de la version autonome ou de la vue Archive/Delete (Archivage/suppression) de la version client/serveur. Dans la version client/serveur, vous pouvez choisir d'archiver les analyses avant de les supprimer ou de les supprimer sans les archiver préalablement. Pour archiver les données dans la version autonome, copiez les fichiers *.mdb de la base de données sur votre unité de sauvegarde.

**ATTENTION** Les analyses que vous supprimez sont effacées de la base de données et ne peuvent plus être retrouvées. Veillez à ne supprimer que les analyses qui ont déjà été archivées ou recopiées sur un autre support ou celles dont vous n'avez vraiment plus besoin.

Vous sélectionnez les analyses à supprimer dans la liste de la partie gauche de la vue suppressions (version autonome) ou de la vue archivage/suppression (version client/serveur). Quand vous activez le bouton Delete (Supprimer) de la barre d'outils, les analyses sont supprimées.

La suppression est protégée par des droits d'accès et un mot de passe. La vue archivage/suppression et la vue suppression ne sont disponibles que pour les utilisateurs possédant les droits d'accès requis ; ils doivent en outre indiquer leur mot de passe pour que la suppression des analyses puisse commencer.

# 3
# Utilisation du calculateur personnalisé

Qu'est-ce que le calculateur personnalisé ? 60
Préparation à l'utilisation de l'éditeur de script du calculateur personnalisé 61
Editeur de script du calculateur personnalisé 64

Ce chapitre décrit l'utilisation du calculateur personnalisé. Il montre comment créer des calculs personnalisés sur des jeux de données de la base de données ChemStore et comment intégrer les résultats dans un rapport ChemStore.

# Qu'est-ce que le calculateur personnalisé ?

Le calculateur personnalisé est un composant intégré dans ChemStore permettant d'améliorer ses capacités de calcul.

Les calculs sont décrits pour des modèles de calcul (scripts) à l'aide d'un langage de programmation simple comparable à SQL. Un certain nombre d'assistants facilitent le développement de modèles de calcul de syntaxe correcte. Ces assistants guident l'utilisateur dans la création de chaque étape de calcul. Pour les utilisateurs expérimentés, un éditeur de script autorise la programmation directe de scripts de calcul.

Le langage de programmation contient des structures allant des opérations et fonctions mathématiques simples jusqu'aux calculs récapitulatifs complexes. Un ensemble de modèles de calcul intégré est conçu pour les calculs les plus courants ; ceux-ci peuvent servir de point de départ au développement de modèles de calculs personnalisés.

Lors de l'écriture d'un modèle de calcul, celui-ci peut être testé et débogué à l'aide des outils de débogage puissants tels que l'exécution pas à pas et les points d'interruption. Les modèles de calcul peuvent être enregistrés et attribués à certains utilisateurs pour exécution seulement. Lors de la modification d'un modèle de calcul, l'utilisateur peut l'enregistrer sous forme de version séparée ou de nouveaux modèles de calcul. Le journal ChemStore C/S suit ces opérations.

L'utilisateur peut obtenir un aperçu des résultats d'un modèle de calcul, les mettre en forme et les inclure dans des rapports. Les modèles de calcul inclus dans les rapports sont exécutés automatiquement à chaque génération d'un rapport. Le résultat de ces calculs peut être imprimé sous forme de tableau ou de graphique.

L'accès à ces capacités de calcul est géré par des droits d'utilisateur spéciaux, l'attribution de modèles de calcul aux utilisateurs ainsi que la gestion de la propriété des modèles de calcul.

# Préparation à l'utilisation de l'éditeur de script du calculateur personnalisé

## Recherche du jeu de données de calcul

Le modèle de calculateur travaille sur le jeu de données en cours téléchargé par une requête sur une base de données. C'est le jeu de données qui est visible dans la table de révision. Toutefois, les tables de révision n'ont pas besoin d'afficher toutes les colonnes pouvant être utilisées pour les calculs. L'assistant Table du calculateur personnalisé permet d'indiquer toutes les colonnes du jeu de données en cours, quels que soient les paramètres d'interface utilisateur.

Au début du développement d'un nouveau modèle de calcul, il est essentiel d'effectuer une requête sur un jeu de données représentatif des données où le modèle doit être utilisé.

## Compréhension des vues de l'éditeur de script du calculateur personnalisé

### Arbre de sélection de fenêtres

Le navigateur de fenêtre est une vue arborescente qui aide l'utilisateur à parcourir les fenêtres de calculs personnalisés représentées comme des feuilles. Un double-clic sur un nœud de feuille de cette vue arborescente permet de trouver, d'afficher et de placer au-dessus la fenêtre sélectionnée qui peut être partiellement ou complètement recouverte par d'autres fenêtres ou même être invisible à ce moment. Les deux nœuds de feuilles supérieurs (Calculation, Errors [Calculs, Erreurs]) sont toujours présents. Ces nœuds ramènent au sommet les fenêtres Calculation editor (Editeur de calculs) et Calculation errors (Erreurs de calculs). Une liste de toutes les fenêtres de table de calcul disponibles apparaît sous le nœud Tables. Ces nœuds font apparaître la table de calcul personnalisé sélectionnée au-dessus des autres.

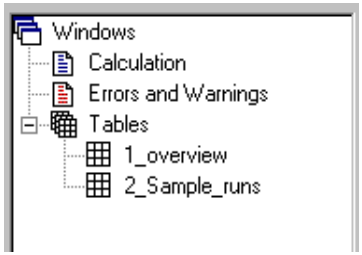



**Figure 14** Arbre de sélection de fenêtres

### Fenêtre de calcul

Cette fenêtre permet d'éditer et de mettre au point des scripts de calcul. La barre de titre affiche le nom et la version du modèle de calcul chargé, le cas échéant. Le bord gauche contient la ligne en cours d'exécution et les marqueurs de point d'interruption. La bordure inférieure contient la position du curseur (ligne et colonne) et une barre de progression d'exécution. La zone client de la fenêtre permet d'éditer le script de calcul. Les lignes de script de calcul sont affichées en noir, sauf si une erreur est détectée ou un avertissement déclenché. Les lignes d'erreur sont en rouge, les lignes d'avertissement sont en bleu.

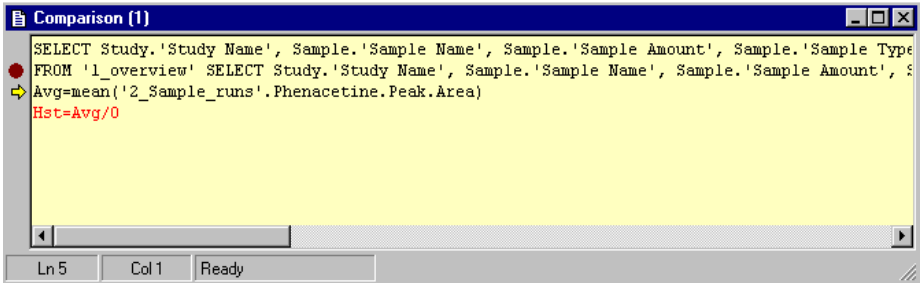



**Figure 15** Fenêtre de calcul

### Liste de variables

La liste de variables affiche les noms et les valeurs des variables disponibles dans un calcul. Un double-clic sur une variable de la liste fait ouvrir une boîte de dialogue contenant une copie en lecture seulement du nom et de la valeur de la variable. Cette boîte de dialogue permet de consulter les noms et valeurs de variable longs. Elle permet aussi de copier ces valeurs vers le Presse-papiers.

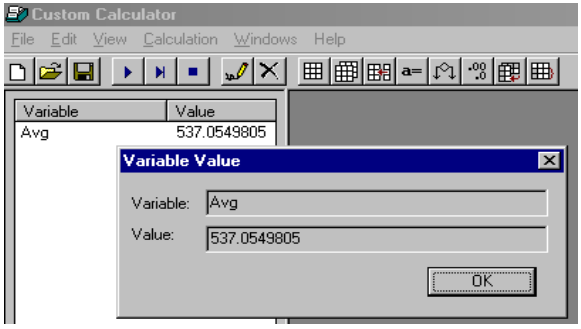



**Figure 16** Liste de variables

### Fenêtre d'erreurs et d'avertissements

La fenêtre d'erreurs et d'avertissements donne une liste détaillée d'informations sur toutes les erreurs et avertissements résultant de l'exécution d'un script de calcul. Une référence aux lignes de script et une indication visuelle de la position du défaut aident à résoudre l'erreur.

# Editeur de script du calculateur personnalisé

L'éditeur de script de calcul personnalisé est une fenêtre de calcul de couleur jaune où s'effectue le script du modèle de calcul personnalisé. Celui-ci peut être effectué par les assistants de calcul personnalisé pour créer le code de script approprié ou par programmation libre, comme pour l'écriture d'une macro.

## Pour comprendre les assistants de script de calcul personnalisé

Les assistants aident l'utilisateur dans la création d'un code de script pour le calcul voulu. Un assistant particulier permet de créer chaque partie de script pour chaque opération de calcul.

Les assistants peuvent être appelés soit depuis la barre d'outils, soit en cliquant sur une ligne du modèle (clic droit, sélectionnez *Edit [Editer]* sur le menu contextuel). L'assistant approprié apparaît en fonction du contenu de la ligne, il affiche le contenu de cette ligne dans les champs appropriés.

Les assistants permettent de créer des lignes ou d'éditer les lignes affichées dans le modèle.

### Caractéristiques communes des assistants

La Figure 17 présente un exemple d'assistant de table simple. Un symbole à gauche de chaque boîte de dialogue d'assistant indique l'objectif de l'instruction de calcul. Un assistant de table est par exemple utilisé pour placer des données du jeu de données en cours dans une table.

Des éléments de syntaxe au milieu permettent de définir les éléments de la ligne de commande à générer. L'ordre de ces éléments est le même que celui de leur apparition ultérieure dans l'instruction de calcul. Chaque élément de syntaxe contient un nom terminal (gros caractères bleus), une description (petits caractères noirs) et des commandes de sélection ou d'entrée d'informations spécifiques de l'instruction.

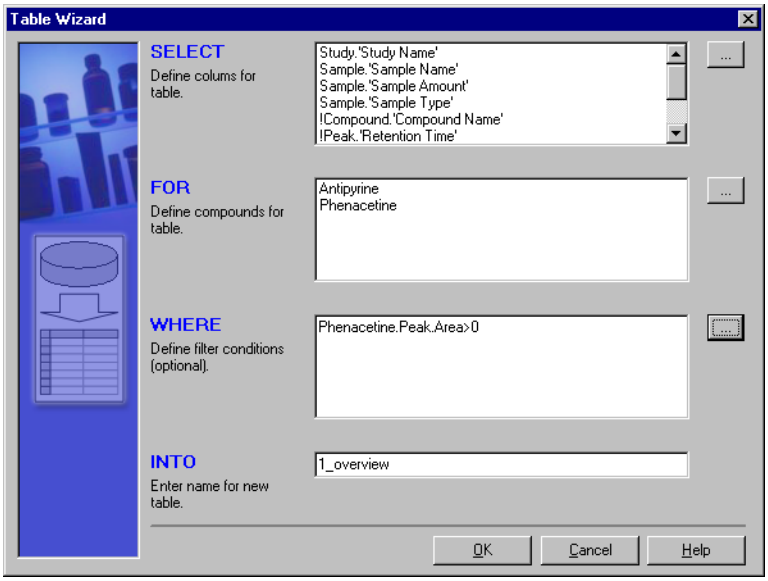



**Figure 17** Assistant Table

## Sous-assistants communs

### Sélection de colonnes

La Figure 18 présente une boîte de dialogue utilisée pour la sélection de colonnes de table, par exemple pour le parcours par la fonction SELECT de l'assistant table. Une vue arborescente à gauche contient toutes les tables disponibles avec leurs colonnes. Le déplacement des éléments vers la droite permet de définir une nouvelle table. Une liste des colonnes sélectionnées est affichée à droite de la boîte de dialogue. Les icônes devant les nœuds d'arbre sélectionnés sont en vert alors que ceux situés devant les nœuds d'arbre non sélectionnés sont en blanc.

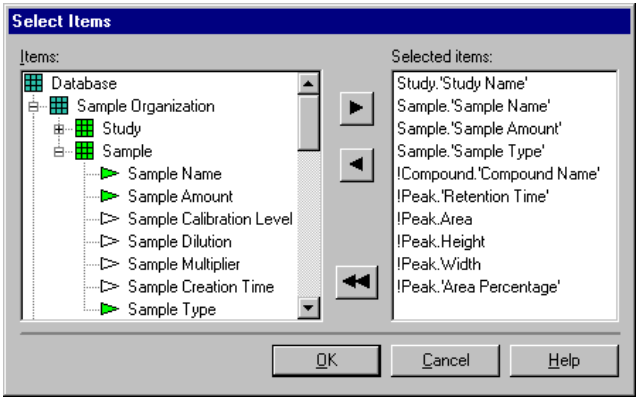



**Figure 18** Ecran de sélection de colonnes (calculateur personnalisé)

### Expressions

La boîte de dialogue Expressions présentée sur la Figure 19 est au cœur du calculateur personnalisé. Elle permet de créer et d'éditer des expressions et conditions. La boîte de dialogue d'édition du cadre supérieur contient l'état en cours de composition de l'expression. Il est possible de composer son contenu en sélectionnant les éléments dans les cadres Data Items (Données) et Functions (Fonctions) avant de cliquer sur les boutons Add to Expression (Ajouter à l'expression). Le contenu de la boîte d'édition peut aussi être saisi manuellement. Une icône de coche dans le coin supérieur droit et une ligne d'informations supplémentaires signalent si l'expression en cours de construction est syntaxiquement correcte. Ces deux éléments sont mis à jour en permanence si la case à cocher Continuous check (Contrôle continu) est cochée.

Si l'expression en cours de construction n'est pas syntaxiquement correcte, l'icône de coche devient un point d'interrogation. La coche donne des indices sur le problème et la partie en cause de l'expression est affichée en rouge dans la boîte d'édition.

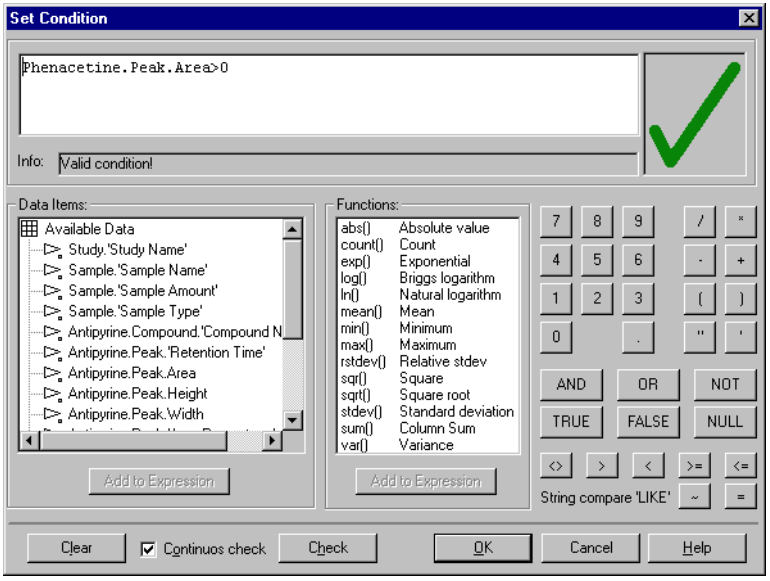



**Figure 19** Boîte de dialogue de définition de condition

### Assistant Table

L'assistant Table affiché sur la Figure 17 offre la possibilité de sélectionner un ensemble de colonnes dans le jeu de données en cours pour l'enregistrer dans une nouvelle table de calcul. C'est l'étape initiale de création d'un modèle de calcul. Il est recommandé d'ajouter toutes les colonnes utilisées pour l'identification d'échantillon et pour les étapes de calcul voulu dans une table générale comme point de départ.

L'assistant écrit les résultats de la sélection de l'utilisateur dans la fenêtre de script comme dans l'exemple ci-dessous :

SELECT Study,'StudyName',Sample.'Sample Name', etc.

FOR « Antipyrine », « Phenacteine »

WHERE (Phenacetine.PeakArea>0

INTO « 1_overview »

Dans cet exemple la colonne *Study name* a été sélectionnée dans la table *study* et la colonne *Sample* a été sélectionnée dans la *sample table*. La sélection est basée sur les composés *Phénazone* et *Phénacétine* et limitée à tous les échantillons où un pic de phénacétine a été détecté. Le résultat de cette section est écrit dans la nouvelle table appelée 1_overview.

### Assistant Colonne

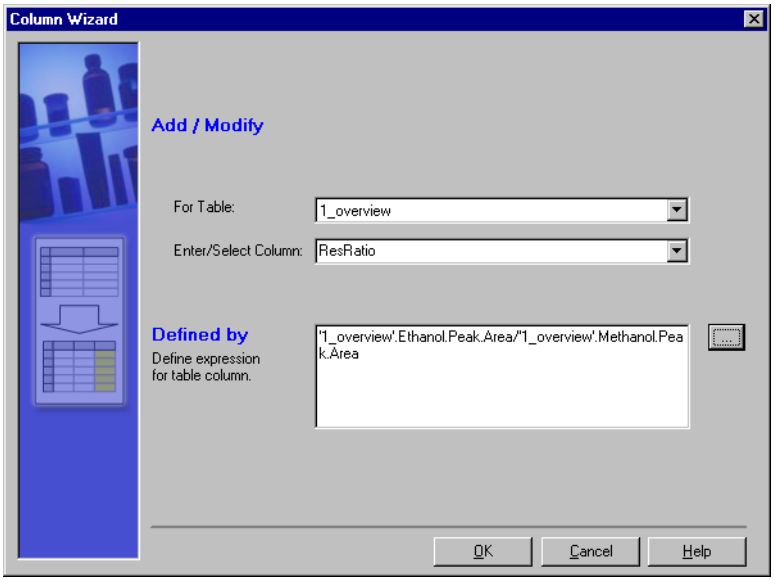



**Figure 20** Assistant Colonne

L'assistant Colonne permet d'étendre une table donnée par une nouvelle colonne de calcul. Cette colonne contient des valeurs basées sur une expression définie à l'aide de l'assistant Expression comme sur la Figure 19.

L'exemple présenté sur la Figure 20 ajoute une colonne « ResRatio » à la table « 1_overview ». Le contenu de la colonne est défini par le rapport des aires des composés « Ethanol » et « Méthanol ».

### Assistant Variable

L'assistant Variable est comparable à l'assistant Colonne. L'utilisateur peut appliquer une expression mathématique de valeurs provenant d'une ou plusieurs colonnes pour enregistrer le résultat dans une variable. Le plus souvent, c'est le cas quand le résultat contient l'évaluation d'une série de valeurs.

### Assistant Si

Les exemples ci-dessus ont présenté le calcul de nouvelles valeurs basées sur des valeurs données dans des colonnes pour les attribuer à des nouvelles valeurs d'une colonne ou à une variable unique.

Dans les cas où cette affectation doit dépendre d'une condition particulière, l'assistant IF (Si) peut être utilisé.

### Assistant Format

Le calculateur personnalisé affiche les nombres sous forme de chiffres bruts avec toutes les décimales disponibles. Pour une meilleure lisibilité ou pour afficher seulement les chiffres significatifs, l'assistant Format permet de mettre en forme des valeurs uniques (variables), une colonne d'une table ou même un ensemble de colonnes de plusieurs tables. La précision du calcul n'est pas modifiée par la mise en forme du nombre.

Outre des nombres, il est possible de mettre en forme des chaînes, des dates et des heures et même des cellules vides. L'aide en ligne de l'assistant Format contient des exemples de ces options évoluées de mise en forme.

### Assistant Transpose

L'assistant Transpose permet de transposer une table existante en transformant les colonnes en lignes et les lignes en colonnes. Ceci peut être utile pour le calcul de statistiques sur des valeurs données dans une ligne. Celles-ci peuvent être le résultat d'un calcul précédent. Mais les statistiques ne sont possibles que sur des colonnes, une étape de transposition est donc nécessaire avant d'effectuer ces calculs statistiques.

La boîte de dialogue de l'assistant Transpose (Figure 21 page 70) contient les éléments de syntaxe suivants :

- Dans la boîte combinée TRANSPOSE, l'utilisateur peut indiquer le nom de la table à transposer. Remarque : La sélection ne contient que les tables disponibles à la ligne de calcul donnée – toutes les tables générées préalablement.
- Dans la boîte combinée BY, l'utilisateur doit indiquer quelle colonne de table doit être utilisée comme ligne d'en-tête pour la table transposée. Le plus souvent, il s'agit du nom de l'échantillon ou de l'identificateur d'analyse, car ce sont les éléments qui définissaient les lignes de la table d'origine.
- Dans la case de texte INTO, l'utilisateur peut indiquer un nom pour la table transposée.

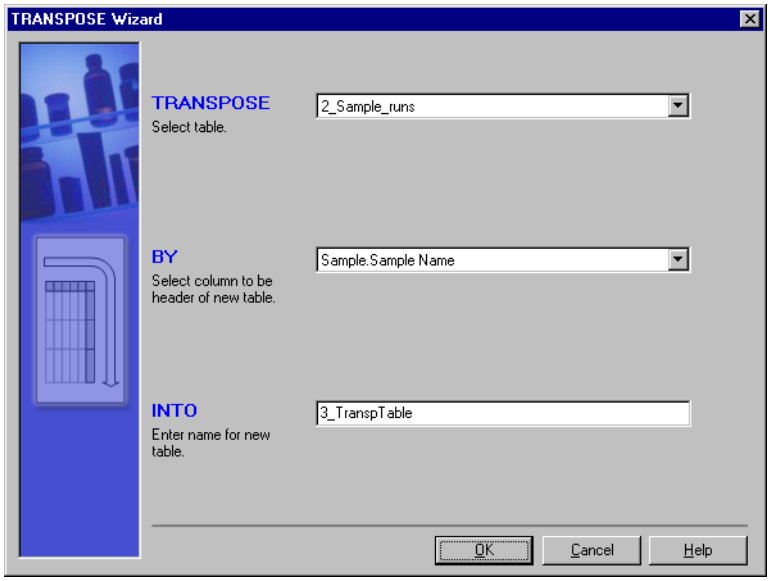



**Figure 21** Assistant Transpose

### Assistant Group

Le groupement d'une table est utile par exemple dans le cas de calculs de statistiques sur un ensemble d'échantillons, plutôt que sur des statistiques générales. Les mêmes résultats peuvent être obtenus par définition de sous-tables multiples, mais l'assistant Group les combine en une seule étape.

La boîte de dialogue présentée sur Equation 22 page 71 contient les composants syntaxiques suivants :

- Dans la boîte combinée GROUP, l'utilisateur indique le nom de la table qu'il souhaite grouper.
- Dans la boîte combinée BY, l'utilisateur indique l'identificateur du groupe. Par exemple, un groupement par « niveau d'étalonnage d'échantillon » permet de combiner des échantillons et des étalonnages en groupes séparés. Les analyses d'étalonnage sont aussi groupées par niveau d'étalonnage.
- L'élément DO définit une fonction (statistique) appliquée à une colonne de table donnée qui donne une nouvelle colonne nommée.

La boîte INTO doit recevoir un nom pour la table résultante.

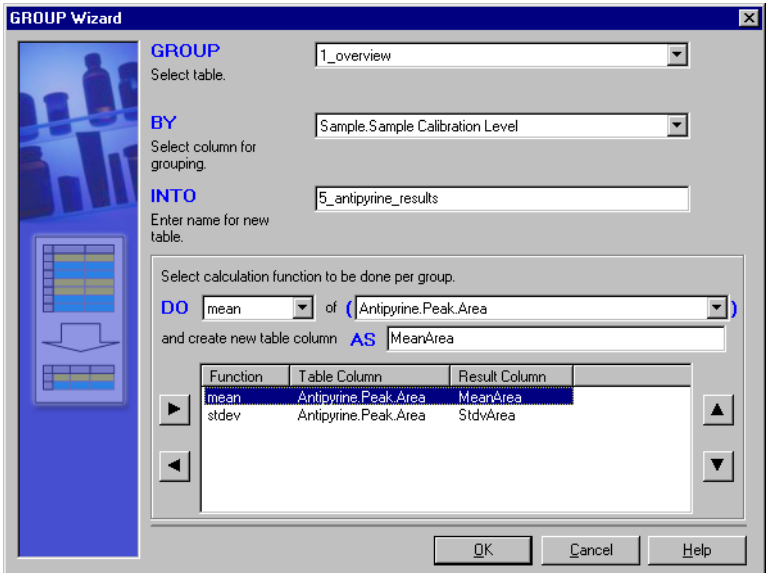



**Figure 22** Assistant Group

## Exemple : Création d'un script de calcul de rapport

Le chapitre suivant présente le développement d'un modèle d'exemple simple. Cet exemple est basé sur les données reçues lors de l'exécution de la requête *« SSR for quality control »* sur la base de données ChemStoredemo.mdb installée avec ChemStore C/S. Nous vous recommandons de suivre les procédures de ce chapitre pour vous familiariser avec l'utilisation et les fonctionnalités des assistants du calculateur. Cet exemple n'est pas une recommandation sur une méthode permettant d'évaluer les critères d'acceptation d'un ensemble de données.

REMARQUE

Si le script décrit ne peut pas être obtenu, une copie du script d'exemple se trouve sur le CD d'installation de ChemStation Plus. Parcourez les dossiers du support pour rechercher **simple_example.cct**. Pour importer le script d'exemple dans la base de données de démo, utilisez la fonction d'importation du calculateur personnalisé.

Supposons que vous avez reçu la tâche suivante :

> *Créer un modèle permettant de calculer l'écart type relatif des aires d'un composé donné pour les analyses d'étalonnage et les analyses d'échantillon. La comparaison doit affecter aux analyses d'échantillons le classement « pass » si l'écart type relatif est inférieur à l'écart type relatif des analyses d'étalonnage. Les résultats doivent être intégrés dans un rapport.*

Pour obtenir une solution à cette tâche, vous devez travailler en quatre phases :

1. Définir un plan incluant les étapes nécessaires pour obtenir une solution.
2. Créer le modèle conformément à ce plan.
   Ceci inclut le test et la correction de chaque étape de développement.
3. Améliorer le modèle
4. Inclure le modèle dans un rapport.

### Définition d'un plan

Pour définir un plan, vous devez d'abord bien comprendre la tâche. Divisez la tâche en étapes et notez ce que vous devez obtenir à chaque étape :

1 Créez une table constituée de tous les paramètres nécessaires pour votre calcul et de tous les paramètres d'échantillon nécessaires pour l'identification et les rapports d'échantillon. Pour vos calculs il vous faut :

   - L'aire de pic
   - Le type d'échantillon pour distinguer les analyses d'étalonnage des analyses d'échantillons

   Pour l'identification d'échantillons, vous souhaitez voir :

   - le nom de l'échantillon
   - le nom du fichier de données brutes

2 Calculez l'écart type relatif des aires de pic par niveau d'étalonnage pour l'enregistrer dans une nouvelle table.

3 Calculez la moyenne des écarts types relatifs et enregistrez-la dans une variable.

4 Calculez les aires moyennes pour toutes les analyses d'échantillon et l'écart type absolu et relatif pour cette moyenne. Ce calcul doit être effectué par analyse.

5 Vérifiez si l'écart type relatif de chaque échantillon est inférieur à l'écart type relatif moyen des analyses d'étalonnage pour les marquer en conséquence.

Après chaque étape, vous devez tester les résultats intermédiaires pour voir si vous progressez correctement. Si le résultat intermédiaire est différent de vos attentes, vous devez prendre des mesures correctives.

### Création du modèle

#### Création d'une table générale

Pour créer la table de départ, utilisez l'assistant table comme indiqué sur la Figure 23 page 74. Sélectionnez les colonnes Sample Name, Sample Calibration level, Sample type, Acq. Sequence name, Raw data file name et Peak area pour le composé « Phénazone » et enregistrez-les dans la table « 1_overview ». Il est préférable d'ajouter un nombre en tête des noms de tables créées par le script pour que les résultats reflètent la structure du script.

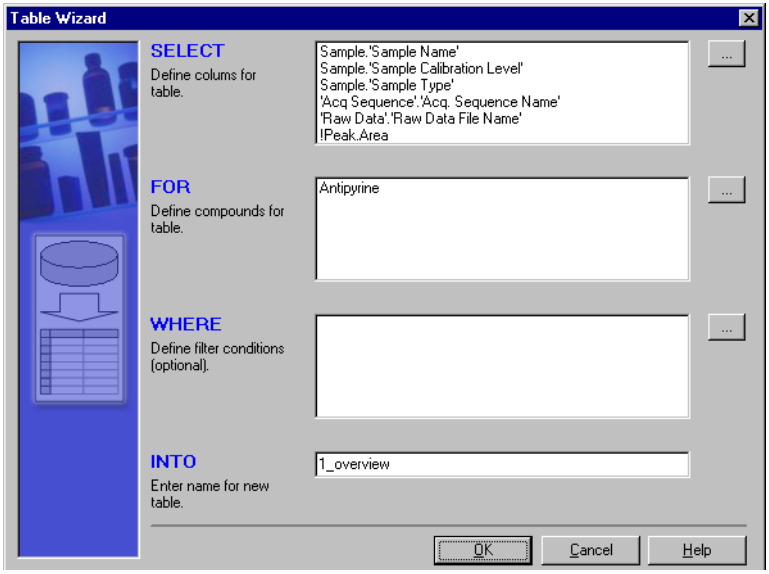



**Figure 23** Assistant Table

1_overview

| Sample | | | Acq Sequence | Raw Data | Antipyrine |
|---|---|---|---|---|---|
| Sample Name | Calibration | Sample Type | Acq. Sequence Name | Raw Data File Name | Peak.Area |
| calib1 | 1 | Calibration | LINSEQ.S | NEW00045.D | 153.110489 |
| calib1 | 1 | Calibration | LINSEQ.S | NEW00046.D | 151.006012 |
| calib1 | 1 | Calibration | LINSEQ.S | NEW00047.D | 151.757874 |
| calib2 | 2 | Calibration | LINSEQ.S | NEW00055.D | 497.751862 |
| calib2 | 2 | Calibration | LINSEQ.S | NEW00056.D | 496.648102 |
| calib2 | 2 | Calibration | LINSEQ.S | NEW00057.D | 496.732056 |
| calib3 | 3 | Calibration | LINSEQ.S | NEW00065.D | 839.842834 |
| calib3 | 3 | Calibration | LINSEQ.S | NEW00066.D | 838.583191 |
| calib3 | 3 | Calibration | LINSEQ.S | NEW00067.D | 841.310486 |
| sam1 | 0 | Sample | LINSEQ.S | NEW00081.D | 374.544006 |
| sam2 | 0 | Sample | LINSEQ.S | NEW00082.D | 374.5289 |
| sam3 | 0 | Sample | LINSEQ.S | NEW00083.D | 374.48291 |
| sam4 | 0 | Sample | LINSEQ.S | NEW00084.D | 374.128235 |
| sam5 | 0 | Sample | LINSEQ.S | NEW00085.D | 374.773499 |
| sam6 | 0 | Sample | LINSEQ.S | NEW00086.D | 374.385742 |
| sam7 | 0 | Sample | LINSEQ.S | NEW00087.D | 374.245667 |
| sam8 | 0 | Sample | LINSEQ.S | NEW00088.D | 374.140045 |
| sam9 | 0 | Sample | LINSEQ.S | NEW00089.D | 374.328796 |
| sam10 | 0 | Sample | LINSEQ.S | NEW00090.D | 374.229187 |

**Figure 24** Table générale

Pour le test de cette étape, vous exécutez les scripts et vous devez obtenir une table contenant la liste des noms d'échantillons, niveau d'étalonnage, type d'échantillon, nom de séquence d'acquisition, nom de fichier de données brutes et aires de pic pour le composé « Phénazone » sur tous les échantillons trouvés par la requête « SSR for quality control » (voir Figure 24 page 74).

### Création de sous-tables

L'étape suivante est la création d'une sous-table pour séparer les analyses d'étalonnage des analyses d'échantillon. Il est possible pour cela d'utiliser l'assistant de sous-table. La clé de la séparation des types d'échantillon est la clause WHERE qui doit correspondre exactement à l'exemple présenté sur la Figure 25 page 75. La condition « `Etalonnage` » doit être saisie manuellement dans la boîte de dialogue de définition de condition, elle doit être incluse entre guillemets.

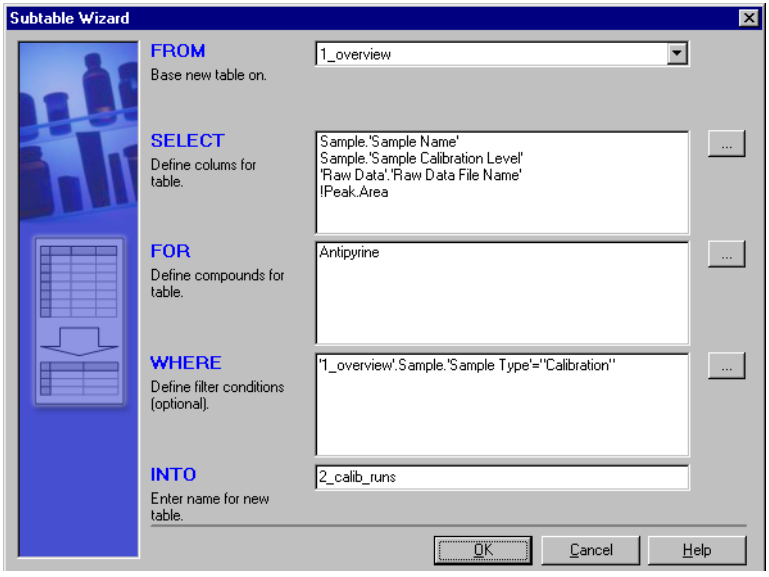
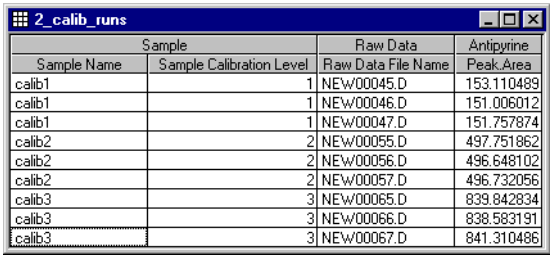



**Figure 25** Assistant sous-table pour la séparation des analyses d'étalonnage

L'exécution du script se traduit par une table simple affichant la liste de tous les échantillons d'étalonnage avec le niveau d'étalonnage et les aires de pics du composé « Phénazone » (voir Figure 26 page 76).



2_calib_runs

| Sample | | Raw Data | Antipyrine |
|---|---|---|---|
| Sample Name | Sample Calibration Level | Raw Data File Name | Peak.Area |
| calib1 | 1 | NEW00045.D | 153.110489 |
| calib1 | 1 | NEW00046.D | 151.006012 |
| calib1 | 1 | NEW00047.D | 151.757874 |
| calib2 | 2 | NEW00055.D | 497.751862 |
| calib2 | 2 | NEW00056.D | 496.648102 |
| calib2 | 2 | NEW00057.D | 496.732056 |
| calib3 | 3 | NEW00065.D | 839.842834 |
| calib3 | 3 | NEW00066.D | 838.583191 |
| calib3 | 3 | NEW00067.D | 841.310486 |

**Figure 26** Sous-table d'analyse d'étalonnage

### Calcul de l'écart type relatif des aires de pic pour chaque niveau d'étalonnage

Pour calculer l'écart type relatif par niveau d'étalonnage, vous pouvez utiliser l'assistant Group. Le groupement de la table « 2_calib_runs » sur les niveaux

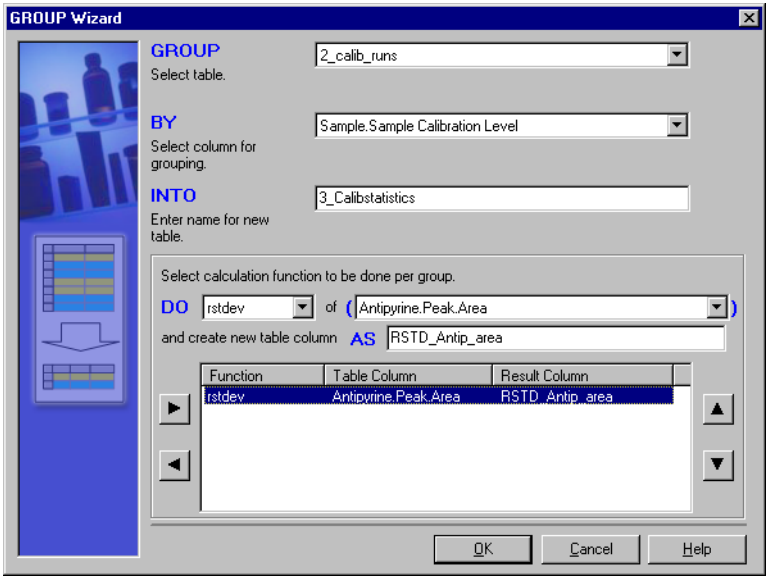
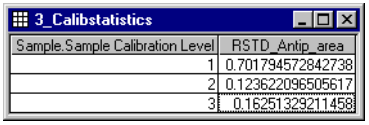



**Figure 27** Assistant Group

d'étalonnage génère un seul résultat par niveau et l'enregistre dans la nouvelle table « 3_calibstatistics ». Le calcul à exécuter par groupe est défini dans la section DO/AS de l'assistant Group (Figure 27 page 76). L'assistant Group permet de définir plusieurs calculs pour plusieurs composés en même temps, mais l'exemple en cours est restreint à un seul, pour simplifier.

L'exécution du script se traduit par une petite table contenant l'écart type relatif de chaque niveau d'étalonnage.


3_Calibstatistics

| Sample.Sample Calibration Level | RSTD_Antip_area |
|---|---|
| 1 | 0.701794572842738 |
| 2 | 0.123622096505617 |
| 3 | 0.162513292114583 |

**Figure 28** Ecart type relatif des aires de pic de phénazone

Pour calculer la moyenne des écarts types relatifs, l'assistant Variable doit être utilisé avec l'instruction de définition suivante :

Avg(RSTD_Antipyrine)=mean('3_Calibstatistics'.'RSTD_Antip_area')

Pour tester cette étape, exécutez le calcul et vous trouverez la variable avec le résultat approprié dans la liste de variables. Le calcul sur les analyses d'étalonnage est maintenant terminé, l'étape suivante consiste à effectuer des calculs sur les résultats d'analyse d'échantillon et enfin effectuer la comparaison désirée.

### Calcul de l'écart type relatif d'aire pour les analyses d'échantillon

Pour afficher la liste des analyses d'échantillon dans une table séparée, générez une sous-table comme indiqué à la Figure 25 page 75, mais remplacez le type d'échantillon « `Calibration` » dans la clause WHERE par « `Sample` » et le nom de table destination par « `4_sample_runs` ».

Les deux étapes suivantes consistent à ajouter deux colonnes supplémentaires à la table d'échantillons – une pour calculer la réponse moyenne sur tous les échantillons (voir Figure 29) et une autre pour calculer l'écart absolu des réponses individuelles par rapport à la moyenne. Utilisez l'assistant Add columns (Ajout de colonnes) deux fois pour obtenir ce résultat. La boîte de dialogue Set condition (Définition de condition) de calcul de l'écart absolu est présentée sur la Figure 30.

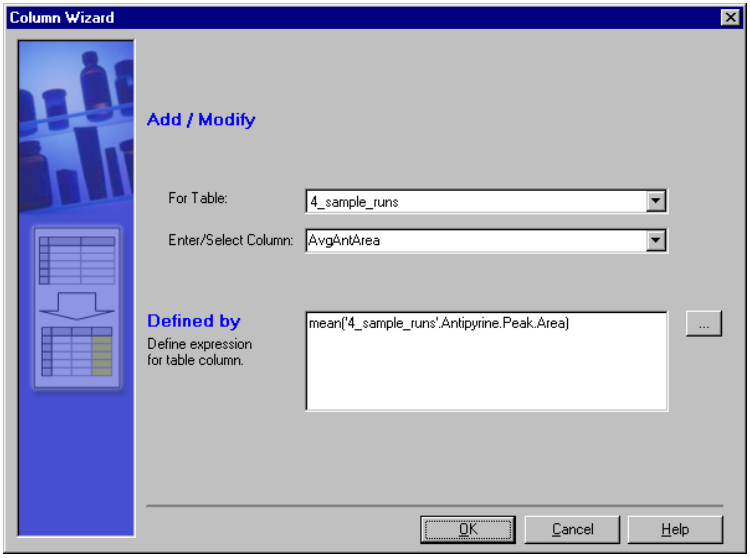



**Figure 29** Calcul de la moyenne des réponses de la phénazone pour les analyses d'échantillon

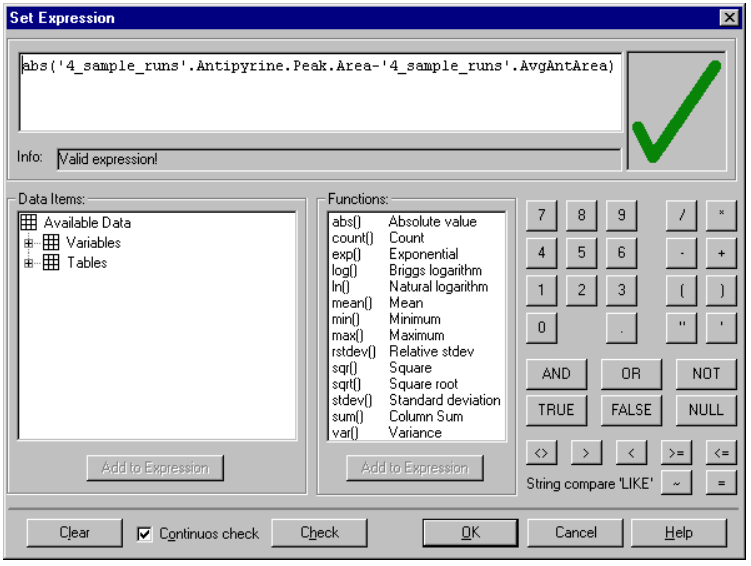



**Figure 30** Ecart absolu de l'aire Phénazone par rapport à la valeur moyenne

L'exécution du script se traduit par la table d'échantillons suivante :

4_sample_runs

| Sample | Raw Data | Antipyrine | | |
|---|---|---|---|---|
| Sample Name | Raw Data File Name | Peak.Area | AvgAntArea | delta_Ant |
| sam1 | NEW00081.D | 374.544006 | 374.3786987 | 0.1653 |
| sam2 | NEW00082.D | 374.5289 | 374.3786987 | 0.1502 |
| sam3 | NEW00083.D | 374.48291 | 374.3786987 | 0.1042 |
| sam4 | NEW00084.D | 374.128235 | 374.3786987 | 0.2505 |
| sam5 | NEW00085.D | 374.773499 | 374.3786987 | 0.3948 |
| sam6 | NEW00086.D | 374.385742 | 374.3786987 | 0.0070 |
| sam7 | NEW00087.D | 374.245667 | 374.3786987 | 0.1330 |
| sam8 | NEW00088.D | 374.140045 | 374.3786987 | 0.2387 |
| sam9 | NEW00089.D | 374.328796 | 374.3786987 | 0.0499 |
| sam10 | NEW00090.D | 374.229187 | 374.3786987 | 0.1495 |

**Figure 31** Résultats des calculs d'écart

### Vérification et marquage

Tous les résultats sont maintenant disponibles pour définir une table de résultats définitive sur laquelle la comparaison pourra être exécutée. Utilisez un assistant de sous-table pour générer un extrait de la table « 4_sample_runs » et l'enregistrer dans la table de résultats définitifs

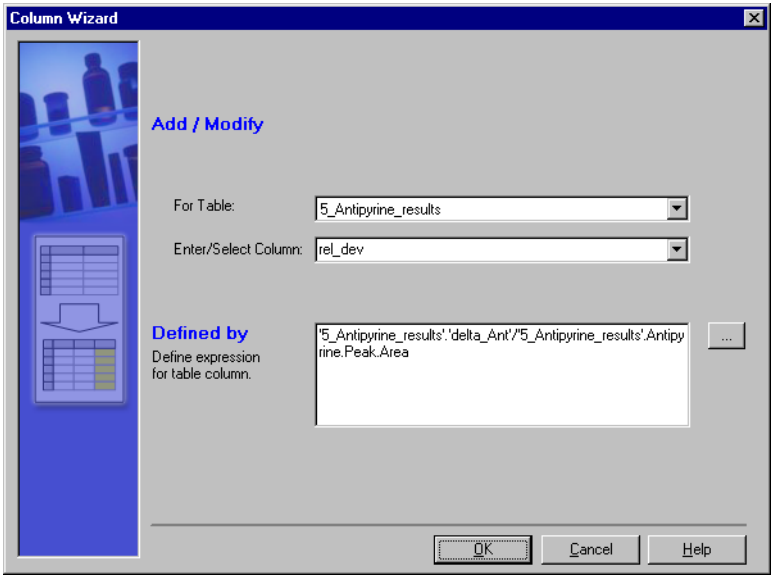



**Figure 32** Calcul de l'écart d'aire relatif

« 5_Antipyrine_results ». L'exemple utilise les colonnes sample name, raw data file name, peak area, delta_ant. Si d'autres colonnes d'identification d'échantillon doivent apparaître dans le rapport définitif, elles doivent être ajoutées à la table de résultats.

Avant de comparer les analyses d'échantillons avec les analyses d'étalonnage, vous devez diviser l'écart absolu d'aires des analyses d'échantillon par l'aire pour obtenir l'écart relatif. L'assistant d'ajout de colonne pour ce calcul est présenté sur la Figure 32 page 79.

Si l'écart d'aire relatif est inférieur à la valeur moyenne obtenue pour les analyses d'étalonnage, les analyses correspondantes doivent recevoir le classement PASS, sinon FAIL. C'est possible avec l'assistant If (Si). La condition IF de la figure Figure 33 page 80 présente cette comparaison. Les instructions THEN et ELSE sont définies par les assistants de colonne, accessibles avec les boutons parcourir de l'assistant IF. Cette étape présentée sur la Figure 34 page 81 ajoute une colonne « status » à la table de résultats.

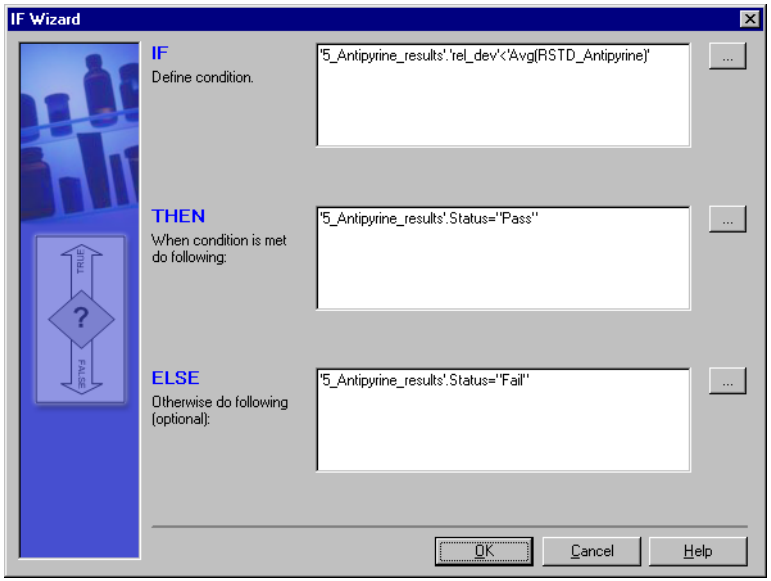



**Figure 33** Assistant IF pour l'évaluation du résultat

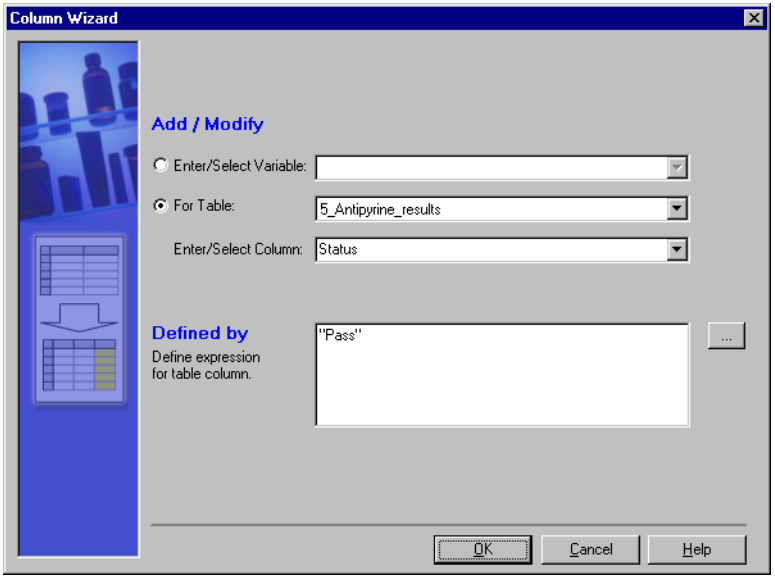



**Figure 34** Définition d'une instruction THEN à l'aide d'un assistant de colonne

Pour tester cette dernière étape, exécutez le script, une nouvelle colonne est ajoutée à la table de résultats avec PASS ou FAIL près de la colonne d'écart relatif (Figure 35 page 81).

5_Antipyrine_results

| Sample | Raw Data | Antipyrine | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| Sample Name | Raw Data File Name | Peak.Area | delta_Ant | rel_dev | Status |
| sam1 | NEW00081.D | 374.5440 | 0.1653 | 0.0441 | Pass |
| sam2 | NEW00082.D | 374.5289 | 0.1502 | 0.0401 | Pass |
| sam3 | NEW00083.D | 374.4829 | 0.1042 | 0.0278 | Pass |
| sam4 | NEW00084.D | 374.1282 | 0.2505 | 0.0669 | Pass |
| sam5 | NEW00085.D | 374.7735 | 0.3948 | 0.1053 | Pass |
| sam6 | NEW00086.D | 374.3857 | 0.0070 | 0.0019 | Pass |
| sam7 | NEW00087.D | 374.2457 | 0.1330 | 0.0355 | Pass |
| sam8 | NEW00088.D | 374.1400 | 0.2387 | 0.0638 | Pass |
| sam9 | NEW00089.D | 374.3288 | 0.0499 | 0.0133 | Pass |
| sam10 | NEW00090.D | 374.2292 | 0.1495 | 0.0400 | Pass |

**Figure 35** Table de résultats définitifs

## Amélioration du modèle

### Mise en forme des colonnes

Enfin, vous pouvez souhaiter mettre en forme certaines des colonnes. Utilisez l'assistant format pour mettre en forme par exemple les colonnes delta_Ant de la table « 4_sample_runs » et la colonne « rel_dev » de la table « 5_Antipyrine_results » ainsi que la colonne Antipyrine.Peak.Area comme indiqué sur la Figure 36.

Toutes les colonnes de table et toutes les variables qui doivent apparaître avec le même format de nombre peuvent être définies par un même assistant de table.

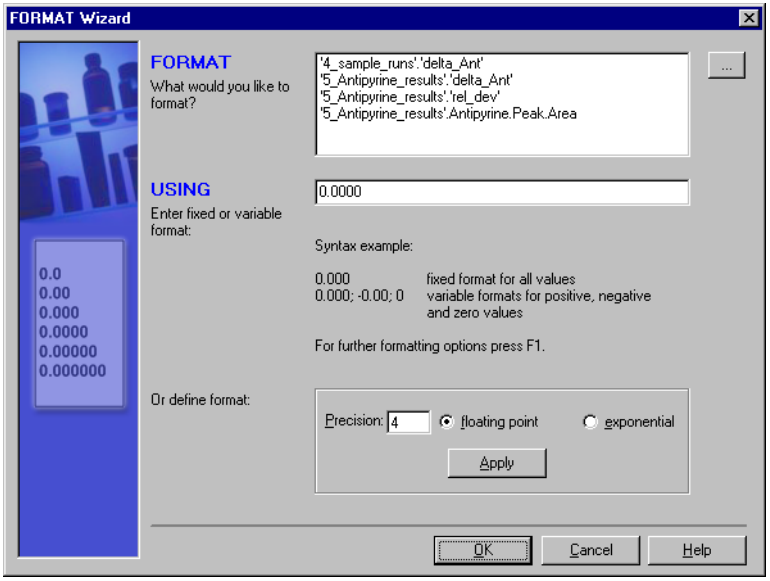



**Figure 36** Mise en forme de la table de résultats définitifs

### Inclusion du modèle dans un rapport

La section « Calculs » page 108 décrit la façon d'inclure une table de résultats de calcul dans un rapport.

# Utilisation de l'éditeur de script du calculateur personnalisé

L'éditeur de script est comparable à un éditeur de test pour les scripts du calculateur personnalisé. Les utilisateurs expérimentés peuvent écrire des scripts sans l'aide d'un assistant. Ceci facilite aussi la création de structures de scripts qui ne pourraient pas être créées à l'aide d'un assistant. Ces structures de scripts peuvent raccourcir de façon importante le code du script pour en faciliter la compréhension.

## Commandes

Vous trouverez ci-dessous la description des commandes les plus importantes pour l'écriture du script du modèle. Pour une description détaillée de toutes les commandes, consultez la section de référence « Commandes du calculateur personnalisé » page 191.

### Sélection des colonnes de la base de données

Pour sélectionner des colonnes dans la base de données, éventuellement avec une condition pour réduire l'ensemble de données obtenu, utilisez la commande SELECT :

SELECT *colonne(s)* FOR *composé(s)* WHERE *aCondition* INTO *aTable*

*column(s)* peut désigner une ou plusieurs colonnes, indiquées par leur nom, dans n'importe quelle table de la base de données.

*compound(s)* peut désigner un ou plusieurs composés, indiqués par leur nom, dont les colonnes doivent être sélectionnées. Les caractères génériques sont autorisés. Consultez la partie référence de la section « Commandes du calculateur personnalisé » *page 191* pour plus de détails.

*aCondition* est facultatif. C'est une condition de sélection.

*aTable* est le nom d'une table vers laquelle la sélection doit être écrite.

### Sélection des colonnes dans une table

Pour sélectionner des colonnes dans une table de calculateur personnalisé, utilisez la commande FROM :

FROM aTable SELECT *column(s)* FOR *compound(s)* WHERE *aCondition* INTO *anotherTable*

Cette commande fait la même chose que la commande SELECT, mais elle ne recherche les colonnes que dans *une table* reçue depuis une commande SELECT ou FOR précédente.

### Prise de décisions

Les instructions conditionnelles permettent de prendre des décisions. La commande IF THEN ELSE permet d'effectuer cette opération :

```
IF aCondition THEN do This ELSE doThat
```

Si la condition est remplie, c'est la partie THEN qui est évaluée ; si la condition n'est pas remplie, c'est la partie ELSE qui est évaluée. La partie ELSE est facultative et peut être omise.

**REMARQUE** L'instruction conditionnelle ne peut être affectée qu'à des opérations sur des variables ou des colonnes de table. Elle n'est pas utilisable pour l'évaluation conditionnelle de votre script de modèle.

### Mise en forme des résultats dans les tables

Les valeurs résultantes des tables de calculateur personnalisé ou des variables peuvent être mises en forme par la commande FORMAT :

```
FORMAT column(s)/variable(s) USING aFormat
```

*aFormat* est une chaîne (entre guillemets) contenant la spécification de format. Consultez la partie référence de la section « Commandes du calculateur personnalisé » *page 191* pour plus de détails.

### Transposition de tables

Les calculs sont effectués sur des colonnes sélectionnées pour chaque ligne. Les résultats sont écrits dans de nouvelles colonnes. Certains calculs (statistiques) doivent être effectués sur une ligne pour chaque colonne. Ce n'est pas possible directement : cette ligne doit être transformée en colonne. Pour cela, utilisez la commande TRANSPOSE :

```
TRANSPOSE aTable BY aColumn INTO destinationTable
```

*Une colonne* est utilisée comme clé pour l'opération de transposition. Les entrées de cette colonne sont utilisées comme en-têtes de colonne de la *table de destination*. Les noms de colonne doivent être uniques, donc la *table de destination* ne contient aucune colonne de nom apparaissant plus d'une fois.

### Groupement de tables

Le groupement de tables est une façon de mieux organiser le contenu d'une table pour rendre possibles certains calculs statistiques. Vous pouvez grouper les tables à l'aide de la commande GROUP :

GROUP aTable BY aColumn DO operation(s) INTO destinationTable

Le groupement d'*une table* est défini par les valeurs d'*une colonne*. Chaque groupe de lignes contient des lignes de valeurs égales dans la colonne. Les opérations à effectuer sur chaque groupe de lignes sont définies par *opération(s)*.

### Ajout de commentaires

Le symbole # permet de démarrer un commentaire. Le texte écrit après ce symbole # n'est pas évalué.

```
#This is a comment!
```

Malgré un assistant à venir chargé de gérer la partie déclaration de votre script, les commentaires sont ajoutés après la définition de variable dans le cas où ils sont associés à cette définition :

```
strCompound = « Barbital »
# Définition du composé
```

La partie déclaration du script commence par le commentaire

```
# D E C L A R A T I O N
```

et se termine par le commentaire

```
# I M P L E M E N T A T I O N
```

## Syntaxe

Vous trouverez la description détaillée de la syntaxe et des commandes de script dans la partie de référence de la section « Commandes du calculateur personnalisé » page 191.

La partie ci-dessous décrit certaines particularités à prendre en compte pour éviter des erreurs inutiles dans le script.

### Utilisation de guillemets

Les chaînes doivent toujours être incluses entre guillemets. Les chaînes sont les noms des composés, échantillons, etc. ainsi que les noms de colonnes. De plus, comme vous le verrez ci-dessous, les chaînes peuvent aussi contenir des commandes.

Si la chaîne contient aussi des guillemets simples, ils doivent être transformés en guillemets doubles.

Les apostrophes autour des noms de colonnes doivent être conservées lors de l'inclusion entre guillemets.

### Utilisations de parenthèses

Les parenthèses doivent toujours être utilisées quand plusieurs opérations dans une expression doivent être traitées par ordre hiérarchique. Les expressions entre parenthèses sont évaluées en premier. Donc chaque partie d'une expression devant être évaluée avant une autre partie doit être incluse entre parenthèses.

### Distinction entre majuscules et minuscules

Le plus souvent les scripts (commandes, noms de colonnes, expressions) ne font pas de distinction entre majuscules et minuscules. Il n'y a que deux exceptions :

- Quand une comparaison est effectuée sur des chaînes pour vérifier l'identité de ces chaînes (chaîne1=chaîne2), cette opération fait la distinction entre majuscules et minuscules.
- Les noms des variables doivent être utilisés dans le script exactement comme ils ont été définis au début.

### Utilisation des variables de chaîne

Une fonction essentielle de l'éditeur de script consiste à créer des *variables de chaîne*. Dans ce qui suit, nous utiliserons le préfixe *str* pour les noms de variables de chaîne. Une variable de chaîne est un élément de texte entre guillemets. Le contenu de ces variables de chaîne peut être un nom simple, par exemple un nom de composé ou la définition d'une colonne de nom d'échantillon :

strCompound = « Barbital »

strSmplName = « Sample.'Sample Name' »

mais aussi un élément de code de script, par exemple l'instruction de sélection des colonnes dans la base de données :

strSelect = « SELECT Sample.'Sample Name' FOR Barbital INTO aTable »

N'oubliez pas que les noms de colonnes contenant un espace :

Sample.'Sample Name'

ou un caractère spécial dans leur nom (tel que « 1_overview »)

doivent être inclus entre ' (apostrophes).

L'utilisation de variables de chaînes permet de définir une fois ce type de variable pour les réutiliser plusieurs fois dans le reste du script.

Pour réutiliser ces variables de chaîne vous devez les faire précéder d'un $ :

$strCompound

$strSelect

Le $ signale à l'interpréteur de script qu'il doit interpréter le contenu de cette variable. Plutôt que d'écrire

SELECT Sample.SampleName FOR Barbital INTO aTable

vous pouvez aussi écrire :

SELECT Sample.SampleName FOR $strCompound INTO aTable

Les interpréteurs substituent *$strCompound* par *Barbital* avant d'évaluer les commande SELECT et d'effectuer la sélection dans la base de données.

L'avantage est de permettre de définir un nom de composé une fois au début du script pour y faire référence dans le reste du script. La modification du nom de composé peut alors se faire une seule fois dans la définition de la variable au début du script.

Comme indiqué dans l'exemple ci-dessus, vous pouvez aussi définir des variables de chaîne pour le codage de script :

strSelect = « SELECT Sample.SampleName FOR Barbital INTO aTable »

ou en prenant en compte la substitution du nom :

strSelect = « SELECT $strSmplName FOR $strCompound INTO aTable »

Pour utiliser ce type de structure, il suffit d'écrire dans l'éditeur de script la variable de chaîne en la faisant précéder du préfixe $ :

$strSelect

L'interpréteur de script commence par substituer les variables de chaîne de noms d'échantillon et de composés par leur contenu avant de faire la sélection elle-même, donc dans ce cas de sélectionner tous les noms d'échantillons correspondant au Barbital.

Comme vous venez de le voir, les variables de chaîne peuvent aussi contenir des variables de chaîne (avec le préfixe $). Les variables de chaîne sont remplacées par leur contenu au moment où l'interpréteur de script évalue et exécute la commande, soit depuis une variable de chaîne comme indiqué dans le dernier exemple :

$strSelect

soit depuis la commande entrée elle-même comme indiqué dans l'exemple précédent :

SELECT $strSmplName FOR $strCompound INTO aTable

Il existe un autre signe très spécial de substitution. Les paramètres de pic tels que l'aire, la hauteur mais aussi le rapport de symétrie, résolution, etc. dépendent du composé choisi. Vous sélectionnez d'habitude ces paramètres pour certains composés. L'éditeur de script permet d'utiliser le ! (point d'exclamation) pour sélectionner ces paramètres de pic faisant référence au composé en cours d'utilisation :

SELECT !Peak.Area FOR $strCompound INTO aTable

L'exécution de cette commande ne sélectionne que les aires de pic du composé défini dans strCompound (par exemple, Barbital). Le ! représente le Barbital ou le nom de composé défini dans la variable de chaîne strCompound.

Vous auriez aussi pu écrire :

SELECT Barbital.Peak.Area FOR $strCompound INTO aTable

mais cette expression ne peut traiter que le Barbital ou

SELECT $strCompound.Peak.Area FOR $strCompound INTO aTable

mais l'utilisation de ! est plus simple.

### Exemple : Création d'un script de calcul de rapport

Rappelez-vous l'exemple créé dans la section précédente. Dans ce chapitre, cet exemple permet de démontrer les avantages de l'utilisation de variables de chaîne. Elles ajoutent de la souplesse pour l'adaptation du script à d'autres jeux de données.

REMARQUE

Si le script décrit ne peut pas être obtenu, une copie du script d'exemple se trouve sur le CD d'installation de ChemStation Plus. Parcourez les dossiers du support pour rechercher **refined_example.cct**. Pour importer le script d'exemple dans la base de données de démo, utilisez la fonction d'importation du calculateur personnalisé.

Vous devez d'abord définir certaines variables de chaîne. Cette partie deviendra la section de définition de votre script. Remplacez ensuite la partie appropriée du script par ces variables. Cette partie deviendra la partie de mise en œuvre (implémentation) du script. Vous devrez enfin ajouter quelques commentaires au script.

#### Définition de variables de chaîne

Définissez une variable de chaîne pour le nom de composé. Il sera ensuite facile de remplacer le nom de composé si vous souhaitez utiliser ce script pour un autre composé :

strCompound = « Antipyrine »

Définissez une variable de chaîne pour le nom de colonne de réponse. Il sera ensuite facile de choisir l'aire ou la hauteur comme indicateur de réponse :

strResponse = « Peak.Area »

Pour une meilleure lisibilité, définissez une variable de chaîne pour la sélection. Ceci facilite la modification de la sélection complète. Vous pouvez même utiliser les variables de chaîne définies ci-dessus dans cette sélection en les faisant précéder du préfixe $ :

strSelection=« Sample.'Sample Name', Sample.'Sample Calibration Level', Sample.'Sample Type', 'Acq Sequence'.'Acq. Sequence Name', 'Raw Data'.'Raw Data File Name', !$strResponse »

### Application des variables de chaîne

La première instruction Select devient :

SELECT $strSelection FOR $strCompound INTO '1_overview'

et la deuxième est réduite à :

FROM '1_overview' SELECT $strSelection FOR $strCompound WHERE '1_overview'.Sample.'Sample Type'=« Calibration » INTO '2_calib_runs'

Les trois instructions de calcul se simplifient en :

GROUP '2_calib_runs' BY 'Sample.Sample Calibration Level' DO rstdev ($strCompound.$strResponse) AS 'RSTD_Antip_area' INTO '3_Calibstatistics'

'5_compound_results'.'rel_dev'='5_compound_results'.'delta_Ant'/ '5_compound_results'.$strCompound.$strResponse

### Ajout de commentaires au script

La dernière étape consiste à ajouter des commentaires judicieux pour séparer la section de définition de la section d'implémentation et à simplifier la personnalisation de la section de définition. Consultez aussi le modèle **refined_example.cct** sur le CD-ROM d'installation.

# 4
# Utilisation de l'éditeur de modèle de rapport

Présentation de l'éditeur de modèle de rapport 92
Préparation de l'utilisation de l'éditeur 94
Utilisation de l'éditeur de modèle de rapport 97
Composants du modèle de rapport 100
Tableaux 110
Création d'un rapport à l'aide d'un modèle 125
Utilisation des rapports automatiques 125

# Présentation de l'éditeur de modèle de rapport

L'éditeur de modèle de rapport est une application accessible par l'icône de gauche sous le nom du rapport (Compound Amounts [(built-in)] dans la figure ci-dessous) ou par une commande du menu Report (Rapport) dans la boîte de dialogue principale de ChemStore C/S.

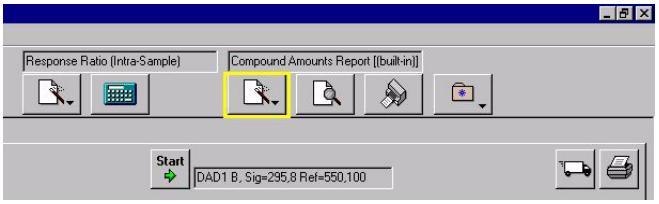



**Figure 37** Editeur de modèle de rapport

L'éditeur de modèle de rapport sert à créer et à modifier des modèles à partir desquels les rapports seront ensuite élaborés. Vous souhaiterez probablement utiliser le même rapport de nombreuses fois, mais avec des variantes et des données différentes ; l'éditeur a été conçu pour vous permettre de créer facilement des modèles de rapports modifiables.

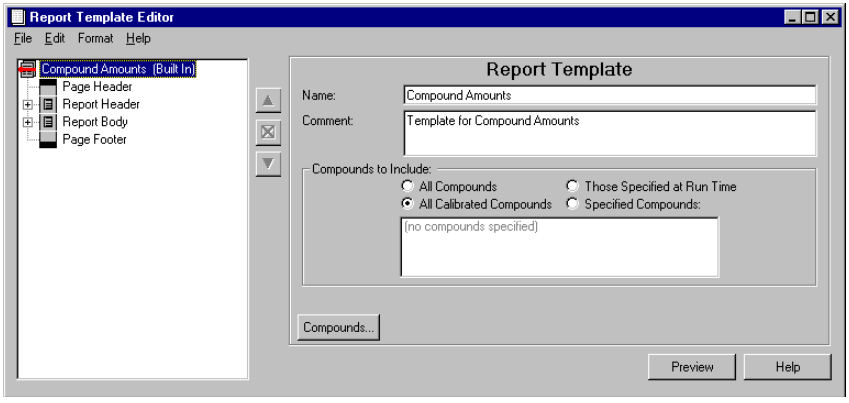



**Figure 38** Editeur de modèle de rapport

Quand vous créez un modèle de rapport, vous spécifiez des éléments tels que le contenu et l'emplacement d'un en-tête ou d'un pied de page, des tableaux et des graphiques à inclure et les polices à utiliser dans les différentes parties du rapport. En effet, vous créez une entité spécifique pour la mise en page et le contenu d'un rapport et vous enregistrez cette entité afin de pouvoir la réutiliser la prochaine fois que vous aurez besoin de générer un rapport identique. Vous pouvez également modifier la structure de n'importe quel modèle pour l'enregistrer sous un nom différent.

# Préparation de l'utilisation de l'éditeur

## Extraction des données de rapport

Avec ChemStore C/S, vous interrogez la base de données en fonction du contenu de certains champs dont vous spécifiez les valeurs. L'ensemble des enregistrements conformes aux critères de la requête s'appelle le jeu de données en cours (on l'appelle aussi instantané - snapshot). Vous sélectionnez ensuite un modèle de rapport et vous l'utilisez pour générer un rapport. Ce rapport imprime les informations contenues dans le jeu de données en cours selon la structure du modèle. Vous pouvez même réduire encore les données qui apparaissent dans le rapport ; en revanche, les données qui ne font pas partie du jeu en cours ne peuvent pas apparaître sur un rapport élaboré à partir de ces données.

## Arborescences de l'éditeur de modèle de rapport

L'éditeur de modèle de rapport comporte une **arborescence de vues** permettant d'afficher les différents objets.

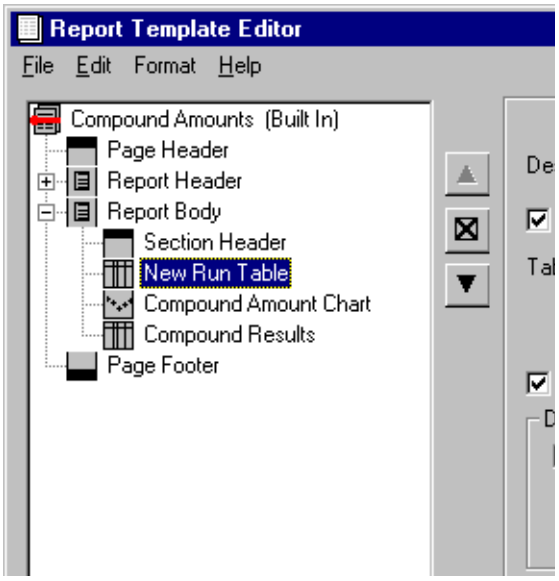



**Figure 39** Arborescence des vues de modèles de rapports dans l'éditeur de modèle

Le premier objet qui s'affiche dans une arborescence lorsque vous ouvrez un modèle, c'est le modèle de rapport lui-même (sur la gauche de la boîte de dialogue principale). Quand vous modifiez un modèle de rapport existant, la boîte de dialogue principale de l'éditeur affiche une arborescence de la structure du modèle. Le nom du modèle est situé au sommet de l'arborescence. Juste au-dessous apparaissent les éléments du modèle de rapport :

- en-têtes et pieds de page ;
- sections de données ;
- en-têtes de section ;
- éléments de section, par exemple tableaux, graphiques, calculs, chromatogrammes et spectres.

Tout ce qui peut être développé dans une arborescence, comme une structure de répertoires dans l'Explorateur Windows, est repéré sur le côté gauche par un signe plus. Les en-têtes de pages n'ont jamais de signe plus car on ne peut pas les développer. En revanche, les sections de données contiennent des tableaux et des graphiques ; ainsi, si vous cliquez sur le signe plus figurant à côté du nom d'une section de données, vous pouvez en voir le contenu.

Pour en savoir plus sur les sections et les éléments composant un modèle de rapport, consultez la section « Composants du modèle de rapport » page 100.

# Utilisation de l'éditeur de modèle de rapport

## Création des sections de rapport à l'aide de boîtes de dialogue

Utilisez la boîte de dialogue principale de l'éditeur de modèle de rapport pour créer les sections et éléments que vous souhaitez voir apparaître sur le rapport par les commandes de menus ou en cliquant avec le bouton droit de la souris.

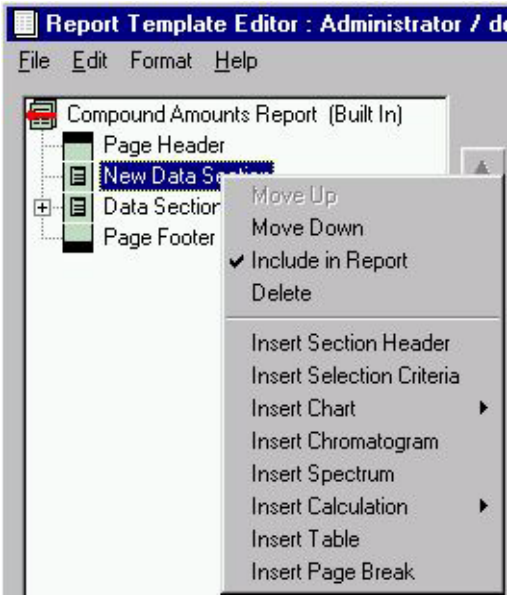



**Figure 40** Menu de création des éléments de sections de données

Les paramètres associés à la section ou à l'élément que vous modifiez apparaissent sur le côté droit de la boîte de dialogue. Si par exemple vous ajoutez un en-tête de page, le côté droit de la boîte de dialogue comporte des paramètres tels qu'imprimer ou non l'en-tête sur chaque page, imprimer une bordure autour de l'en-tête, etc.

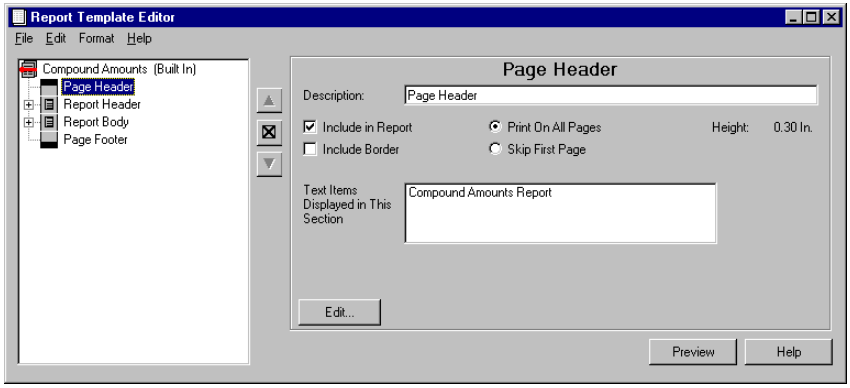



**Figure 41** Boîte de dialogue Page Header (En-tête) de l'éditeur de modèle de rapport

Ensuite, pour accéder aux boîtes de dialogue permettant de modifier les paramètres, cliquez sur le ou les boutons en bas de cette boîte de dialogue. Quand vous modifiez un en-tête de page, un seul bouton figure dans la boîte de dialogue principale de l'éditeur ; ce bouton s'appelle Edit (Editer). En cliquant dessus, vous pouvez modifier les nombreux paramètres associés à un en-tête, tels que le nombre de colonnes et de lignes de l'en-tête ainsi que le texte et les données à imprimer dans les colonnes ou lignes.

Si vous modifiez un tableau, il y a beaucoup plus de boutons au bas de la boîte de dialogue principale de l'éditeur, car il y a bien plus de paramètres à configurer pour un tableau que pour un en-tête.

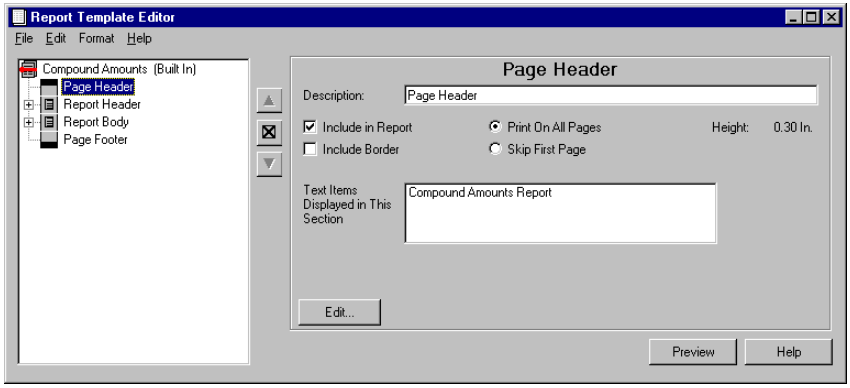



**Figure 42** Boîte de dialogue Table (Tableau) de l'éditeur de modèle de rapport

## Arborescences pour des tableaux et des graphiques

Les arborescences servent également à sélectionner des champs de données tels que des colonnes de tableaux ou des axes de graphiques. Une arborescence est utile pour sélectionner les champs d'une base de données parce que ces champs appartiennent à des enregistrements qui font eux-mêmes partie d'un jeu de données. Par exemple, si vous sélectionnez les colonnes dans une table d'échantillons, vous souhaiterez développer la vue du jeu de données contenant les informations portant sur l'organisation des échantillons afin de visualiser les autres champs associés aux échantillons.

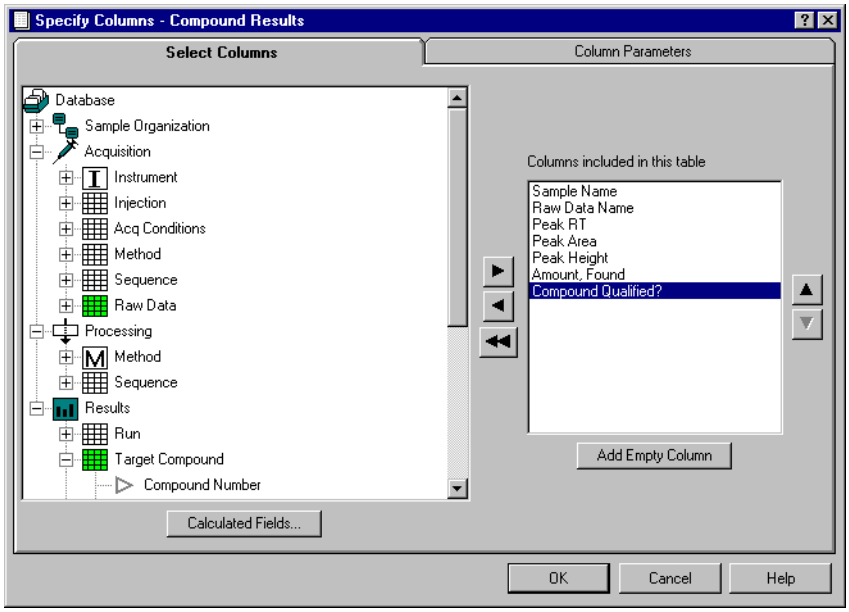



**Figure 43** Arborescence pour la conception d'un tableau

# Composants du modèle de rapport

Un modèle de rapport comprend un ou plusieurs des objets suivants : un en-tête, un pied de page, des sauts de page et des sections de données. Les sections de données contiennent des éléments de rapport tels que les tableaux, calculs, chromatogrammes, spectres et graphiques. Grâce à une case à cocher, vous pouvez exclure d'un rapport une section ou un élément quelconque, sans pour autant l'éliminer du modèle de rapport. Chaque composant d'un modèle de rapport est appelé « objet » parce que vous pouvez le modifier individuellement et qu'il ne dépend pas des autres composants sélectionnés pour votre modèle.

## En-têtes et pieds de pages

Dans votre modèle de rapport, vous pouvez définir un en-tête ou un pied de page contenant le nom du rapport (Report Name), des commentaires de rapport (Report Comment), l'utilisateur, l'heure, la page, la date de modification du rapport et l'auteur de la modification. Chacun de ces éléments peut être placé dans l'une des trois colonnes de l'en-tête et mis en forme avec toute police et taille de police disponible sur votre ordinateur. Vous pouvez en outre nommer et justifier ces éléments à l'intérieur de la colonne. Des graphiques, comme le logo de votre société, peuvent être placés dans l'en-tête et le pied de page.

Vous modifiez les en-têtes et les pieds de pages par une boîte de dialogue qui vous permet de voir à quel endroit chaque élément est placé par rapport à l'en-tête et aux autres éléments de l'en-tête. Cette boîte de dialogue permet de voir l'aspect de votre en-tête ou pied de page à mesure que vous le modifiez.

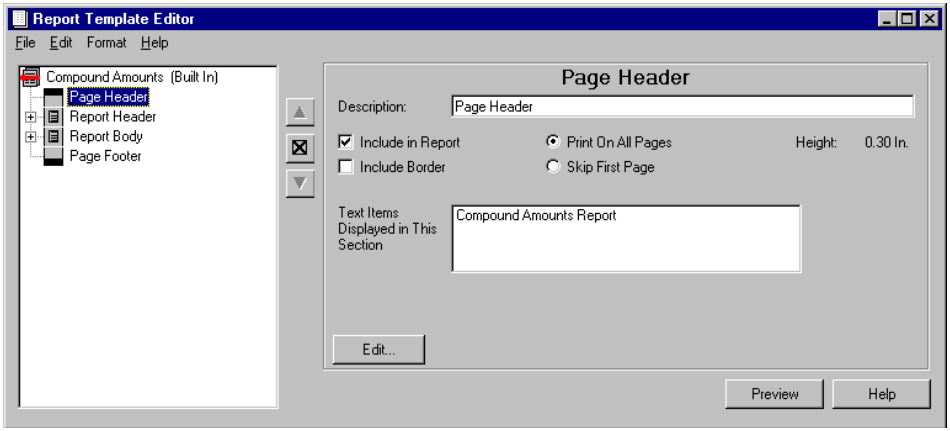



**Figure 44** Edition des en-têtes et pieds de pages

## Sections de données

Les sections de données contiennent un ou plusieurs éléments de rapport, par exemple tableaux, calculs, graphiques, chromatogrammes et spectres. Il y a peu de paramètres directement associés à une section de données, comme vous pouvez le voir en cliquant sur le nom d'une section de données de l'arborescence d'un modèle de rapport. Il y a un champ de description (qui apparaît sur l'arborescence) ainsi qu'une case à cocher déterminant si la section est à inclure ou non dans le rapport. L'unique bouton Repeat (Répéter), qui apparaît dans la boîte de dialogue, permet de sélectionner les champs à répéter. La fonction de répétition a donc une influence essentielle sur l'organisation interne du rapport généré. C'est la clé de la création des différents types de rapports.

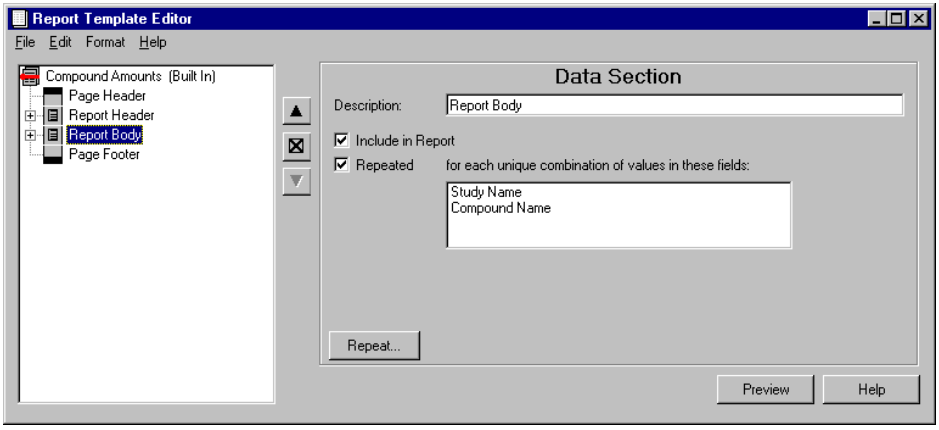



**Figure 45** Sections de données

### Répétition d'une section

Vous pouvez reproduire une section de données pour chaque combinaison unique de champs sélectionnés. Supposons par exemple que vous souhaitez créer un rapport récapitulatif de séquences, incluant des calculs statistiques. Mais vous ne souhaitez pas calculer une statistique globale de tous les niveaux d'étalonnage et analyses d'échantillons. Pour afficher séparément dans le rapport les différents niveaux d'étalonnage et types d'échantillons, les éléments Sample calibration level (Niveau d'étalonnage d'échantillon) et Sample type (Type d'échantillon) doivent être ajoutés dans la section répétition, comme indiqué sur la Figure 45.

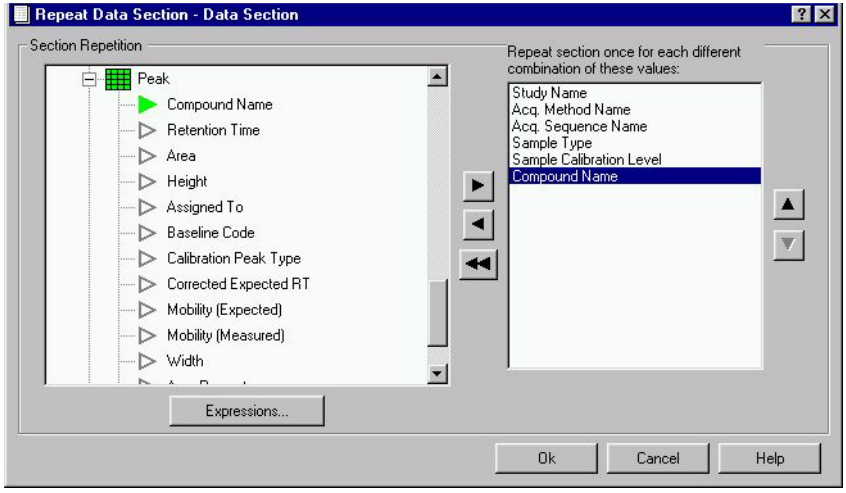



**Figure 46** Répétition

Dans notre exemple, nous souhaitons aussi éviter les statistiques inter-séquences et inter-études, ces éléments sont donc aussi ajoutés comme séparateurs.

Enfin, nous souhaitons créer un rapport des résultats de séquence pour chaque composé dans une table individuelle, avec ses statistiques. C'est pourquoi nous ajoutons l'élément Compound name (Nom de composé).

L'ordre des éléments de champs dans la section de données est également un critère important. L'élément le plus bas dans la liste est celui qui est effacé en premier. Dans notre exemple, les pages du rapport se présentent dans l'ordre suivant :

**Compound A** (Cal.level 1), **Compound B** (Cal.level 1), **Compound A** (Cal.level 2), **Compound B** (Cal.level 2), **Compound A** (samples), **Compound B** (samples)

Pour obtenir tous les rapports de Compound A (Composé A) dans une série de pages de rapport, vous devez déplacer l'élément Compound Name (Nom de composé) au-dessus de sample type (type d'échantillon). Ceci donne l'ordre d'impression suivant :

**Compound A** (Cal.level 1), **Compound A** (Cal.level 2), **Compound A** (samples), **Compound B** (Cal.level 1), **Compound B** (Cal. level 2), **Compound B** (samples).

### Champs calculés

Vous pouvez créer des champs calculés à partir de n'importe quel champ du jeu de données en cours. Une fois créés, les champs calculés peuvent être utilisés pour déterminer la section à répéter ainsi que les colonnes d'un tableau ou les axes d'un graphique. Les champs calculés sont sélectionnés de la même manière que les autres champs de données mais ils apparaissent ensemble sous l'en-tête Calculated Fields (Champs calculés) dans l'arborescence du jeu de données en cours.

## En-têtes de sections

Les en-têtes de sections permettent de différencier les sections du rapport. Outre les éléments listés pour les en-têtes et pieds de page (nom de rapport, commentaire de rapport, page, etc.), les en-têtes de sections peuvent contenir toutes les données à répéter que vous avez sélectionnées. Par exemple, si vous choisissez de répéter la section basée sur une combinaison unique type d'échantillons et nom d'étude, ces deux éléments apparaîtront dans la liste des éléments qui peuvent être placés dans un en-tête de section. Si vous ne choisissez aucun élément à répéter, les seuls que vous pouvez placer dans un en-tête de section sont les éléments disponibles au niveau de l'en-tête de page standard.

## Eléments de sections

### Tableaux

Vous pouvez créer huit types de tables ou tableaux différents ; le type de table ou tableau que vous sélectionnez détermine les champs du jeu de données que vous pouvez utiliser. Les choix possibles sont : injection, analyse, acquisition, composé, pic, configuration de colonnes, composants d'instruments et journal d'audit. Pour en savoir plus sur le fonctionnement des tables et tableaux, consultez la section « Tableaux » de ce chapitre.

Pour chaque tableau, spécifiez les éléments suivants :

- les champs de données à utiliser comme colonnes du tableau ;
- les champs de données à utiliser pour regrouper des données dans le tableau ;
- les colonnes à trier (jusqu'à trois colonnes) ;
- toutes les données récapitulatives à générer pour chaque groupe ou pour le rapport global ;
- la police et la taille de police des informations à imprimer.

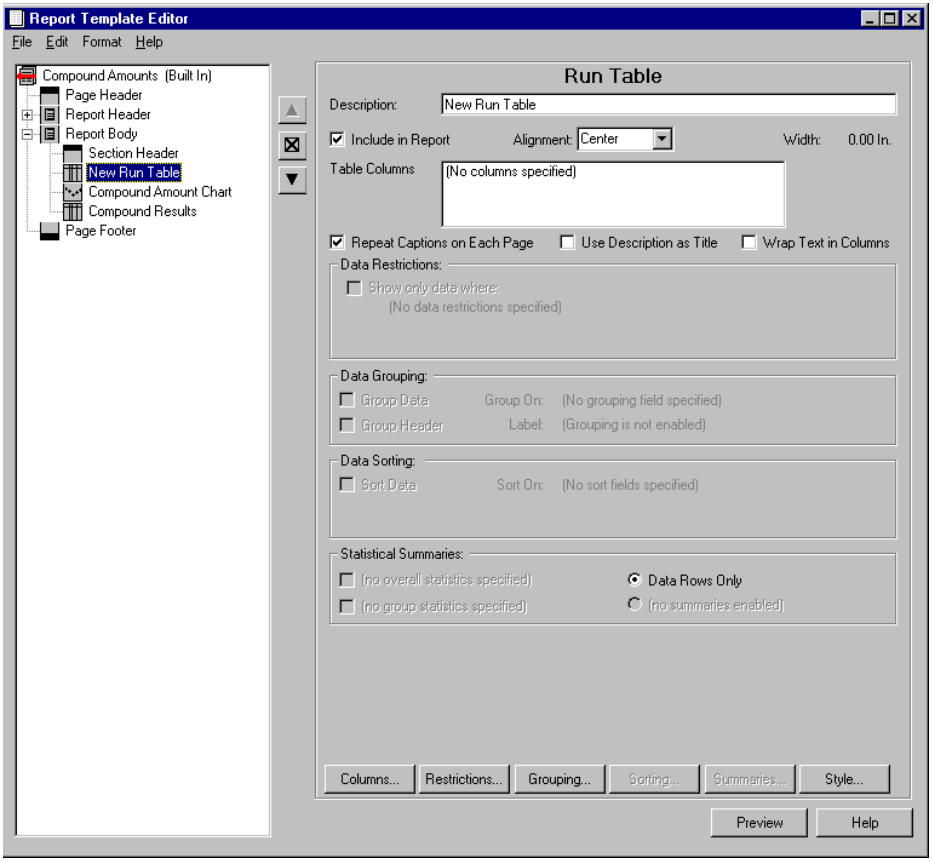



**Figure 47** Table d'analyse

Chaque fois qu'un tableau utilise des colonnes ne contenant que des noms ou des chaînes de caractères et aucune valeur numérique, les lignes contenant les mêmes informations sont réunies en une seule.

Chaque fois qu'un tableau utilise des colonnes contenant des valeurs numériques, les lignes restent toujours séparées même si leurs données semblent identiques, comme dans les lignes 1 et 3 de la table des pics ci-après.

**Tableau 2** Table des pics

| Nom de l'étude | Nom de l'échantillon | Volume Inj. | Composé | Temps de rét. attendu |
|---|---|---|---|---|
| Procaïne | Procaïne déc. | 3.0 | Acide amino-benzoïque | 1.734 |
| Procaïne | Procaïne contrôle | 3.0 | Acide amino-benzoïque | 1.734 |
| Procaïne | Procaïne déc. | 3.0 | Acide amino-benzoïque | 1.734 |

## Graphiques

Vous pouvez créer deux types de graphiques pour votre rapport : des graphiques de composés ou d'échantillons. Dans les deux cas, spécifiez les éléments suivants :

- les champs de données à utiliser pour créer les axes X et Y ;
- des restrictions sur les données réelles utilisées pour créer le graphique et pour les graphiques de composés, les composés à inclure ;
- les champs à utiliser pour regrouper les graphiques ;
- des options de graphiques supplémentaires comprenant le type de courbe, la pondération, le traitement de l'origine, les limites, les titres et l'échelle.

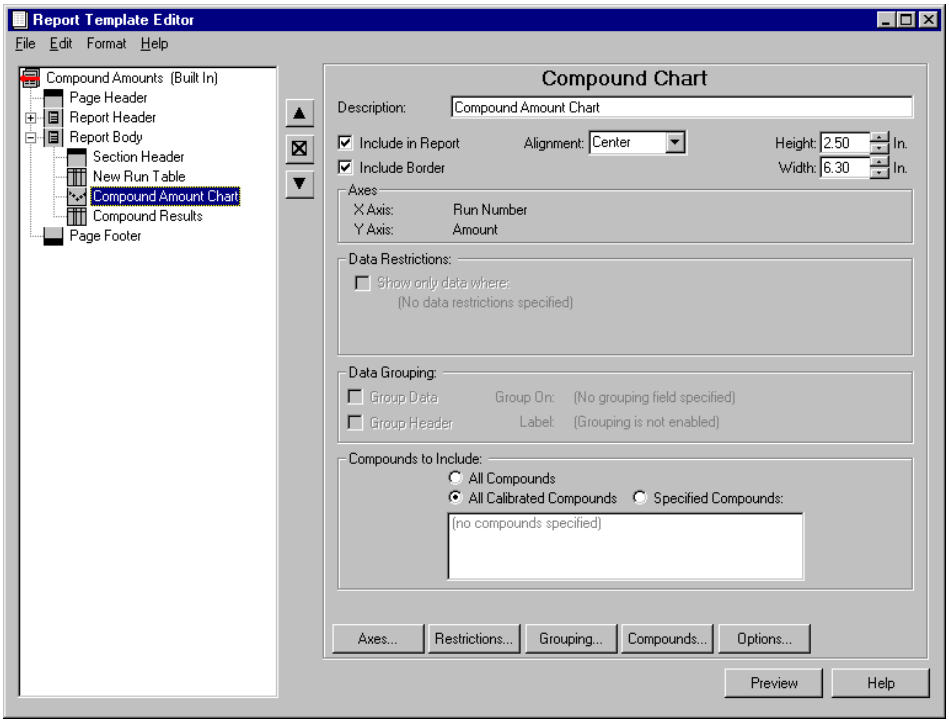



**Figure 48** Compound Chart (Graphique de composés)

Lors de la création d'un graphique d'échantillons, les valeurs des ordonnées peuvent être choisies dans des champs par analyse. Pour chaque champ sélectionné pour les ordonnées, il y a un seul point par analyse, les valeurs correspondant aux différentes analyses étant réparties le long de l'axe des abscisses.

Lors de la création d'un graphique de composés, les valeurs des ordonnées peuvent être choisies dans les champs par composé. Si la section comporte des données pour plusieurs composés, les données peuvent figurer sur un seul graphique (avec une courbe par composé) ou sur différents graphiques.

Vous pouvez également regrouper des données dans des graphiques. Si les données sont regroupées, seules les données du groupe sont incluses dans un graphique. Un graphique est par conséquent imprimé pour chaque groupe de données différent.

### Calculs

Vous pouvez inclure dans votre rapport les résultats générés par un script de calcul personnalisé.

Les résultats à afficher peuvent être une table de calcul, une liste de variables utilisées pour les calculs ou un graphique de calcul permettant de visualiser les résultats du calcul.

De plus, le script de calcul lui-même et la liste des erreurs et avertissements de calcul peuvent être ajoutés au rapport.

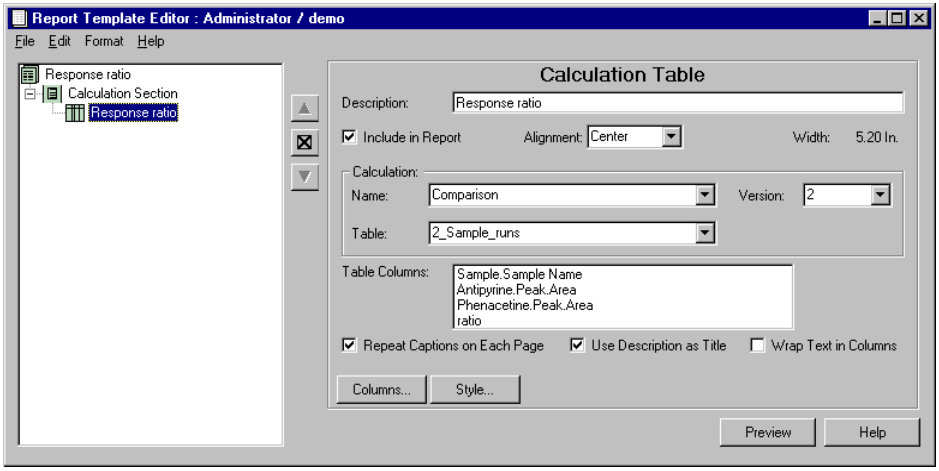



**Figure 49** Table de calcul

Pour chaque élément, vous devez indiquer les éléments suivants :

- nom du modèle de calcul ;
- version du modèle de calcul ;
- police et taille de police des informations à imprimer.

- Pour les tables et graphiques de calcul, vous devez sélectionner de plus le nom de la table de résultats générée par le modèle de calcul. Dès que le modèle et la version de calcul sont choisis, les tables de calculs peuvent être sélectionnées. La boîte de dialogue data series (séries de données) permet alors de sélectionner les colonnes à afficher ou à tracer.

**ATTENTION**

Pour créer un modèle de calcul avec des calculs personnalisés, il est essentiel que ce modèle de calcul puisse être exécuté sans problème sur le jeu de données en cours.

Les modèles de rapport et de calcul ne sont pas liés lors de l'exportation vers un système de fichiers. Les deux modèles doivent être exportés et importés individuellement.

### Chromatogrammes

Il est possible d'ajouter des chromatogrammes au rapport s'ils sont enregistrés dans la base de données. L'enregistrement des chromatogrammes est une option dans les paramètres de transfert d'étude. Quand les chromatogrammes sont imprimés dans le rapport, ce sont des représentations de méta-fichiers graphiques des tracés de chromatogrammes produits par le logiciel ChemStation. Ils ne peuvent être personnalisés dans les rapports ChemStore.

Si votre système ChemStation utilise un pilote d'imprimante couleur ou en niveaux de gris, les chromatogrammes enregistrés dans ChemStore sont en couleur. Sinon, ils sont en noir et blanc.

La taille, la position et le groupement des chromatogrammes peuvent être spécifiés dans l'éditeur de modèle de rapport.

### Tracés de spectres

Si des spectres ont été enregistrés avec les données, ils peuvent aussi être inclus dans le rapport. L'enregistrement des spectres est aussi régi par les paramètres de transfert d'étude. Comme pour les tableaux et certains graphiques, il est possible de définir certaines restrictions pour n'imprimer par exemple que les spectres d'un composé ou d'un groupe de composés.

Si votre système ChemStation utilise un pilote d'imprimante couleur ou en niveaux de gris, les tracés de spectres enregistrés dans ChemStore sont en couleur. Sinon, ils sont en noir et blanc.

La taille, la position et le groupement des tracés de spectres peuvent être spécifiés dans l'éditeur de modèle de rapport.

# Tableaux

Les notions sous-jacentes à la création de tableaux avec l'éditeur de modèle de rapport ChemStore sont les plus complexes de ce logiciel. Cette section présente ces notions pour vous permettre de comprendre les tableaux qui résultent des choix que vous avez effectués.

## Regroupements et récapitulatifs de tableaux

### Regroupements

Les données des tableaux peuvent être regroupées : toutes les lignes possédant la même valeur pour un champ déterminé sont alors imprimées successivement. Les groupes sont classés selon le champ qui contrôle le regroupement et les lignes de chaque groupe sont triées dans l'ordre choisi. Si vous choisissez de regrouper les lignes d'un tableau, vous pouvez économiser une colonne de ce dernier en n'incluant pas la colonne de l'élément de regroupement. En fait, si vous avez défini les colonnes de votre tableau et si vous définissez ensuite un regroupement en utilisant un champ déjà présent dans une colonne, un message apparaît pour signaler la redondance.

Vous pouvez par exemple regrouper les lignes d'un tableau en fonction du nom de l'étude, de sorte que toutes les données de la même étude apparaissent ensemble. L'élément de regroupement (ici le nom de l'étude) apparaît en tête de chaque groupe puis toutes les données de ce groupe sont classées dans l'ordre spécifié. Une autre méthode consiste à inclure le nom de l'étude dans les colonnes puis à affecter le nom de l'étude comme premier élément de tri. En effectuant un regroupement par nom d'étude, vous pouvez gagner de la place dans votre tableau pour inclure une autre colonne.

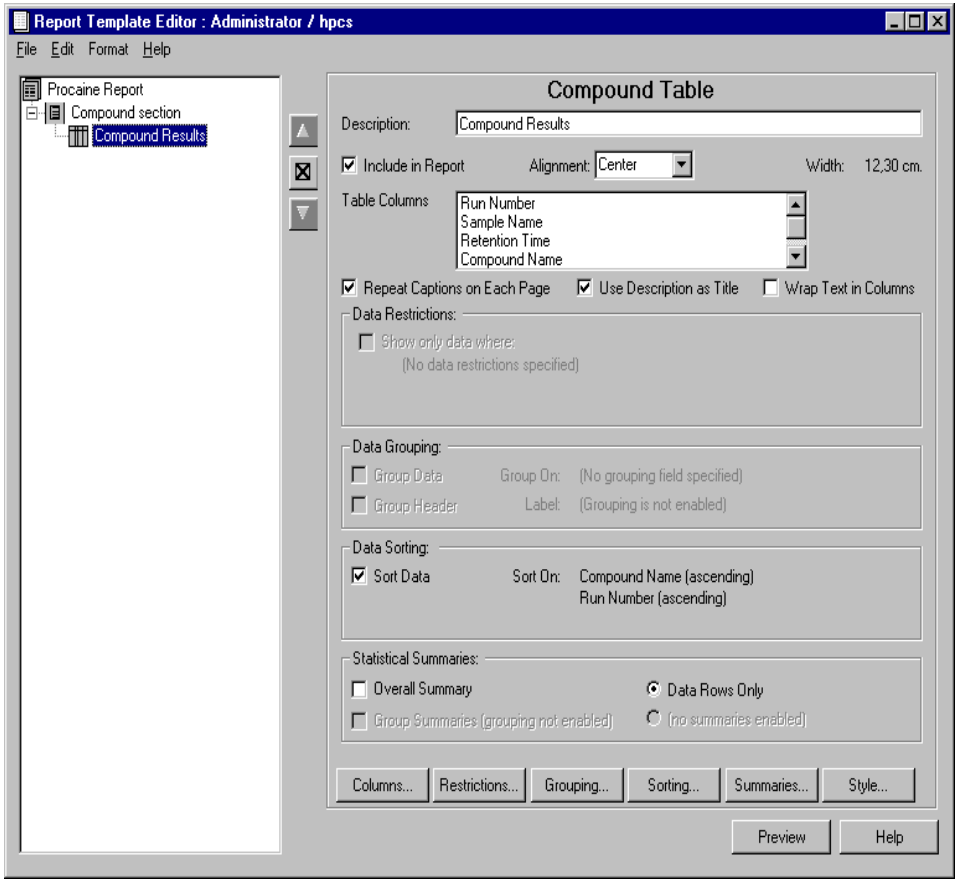



**Figure 50** Compound Table (Table des composés)

## Statistiques

Des statistiques peuvent être imprimées dans des tableaux récapitulatifs. Vous pouvez demander un récapitulatif général (overall summary) et/ou un récapitulatif de groupe (si vous avez spécifié un élément de données pour le regroupement). Les récapitulatifs permettent d'inclure jusqu'à sept lignes de données statistiques telles que la moyenne, l'écart type, le minimum, le maximum, etc. Pour chaque colonne, vous pouvez spécifier de l'inclure ou non dans les récapitulatifs généraux ou de groupe.

# Types de tableaux

## Relations entre les éléments d'un tableau

Les relations entre les éléments d'un tableau, même dans une petite base de données, peuvent être relativement complexes. La figure ci-après montre un exemple de relations entre certains éléments d'un tableau d'une petite base de données.

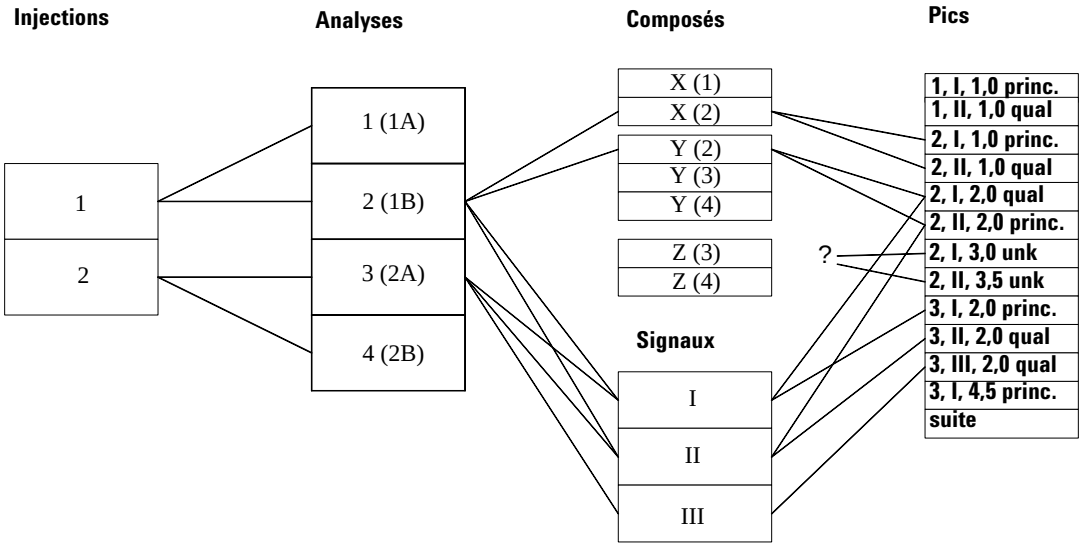



**Figure 51** Relations entre les éléments de tableaux

Dans cette figure, les injections, les analyses, les composés, les acquisitions et les pics sont liés comme suit :

- La base de données comprend deux injections différentes. Chacune de ces injections a été analysée deux fois, il en résulte quatre analyses.
- Au cours de la première injection, les acquisitions (chromatogrammes) I et II ont été effectuées (il peut s'agir d'acquisitions provenant de deux détecteurs ou de deux voies différents d'un détecteur multivoie). Au cours de la seconde injection, trois acquisitions (I, II et III) ont été analysées.

- Dans l'analyse 1, seul le composé X a été détecté, dans l'analyse 2, les deux composés X et Y ont été trouvés. Les analyses 3 et 4 ont toutes deux permis de détecter les composés Y et Z.
- Les résultats concernant l'acquisition I de l'analyse 2 comprennent des pics à 1,0, 2,0 et 3,0 minutes. L'acquisition II pour l'analyse 2 comprend des pics à 1,0, 2,0 et 3,5 minutes.
- L'acquisition I a été utilisée pour quantifier le composé X, le pic (2, I, 1.0) est ainsi identifié comme pic « main » (principal). Le pic ayant le même temps de rétention dans l'acquisition II est toujours associé au composé X, mais n'est pas le pic principal.
- Il y a deux pics associés au composé Y pour l'analyse 2 ; dans ce cas, le pic principal est celui de l'acquisition II.

  Notez que les pics de l'analyse 2 à 3,0 et 3,5 minutes ne sont associés à AUCUN composé.

Cet exemple sert à présent de support aux explications concernant les tables d'injection, d'analyse, d'acquisitions, de composés et de pics.

### Table d'injection

Dans une table d'injection, les seuls champs (colonnes) que vous pouvez inclure sont ceux qui possèdent une valeur par injection (par exemple, la date et l'heure de l'injection, le nom de l'instrument utilisé, le numéro du flacon, le nom du fichier). En effet, le modèle de données présenté dans la Figure 51 page 112 se résume en fait à celui de la Figure 52.

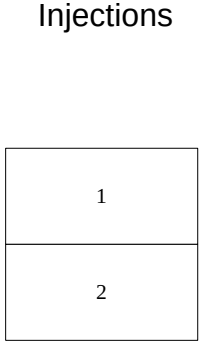



**Figure 52** Modèle de données d'une table d'injection

D'une manière générale, la table du rapport n'aura pas plus d'une ligne par injection dans la base de données instantanée (ici deux lignes au total) : voir le Tableau 3 page 114.

**Tableau 3** Exemple de table figurant dans le rapport

| Date d'injection | Instrument | Opérateur | Numéro de flacon |
|---|---|---|---|
| 1-avr-1977 08: 00 | Système CPL A | Fred | 10 |
| 1-avr-1977 08:20 | Système CPL A | Fred | 33 |

Il y a plusieurs raisons pour lesquelles il pourrait y avoir moins de lignes :

- si la table fait partie d'une section répétée, chaque répétition de la table comportera seulement les lignes associées aux valeurs des champs de répétition propres à cette répétition. Par exemple, si la section est répétée sur la base du nom du composé, il y aura trois répétitions (une par composé X, Y et Z). La table d'injection de la première répétition comportera seulement l'injection I (parce que le composé X est détecté seulement dans les analyses de la première injection). La répétition « Y » comportera seulement les injections I et II et la répétition « Z » comportera une seule ligne pour l'injection II.
- Si des spécifications restreignent les données de la table, toute ligne non conforme aux critères sera éliminée.
- Si la table ne contient aucune colonne de valeurs numériques ou de date/heure, seules les lignes différentes apparaissent dans la table. Dans l'exemple ci-dessus, si seules les colonnes Instrument et Opérateur sont incluses, il n'y aura qu'une seule ligne au lieu de deux lignes identiques.

### Table d'analyse

Les seuls champs que vous pouvez inclure dans une table d'analyse sont ceux qui possèdent une valeur par injection ou une valeur par analyse (par exemple, le nom de l'étude, les valeurs de champs personnalisés, le nom d'une méthode de traitement, etc.). Le modèle de données de la Figure 51 page 112 se résume en fait à celui de la Figure 53.

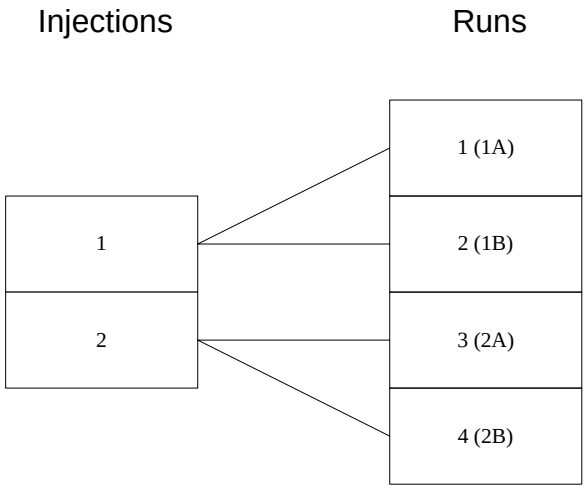



**Figure 53** Champs d'une table d'analyse

D'une manière générale, le tableau du rapport n'aura pas plus d'une ligne par analyse dans la base de données instantanée (ici quatre lignes au total) : voir le Tableau 4.

**Tableau 4** Exemple de table figurant dans le rapport

| N° d'analyse | Date d'injection | Flacon | Version | Approbation | Code patient |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 1-avr-1977 08: 00 | 10 | 2 | En attente | PKH9653 |
| 2 | 1-avr-1977 08: 00 | 10 | 1 | Approuvé | PKH9653 |
| 3 | 1-avr-1977 08:20 | 33 | 2 | En attente | PKH9004 |
| 4 | 1-avr-1977 08:20 | 33 | 1 | Approuvé | PKH9004 |

Comme pour les tables d'injection, il peut y avoir moins de lignes si :

- la table fait partie d'une section répétée ;
- des spécifications restreignent les données de la table ;
- la table ne contient aucune colonne de valeurs numériques ou de date/heure, sinon plusieurs lignes seraient identiques. Par exemple, si vous intégrez uniquement la colonne Approbation OU Code du patient, il n'y aura que deux lignes. Si vous intégrez les deux colonnes Approbation ET Code du patient, la table comportera toujours quatre lignes car les quatre combinaisons rencontrées sont alors différentes.

### Table d'acquisition

Les seuls champs que vous pouvez inclure dans une table d'acquisition sont ceux qui possèdent une valeur par injection ou une valeur par analyse ou acquisition (par exemple, description de l'acquisition, heure de démarrage, heure de fin, type). Le modèle de données accessible ressemble à celui de la Figure 54.

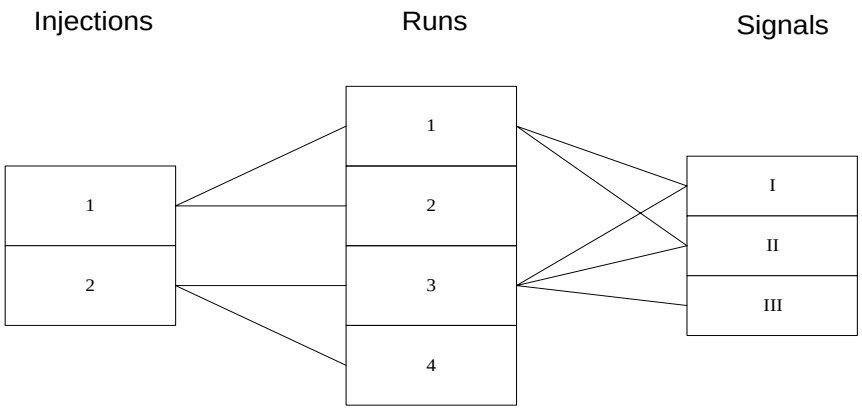



**Figure 54** Modèle de données d'une table d'acquisition

D'une manière générale, le rapport ne comportera pas plus d'une ligne pour chaque combinaison d'analyse et d'acquisition. Dans le cas présent, il y a deux acquisitions associées aux analyses 1 et 2 et trois acquisitions associées aux analyses 3 et 4 ; il pourrait ainsi y avoir jusqu'à 10 lignes : voir le Tableau 5 page 117.

**Tableau 5** Exemple de table figurant dans le rapport

| N° d'analyse | Version | Flacon | Voie |
|---|---|---|---|
| 1 | 1 | 10 | DAD1 A, Sig=282,8 Ref=550,100 |
| 1 | 1 | 10 | DAD1 B, Sig=295,8 Ref=550,100 |
| 2 | 2 | 10 | DAD1 A, Sig=282,8 Ref=550,100 |
| 2 | 2 | 10 | DAD1 B, Sig=295,8 Ref=550,100 |
| 3 | 1 | 33 | DAD1 A, Sig=282,8 Ref=550,100 |
| 3 | 1 | 33 | DAD1 B, Sig=295,8 Ref=550,100 |
| 3 | 1 | 33 | DAD1 C, Sig=320,8 Ref=550,100 |
| 4 | 2 | 33 | DAD1 A, Sig=282,8 Ref=550,100 |
| 4 | 2 | 33 | DAD1 B, Sig=295,8 Ref=550,100 |
| 4 | 2 | 33 | DAD1 C, Sig=320,8 Ref=550,100 |

Comme pour les tables d'injection et d'analyse, il peut y avoir moins de lignes si :

- la table fait partie d'une section répétée ;
- des spécifications restreignent les données de la table ;
- la table ne contient aucune colonne de valeurs numériques ou de date/heure, sinon plusieurs lignes seraient identiques. Par exemple, si vous avez intégré uniquement la colonne Voie, la table comporte trois lignes (une pour chacune des trois acquisitions).

### Table des composés

La table des composés peut comprendre des champs avec une valeur par injection, analyse ou composé. Elle peut en outre inclure des champs pour les pics et les acquisitions. Cependant, les seules valeurs de pics qui seront incluses sont celles concernant le pic principal de chaque composé trouvé. Il ne peut donc y avoir qu'une seule valeur par exemple par aire de pic associée au composé X dans l'analyse 1. De même, la seule information d'acquisition incluse dans la table des composés provient de l'acquisition associée au pic principal du composé.

Dans le cas présent, le modèle de données ressemble à celui de la Figure 55. Notez que seuls les pics principaux apparaissent ; ils sont en relation bijective avec les composés trouvés et les acquisitions.

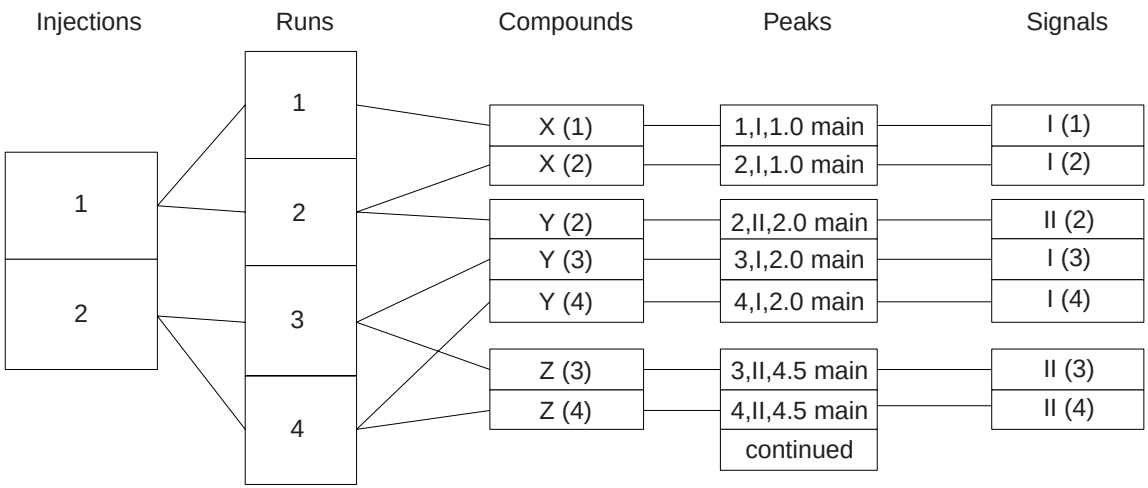



**Figure 55** Modèle de données d'une table des composés

Dans cet exemple, il y a trois composés différents, mais il y a sept jeux de résultats de composés (composés trouvés) pour les quatre analyses (parce que certains composés sont détectés dans plus d'une analyse) ; la table peut donc comporter jusqu'à sept lignes : voir le Tableau 6 page 119.

**Tableau 6** Exemple de table de résultats de composés

| N° d'analyse | Flacon | Composé | Qté du composé | TR | Voie |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 10 | X | n.nnn | 1,000 | DAD1 A, ... |
| 2 | 10 | X | n.nnn | 1,000 | DAD1 A, ... |
| 2 | 10 | Y | n.nnn | 2,000 | DAD1 B, ... |
| 3 | 33 | Y | n.nnn | 2,000 | DAD1 A, ... |
| 3 | 33 | Z | n.nnn | 4,500 | DAD1 B, ... |
| 4 | 33 | Y | n.nnn | 2,000 | DAD1A, ... |
| 4 | 33 | Z | n.nnn | 4,500 | DAD1 B, ... |

Comme pour les autres tables, il peut y avoir moins de lignes si :

- la table fait partie d'une section répétée ;
- des spécifications restreignent les données de la table ;
- la table ne contient aucune colonne de valeurs numériques ou de date/heure, sinon plusieurs lignes seraient identiques. Par exemple, si vous intégrez uniquement la colonne Composé, la table comportera trois lignes (une pour chacun des trois composés).

### Table des pics

La table des pics, comme la table des composés, peut comprendre des champs avec une valeur par injection, analyse, composé, acquisition ou pic. Contrairement aux pics de la table des composés, les pics de la table des pics ne sont pas limités au pic principal de chaque composé. Cela signifie que la table peut contenir des informations concernant tous les pics, mêmes ceux qui ne sont pas associés à un composé. Dans le cas présent, le modèle de données ressemble à celui de la Figure 56 page 120.

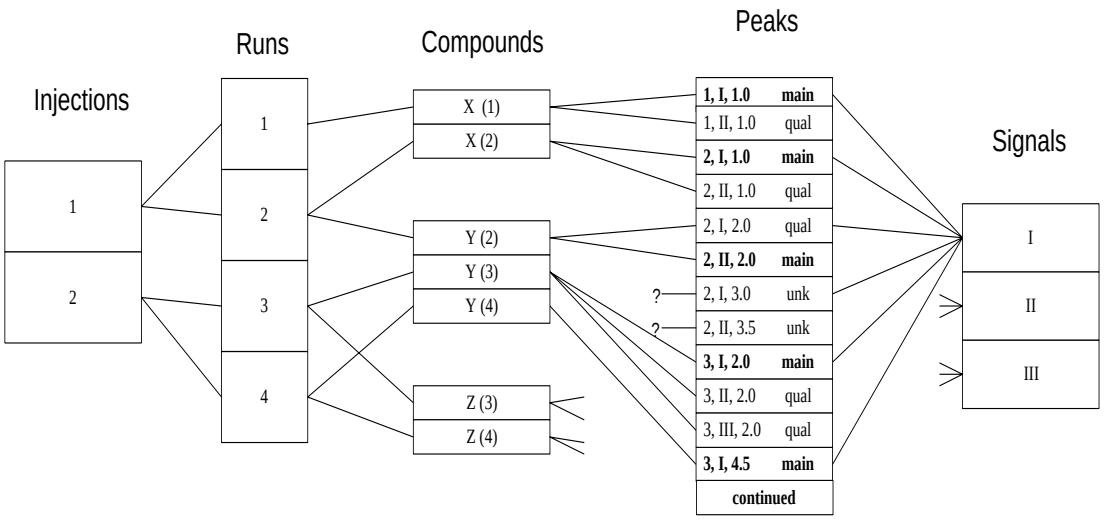



**Figure 56** Modèle de données d'une table des pics

Dans cet exemple, il y a huit pics pour les deux premières injections.

Si vous deviez créer une table des pics avec exactement les mêmes colonnes que celles de la table des composés précédente, la table des pics comporterait beaucoup plus de lignes (voir ci-dessous). Notez que les pics qui ne sont pas associés à un composé recherché n'ont pas de quantité calculée et que la colonne des noms comporte la mention « Unknown n » (Inconnu n).

**Tableau 7** Exemple de table des pics figurant dans le rapport

| N° d'analyse | Flacon | Composé | Qté du composé | TR | Voie |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 10 | X | n.nnn | 1,000 | DAD1 A, ... |
| 1 | 10 | X | n.nnn | 1,000 | DAD1 B, ... |
| 2 | 10 | X | n.nnn | 1,000 | DAD1 A, ... |
| 2 | 10 | X | n.nnn | 1,000 | DAD1 B, ... |
| 2 | 10 | Y | n.nnn | 2,000 | DAD1 A, ... |
| 2 | 10 | Y | n.nnn | 2,000 | DAD1 B, ... |
| 2 | 10 | <Inconnu 1> | | 3,000 | DAD1 A, ... |
| 2 | 10 | <Inconnu 2> | | 3,500 | DAD1 B, ... |
| 3 | 33 | Y | n.nnn | 2,000 | DAD1 A, ... |
| 3 | 33 | Y | n.nnn | 2,000 | DAD1 B, ... |
| 3 | 33 | Y | n.nnn | 2,000 | DAD1 C, ... |

Comme pour les autres tables, il peut y avoir moins de lignes si :

- la table fait partie d'une section répétée ;
- des spécifications restreignent les données de la table ;
- la table ne contient aucune colonne de valeurs numériques ou de date/heure, sinon plusieurs lignes seraient identiques. Par exemple, si vous avez intégré uniquement la colonne Composé, la table comporte 5 lignes (une pour chaque composé X, Y, Z, Inconnu 1 et Inconnu 2).

**ATTENTION** Lorsque plusieurs voies de données font l'objet d'une acquisition, la table des pics peut comporter plus de lignes que n'importe quelle autre table de la base de données et peut consommer une très grande quantité de ressources (temps machine, papier d'imprimante !).

### Table des composants d'instruments

Dans une table des composants d'instruments, vous pouvez inclure des colonnes avec une valeur par analyse, injection ou composant d'instrument. Chaque analyse est associée à un instrument lui-même associé à un ou plusieurs composants.

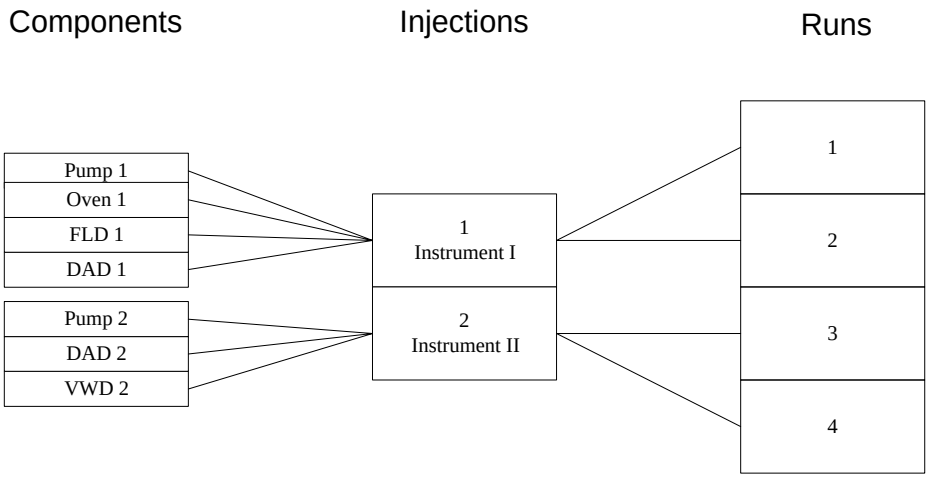



**Figure 57** Modèle de données d'une table de composants d'instruments

Si le diagramme ci-dessus présente les données qui nous intéressent, une table de composants d'instruments comporterait un maximum de 14 lignes (les quatre composants de l'instrument 1 sont utilisés pour l'injection 1 et les analyses 1 et 2 ; les trois composants de l'instrument 2 sont utilisés pour les analyses 3 et 4), comme l'indique le Tableau 8 page 123.

**Tableau 8** Exemple de table de composants d'instruments

| Composé | N° injection | N° d'analyse |
|---|---|---|
| Pompe 1 | 1 | 1 |
| Four 1 | 1 | 1 |
| FLD 1 | 1 | 1 |
| DAD 1 | 1 | 1 |
| Pompe 1 | 1 | 2 |
| Four 1 | 1 | 2 |
| FLD 1 | 1 | 2 |
| DAD 1 | 1 | 2 |
| Pompe 2 | 2 | 3 |
| DAD 2 | 2 | 3 |
| VWD 2 | 2 | 3 |
| Pompe 2 | 2 | 4 |
| DAD 2 | 2 | 4 |
| VWD 2 | 2 | 4 |

Ici encore, il est possible de réduire le nombre de lignes par l'un des trois facteurs mentionnés pour les tables précédentes.

### Table de configuration des colonnes

Cette table fonctionne exactement comme la table des composants d'instruments, les informations de configuration de colonnes venant remplacer les informations des composants d'instruments (chaque injection peut être associée à plusieurs entrées de configuration de colonnes). Les seules colonnes que vous pouvez inclure sont les injections, les analyses ou les champs de configuration de colonnes.

### Table de journal d'audit

Dans cette table, vous pouvez inclure des colonnes avec une valeur par injection, analyse ou entrée du journal d'audit. Chaque entrée d'analyse est associée à une ou plusieurs entrées du journal d'audit (une pour chaque entrée lorsque vous changez l'état d'approbation ou les valeurs de champs personnalisés).

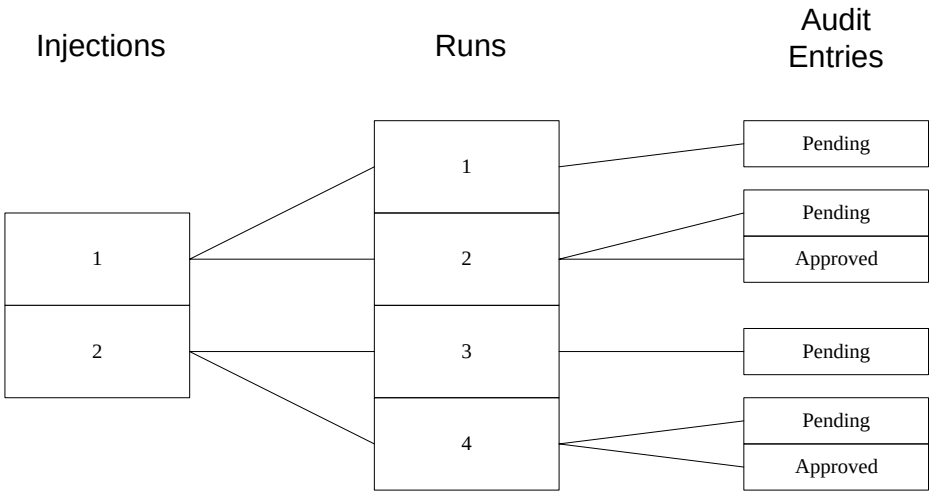



**Figure 58** Modèle de données de table de journal d'audit

**Tableau 9** Exemple de table de journal d'audit

| N° d'injection | N° d'analyse | Etat d'approbation | Date d'audit |
|---|---|---|---|
| 1 | 1 | En attente | 01-avr-97 08:10 |
| 1 | 2 | En attente | 02-avr-98 10:15:00 |
| 1 | 2 | Approuvé | 02-avr-98 14:30 |
| 2 | 3 | En attente | 01-avr-97 08:30:00 |
| 2 | 4 | En attente | 02-avr-98 10:20:00 |
| 2 | 4 | Approuvé | 02-avr-98 14:30 |

## Création d'un rapport à l'aide d'un modèle

Lorsque vous avez terminé l'édition préliminaire d'un modèle de rapport, vous pouvez avoir un aperçu du rapport qui sera créé à partir de ce modèle. Vous pouvez ensuite effectuer toutes les modifications dont vous avez besoin sur le modèle, sans jamais quitter l'application Editeur de modèles de rapports. Une fois que le modèle répond à votre attente, vous pouvez imprimer le rapport.

Depuis l'application ChemStore C/S, sélectionnez, en effectuant une requête, un jeu de résultats de traitement de données pour lequel vous souhaitez obtenir un rapport, puis sélectionnez le modèle de rapport que vous souhaitez utiliser.

## Utilisation des rapports automatiques

ChemStore C/S permet d'établir automatiquement des rapports après l'exécution d'une séquence. Après une séquence, un rapport récapitulatif peut être élaboré à partir des résultats de la séquence en cours. Les rapports sont établis grâce à un lien DDE (Dynamic Data Exchange - protocole d'échange dynamique de données de Microsoft) vers ChemStore C/S. La boîte de dialogue Préférences du menu ChemStore de la vue Method and Run Control (Méthode et contrôle de l'analyse) de la ChemStation vous permet de définir le nom et le type de rapport post-séquence. Pour le rapport post-séquence, vous pouvez sélectionner n'importe quel rapport ChemStore C/S disponible (modèles standards et personnalisés).

# 5
# Sécurité des données

Introduction 128
Définition et gestion des utilisateurs 131
Définition des informations organisationnelles 135
Configuration et gestion des éléments ChemStore C/S 138
Gestion de l'archivage et de la restauration sur Admin Client 156
Journal d'audit 160
Notification par e-mail 162
Validation et sécurité des fichiers imprimés 166

# Introduction

La sécurité et l'intégrité des données sont des notions majeures pour un laboratoire d'analyse travaillant dans un environnement réglementé par exemple, par les Good Laboratory Practice– GLP (Bonnes pratiques de laboratoire– BLP) ou les current Good Manufacturing Practice - cGMP (Bonnes pratiques de fabrication courantes – BPFc).

**Remarque** S'il est nécessaire que le logiciel soit explicitement conforme aux dispositions BPL/BPFc, ajoutez à votre installation ChemStore C/S le module de sécurité G2183AA, disponible auprès de votre distributeur Agilent Technologies.

ChemStore C/S possède des fonctionnalités qui permettent de répondre à ces besoins :

- L'ouverture de sessions ChemStore C/S est protégée par mot de passe ; l'utilisateur doit fournir un mot de passe valide pour démarrer ChemStore C/S. Pour de nombreuses autres activités effectuant des modifications sur la base de données, l'utilisateur doit fournir un identifiant et un mot de passe.
- ChemStore C/S utilise un système de droits d'accès des utilisateurs pour empêcher les utilisateurs non autorisés d'effectuer des tâches réservées à l'administrateur système, telles que la définition de la mise en page de rapports ou la suppression d'analyses de la base de données. Les profils d'utilisateurs indiquent les droits de chaque utilisateur ; vous pouvez utiliser les profils par défaut ou créer des profils personnalisés pour chaque utilisateur.
- ChemStore C/S ne permet pas la modification des résultats d'analyses enregistrées : ils sont protégés. L'utilisateur peut seulement modifier les champs personnalisés et l'état d'approbation d'un enregistrement. Toutes les modifications sont enregistrées dans un journal d'audit.
- La version client/serveur de ChemStore C/S possède des fonctions d'archivage permettant de conserver les données lorsque les projets sont terminés et de les restaurer si vous avez besoin de les revoir à une date ultérieure.
- Pour créer une traçabilité des transferts de données, ChemStore C/S fournit un journal d'audit qui enregistre les événements suivants :
  - ajouts dans la base de données (analyses) ;

  - modification des champs personnalisés ;
  - modification de l'état d'approbation d'une analyse ;
  - ajouts et suppressions dans un lot ;
  - modification de l'état d'archivage d'une analyse.
- ChemStation et ChemStore peuvent tous deux être verrouillés pendant leur fonctionnement afin d'empêcher des personnes non autorisées d'y accéder. Le verrou peut être privé, quand le déverrouillage de la session peut être effectué par l'identifiant et mot de passe de l'utilisateur en cours ou celui d'un administrateur, ou non privé, quand toute combinaison d'identifiant et de mot de passe valide suffit pour déverrouiller la session.

## Sécurité

ChemStore C/S fournit deux niveaux de sécurité pour empêcher les utilisateurs non autorisés d'accéder à la base de données. Le premier niveau de sécurité est la protection par mot de passe qui empêche les accès non autorisés ; le second niveau de sécurité correspond aux droits d'accès de l'utilisateur, qui restreignent les fonctions dont disposent les utilisateurs autorisés. Les mots de passe et les droits d'accès des utilisateurs ne sont pas globaux ; ils peuvent être configurés individuellement pour chaque base de données ChemStore C/S.

### Protection par mot de passe

ChemStore C/S est protégé par mot de passe ; pour démarrer une session ChemStore C/S, l'utilisateur doit fournir un mot de passe valide. D'autres fonctionnalités de ChemStore C/S nécessitent une vérification du mot de passe en plus des droits d'accès de l'utilisateur, par exemple :

- changement d'utilisateur ;
- modification des mots de passe ;
- modification des champs personnalisés ;

- réouverture d'une analyse précédemment archivée ;
- suppression d'une analyse
- archivage et restauration d'analyses ;
- approbations et rejets d'analyses.

**Remarque** Pour des raisons de sécurité, nous vous recommandons de modifier les mots de passe utilisateur par défaut après l'installation de ChemStore C/S. Voir « Tâches d'administration — Changement des mots de passe par défaut » dans le *Guide d'installation ChemStore C/S*.

### Configuration des mots de passe

Un certain nombre de conditions s'appliquent aux mots de passe et à leur durée de validité. L'administrateur peut spécifier les valeurs des paramètres conditionnels.

| | |
|---|---|
| **Minimum length (Longueur minimale)** | Il s'agit de la longueur (nombre de caractères) minimale acceptable pour un mot de passe. Tout mot de passe de longueur inférieure à ce minimum est rejeté par ChemStore C/S. La longueur minimale par défaut est fixée à 8 caractères. |
| **Password validity (Validité du mot de passe)** | Il s'agit de la durée (en jours) pendant laquelle le mot de passe reste en vigueur. La validité du mot de passe expire après ce délai et vous devez indiquer un nouveau mot de passe. La validité par défaut est de 90 jours. |
| **Minimum password recycle (Recyclage minimum du mot de passe)** | Nombre minimum de mots de passe nouveaux et très différents que l'utilisateur doit utiliser avant de pouvoir réutiliser un ancien mot de passe. La valeur par défaut est 12. Un utilisateur doit par conséquent changer au moins 12 fois de mot de passe avant de pouvoir réutiliser celui d'origine. |
| **Retries before rejection (Nombre d'essais avant rejet)** | Nombre autorisé de tentatives infructueuses consécutives d'entrée avant rejet de l'utilisateur par ChemStore C/S. La valeur par défaut est 3. Si ce quota est atteint, le mot de passe en cours est invalidé. |

# Définition et gestion des utilisateurs

De nombreuses fonctions de ChemStore C/S sont protégées contre les modifications par des personnes non autorisées, par un système de droits d'accès des utilisateurs. Chaque utilisateur de ChemStore C/S reçoit une autorisation d'exécuter certaines tâches. Chaque utilisateur peut recevoir différents droits en fonction des besoins de chaque tâche de laboratoire et des implications de la fonction occupée par l'utilisateur.

Un utilisateur de ChemStore C/S est quelqu'un qui a été enregistré dans ChemStore C/S avec un compte ouvert à son nom d'utilisateur, un nom destiné à l'affichage (ce dernier figure dans les journaux d'audit et d'autres rapports), un mot de passe et un certain nombre de droits d'accès. Les droits d'accès déterminent les fonctionnalités de ChemStore C/S dont dispose cet utilisateur.

Seul un administrateur (ou un autre utilisateur ayant les droits appropriés) peut configurer un nouvel utilisateur ChemStore C/S. Pour faciliter la définition des droits d'accès des nouveaux utilisateurs, quatre profils standard sont disponibles :

| | |
|---|---|
| **Opérateur** | L'opérateur est l'utilisateur de base. L'opérateur peut extraire des données de la base mais il n'a pas le droit de modifier la configuration de ChemStore C/S. **Droits d'accès** : création de lots uniquement. |
| **Chimiste** | Le chimiste peut modifier l'état d'approbation des données extraites ainsi que la valeur des champs personnalisés. Les chimistes peuvent également enregistrer leurs paramètres d'interface utilisateur et, dans la version client/serveur, ils peuvent archiver, restaurer et extraire des données. **Droits d'accès** : Archivage/restauration d'analyses, approbation de premier niveau, création de lots, création/modification de requêtes, filtres évolués, modèles de calcul et de rapport. Définition de colonnes/expressions, Enregistrement/modification des paramètres. |

**Administrateur de laboratoire** L'administrateur labo possède tous les droits d'accès du chimiste mais en plus, il peut créer et modifier des études et des champs personnalisés. L'administrateur labo peut approuver les analyses en 2ème niveau et modifier la configuration de rechargement des données. L'administrateur labo a aussi la possibilité d'affecter des paramètres ChemStore C/S à d'autres utilisateurs et de supprimer des analyses.
**Droits d'accès** : Tous sauf le mode de test de client administrateur (mode spécial de diagnostic et de maintenance), administration du serveur de base de données, administration des utilisateurs (voir Tableau 10 page 132), attribution d'études aux utilisateurs, définition de la configuration d'approbation, migration de base de données ou compactage d'une base de données indépendante.

**Administrateur** L'administrateur a les mêmes droits d'accès que l'administrateur labo mais en plus, il peut administrer les utilisateurs, attribuer les études aux utilisateurs et, dans la version client/serveur, administrer le serveur ChemStore C/S et transférer des bases de données.
**Droits d'accès** : Tous (voir le Tableau 10 page 132).

Les utilisateurs peuvent être définis en utilisant l'un des quatre profils d'utilisateurs standard mais les droits d'accès de chacun peuvent être accordés ou refusés pour attribuer à chaque utilisateur un ensemble de droits d'accès personnalisé. Le Tableau 10 présente les droits d'accès figurant dans le modèle fourni.

**Remarque**

Si le pack de sécurité est installé, les droits d'accès aux tâches telles que la mise en pause de la file d'attente, la suppression des travaux en file d'attente ou la présélection d'une base de données sont gérés au niveau du système d'exploitation. L'exploitation standard du logiciel doit être effectuée par un membre du groupe Windows *Utilisateurs.* Voir aussi *Guide d'utilisation du pack de sécurité ChemStation Plus.*

**Tableau 10** Modèles de droits d'accès d'utilisateur

| Droits d'accès | Opérateur | Chimiste | Administrateur labo | Administrateur |
|---|---|---|---|---|
| Mode test de Admin client | | | | Oui |
| Administration du serveur de base de données | | | | Oui |

**Tableau 10** Modèles de droits d'accès d'utilisateur (suite)

| Droits d'accès | Opérateur | Chimiste | Administrateur labo | Administrateur |
|---|---|---|---|---|
| Administration des champs personnalisés | | | Oui | Oui |
| Administration des utilisateurs | | | | Oui |
| Administration des paramètres utilisateurs | | | Oui | Oui |
| Attribution d'études aux utilisateurs | | | | Oui |
| Archivage/restauration d'analyses | | Oui | Oui | Oui |
| Approbation de 1er niveau | | Oui | Oui | Oui |
| Approbation de 2ème niveau | | | Oui | Oui |
| Création/modification des requêtes | | Oui | Oui | Oui |
| Création/modification de filtres avancés | | Oui | Oui | Oui |
| Création/modification de modèles de rapports | | Oui | Oui | Oui |
| Création/modification de modèles de calcul | | Oui | Oui | Oui |
| Création/modification d'études | | | Oui | Oui |
| Définition de colonnes/expressions | | Oui | Oui | Oui |
| Suppression d'analyses | | | Oui | Oui |
| Modification des valeurs de champs personnalisés | | Oui | Oui | Oui |
| Réouverture d'analyses | | | Oui | Oui |
| Création de lots | Oui | Oui | Oui | Oui |
| Compactage de base de données (base de données indépendante seulement) | | | | Oui |

**Tableau 10** Modèles de droits d'accès d'utilisateur (suite)

| Droits d'accès | Opérateur | Chimiste | Administrateur labo | Administrateur |
|---|---|---|---|---|
| Modification/enregistrement des paramètres | | Oui | Oui | Oui |
| Transfert d'une base de données | | | | Oui |

Les tâches suivantes ne nécessitent aucun droit d'accès particulier :

- enregistrement des résultats dans la base ;
- extraction et revue des données à l'aide de requêtes enregistrées auxquelles l'utilisateur a le droit d'accéder ;
- accès à tous les paramètres utilisateurs (requêtes, filtres, modèles de rapports ou interface utilisateur) qui ne sont pas contrôlés par des accès sécurisés, propres à l'utilisateur ou auxquels il a le droit d'accéder ;
- Le rechargement des fichiers de données brutes, des fichiers de méthode ou de séquence sur la ChemStation nécessite le droit d'accès à la création de lots.

### Désactivation des utilisateurs

Un administrateur (ou un autre utilisateur ayant le droit d'administrer les utilisateurs) peut désactiver n'importe quel utilisateur de ChemStore C/S. Un utilisateur désactivé ne peut plus ouvrir de session dans ChemStore C/S.

# Définition des informations organisationnelles

Seuls les utilisateurs possédant les droits d'accès nécessaires peuvent configurer et gérer les études et les champs personnalisés. En ce qui concerne les profils d'utilisateurs standard, seuls les administrateurs labo et les administrateurs possèdent les droits d'accès requis.

## Configuration et gestion des études

Une étude ne peut être créée ou modifiée que par un administrateur, un administrateur labo ou un autre utilisateur auquel on a accordé le droit d'accès correspondant. Une étude peut être créée ex nihilo ou à partir d'une étude existante. Au cours de la création de l'étude, l'auteur identifie les éléments (chromatogrammes, spectres, données brutes, méthodes et séquences) qui seront enregistrés par ChemStore C/S avec les résultats ; il spécifie également les champs personnalisés à associer à l'étude. Tous les champs personnalisés qui ont été créés pour d'autres études et non désactivés peuvent être utilisés dans la nouvelle étude. Tout nouveau champ personnalisé à inclure dans l'étude peut être spécifié à ce moment (voir « Configuration et gestion des champs personnalisés » page 136). Les valeurs contenues dans les champs personnalisés de l'étude sont spécifiques aux analyses de l'étude, que ces champs soient préalablement définis ou créés pour cette étude.

Dès que l'étude a été définie, les utilisateurs se voient autoriser ou interdire son accès en fonction des attributions d'étude (voir « Attribution d'études » page 137). Les utilisateurs attribués à l'étude peuvent y ajouter des données ou en extraire des analyses en utilisant le nom de l'étude comme critère de recherche.

Lors de la création d'une étude, un utilisateur disposant de droits d'accès suffisants peut aussi modifier le mode d'approbation, utiliser le mode de verrouillage et le mode de notification LIMS.

Une étude peut être activée ou désactivée par les utilisateurs possédant le droit d'accès correspondant. Une étude active est disponible pour toutes les activités de la ChemStation et de ChemStore C/S. Dans la ChemStation, il n'est pas possible d'ajouter des données dans une étude désactivée. Dans ChemStore C/S, on peut toujours extraire des données d'une étude désactivée mais non l'utiliser comme modèle pour une autre étude ni la modifier.

## Configuration et gestion des champs personnalisés

Seul un administrateur, un administrateur labo ou un autre utilisateur auquel on a accordé le droit d'accès correspondant peut créer ou modifier un champ personnalisé. La création d'un champ personnalisé requiert un nom et la spécification du type de données (voir « Utilisation des champs personnalisés » page 23) ; certains types de données requièrent des informations supplémentaires (unités, liste de valeurs possibles). Un champ personnalisé peut être inclus dès sa création dans n'importe quelle étude.

### Saisie de données dans les champs personnalisés

Une partie de la spécification du champ personnalisé est le mode de saisie des données. Les valeurs des champs personnalisés peuvent être saisies automatiquement (par une macro ChemStation) ou manuellement. En saisie manuelle, vous pouvez indiquer qu'une valeur est *obligatoire* s'il faut la saisir avant que le transfert des résultats d'analyse dans ChemStore C/S soit autorisé. Si une valeur n'est pas toujours nécessaire, une valeur par défaut peut être spécifiée ; cette dernière peut être remplacée avant le transfert de données. Vous pouvez en outre spécifier des masques de saisie pour certains types de champs (valeurs maximale et minimale pour des champs numériques, nombre maximum de caractères pour un champ texte). Ces masques de saisie sont spécifiques à l'étude ; si le champ personnalisé est utilisé dans d'autres études, ses masques de saisie peuvent être différents.

Si les données doivent être entrées automatiquement dans le champ personnalisé à l'aide d'une macro ChemStation, vous devez vous assurer que :

- la macro renvoie le type de données correct (conformément aux spécifications du champ personnalisé) ;
- la macro est chargée dans la ChemStation.

Pour plus de détails sur les macros, consultez les commandes de l'aide en ligne de la ChemStation.

Un champ personnalisé peut être activé ou désactivé par les utilisateurs possédant le droit d'accès correspondant. Quand un champ personnalisé est désactivé, il devient inaccessible à toutes les activités de la ChemStation et de ChemStore C/S, sauf s'il est utilisé comme critère de requête.

### Attribution d'études

Seuls les utilisateurs attribués à une étude peuvent accéder à celle-ci. L'attribution d'études aux utilisateurs peut être effectuée lors de la création ou de la modification des études, ou encore par une interface séparée permettant de modifier toutes les attributions d'études.

Les utilisateurs ne peuvent accéder qu'aux études qui leur sont attribuées dans les interfaces logicielles ChemStore et ChemStation. Cette méthode évite toute modification, accès ou ajout de données inappropriées aux études par des utilisateurs non autorisés. L'attribution d'un nombre limité d'études à chaque utilisateur facilite l'utilisation du logiciel, car chaque utilisateur voit un nombre inférieur d'études et d'options.

Un droit d'accès spécifique Assign Studies to Users (Attribuer des études aux utilisateurs) est nécessaire pour attribuer des études.

# Configuration et gestion des éléments ChemStore C/S

Cinq éléments essentiels de la configuration ChemStore C/S peuvent être enregistrés pour être rouverts ultérieurement ; on peut aussi spécifier que ces éléments sont accessibles à d'autres utilisateurs ChemStore C/S, même s'ils n'ont pas les autorisations pour créer et enregistrer ces éléments. Ce paramètre limite l'accès aux données à des sous-ensembles prédéfinis. L'auteur de l'élément en est le propriétaire désigné, mais cette propriété peut être transférée à un utilisateur tiers par un utilisateur possédant le droit d'accès correspondant.

| | |
|---|---|
| **Requêtes** | Les requêtes peuvent être enregistrées sous un nom pour être ensuite réutilisées ; une requête enregistrée peut être attribuée à un autre utilisateur pour lui donner le droit de l'utiliser. |
| **Filtres** | Les filtres personnalisés peuvent être enregistrés sous un nom pour être ensuite réutilisés ; un filtre enregistré peut être attribué à un autre utilisateur pour lui donner le droit de l'utiliser. |
| **Modèles de rapport** | Les modèles de rapports peuvent être enregistrés sous un nom pour être ensuite réutilisés ; un modèle enregistré peut être attribué à un autre utilisateur pour lui donner le droit de l'utiliser. |
| **Paramètres de l'interface utilisateur** | Les paramètres de l'interface utilisateur comprennent les configurations en cours de toutes les fenêtres, tables et graphiques de l'utilisateur. Ces paramètres peuvent être enregistrés sous un nom pour être ensuite réutilisés ; ces paramètres peuvent être attribués à un autre utilisateur pour lui permettre de les utiliser. |
| **Modèles de calcul** | Les modèles de calcul peuvent être enregistrés sous un nom avec un numéro de version pour réutilisation ; les modèles de calcul enregistrés peuvent être attribués à d'autres utilisateurs. L'attribution de modèles de calcul concerne toutes les versions de même nom. |

Un utilisateur ayant le droit d'accès requis peut non seulement attribuer l'utilisation et transférer la propriété d'éléments ChemStore C/S à d'autres utilisateurs, mais également renommer des éléments enregistrés. Ces éléments peuvent être aussi modifiés puis enregistrés sous le même nom — auquel cas l'original est remplacé — ou sous un nouveau nom, par un utilisateur ayant l'autorisation requise.

# Archivage et restauration

La version client/serveur de ChemStore vous permet d'archiver (copier et enregistrer) des analyses présentes dans la base de données sur un disque ou une bande. Une fois les analyses archivées, vous pouvez automatiquement les supprimer de la base de données ChemStore C/S, afin de libérer de l'espace disque.

Avant de pouvoir archiver, restaurer ou rouvrir un fichier, votre administrateur doit vous donner le droit de le faire. Votre administrateur définit et gère certaines opérations d'archivage à travers ChemStore C/S Admin Client. Voir la section « Gestion de l'archivage et de la restauration sur Admin Client » page 156.

Si vous n'avez pas supprimé les analyses après les avoir archivées, vous pouvez toujours y accéder par la base de données, sans toutefois avoir la possibilité de les modifier (par exemple, les approuver) à moins de les rouvrir. Avant de pouvoir rouvrir une analyse supprimée, vous devez la restaurer dans la base de données.

L'archivage, la suppression, la restauration et la réouverture agissent sur toutes les versions d'une analyse. S'il existe plusieurs versions d'une analyse, toutes les versions sont archivées – même si elles sont distribuées dans des études différentes. De même, si vous demandez à supprimer automatiquement les analyses après archivage, toutes les versions de cette analyse sont supprimées.

ChemStore C/S propose deux modes d'archivage : automatisé et interactif.

## Archivage automatisé

Un utilisateur disposant de droits d'accès d'administrateur peut configurer l'archivage automatique de certaines analyses à intervalles réguliers. Les analyses à archiver sont sélectionnées par une requête. Pour configurer de nouvelles requêtes d'archivage, l'utilisateur doit sélectionner **Automated Archiver (Archiveur automatique)** dans le menu « Administration » du Review Client (Client de revue).

La section Archive query (Requête d'archivage) permet d'entrer des informations comparables à celles de la boîte de dialogue **Create Archive Unit (Création des unités d'archivage)** utilisée pour l'archivage manuel. Un nom de requête d'archivage doit être indiqué (obligatoire et unique) ainsi que le nom de l'unité d'archivage et son chemin d'accès. Le nom de l'unité d'archivage reçoit en suffixe la date de création, par exemple « <fichier>-aaaa-mm-jj ».

La case à cocher **Activé** permet d'activer une requête d'archivage. La requête d'archivage est présentée comme « activé » dans la liste de requêtes d'archivage automatiques. Si la coche est supprimée, la requête est désactivée et indique un état **Désactivé**.

Il est possible de supprimer les analyses de la base de données après un archivage réussi.

Les critères de la requête sont notamment le temps d'injection, le nom de l'instrument, le nom de l'opérateur, le nom de la séquence d'acquisition, le nom de la méthode, le nom de l'échantillon, le nom de l'étude, les champs personnalisés, l'opérateur de l'injection, l'état d'approbation, etc. Les opérandes dépendent de la catégorie de données, il est possible d'utiliser la négation **NOT**.

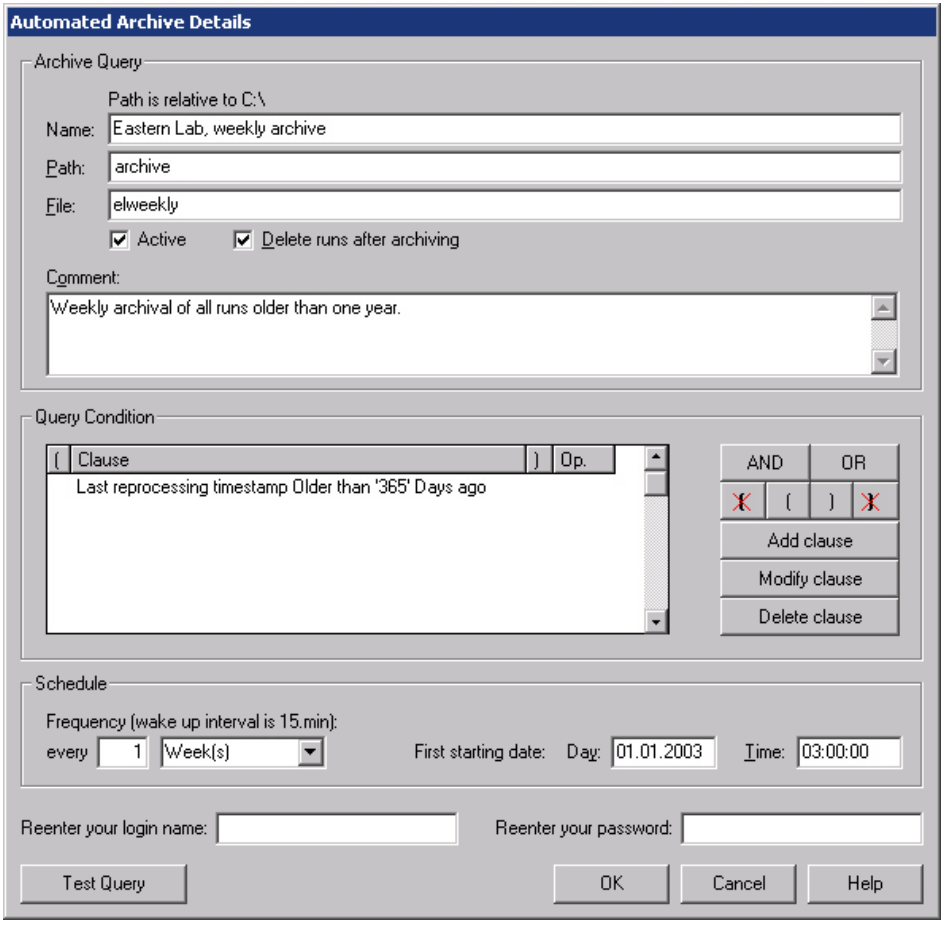



**Figure 59** Boîte de dialogue Automated Archives (Archives automatisées)

- Données de type texte: égal, contient (caractères génériques)
- Données numériques: égal, plus grand que, plus petit que, entre
- Date: antérieur à X jours/mois

Pour des performances optimales, le nombres de clauses pouvant être définies pour les archives automatisées est restreint à 10.

Il est possible de définir une fréquence individuelle pour chaque requête d'archivage. Vous pouvez configurer l'intervalle, par exemple quotidien, hebdomadaire, mensuel ou associé à un compteur (tous les x jours, semaines, etc.). Il faut indiquer une **First starting date (Première date de départ)** pour l'exécution de la requête sur le serveur. L'utilisateur doit s'identifier et confirmer la création ou la modification d'une requête d'archivage avec les champs **UserID (Identifiant)** et **password (mot de passe)**, comme dans la boîte de dialogue **create archive unit (création des unités d'archives)** de création d'archives manuelles. Le bouton **Test Query (Tester la requête)** fournit des informations sur le nombre d'analyses renvoyées par la requête avec la condition de requête donnée.

Lors de l'activation d'une requête d'archivage, celle-ci est exécutée automatiquement la première fois comme indiqué par **first starting date (Première date de départ)** Les archives suivantes seront créées à l'intervalle de temps indiqué.

# Archivage interactif

Les utilisateurs peuvent aussi sélectionner des analyses pour archivage à partir de la vue archivage/suppression ou de l'interface graphique de la vue principale ChemStore.

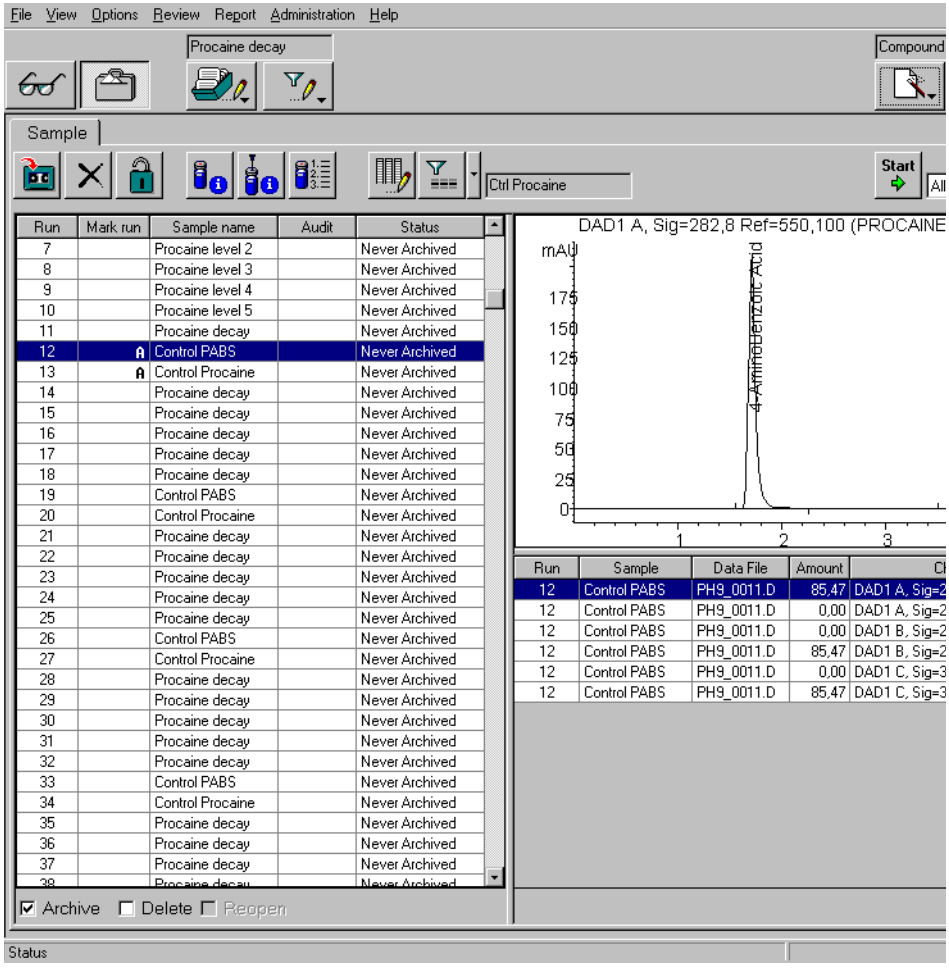



**Figure 60** Vue archivage/suppression de la vue principale ChemStore

Vous remarquerez que l'icône d'archivage est activée (et non pas l'icône de revue d'échantillons).

La vue archivage/suppression contient un jeu d'outils identique à celui de la fenêtre graphique de revue d'échantillons à l'exception des trois outils suivants :

Permet de spécifier où et quand l'archivage doit être effectué.

Supprime toutes les analyses marquées « à supprimer » dans la liste des analyses. Ce bouton apparaît aussi dans la vue de suppression de la version autonome.

Rouvre toutes les analyses marquées « à rouvrir » dans la liste des analyses et fait passer leur état en Approval Pending (Attente d'approbation) (voir « Etat d'approbation des analyses » page 34).

Pour plus d'informations sur la fenêtre graphique de revue d'échantillons, consultez la section « Vue Sample (Echantillons) » page 41.

Sélectionnez la liste des analyses à archiver dans la liste d'analyses à gauche de la vue **Archivage/suppression**, comme pour rechercher des données à réviser ou à inclure dans un rapport en vue Review (Revue). Les analyses marquées pour l'archivage sont protégées de toute modification de l'état d'approbation et des champs personnalisés. Etant donné que l'archivage peut être différé à un moment plus favorable (par exemple en dehors des heures de travail), les analyses marquées pour l'archivage sont enregistrées dans un jeu de données jusqu'à ce que l'archivage ait été effectué.

En principe, les travaux d'archivage manuel ne gênent pas les travaux à déclenchement automatique. Le premier travail déclenché a priorité. Une analyse programmée pour archivage dans deux « travaux » séparés est archivée par le premier travail de la file d'attente.

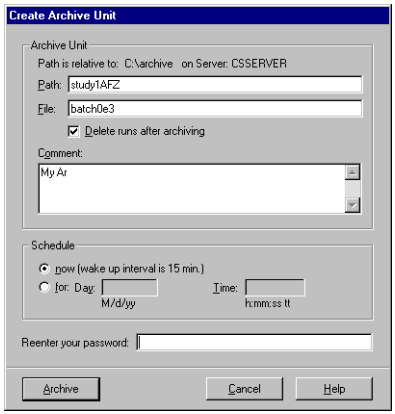



**Figure 61** Fenêtre de création des unités d'archivage

## Archive Units (Unités d'archivage)

Les analyses archivées sont enregistrées sous forme d'*unités d'archivage (archive units);* une unité d'archivage contient toutes les versions des analyses spécifiées. L'unité d'archivage peut être créée automatiquement ou manuellement, comme indiqué ci-dessous. Lorsque vous définissez une unité d'archivage, vous spécifiez un nom de fichier et un chemin et vous pouvez également ajouter une description de l'unité d'archivage. Ces informations peuvent être utilisées ultérieurement pour rechercher une unité d'archivage spécifique. Quand ChemStore C/S crée l'unité d'archivage, il associe un numéro d'identification généré par le système et un fichier de catalogue au format XML pour décrire le contenu de l'unité d'archivage binaire. Le nom de fichier correspond au nom de l'unité d'archivage avec l'extension XML. La Figure 62 page 146 présente un exemple de fichier catalogue XML.

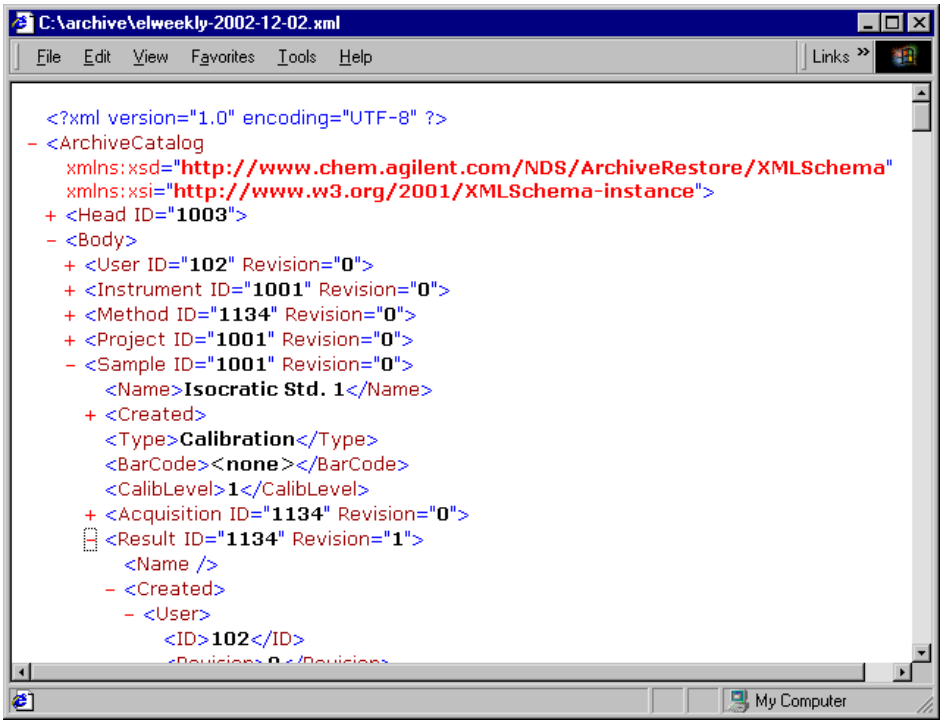



**Figure 62** Exemple de fichier catalogue XML

Ce fichier catalogue peut être utilisé pour l'indexation en cas de gestion d'archivage évoluée, par exemple dans des systèmes de gestion de document (DMS) externes.

L'archivage est protégé par des droits d'accès et un mot de passe. La vue archivage/suppression ainsi que l'option de menu « Automated archives » (Archives automatisées) ne sont disponibles que pour les utilisateurs disposant des droits d'accès corrects. Pour transmettre un travail d'archivage, l'utilisateur doit entrer son identifiant et son mot de passe.

## Suppression d'analyses

Si le pack de sécurité pour ChemStore C/S n'est pas installé, il est possible de supprimer des analyses sans archivage préalable. Dans la vue suppression de la version autonome, ainsi que dans la vue archivage/suppression de la version client/serveur, vous pouvez marquer les analyses de manière explicite pour qu'elles soient supprimées ultérieurement. La sécurité des données est assurée en autorisant seulement les utilisateurs ayant un droit d'accès suffisant (voir « Définition et gestion des utilisateurs » page 131) pour exécuter ces tâches et en demandant une confirmation assortie d'un mot de passe pour que les analyses soient réellement supprimées.

Dans la version client/serveur, il est également possible de supprimer automatiquement les analyses archivées de la base de données.

**Attention** Les analyses que vous supprimez sont effacées de la base de données et ne peuvent plus être retrouvées. Veillez à ne supprimer que les analyses déjà archivées ou celles dont vous n'avez vraiment plus besoin.

## Réouverture d'analyses

Les analyses qui sont archivées, mais pas supprimées figurent toujours dans la base ; elles sont cependant verrouillées et ne peuvent être modifiées, à moins d'être rouvertes. Pour ce faire, sélectionnez les analyses archivées dans la liste des analyses à gauche de la vue archivage/suppression et cliquez sur le bouton Reopen (rouvrir) décrit à la page précédente.

A l'instar de l'archivage, la réouverture n'est disponible que pour les utilisateurs disposant des droits requis.

## Restauration des analyses

Les analyses archivées et supprimées ne figurent plus dans la base de données. Pour accéder à des analyses archivées et supprimées, vous devez d'abord les restaurer (les recopier dans la base de données) puis les rouvrir.

Vous pouvez restaurer une unité d'archivage complète ou choisir de restaurer une ou plusieurs analyses dans l'unité d'archivage. Pour choisir l'unité d'archivage à restaurer, utilisez le journal d'archivage (Archive History) : il permet d'afficher toutes les unités d'archivage par ordre chronologique de création. Etant donné que vous pouvez avoir enregistré de nombreuses unités d'archivage dans la base de données, il peut être difficile de retrouver celle contenant les analyses recherchées ; un utilitaire de recherche est disponible pour vous aider à localiser l'unité d'archivage souhaitée dans la liste.

Comme pour l'archivage, vous pouvez spécifier une restauration immédiate (dans le délai d'activation du serveur), mais vous pouvez également différer cette opération. La restauration copie dans la base de données toutes les versions de l'analyse sélectionnée dans l'archive.

La restauration est protégée par des droits d'accès, un identifiant et un mot de passe. Seul l'utilisateur disposant des droits d'accès peut accéder à la vue archivage/suppression, l'identifiant d'utilisateur et son mot de passe doivent être entrés avant la restauration.

## Interface d'archivage XML générique

De plus, une interface d'archivage XML générique peut être ajoutée au serveur ChemStore C/S. Celle-ci permet de mettre en place une liaison vers des systèmes de gestion d'archivage externes (DMS, HSM, etc). L'interface d'archivage est installée à partir du répertoire \G1410a\archiver_interface sur le CD-ROM ChemStation Plus. Consultez le fichier readme.txt pour plus de détails sur l'installation.

Quand cette interface est installée, ChemStore C/S signale à l'interface d'archivage générique XML la création de chaque unité d'archivage. Le nom et l'emplacement de l'unité d'archivage ainsi que le fichier XML correspondant sont transmis au plug-in par défaut. Selon la nature du plug-in, différentes activités, par exemple le transfert de l'unité d'archivage vers un système DMS suivi de sa suppression en local, peuvent être lancées. Après traitement réussi de

l'unité d'archivage, un message de notification avec un ID externe de l'emplacement de stockage peut être renvoyé à l'interface d'archivage générique XML, pour retransmission de ces informations à ChemStore C/S.

Le prérequis pour l'utilisation de l'interface d'archivage XML générique est le développement d'un plug-in. Sur demande, Agilent peut fournir un kit de développement contenant les informations nécessaires pour programmer un tel plug-in.

Un exemple simple de plug-in est livré avec l'installation de l'interface d'archivage XML, il ne nécessite aucune configuration ultérieure. Ce plug-in simple ouvre une boîte de dialogue sur le PC serveur à chaque création d'un fichier d'archivage.

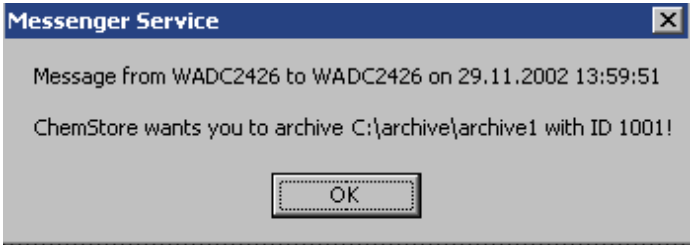



**Figure 63** Message généré par un plug-in simple d'interface d'archivage XML générique

Le message et la fonction du plug-in simple sont modifiables par le fichier AddArchive.cmd dans le dossier du plug-in simple (« C:\Program Files\Agilent Technologies\XML-based Archive Restore\Examples\Simple Plugin »).

Vous trouverez une présentation simplifiée du traitement de données dans ce plug-in simple et des extensions possibles pour un plug-in personnalisé sur la Figure 64.

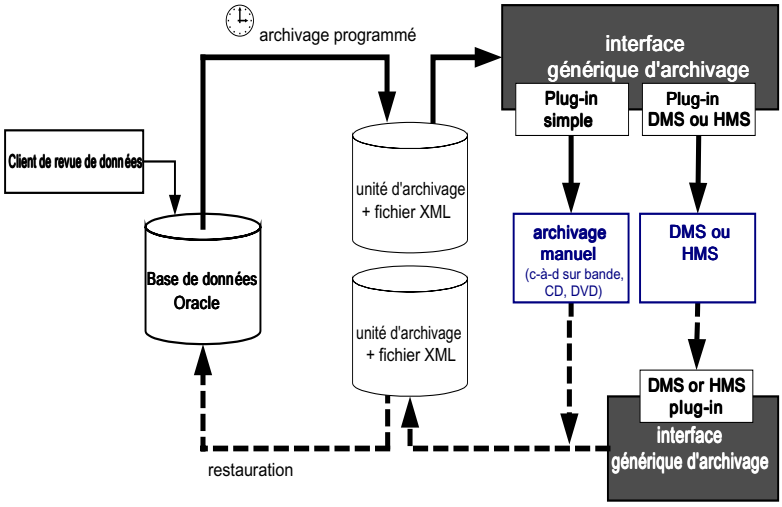



**Figure 64** Interface d'archivage XML générique

La restauration doit être effectuée d'abord manuellement en remettant le fichier d'archivage binaire à son ancien emplacement, puis par ChemStore comme dans les révisions précédentes de ChemStore.

## Etats d'archivage

Lorsqu'une analyse est transférée d'une ChemStation vers ChemStore C/S, l'état d'archivage *Never Archived (Jamais archivé)* lui est attribué. Lorsqu'une analyse a été sélectionnée pour être archivée, l'état d'archivage *Archive Pending (Attente d'archivage)* lui est attribué et elle est alors verrouillée contre toute modification. Si la suppression après archivage a été spécifiée, l'état *Archive Delete Pending (Attente de suppression d'archivage)* lui est attribué. Une fois cet état attribué, une analyse ne peut plus être retrouvée par une requête d'extraction. Les états *Archive Pending (Attente d'archivage)* et *Archive Delete Pending (Attente de suppression d'archivage)* ne sont applicables qu'après l'achèvement de l'unité d'archivage, quand l'état d'archivage de l'analyse passe à Archived (Archivé) pour une opération d'archivage terminée.

Pour ce qui concerne la suppression des archives, les informations d'archivage et de suppression sont disponibles seulement à partir de l'interface de l'unité d'archivage dans l'application Admin Client.

**Remarque** L'état d'archivage n'est pas mis à jour automatiquement; vous devez lancer une requête sur les analyses en instance de changement d'état pour qu'il soit effectivement mis à jour.

Si l'archivage échoue — par exemple, parce que le support de stockage est saturé avant la fin de l'archivage — l'état *Archive Failed (Echec de l'archivage)* est attribué. Si cela se produit, votre administrateur doit utiliser le programme Admin Client pour résoudre ce problème en planifiant de nouveau l'archivage.

Une analyse qui a été archivée mais non supprimée (c'est-à-dire qui reste présente dans la base de données) est verrouillée contre toute modification telle qu'un changement de son état d'approbation ou de la valeur d'un champ personnalisé, jusqu'à ce qu'elle soit explicitement rouverte. L'état *Reopened (Rouvert)* lui est alors attribué. Les analyses rouvertes doivent être archivées de la même manière que les analyses normales.

Il existe un certain nombre de règles pour déterminer l'état d'une analyse lorsque vous la restaurez dans la base de données.

Si l'analyse a été supprimée de la base, les règles qui s'appliquent sont les suivantes :

- Si vous restaurez la dernière archive en date, l'analyse est transférée vers la base de données et marquée *Dearchived (Restaurée)*.
- Si l'analyse a été archivée plusieurs fois et si vous tentez de restaurer une archive qui n'est pas la plus récente, l'analyse est transférée vers la base de données et marquée *Read-Only (Lecture seule)*.

Si, après avoir lancé un processus de suppression ou de restauration, l'analyse est toujours présente dans la base de données, les règles qui s'appliquent sont les suivantes :

- Si vous tentez de restaurer l'archive la plus récente, l'analyse sera transférée vers la base de données et l'état *dearchived (restaurée)* lui sera attribué.

- Si vous tentez de restaurer une archive qui n'est pas la plus récente, l'analyse est restaurée et marquée *read-only (lecture seule)*. Si vous restaurez ensuite une archive plus récente mais qui ne soit pas la plus récente, l'ancienne analyse restaurée est remplacée et toutes les analyses passent en lecture seulement. Si vous tentez de restaurer des versions d'analyse plus anciennes que celles qui sont restaurées pour l'instant, les applications n'autorisent pas la restauration de ces analyses à remplacer celle de la base de données.

Si l'analyse est toujours présente dans la base de données et n'a pas encore été restaurée depuis une unité d'archivage, l'application n'autorise pas la restauration ni le remplacement de cette analyse dans la base.

Vous pouvez trouver une liste des analyses ayant été remplacées ou non lors de la dernière opération de restauration d'une unité d'archivage dans la vue de Rapports d'archives (Archive Reports) du logiciel ChemStore Admin Client. Cette information est également consignée dans le journal du serveur.

Les relations qui existent entre les différents états d'archivage sont présentées dans la Figure 65. Voir aussi le paragraphe « Etude détaillée d'un exemple de cycle d'archivage/restauration » ci-après, pour obtenir un exemple spécifique de la manière dont les processus d'archivage/de restauration affectent l'état de l'analyse.

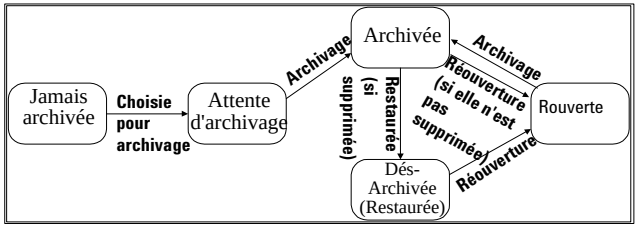



**Figure 65** Relations entre les états d'archivage

## Revue des états et rapports d'archivage

Pour consulter le calendrier des archivages/restaurations en attente, vous devez utiliser les commandes du menu Review (Revue) en haut de la fenêtre principale de la vue archivage/suppression (voir Figure 60 page 143). Vous pouvez aussi passer en revue l'historique d'une archive et évaluer les raisons d'un échec d'archivage ou de restauration.

Les archives automatisées ne sont pas mentionnées dans le calendrier d'archivage en cours parce que les requêtes d'archivage automatique sont exécutées directement à la date et à l'heure indiquées.

Vous pouvez également consulter le calendrier et l'historique d'archivage à partir de la vue principale du client d'administration. Tout utilisateur peut consulter ces rapports sans mot de passe pour y accéder à partir du client d'administration. Depuis ce programme, vous pouvez également consulter les rapports suivants :

- Archive Units (Unités d'archivage)
- Runs in an archive unit (Analyses incluses dans une unité d'archivage)
- Runs to be deleted (Analyses à supprimer)
- Audit Trail (Journal d'audit)
- Information for an object (Informations concernant un objet)
- Base path, wake-up interval et time-out interval (Chemin de base, délai d'activation et délai d'attente)
- Active spool/download table (Gestionnaire d'archivage actif/planning de transfert)

# Etude détaillée d'un exemple de cycle d'archivage/restauration

Vous comprendrez plus facilement les processus d'archivage et de restauration à l'aide d'un exemple.

**Exemple** L'exemple suivant comporte deux figures : la Figure 66 page 154 présente les étapes du processus d'archivage d'une analyse dans plusieurs unités d'archivage. La Figure 67 page 155 fournit un exemple de processus de restauration lorsque l'analyse n'est plus présente dans la base de données de la Figure 66.

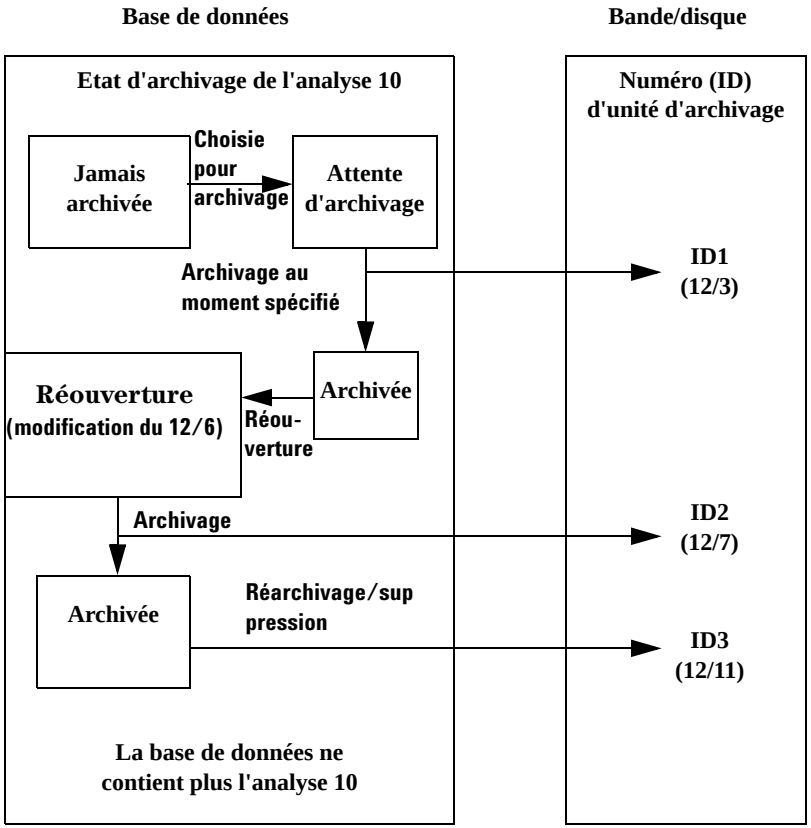



**Figure 66** Exemple de processus d'archivage

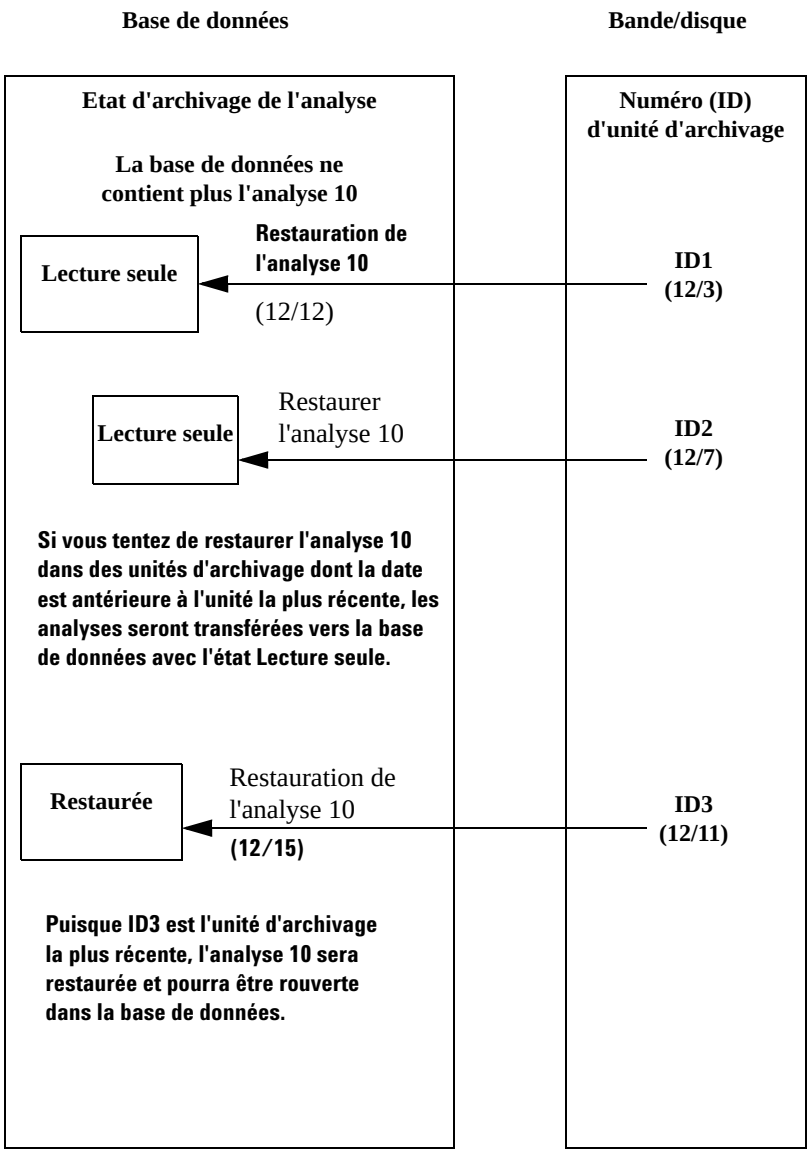



**Figure 67** Exemple de processus de restauration — l'analyse 10 n'existe plus dans la base de données

# Gestion de l'archivage et de la restauration sur Admin Client

Les administrateurs peuvent exécuter certains préparatifs sur ChemStore C/S Admin Client avant que les utilisateurs possédant les droits d'accès correspondants archivent et restaurent des analyses. ChemStore C/S Admin Client est une application web que vous pouvez utiliser sur n'importe quel PC du réseau pour gérer facilement les fonctions d'archivage et de restauration et d'autres processus exécutés par le serveur. Le programme Admin Client communique avec le serveur d'archivage qui fonctionne comme un service NT de l'ordinateur serveur. Vous accédez au programme Admin Client à l'aide d'un navigateur web. Admin Client permet d'exécuter les tâches suivantes :

- planifier l'archivage, la restauration et la suppression d'opérations ;
- modifier des opérations planifiées ;
- examiner les rapports détaillant les opérations en attente ;
- revoir l'historique des archivages et des restaurations ;
- examiner les informations concernant les archives, les analyses et d'autres objets ;
- exécuter les opérations d'archivage, de restauration et de suppression immédiatement ;
- définir les paramètres de fonctionnement du serveur tels que le délai d'activation (wakeup interval) ;
- connecter le serveur d'archives à Oracle ;
- ajouter et modifier les informations de connexion de la base de données.

Pour plus d'informations sur l'utilisation de ces fonctions de gestion, consultez l'aide en ligne du programme Admin Client.

Consultez la section « Archivage et restauration » page 139 pour plus de détails sur l'archivage et la restauration avec le logiciel ChemStore C/S.

## Présentation du processus d'archivage et de suppression

Le programme Admin Client vous aide à gérer les processus d'archivage exécutés sur le serveur d'archivage. Les étapes d'archivage et de suppression d'une analyse sont décrites ci-dessous.

1. Un utilisateur spécifie les analyses de la base de données qu'il souhaite archiver à l'aide d'une fonction interne à ChemStore C/S et indique la date et l'heure de l'opération. Ces analyses sont placées dans des tables d'archivage à l'usage exclusif du serveur d'archivage. L'opération à effectuer et la date prévue sont enregistrées dans une table de planification (planning).
2. Lorsque le serveur est réactivé, il vérifie le planning pour déterminer s'il y a des demandes d'archivage en attente. Si c'est le cas, le système vérifie l'intégrité des demandes ; par exemple, certaines analyses ne peuvent être archivées que si elles sont dans un état compatible avec l'archivage.
3. Si le serveur détermine qu'une analyse peut être archivée, les données sont enregistrées dans un fichier binaire (dans le répertoire spécifié par la variable PATH). En complément de l'écriture des données de l'analyse dans le fichier d'archives, toutes les données concernant les objets relatifs à l'analyse, tels que la méthode et les données brutes, sont aussi enregistrées dans le fichier binaire. Si une erreur se produit pendant cette partie du processus, l'état « Failed » (Echec) est attribué à l'archive de l'analyse dans les tables d'archivage et elle est supprimée du planning.
4. Quand le serveur a fini d'écrire les données dans le fichier binaire, il retourne à la base de données pour marquer les analyses archivées pour suppression si le paramètre AutoDel de l'archive a la valeur TRUE (VRAI).
5. L'opération de suppression a lieu automatiquement après un archivage réussi. A tout moment, les administrateurs peuvent utiliser ChemStore C/S Admin Client pour planifier manuellement une opération de suppression d'une analyse.
6. Lors de l'opération de suppression, toutes les analyses marquées pour suppression pendant l'archivage ou manuellement depuis ChemStore C/S sont supprimées.

# Exécution des tâches d'archivage/restauration sur Admin Client

Les tâches citées au début de cette section sont divisées en cinq groupes. Il s'agit des rapports d'archivage, des tâches d'archivage, des commandes serveur, des options de configuration globale et des fonctions de test. Les administrateurs doivent ouvrir une session sur Admin Client avec un nom d'utilisateur et un mot de passe pour effectuer l'archivage, les commandes serveur et les tests. Tout utilisateur ayant accès au réseau peut consulter ces rapports sans ouvrir une session sur Admin Client.

Vous accédez aux tâches de ces groupes à partir de la page web principale du programme Admin Client.

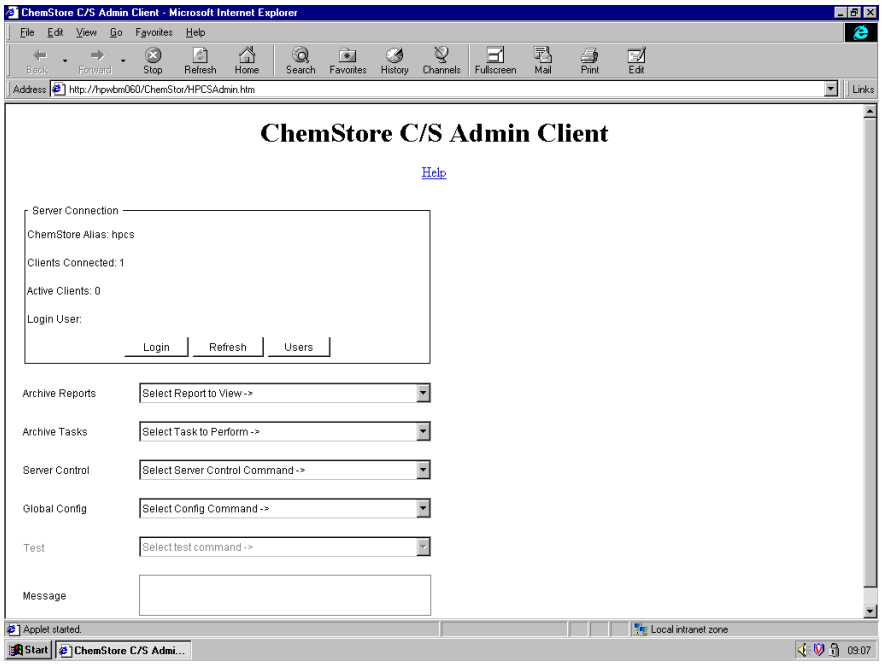
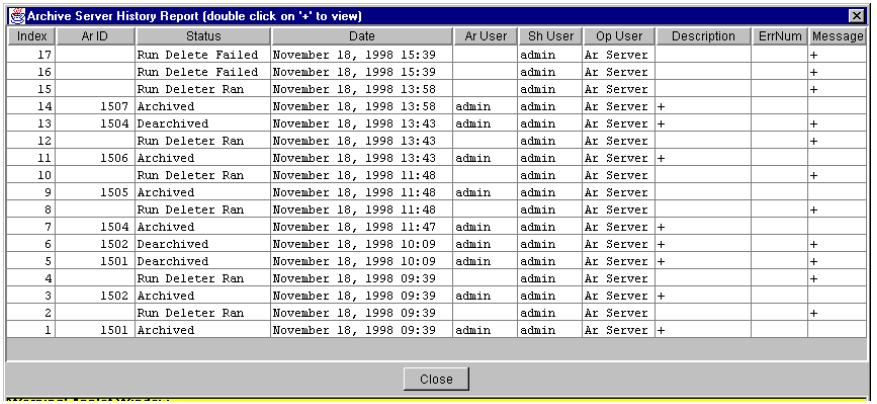



**Figure 68** Page web principale d'Admin Client

Une fois que vous avez accédé à la page web principale du programme Admin Client, vous pouvez accéder aux différentes tâches en fonction de vos droits d'accès. La plupart des vues et des rapports ont le format suivant :




| Index | Ar ID | Status | Date | Ar User | Sh User | Op User | Description | ErrNum | Message |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 17 | | Run Delete Failed | November 18, 1998 15:39 | | admin | Ar Server | | | + |
| 16 | | Run Delete Failed | November 18, 1998 15:39 | | admin | Ar Server | | | + |
| 15 | | Run Deleter Ran | November 18, 1998 13:58 | | admin | Ar Server | | | + |
| 14 | 1507 | Archived | November 18, 1998 13:58 | admin | admin | Ar Server | + | | |
| 13 | 1504 | Dearchived | November 18, 1998 13:43 | admin | admin | Ar Server | + | | + |
| 12 | | Run Deleter Ran | November 18, 1998 13:43 | | admin | Ar Server | | | + |
| 11 | 1506 | Archived | November 18, 1998 13:43 | admin | admin | Ar Server | + | | |
| 10 | | Run Deleter Ran | November 18, 1998 11:48 | | admin | Ar Server | | | + |
| 9 | 1505 | Archived | November 18, 1998 11:48 | admin | admin | Ar Server | | | |
| 8 | | Run Deleter Ran | November 18, 1998 11:48 | | admin | Ar Server | | | + |
| 7 | 1504 | Archived | November 18, 1998 11:47 | admin | admin | Ar Server | + | | |
| 6 | 1502 | Dearchived | November 18, 1998 10:09 | admin | admin | Ar Server | + | | + |
| 5 | 1501 | Dearchived | November 18, 1998 10:09 | admin | admin | Ar Server | + | | + |
| 4 | | Run Deleter Ran | November 18, 1998 09:39 | | admin | Ar Server | | | + |
| 3 | 1502 | Archived | November 18, 1998 09:39 | admin | admin | Ar Server | + | | |
| 2 | | Run Deleter Ran | November 18, 1998 09:39 | | admin | Ar Server | | | + |
| 1 | 1501 | Archived | November 18, 1998 09:39 | admin | admin | Ar Server | + | | |

**Figure 69** Rapport chronologique du serveur d'archivage

# Journal d'audit

Le journal d'audit conserve la trace de toutes les modifications qui affectent les analyses. Chaque échantillon possède son journal d'audit mis à jour séparément des données d'échantillon. Le journal d'audit n'est pas archivé avec l'analyse ; donc les opérations d'archivage et de restauration peuvent être ajoutées au journal ; le lien avec le journal d'audit est maintenu même si l'analyse est archivée. Les activités qui génèrent une écriture dans le journal d'audit sont les suivantes :

- modification des valeurs des champs personnalisés ;
- modification de l'état d'approbation ;
- modification du nom de l'échantillon ;
- modification de l'état de retraitement ;
- ajouts et suppressions dans un lot ;
- modification de l'état d'archivage.

Vous pouvez afficher le journal d'audit de n'importe quelle analyse ; il contient une table qui récapitule toutes les modifications apportées à l'analyse (avec la date, l'heure et l'auteur) (voir la Figure 70 page 161). Des boutons permettent d'afficher les informations supplémentaires sur les modifications des champs personnalisés et les états d'archivage.

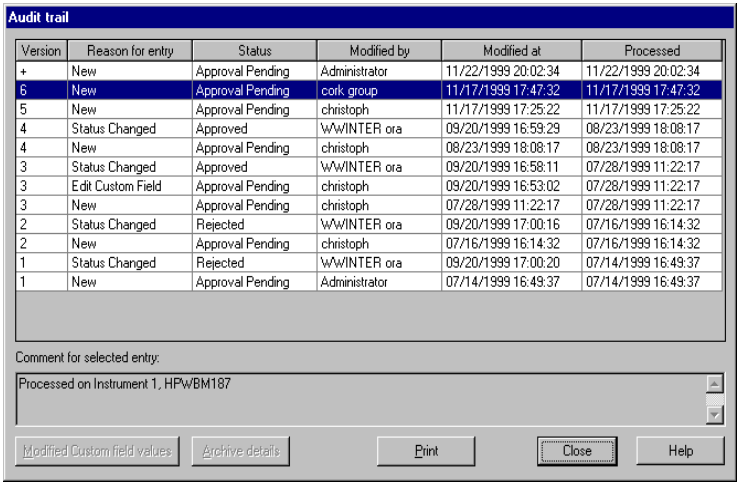



**Figure 70** Journal d'audit

# Notification par e-mail

La fonction décrite ci-dessous n'est disponible que sur les systèmes client/serveur. Il s'agit d'envoyer une notification automatique par e-mail pour certains événements, cette fonction doit être configurée par l'administrateur (ou un autre utilisateur disposant de droits d'accès d'administration). Les événements qui déclenchent une notification automatisée par e-mail sont :

- verrouillage d'un compte d'utilisateur suite au dépassement du nombre de tentatives infructueuses d'ouverture de session ;
- envoi d'un lot en revue ;
- effacement d'un mot de passe ;
- création d'un utilisateur ;
- modification de droits d'accès.

Sauf pour la « notification d'envoi de lot », ces notifications par e-mail ne doivent être envoyées qu'aux administrateurs pour les avertir de violations éventuelles de sécurité. Le fonctionnement des notifications par e-mail impose l'existence d'un serveur d'e-mail en état de fonctionnement. Le message peut être envoyé de deux façons :

- Par SMTP anonyme à un serveur de messagerie.

  Dans ce cas, le serveur de messagerie doit être configuré pour autoriser les messages anonymes par SMTP. Pour une meilleure sécurité, le serveur de messagerie peut ajouter l'adresse IP du serveur de base de données ChemStore à sa liste de confiance pour autoriser le protocole SMTP anonyme seulement à partir des serveurs de confiance.

- Utilisation de LDAP

  Dans ce cas, le serveur virtuel SMTP du serveur Windows 2000, disposant de fonction de routage LDAP, peut être utilisé. La notification par e-mail est ensuite transmise par LDAP au serveur de messagerie. Ceci impose l'existence d'un compte sur le serveur de messagerie utilisé pour envoyer le message ; ce compte devient l'émetteur du message.

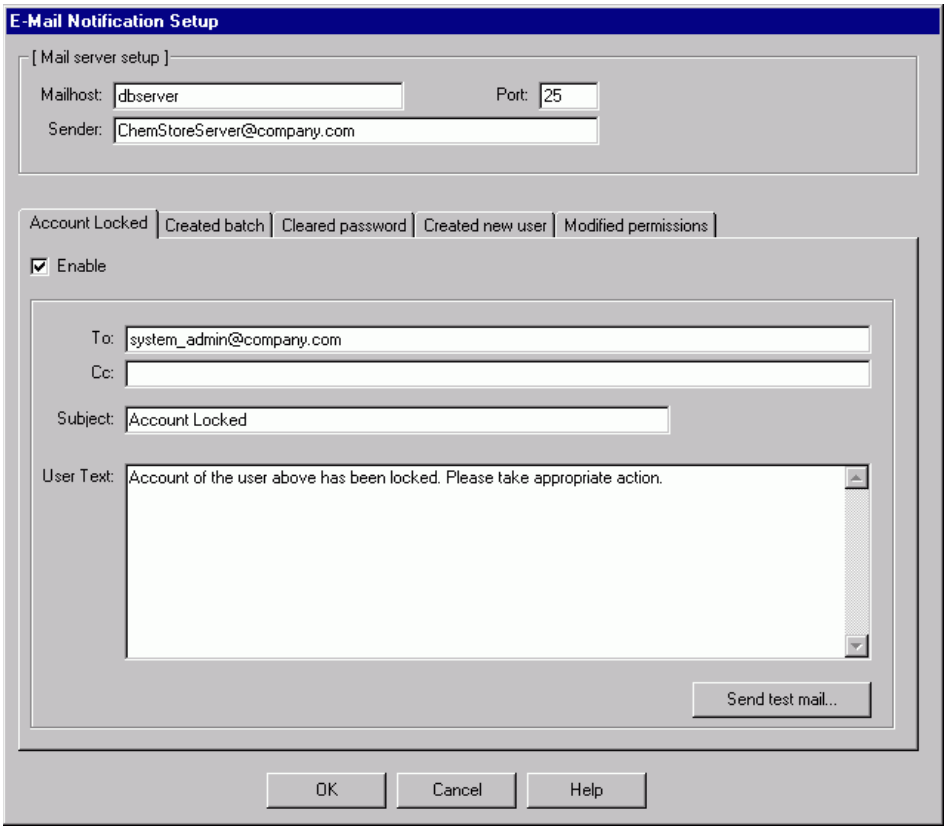



**Figure 71** Boîte de dialogue E-Mail Notification (Notification par e-mail)

La boîte de dialogue E-Mail Notification (Notification par e-mail), présentée sur la Figure 71, contient les paramètres de connexion au serveur de messagerie ainsi que les adresses e-mail des destinataires de la notification. Un sujet par défaut, par exemple « verrouillage de compte » peut être modifié, il est aussi possible d'ajouter du texte.

Le message de notification par e-mail contient la date et l'heure d'initiation du message, l'identifiant de l'utilisateur concerné et les détails sur le client ChemStore, ainsi que le texte supplémentaire indiqué pendant la configuration.

Une fonction de test de messagerie permet de vérifier la bonne configuration de cette fonction.

**Remarque**

Les formats d'adresse e-mail valides sont les suivants :

a) personne@nom.domaine par exemple : jean.echantillon@societe.com

b) texte<personne@nom.domaine> par exemple : Jean Echantillon<jean.echantillon@societe.com>

b) « texte »<personne@nom.domaine> par exemple : « jean Echantillon »<jean.echantillon@societe.com>

Les adresses e-mail doivent être séparées par des « ; »(point-virgules).

# Journal de la base de données

Toutes les interactions qui peuvent avoir une incidence sur la sécurité de la base de données ou de l'application sont consignées dans un journal (logbook). Les entrées du journal peuvent être affichées dans un tableau ; utilisez une requête pour afficher uniquement les entrées répondant aux critères sélectionnés. Les actions qui créent une entrée dans le journal sont :

- configuration d'utilisateur (création d'utilisateur, modification de droits d'accès, changement de mot de passe, effacement de mot de passe, désactivation d'utilisateur, réactivation d'utilisateur, changement du nom d'affichage de l'utilisateur) ;
- modification d'état d'analyse (approbation d'analyses, rejet d'analyses, réouverture d'analyses, suppression de requête de lot,
- suppression de travaux de mise en file d'attente, modification de champs personnalisés) ;
- archivage et maintenance de base de données (archivage d'analyses, restauration d'analyses, archivage d'analyses avec suppression, modification d'archivage, modification d'archivage avec suppression, suppression d'analyses, migration de données, mise à jour de schéma de base de données) ;
- calculs (création de modèle de calcul, création de version de modèle de calcul).

Le journal est affiché en commençant par la dernière entrée ; il peut être imprimé.

# Validation et sécurité des fichiers imprimés

Pour assurer l'exportation des résultats vers un système LIMS à base de fichiers, ChemStore C/S permet d'imprimer les rapports dans un fichier au format xml ou csv. Ces formats sont de simples fichiers de texte qui pourraient être facilement falsifiés. Pour résoudre ce problème, ChemStore C/S comporte un mouchard de validation que vous pouvez utiliser pour vous assurer que les fichiers de rapport n'ont pas été modifiés.

## Validation de fichiers en fonctionnement

Dès que le générateur de rapport a fini d'écrire dans le fichier texte, il appelle la fonction de sécurisation du fichier. ChemStore C/S comprend à cet effet une fonction de « sécurisation de fichiers » qui calcule une signature numérique et l'enregistre avec le fichier. A tout moment, la signature numérique peut être recalculée et comparée à celle enregistrée avec le fichier ; une différence entre les deux signatures signale que le fichier a été modifié.

Si vous souhaitez vérifier automatiquement la conformité des fichiers de rapports exportés aux données d'origine, vous pouvez utiliser un fichier de commandes de validation pour calculer le total de contrôle. Le fichier de commandes c:\hpchem\chemstor\validatefile.bat lance hpexfs.exe et affiche un message d'erreur si les codes de sécurité ne correspondent pas.

**Remarque** Quand le fichier hpexfs00.exe est installé sur un ordinateur où ChemStore C/S n'est pas installé, les fichiers hpcsfs00.dll et msvbwm50.dll doivent être installés et enregistrés manuellement. Hpcsfs00.dll et hpexfs00.exe sont destinés aux systèmes d'exploitation Microsoft Windows ; ils ne sont pas utilisables sous UNIX.

## Fonctions de validation des fichiers

Une DLL (hpcsfs00.dll) apporte trois fonctions :

**SecureFile(chemin)** Cette fonction effectue les opérations nécessaires pour sécuriser le fichier spécifié. Elle calcule une « signature » du fichier et l'ajoute en fin de fichier. La signature est une valeur de hachage — valeur sur 24 caractères calculée par l'algorithme RSA Data Security, Inc. MD5 Message Digest.

**ValidateFile(chemin, clé)** Cette fonction recalcule la signature du fichier et la compare à celle enregistrée initialement par la fonction SecureFile(). Si les signatures ne sont pas identiques ou si le fichier n'a pas de signature, c'est qu'il a été modifié et la fonction ValidateFile() renvoie un code d'erreur. Notez que le paramètre *clé* n'est pas utilisé dans la version actuelle de cette fonction.

**UnsecureFile(chemin, clé, nouveauchemin)** Cette fonction retire la signature du fichier et écrit une nouvelle version du fichier dans *nouveauchemin*. Notez que le paramètre *clé* n'est pas utilisé dans la version actuelle de cette fonction.

## Remplacement de la procédure de sécurité intégrée par une procédure personnalisée

Si vos besoins en sécurité sont supérieurs à ceux qu'apporte ChemStore C/S, vous pouvez simplement remplacer le fichier hpcsfs00.dll par votre propre fichier hpcsfs00.dll.

**Remarque** Vous devrez retirer du registre le fichier Agilent hpcsfs00.dll avant d'enregistrer votre nouveau hpcsfs00.dll avec l'utilitaire regsrv32.

Vous devez vous assurer que votre hpcsfs00.dll apporte les trois fonctions décrites dans cette section.

### Public Function SecureFile (strFilePath As String, strKey As String) As Long

Renvoie zéro si l'opération est réussie, sinon renvoie un code d'erreur. Le générateur de rapport appelle cette fonction lorsqu'il a terminé d'écrire dans le fichier texte.

### Public Function ValidateFile (strFilePath As String, strKey As String) As Long

Vérifie que le fichier du chemin spécifié a été sécurisé et n'a pas été modifié depuis.

Renvoie zéro si le fichier est sécurisé et si les signatures concordent, sinon renvoie un code d'erreur.

Notez que selon l'implémentation, strKey peut être utilisée ou non. Elle n'est pas utilisée dans l'implémentation par défaut qui valide un fichier en vérifiant que sa signature correspond aux données qu'il renferme. La variable strKey peut cependant être utilisée dans le cadre d'une implémentation utilisant un cryptage du fichier.

### Public Function UnsecureFile (strFilePath As String, strKey As String) As Long

Retire la sécurité du fichier du chemin spécifié.

Renvoie zéro si l'opération est réussie, sinon renvoie un code d'erreur.

Notez que selon l'implémentation, strKey peut être utilisée ou non. Elle n'est pas utilisée dans l'implémentation par défaut qui retire la sécurité d'un fichier en supprimant la signature intégrée dans ce fichier, entre les balises d'ouverture et de fermeture (les balises restent en place dans le fichier). La variable strKey peut cependant être utilisée dans le cadre d'une implémentation utilisant un cryptage du fichier.

# 6
# Gestion des données

Sauvegarde de votre base de données 170
Sauvegarde de la version autonome 172
Sauvegarde de la version client/serveur 176
Maintenance de l'ordinateur ChemStation 178
Plan de récupération après incident 181

# Sauvegarde de votre base de données

Pour protéger vos précieuses données, il est indispensable d'établir une stratégie de sauvegarde appropriée. Vous devez sauvegarder vos fichiers de données à intervalles réguliers. S'il n'est plus nécessaire de maintenir des données en ligne, vous devriez également les archiver et les effacer afin de libérer un espace précieux sur le disque dur de l'ordinateur.

La procédure de sauvegarde copie vos fichiers de base de données (et tous les autres fichiers que vous avez choisi de sauvegarder) depuis le disque de votre ordinateur vers un autre support, le plus souvent un CD-ROM amovible ou une cartouche magnétique. La sauvegarde est recommandée pour toutes les informations importantes stockées dans un ordinateur. Les intervalles de sauvegarde doivent être aussi rapprochés que nécessaire pour protéger vos données les plus importantes ; un programme de sauvegarde hebdomadaire de la base de données complète est couramment appliqué ; il est cependant possible, si votre débit d'échantillons est très élevé, que vous ayez besoin d'effectuer une sauvegarde quotidienne.

La version autonome de la base de données est un fichier Microsoft Access ; vous pouvez utiliser n'importe quel programme de sauvegarde courant pour copier le contenu du dossier hpchem/database sur un autre support.

La base de données client/serveur est une base Oracle, vous devez arrêter l'instance de base de données pour effectuer une sauvegarde complète.

**REMARQUE** Dans la version autonome comme dans la version client/serveur du produit, vous ne devez pas accéder à la base de données pendant une sauvegarde, il est donc essentiel de prévoir des périodes d'indisponibilité pour effectuer cette opération de maintenance indispensable.

## Sauvegarde ou archivage ?

Contrairement à l'archivage (voir Chapitre 5, « Sécurité des données »), la sauvegarde concerne toujours l'ensemble des données. En cas de panne du système, vous pouvez restaurer la totalité de la base de données sur le système après réparation.

L'archivage permet de transférer des enregistrements individuels de la base de données sur une unité d'archivage distincte de la base de données ; les enregistrements transférés peuvent être ensuite éventuellement supprimés de la base de données. Notez que l'archivage est disponible uniquement avec la version client/serveur de ChemStore C/S.

**ATTENTION** Il est important de bien comprendre que les archives créées avec ChemStore C/S ne peuvent être restaurées que vers la base de données qui a permis de les créer, donc la sauvegarde de la base de données complète est une opération indispensable.

Une sauvegarde de la base de données permet de restaurer la base complète (y compris les unités d'archivage) en cas de panne de votre ordinateur. En revanche, il n'est pas possible de restaurer une base de données à partir d'unités d'archivage. C'est la raison pour laquelle il importe d'effectuer une sauvegarde régulière de votre base de données.

# Sauvegarde de la version autonome

La version autonome de la base de données est un fichier Microsoft Access ; vous pouvez utiliser n'importe quel programme de sauvegarde courant pour copier le contenu du dossier hpchem/database sur un autre support. Ces logiciels sont souvent fournis avec les périphériques de sauvegarde tels que les graveurs de CD-ROM ou les lecteurs de bande magnétiques.

**ATTENTION** La sauvegarde impose un accès exclusif aux fichiers, il est donc essentiel que les logiciels ChemStore C/S client et ChemStation ne soient pas en fonctionnement pendant la procédure de sauvegarde.

**REMARQUE** Pour la restauration d'une base de données depuis un support CD-ROM, n'oubliez pas d'enlever l'attribut de fichier lecture seule provenant du support CD-ROM lors de la copie du fichier vers le disque dur. Pour cela, cliquez avec le bouton droit sur le fichier dans l'explorateur après restauration et choisissez Properties [Propriétés] sur le menu, décochez ensuite la case Read-only [Lecture seule].

Un utilitaire est prévu pour réparer un fichier de base de données Microsoft Access endommagé. Cet utilitaire est une application autonome exécutable depuis le groupe ChemStore C/S dans le menu Programmes. Il comprend également des fonctions pour compacter une base de données Access. Vous devriez compacter votre base de données régulièrement, en particulier si vous effectuez des modifications ou des suppressions d'analyses dans votre base. Cet utilitaire vous permet également de créer une nouvelle base vide ; la base vide peut être utile pour importer les paramètres (requêtes, filtres, paramètres utilisateur et modèles de rapports) d'une base de données existante.

Si la base de données est endommagée de manière irréversible, supprimez les fichiers altérés de votre disque dur avant de restaurer les fichiers de la base à partir de la sauvegarde la plus récente. Nous vous recommandons également d'optimiser votre disque dur après avoir supprimé les fichiers endommagés et avant de restaurer la base de données au moyen, par exemple, de l'outil de défragmentation du disque fourni avec votre système d'exploitation. Cette procédure vous garantit que tout dommage physique affectant la surface du disque dur sera identifié et écarté pour les nouveaux enregistrements. Elle optimise également l'espace disque et la vitesse.

## Sauvegarde Windows 2000/XP

Windows 2000 comme Windows XP sont livrés avec des programmes de sauvegarde compatibles avec beaucoup de lecteurs de bande standard. L'utilitaire de sauvegarde fourni avec le système d'exploitation autorise aussi la sauvegarde vers un fichier unique qui peut ensuite être placé sur un support hors ligne. Les deux utilitaires de sauvegarde permettent de sauvegarder la base de registre Windows avec les données.

## Automatisation et programmation de la sauvegarde Windows 2000/XP

Windows permet d'automatiser et de programmer les tâches de sauvegarde par des fichiers de commandes ou par le service Scheduler [Planificateur de tâches].

Pour configurer le service Planificateur de tâche pour un démarrage automatique, cliquez sur **Start [Démarrer]** et **Run [Exécuter]**. Sur la ligne de commande tapez : `ntbackup`.

Utilisez l'assistant de sauvegarde pour définir des travaux de sauvegarde répétitifs et précisez les données à sauvegarder. Vous trouverez plus de détails dans l'aide en ligne de l'outil de sauvegarde.

**ATTENTION** N'effectuez jamais une sauvegarde sur un système indépendant tant que le Review Client (Client de revue) est ouvert. Le fichier de sauvegarde ne permettrait pas de restaurer la base de données. N'effectuez jamais de sauvegarde pendant une acquisition de données car cela diminue la performance du disque dur ; les données acquises pourraient ne pas être écrites assez vite sur le disque et provoquer un message de défaut d'alimentation ou de débordement de tampon dans le journal de l'instrument, avec des pertes possibles de données.

## Lecteurs de bandes

Les lecteurs de bandes sont les périphériques de sauvegarde les plus courants aujourd'hui. Les lecteurs les plus simples lisent et écrivent sur des cartouches Travan (les anciens standards sont les cartouches QIC-3020, QIC-3010, QIC-80, TR-3 et TR-1) qui combinent les coûts matériels initiaux les plus bas avec des performances acceptables (jusqu'à 70 Mo/min). Les cartouches Travan peuvent enregistrer plus de 2 Go de données sur une seule bande et sont donc suffisantes pour sauvegarder la base de données Access de Microsoft. Les lecteurs Travan se branchent soit sur le port interne IDE, soit sur un port parallèle et ne requièrent aucun matériel supplémentaire en dehors du lecteur lui-même et des bandes. Mais les faibles performances des lecteurs Travan conduisent à ne pas les recommander pour les sauvegardes de serveur.

Les lecteurs DAT utilisent habituellement l'interface SCSI et offrent une capacité de stockage et des débits de transfert plus élevés que les lecteurs Travan. Ils sont également plus fiables en cas d'utilisation intensive. Ils nécessitent l'installation d'une carte SCSI et sont le plus souvent disponibles en versions interne et externe. Les lecteurs DAT sont un support économique pour la sauvegarde de petits systèmes serveur ou de grandes bases de données autonomes.

Les lecteurs DLT sont aussi le plus souvent des périphériques SCSI et offrent un débit et une capacité de sauvegarde 2 à 4 fois supérieurs à ceux des lecteurs DAT. Ces lecteurs sont fortement recommandés pour la sauvegarde de la base de données Oracle du produit client/serveur.

## CD-ROM

Les systèmes CD-R (CD inscriptible) permettent d'enregistrer jusqu'à 700 Mo de données sur un seul disque CD-R. Le graveur de CD est le plus souvent branché sur l'interface IDE. Les supports CD-R ont une grande durée de vie, ils sont donc intéressants pour l'archivage. Les disques CD-R peuvent être lus par les autres ordinateurs équipés d'un lecteur de CD-ROM et du logiciel adéquat.

Si vous prévoyez d'utiliser des CD inscriptibles pour sauvegarder les bases de données MS-Access de la version autonome, prévoyez de limiter chaque base de données à 700 Mo.

Le dossier G2181A du CD d'installation contient une configuration de services NT pouvant être installés pour surveiller automatiquement la taille de la base de données.

**ATTENTION** N'effectuez jamais une sauvegarde avec un utilitaire sous Windows pendant que la ChemStation effectue une acquisition de données ou que le Review Client (Client de revue) est ouvert. La structure des fichiers enregistrés sur le support de sauvegarde pourrait être endommagée.

# Sauvegarde de la version client/serveur

La sauvegarde et la restauration de la base de données du logiciel serveur ChemStore C/S est effectuée avec les outils Oracle. Consultez la documentation Oracle correspondante.

**REMARQUE** Nous vous recommandons d'effectuer cette tâche sous la supervision d'une personne expérimentée sur Oracle.

## Types de sauvegarde Oracle

Il existe deux types de sauvegarde des bases de données Oracle, la sauvegarde à froid et la sauvegarde à chaud. Les sauvegardes à froid sont effectuées quand aucune instance de la base de données n'est active, alors que les sauvegardes à chaud peuvent être effectuées pendant l'utilisation de la base de données. Vous trouverez un exemple de procédure de sauvegarde à froid et de restauration dans le Guide d'installation de ChemStore dans la section « Tâches d'administration et informations de référence ».

### Sauvegarde à froid

Une sauvegarde à froid est une simple sauvegarde de tous les fichiers nécessaires constituant la base de données Oracle. Pour effectuer une sauvegarde à froid, il faut d'abord arrêter l'instance de base de données et déconnecter tous les utilisateurs de la base pour que le programme de sauvegarde puisse poser un verrou exclusif sur tous les fichiers. Si vous n'arrêtez pas l'instance de base de données avant la sauvegarde, vous risquez de ne pas sauvegarder certains fichiers ou d'obtenir une base de données incohérente. Dans les deux cas le jeu de sauvegarde ne pourra pas être restauré pour donner une base de données fonctionnelle.

### Sauvegarde à chaud

Une sauvegarde à chaud s'effectue pendant que la base de données est en mode de journalisation d'archive, elle permet d'effectuer la sauvegarde sans arrêter l'instance de base de données. Mais comme l'application ChemStore C/S utilise des enregistrements de grands objets binaires, il n'est pas recommandé d'utiliser la base de données en mode de journalisation d'archive, car ce mode dégrade sérieusement les performances de la base. Agilent recommande généralement de n'effectuer que des sauvegardes à froid, sauf si le système a été optimisé pour un fonctionnement permanent en mode de journalisation d'archives.

# Maintenance de l'ordinateur ChemStation

Sur tous les systèmes, il est nécessaire d'effectuer une maintenance régulière pour garantir un fonctionnement correct.

Cette section décrit les étapes de la maintenance que vous devriez exécuter à intervalles réguliers. Ces étapes comprennent le nettoyage des fichiers temporaires, la vérification de l'intégrité des structures logiques et physiques du système de fichiers, le contrôle antivirus et des sauvegardes régulières.

## Nettoyage des fichiers temporaires subsistants

Il arrive que les fichiers temporaires s'accumulent dans le répertoire spécifié par la variable d'environnement TEMP. Ces fichiers ne sont pas effacés lorsque la session Windows se termine anormalement ; c'est ce qui se produit par exemple lorsque l'ordinateur est éteint alors qu'une session Windows est en cours. Les fichiers temporaires de Windows sont nommés ~XXXXXXX.TMP, où XXXXXXX sont des caractères et des chiffres produits par le programme qui a créé le fichier temporaire. Pour récupérer l'espace temporaire, il est nécessaire d'effacer ces fichiers après avoir refermé toutes les applications en cours d'exécution.

Pour connaître le répertoire utilisé pour l'enregistrement des fichiers temporaires, tapez SET sur la ligne de commande. Cette commande renvoie lesparamètres de variables d'environnement pour tous les utilisateurs et le système.

# Maintenance du système de fichiers de l'ordinateur

### Analyse et réparation des volumes NTFS

Utilisez le programme CHKDSK pour Windows depuis l'invite de commande pour analyser et réparer les volumes NTFS. Ce programme dispose de toutes les fonctionnalités des utilitaires MS DOS Chkdsk et Scandisk y compris une analyse de la surface. Pour effectuer une analyse de la surface, utilisez la commande **CHKDSK /R**. Le contrôle du disque peut aussi être effectué à partir de la fenêtre de propriétés d'un lecteur en sélectionnant l'onglet Tools [Outils].

Windows 2000 et Windows XP exécutent une routine d'autotest à chaque démarrage. Si la routine détecte une anomalie sur le volume, elle lance automatiquement une commande **CHKDSK /F** pour réparer l'erreur. Si Windows ne parvient pas à exécuter la commande **CHKDSK /F** (parce que vous essayez par exemple de l'exécuter sur la partition de démarrage ou parce que quelqu'un accède à la partition à partir du réseau), cette tâche est remise jusqu'au prochain démarrage du système.

### Utilisation de la compression sur les partitions NTFS

Du fait de la diminution des performances lors de l'utilisation de la fonction de compression de Windows, Agilent ne recommande pas d'utiliser cette fonction pour les systèmes ChemStation Plus. Les données ChemStation subissent une compression assez élevée sous leur format natif, donc la compression du disque n'offre d'habitude qu'un avantage marginal.

### Utilisation du cryptage sous Windows 2000 et XP

Suite à la diminution des performances et au risque de perte d'accès aux données lors de l'utilisation de la fonction de cryptage de Windows, Agilent recommande de ne pas utiliser le cryptage sur les systèmes ChemStation plus. Les données de la ChemStation sont le plus souvent de grande taille et enregistrées dans des fichiers binaires protégés par une somme de contrôle, donc le cryptage n'est pas nécessaire et réduit les performances du système.

## Fonctionnement en continu

Si votre environnement nécessite un fonctionnement en continu du système ChemStation Plus pendant des jours, voire des semaines, sans redémarrer le système client, les performances du système peuvent se dégrader à la longue, suite aux fuites de mémoire et de ressources du système. Pour éviter ce problème, nous recommandons d'installer les Service Packs les plus récents dès qu'ils sont disponibles et pris en charge par Agilent. Les Service Packs des systèmes d'exploitation sont accessibles sur la page d'accueil de Microsoft.

Nous vous recommandons en outre de défragmenter votre disque dur à intervalles réguliers, au moins une fois par semaine.

### Défragmentation d'un volume NTFS

Comparée au système de fichiers FAT, la fragmentation des fichiers sur un volume NTFS est considérablement réduite. Par conception, la fragmentation sur un volume NTFS n'apparaît que lorsqu'un fichier augmente de taille après avoir été créé ou enregistré. Cela signifie qu'une sauvegarde et une restauration, à partir d'une bande par exemple, entraînent une défragmentation complète du volume.

Windows 2000 Professionnel et XP incluent un utilitaire simple pour cette opération. Des programmes d'autres fournisseurs permettent de défragmenter les volumes Windows 2000 et XP. Agilent recommande Diskeeper de Executive Software (http://www.execsoft.com/).

**ATTENTION** Ne défragmentez pas votre disque dur pendant une acquisition de données.

Pour en savoir plus sur la maintenance et l'administration du système, consultez le Guide d'installation de ChemStore à la section « Tâches d'administration et informations de référence ».

# Plan de récupération après incident

Vous devriez également préparer un plan de récupération après incident comprenant une copie complète de votre base de données, afin de vous protéger d'une panne complète du système, telle qu'un problème de disque dur. L'objectif d'un plan de récupération après incident est de prévoir des scénarios de panne pour identifier et mettre en place les procédures de reprise correspondant à ces scénarios. Voici une liste abrégée des pannes les plus courantes.

## Panne de disque dur

En cas de panne d'un disque dur, vous devez faire réparer votre système avant de le restaurer depuis une sauvegarde.

Agilent recommande d'utiliser sur les systèmes serveurs des contrôleurs RAID matériels avec des configurations de disques redondantes pour que la défaillance d'un seul disque ne se traduise pas par une perte de données ni une indisponibilité du système.

## Panne de courant

Une panne de courant peut se traduire par la destruction de données sur un système de base de données, sauf si le système peut être fermé proprement. C'est d'autant plus important sur les systèmes serveur Oracle, où des onduleurs sont indispensables.

## La base de données est endommagée

Le plan de récupération après incident doit donner des indications sur l'intervalle maximal de sauvegarde afin de pouvoir récupérer la plus grande partie des données, au cas où la base de données serait endommagée. La restauration peut alors se faire à partir de la sauvegarde.

1. Effacez tous les fichiers et répertoires qui ont été endommagés et qui devraient être récupérés à partir de la dernière sauvegarde.
2. Optimisez le disque avec un utilitaire de défragmentation.
3. Récupérez les données en les extrayant de la sauvegarde.

# 7
# Calculs ChemStore C/S

Calculs statistiques 184
Calculs faisant appel aux champs personnalisés 205
Calcul de temps 208

# Calculs statistiques

## Calculs de valeurs simples

Les calculs ci-après n'ont pas besoin de paires de valeurs.

Dans tous les cas, les calculs portent sur le jeu de données en cours, affiché dans la fenêtre ou le rapport ChemStore C/S (à l'exception des analyses marquées exclues).

**Number (Nombre)** Affiche le nombre de valeurs :

$$\text{Number} = (n)$$

**Sum (Somme)** Affiche la somme des valeurs :

$$\text{Sum} = \left(\sum X_i\right)$$

**Minimum** Affiche la valeur la plus faible.

**Maximum** Affiche la valeur la plus grande.

**Mean (Moyenne)** Affiche la moyenne arithmétique (somme / nombre) de toutes les valeurs.

$$\text{Mean} = \langle x \rangle = \frac{\left(\sum X_i\right)}{n}$$

**Variance** Affiche le carré de l'écart type.

$$\text{Variance} = s^2 = \frac{\left[\sum (x - \langle x \rangle)^2\right]}{(n-1)}$$

**Standard Deviation (Ecart type relatif)** Affiche l'écart type des valeurs.

$$\text{Std. Dev.} = s = \sqrt{(\text{Variance})}$$

**Relative Standard Deviation (Ecart type)** Affiche l'écart type relatif, soit l'écart type divisé par la moyenne. L'affichage sous forme de pourcentage multiplie la valeur de RSD par 100.

$$\frac{RSD}{\%} = \left(\frac{s}{\langle x \rangle}\right) 100$$

## Calculs de régressions

Les calculs pris en charge pour les paires de valeurs sont basés sur une régression linéaire pondérée. Ils nécessitent la spécification de paramètres supplémentaires.

Il n'est pas nécessaire de spécifier les paramètres avant qu'un calcul des statistiques soit nécessaire. Les paramètres sont :

**Curve Type (Type de courbe)** Détermine le type de fonction auquel les données sont ajustées. Les types suivants sont pris en charge :
**Types linéaires :** ordre zéro (moyenne), premier ordre (linéaire), deuxième ordre (quadratique), troisième ordre (cubique) ;
**Types non linéaires :** exponentiel, logarithme, puissance.

**Origin Treatment (Traitement de l'origine)** Détermine comment le point de coordonnées (0,0) est utilisé. Les types suivants sont pris en charge :
**Ignore (Ignorer) :** ne modifie en rien les données (aucune action).
**Include (Inclure) :** ajoute l'origine (0,0) au jeu de données.
**Force (Forcer) :** oblige la courbe qui sera déterminée à passer par l'origine (0,0).

**Weighting (Pondération)** Détermine comment les valeurs sont pondérées dans le calcul : None, $1/x$, $1/x^2$, $1/y$, $1/y^2$

## Modèle de régression linéaire

Le modèle de régression utilisé pour les courbes d'ordre de 0, 1, 2 et 3 est l'un des suivants, selon que la courbe est forcée à passer par l'origine ou non :

$y'_i = a_0 + a_1x_1 + \ldots + a_mx_i^m$ (I) passage non forcé par l'origine ;

$y'_i = a_1x_1 + \ldots + a_mx_i^m$ (II) passage forcé par l'origine,

où :

$x_i$ sont les valeurs x indépendantes ;
$y_i$ sont les valeurs y liées (mesurées) ;
n est le nombre de points de données ;
m est l'ordre de la régression ;
$a_o \ldots a_m$ sont les coefficients de régression calculés ;
$y'_i$ sont les valeurs y calculées à partir de la fonction en utilisant $a_o \ldots a_m$

**REMARQUE** Si $m = 0$, le cas (I) doit être utilisé et le résultat $y'_i$ est égal à la moyenne des valeurs $y_i$.

## Solution matricielle de la régression

Les mêmes modèles de régression peuvent être exprimés en notation matricielle

$y' = Fa$

où :

$y' = (y_1' \ldots y_n')^T$ vecteur des colonnes des valeurs calculées ;

$a = (a_1 \ldots a_m)^T$ vecteur des colonnes des coefficients ;

F est l'une des deux matrices rectangulaires suivantes (selon que la courbe est forcée à passer par l'origine ou non) :

$F = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^m \\ 1 & x_n & x_n^m \end{bmatrix}$ cas (I), matrice $[n \times (m+1)]$ de valeurs indépendantes ;

$F = \begin{bmatrix} x_1 & x_1^m \\ x_n & x_n^m \end{bmatrix}$ cas (II), matrice $[n \times m]$ de valeurs indépendantes ;

Les valeurs des vecteurs des coefficients « a » peuvent être trouvées avec

$$a = F^{\#}y$$

où :
y est le vecteur des variables liées ;
$F^{\#} = V\Lambda^{-1}U^T$ est l'inverse de F, calculée par décomposition en valeurs singulières ($F = U\Lambda V^T$), méthode robuste aidant à minimiser les erreurs d'arrondi et les problèmes lorsque les équations sont presque singulières.

## Valeurs statistiques et associées

Une fois que le coefficient a été déterminé, les calculs des statistiques et des valeurs associées sont effectués :

### Residuals (Résidus)

Une valeur par valeur $y_i$ mesurée:

$$e_i = y'_i - y_i$$

### Ecart type de l'échantillon

Valeur. Elle est également appelée « écart type résiduel » :

$$s = \sqrt{(\sum (y'_i - y_i)^2)/q}$$

où :
$q = n - m - 1$ Nombre de degrés de liberté, cas (I) ;

$q = n - m$ Nombre de degrés de liberté, cas (II).

### Ecart type des coefficients

Valeur pour chacun des coefficients (m+1). Ecart type du coefficient $a_i$ :

$$s_{a_i} = s\sqrt{(V\Lambda^{-2}V^T)_{ii}}$$

où : $V, \Lambda$ sont calculés à partir de la décomposition en valeurs singulières.

### Coefficient de corrélation (exprimé sous forme de coefficient de détermination)

Valeur.

$$R^2 = \sum \frac{(y'_i - y_{avg})^2}{(y_i - y_{avg})^2}$$

où :

$y_{avg} = \Sigma y_i / n$ pour le cas (I),

$y_{avg} = 0$ pour le cas (II).

## Modification de la régression linéaire pondérée

Dans le cas d'une pondération, les poids sont enregistrés comme éléments diagonaux d'une matrice W :

$W = (w_{ii})$ matrice diagonale des poids ;

$w_i$ poids (un parmi $(1/x_i),(1/x_i^2),(1/y_i),(1/y_i^2)$ )

Dans le cas où $x_i$ ou $y_i$ est égal à 0, $w_i$ est calculé comme la moyenne des valeurs non nulles restantes.

En posant :

$$\Phi = W^{-\frac{1}{2}} = \mathrm{diag}((\sqrt{w_1})\ldots(\sqrt{w_n}))$$

la solution de l'équation de régression devient

$$a = (\Phi F)^{\#}\Phi y$$

où :

$(\Phi F)^{\#} = V\Lambda^{-1}U^{T}$ représente la matrice inverse de $\Phi F$ calculée par décomposition en valeurs singulières.

Les calculs des coefficients d'écart type et des coefficients de corrélation sont modifiés comme suit :

### Erreur relative de coïncidence

$$s_w = \sqrt{\sum(w_{ii}(y'_i - y_i)^2)/q}$$

### Ecart type des coefficients

$$s_{a_i} = s_w\sqrt{(V\Lambda^{-2}V^{T})_{ii}}$$

### Coefficient de corrélation (exprimé sous forme de coefficient de détermination)

$$R^2 = \frac{\sum(w_{ii}(y'_i - y_{avg})^2)}{\sum(w_{ii}(y_i - y_{avg})^2)}$$

où :

$y_{avg} = \sum(w_{ii}y_i)/\sum(w_{ii})$ cas (I)

$y_{avg} = 0$ cas (II)

# Modification des fonctions non linéaires

La même matrice de régression linéaire est utilisée pour ajuster les données à une fonction non linéaire dans la mesure où cette fonction peut être « linéarisée ».

### Exponentielle

L'équation « réelle » est

$$y_i = a \cdot \exp(bx_i)$$

Elle peut être exprimée par une « fonction d'ajustement » linéaire selon les coefficients suivants :

$$\ln(y_i) = \ln(a) + bx_i$$

Dans la pratique, les valeurs y modifiées sont calculées comme

$$Y_i = \ln(y_i)$$

La régression utilise alors l'équation suivante :

$$Y_i = a_0 + a_1 x_i$$

### Puissance

$y_i = ax_i^b$ équation réelle ;

$\ln(y_i) = \ln(a) + b \cdot \ln(x_i)$ fonction linéaire dans les coefficients ;

$Y_i = \ln(y_i), X_i = \ln(x_i)$ modifications des valeurs x et y ;

$Y_i = a_0 + a_1 X_i$ fonction utilisée pour la régression.

### Logarithme

$y_i = a + b \cdot \ln(x_i)$ équation réelle (déjà linéaire dans les coefficients) ;

$X_i = \ln(x_i)$ modifications des valeurs x ;

$y_i = a_0 + a_1 X_i$ fonction utilisée pour la régression.

# Commandes du calculateur personnalisé

### SELECT

**Syntaxe :**

select <column list> for <coumpound list> where <condition> into <table>

**Description :**

Cette instruction permet de rechercher des données à partir de lignes sélectionnées d'une ou de plusieurs tables de base de données dans une table de calculs personnalisés. Après le mot réservé select, vous devez indiquer une <liste de colonnes> de tables de bases de données. Ces colonnes peuvent être des colonnes simples ou des sous-colonnes.

Les sous-colonnes sont les colonnes disponibles pour chaque composé spécifié par une clause for dans la <liste de composés>. Les sous-colonnes doivent être précédées d'un point d'exclamation « ! ». Si au moins une sous-colonne est spécifiée dans la <liste de colonnes>, la clause for est obligatoire. Les composés de la clause for peuvent aussi être spécifiés par un caractère générique « * ». Le caractère générique seul désigne tous les composés. L'ajout d'un caractère générique à un préfixe de composés désigne tous les composés commençant par ce préfixe. L'expression ci-dessous désigne tous les composés commençant par « Bar » et ceux commençant par « C ».

For Bar*,C*

La clause where facultative définit un sous-ensemble des lignes de la table de recherche à l'aide d'une expression de <condition>. La <table> résultante est indiquée par la clause into.

### FROM

**Syntaxe :**

from <table> select <column list> for <compound list> where <condition> into <table>

**Description :**

Cette instruction permet de rechercher des données d'une table de calcul personnalisé (table source) pour les placer dans une autre (table de destination). La table source est indiquée après le mot réservé from. Le reste de l'instruction est identique à celui de l'instruction select décrite ci-dessus sauf pour : la <liste de colonnes> et la <liste de composés>, qui proviennent de la table source plutôt que de tables de base de données.

### IF

**Syntaxe :**

if <condition> then <first assignment> else <second assignment>

**Description :**

Cette instruction est utilisée pour l'affectation conditionnelle. La partie else de l'instruction est facultative. Si la condition s'évalue en une valeur unique et que l'expression <condition> est vraie, alors c'est la <première affectation> qui est effectuée, sinon c'est la <deuxième affectation> qui est effectuée. Si la condition s'évalue en une colonne alors que l'affectation n'est pas sous forme de colonne, la condition est évaluée à nouveau sous forme logique et sur toutes les lignes de la colonne avant d'effectuer l'affectation. Si la condition et l'affectation sont sous forme de colonne, une affectation conditionnelle est effectuée ligne par ligne selon la valeur de la ligne de la colonne de condition. Si la longueur de la colonne de condition (m) est supérieure à la longueur de la colonne d'affectation (n), seules les n premières lignes font l'objet d'une affectation conditionnelle. La partie excédentaire de la colonne conditionnelle est ignorée. Si la longueur de la colonne conditionnelle (m) est inférieure à la longueur de la colonne d'affectation (n), seules les m premières lignes font l'objet d'une affectation conditionnelle. Le reste des affectations n'est pas effectué du tout.

## FORMAT

### Syntaxe :

format <operand list> using <format specification>

### Description :

Cette instruction permet de mettre en forme les données de colonnes et de variables. La liste de colonnes et de variables séparée par des virgules est indiquée comme <liste d'opérandes> et la mise en forme voulue est indiquée par la chaîne <spécification de format>. La mise en forme n'affecte que la représentation en sortie (écran, papier) des données, les données elles-mêmes sont inchangées.

### Spécification de format

La spécification de format est une chaîne contenant des instructions de mise en forme des opérandes. Ces instructions sont données par des caractères de la spécification de format avec les significations décrites ci-dessous. Les caractères sans signification spéciale sont affichés littéralement. Pour afficher littéralement un caractère de signification spéciale, faites-le précéder d'une barre oblique inverse (\) ou incluez-le entre guillemets (« »). La barre oblique inverse elle-même et les guillemets ne sont pas affichés. Pour afficher une barre oblique inverse, utilisez-en deux (\\).

### Mise en forme d'opérandes numériques

Une spécification de format pour opérandes numériques peut avoir une à quatre sections, séparées par des points-virgules.

| Si vous utilisez | Le résultat est |
|---|---|
| Une section seulement | La spécification de format s'applique à toutes les valeurs. |
| Deux sections | La première section s'applique aux valeurs positives ou nulles, la deuxième aux valeurs négatives. |

| | |
|---|---|
| Trois sections | La première section s'applique aux valeurs positives, la deuxième aux valeurs négatives et la troisième aux valeurs nulles. |
| Quatre sections | La première section s'applique aux valeurs positives, la deuxième aux valeurs négatives, la troisième aux valeurs nulles et la quatrième aux valeurs vides (null). |

La spécification de format ci-dessous est composée de deux sections : la première spécifie le format des valeurs positives ou nulles ; la deuxième spécifie le format des valeurs négatives.

« $#,##0;($#,##0) »

Si vous incluez des points-virgules sans rien entre, la section manquante est affichée avec le format de la valeur positive. Par exemple, la spécification de format ci-dessous affiche les valeurs positives et négatives avec le format indiqué dans la première section et « Zero » si la valeur est égale à zéro.

« $#,##0;;\Z\e\r\o »

Les caractères ci-dessous peuvent être utilisés dans les spécifications de format numérique :

| Caractère | Description |
|---|---|
| Aucun | Affiche le nombre sans aucune mise en forme. |
| 0 | **Substitut de chiffre.** Affiche un chiffre ou un zéro. Si l'opérande comporte un chiffre dans la position où apparaît le 0 dans la spécification de format, l'afficher ; sinon, afficher un zéro à cette position. Si l'opérande a moins de chiffres qu'il y a de zéros (de part et d'autre du séparateur décimal) dans la spécification de format, afficher des zéros devant ou derrière la valeur. Si l'opérande a plus de chiffres à droite du séparateur décimal qu'il n'y a de zéros à droite du séparateur décimal dans la spécification de format, arrondir le nombre au nombre de décimales indiqué par le nombre de zéros. Si l'opérande a plus de chiffres à gauche du séparateur décimal qu'il n'y a de zéros à gauche du séparateur décimal dans la spécification de format, afficher les chiffres supplémentaires sans modification. |

| | |
|---|---|
| # | **Substitut de chiffre.** Affiche un chiffre ou rien. Si l'opérande comporte un chiffre dans la position où apparaît le # dans la spécification de format, l'afficher ; sinon, ne rien afficher à cette position. Ce symbole fonctionne comme le substitut de chiffre 0, mais il ne fait pas afficher les zéros devant ou derrière la valeur si l'opérande a un nombre de chiffres au plus égal au nombre de caractères # de part et d'autre du séparateur décimal dans la spécification de format. |
| . | **Substitut de séparateur décimal.** Le substitut de séparateur décimal détermine le nombre de chiffres affichés à gauche et à droite du séparateur décimal. Si la spécification de format ne contient que des signes # à gauche de ce symbole, les nombres inférieurs à 1 commencent par le séparateur décimal. Pour afficher un zéro en tête pour les nombres inférieurs à 1, utiliser 0 comme premier substitut de chiffre à gauche du séparateur décimal. |
| % | **Substitut de pourcentage.** L'opérande est multiplié par 100. Le caractère pour cent (**%**) est inséré à la position où il apparaît dans la chaîne de format. |
| , | **Séparateur de milliers.** Le séparateur de milliers sépare les milliers des centaines dans un nombre comportant quatre chiffres ou plus à gauche du séparateur décimal. L'utilisation standard du séparateur décimal est désignée par une spécification de format contenant un séparateur de milliers encadré de substituts de chiffre (**0** ou **#**). Deux séparateurs de milliers adjacents ou un séparateur de milliers immédiatement à gauche du séparateur décimal (qu'une décimale soit spécifiée ou non) signifie « mettre à l'échelle l'opérande en le divisant par 1000, avec arrondi si nécessaire ». Vous pouvez par exemple utiliser la spécification de format « ##0,, » pour représenter 100 millions sous la forme 100. Les opérandes inférieurs à 1 million sont affichés comme 0. Deux séparateurs de milliers à toute position autre que immédiatement à gauche du séparateur décimal sont traités simplement comme une spécification de séparateur de milliers. |
| E- E+ e- e+ | **Format scientifique.** Si la spécification de format contient au moins un substitut de chiffre (**0** ou **#**) à droite de E-, E+, e- ou e+, l'opérande est affiché en notation scientifique et E ou e est inséré entre le nombre et son exposant. Le nombre de substituts de chiffres à droite détermine le nombre de chiffres de l'exposant. Utilisez E- ou e- pour placer un signe moins devant les exposants négatifs. Utilisez E+ ou e+ pour placer un signe moins devant les exposants négatifs et un signe plus devant les exposants positifs. |

### Mise en forme des opérandes de date/heure

Les caractères ci-dessous peuvent être utilisés dans les spécifications de format de date/heure :

| Caractère | Description |
|---|---|
| : | Séparateur d'heure. Le séparateur d'heure sépare les heures, minutes et secondes dans la mise en forme des valeurs d'heure. |
| / | Séparateur de date. Le séparateur de date sépare les jours, mois et année dans la mise en forme des valeurs de date. |
| C | Affiche la date sous forme ddddd et l'heure sous forme hhhhh, dans cet ordre. N'affiche que les informations de date s'il n'y a pas de partie fractionnaire au numéro de série de date ; n'affiche que l'heure s'il n'y a pas de partie entière. |
| D | Affiche le jour sous forme de nombre sans zéro en tête (1 31). |
| Dd | Affiche le jour sous forme de nombre avec zéro en tête (01 31). |
| Ddd | Affiche le jour sous forme d'abréviation (Sun Sat). |
| Dddd | Affiche le jour sous forme de nom complet (Sunday Saturday). |
| Ddddd | Affiche la date sous forme de date complète (incluant jour, mois et année). Le format de date court par défaut est m/j/aa. |
| Dddddd | Affiche un numéro de série de date sous forme de date complète (incluant le jour, le mois et l'année). Le format de date longue par défaut est mmmm jj, aaaa. |
| W | Affiche le jour de la semaine sous forme de nombre (1 pour dimanche à 7 pour samedi). |
| Ww | Affiche la semaine de l'année sous forme de nombre (1 54). |
| M | Affiche le mois sous forme de nombre sans zéro en tête (1 12). Si m suit immédiatement h ou hh, c'est la minute et non le mois qui est affiché. |
| Mm | Affiche le mois sous forme de nombre avec zéro en tête (01 12). Si m suit immédiatement h ou hh, c'est la minute et non le mois qui est affiché. |
| Mmm | Affiche le mois sous forme d'abréviation (Jan Dec). |
| Mmmm | Affiche le mois sous forme de nom complet (Janvier Décembre). |

| | |
|---|---|
| Q | Affiche le trimestre de l'année sous forme de nombre (1 4). |
| Y | Affiche le jour de l'année sous forme de nombre (1 366). |
| Yy | Affiche l'année sous forme de nombre à deux chiffres (00 99). |
| Yyyy | Affiche l'année sous forme de nombre à quatre chiffres (100 9999). |
| H | Affiche l'heure sous forme de nombre sans zéro en tête (0 23). |
| Hh | Affiche l'heure sous forme de nombre avec zéro en tête (00 23). |
| N | Affiche la minute sous forme de nombre sans zéro en tête (0 59). |
| Nn | Affiche la minute sous forme de nombre avec zéro en tête (00 59). |
| S | Affiche la seconde sous forme de nombre sans zéro en tête (0 59). |
| Ss | Affiche la seconde sous forme de nombre avec zéro en tête (00 59). |
| t t t t t | Affiche une heure complète (avec heure, minute et seconde). Un zéro est affiché en tête si l'option est sélectionnée et si l'heure est antérieure à 10:00 ou à 22:00. Le format d'heure par défaut est h:mm:ss. |
| AM/PM | Utilise une horloge sur 12 heures pour afficher AM en majuscules pour les heures avant midi ; affiche PM en majuscules pour les heures comprises entre midi et 23:59. |
| am/pm | Utilise une horloge sur 12 heures pour afficher am en minuscules pour les heures avant midi ; affiche pm en minuscules pour les heures comprises entre midi et 23:59. |
| A/P | Utilise une horloge sur 12 heures pour afficher un A majuscule pour les heures avant midi ; affiche un P majuscule pour les heures comprises entre midi et 23:59. |
| a/p | Utilise une horloge sur 12 heures pour afficher un a minuscule pour les heures avant midi ; affiche un p minuscule pour les heures comprises entre midi et 23:59. |
| AMPM | Utilise une horloge sur 12 heures pour afficher la chaîne littérale AM pour les heures avant midi ; affiche la chaîne littérale PM pour les heures comprises entre midi et 23:59. |

### Mise en forme d'opérandes de chaîne

Une spécification de format pour chaînes peut contenir une ou deux sections séparées par un point-virgule (;).

| Si vous utilisez | Le résultat est |
|---|---|
| Une section seulement | Le format s'applique à toutes les données de chaîne. |
| Deux sections | La première section s'applique aux données de chaîne, la deuxième aux valeurs vides (null) et aux chaînes de longueur nulle (« »). |

Les caractères ci-dessous peuvent être utilisés dans les spécifications de format de chaîne :

| Caractère | Description |
|---|---|
| @ | **Substitut de caractère**. Affiche un caractère ou un espace. Si la chaîne comporte un caractère dans la position où se trouve le symbole @ dans la chaîne de format, afficher ce caractère ; sinon, afficher un espace dans cette position. Les substituts sont remplis de droite à gauche sauf s'il existe un caractère point d'exclamation (!) dans la chaîne de format. |
| & | **Substitut de caractère**. Affiche un caractère ou rien. Si la chaîne comporte un caractère dans la position où apparaît le signe &, l'afficher ; sinon, ne rien afficher. Les substituts sont remplis de droite à gauche sauf s'il existe un caractère point d'exclamation (!) dans la chaîne de format. |
| < | **Forcer en minuscules**. Affiche tous les caractères en minuscules. |
| > | **Forcer en majuscules**. Affiche tous les caractères en majuscules. |
| ! | **Forcer le remplissage de gauche à droite** des substituts. La valeur par défaut est le remplissage des substituts de droite à gauche. |

## TRANSPOSE

**Syntaxe :**

Transpose <table source> by <column> into <destination table>

**Description :**

Cette instruction permet de transposer une table de calcul personnalisé. La table à transposer est définie par <table source> et le résultat est placé dans <table de destination>. La <colonne> by indique la colonne de la table source à utiliser comme noms de colonnes (en-têtes) de la table de destination. Les noms de colonne doivent être uniques, donc la table de destination ne contient aucune colonne de nom apparaissant plus d'une fois dans la <colonne> by. La <table de destination> résultante est indiquée par la clause into.

## GROUP

**Syntaxe :**

Group <table source> by <column> do <operation list>
into <destination table>

**Description :**

Cette instruction permet d'effectuer une liste d'opérations sur des groupes de lignes. La table source de cette instruction est indiquée par <table source>, le résultat est écrit dans la <table de destination>. Le groupement des lignes de la <table source> est défini par les valeurs de la colonne by. Chaque groupe de lignes contient des lignes de valeurs égales à la colonne by. Les opérations à effectuer sur chaque groupe de lignes sont définies dans une <liste d'opérations> séparées par des virgules. Chaque élément de cette liste respecte la syntaxe suivante :

<aggregate> ( <column> ) as <alias>

La fonction <regroupement> est appliquée à chaque groupe de lignes de la <colonne>. Les résultats de ces opérations forment un <alias> de colonne de la table de destination. La <table de destination> est spécifiée dans la clause into.

# Codes d'erreur et description

Cette section décrit toutes les erreurs détectées par le calculateur personnalisé. Ces erreurs peuvent être des erreurs de syntaxe ou d'exécution. Les erreurs de syntaxe sont détectées lors du contrôle de la syntaxe de l'instruction de calcul. Si une instruction contient une erreur de syntaxe, elle ne peut pas être comprise par le calculateur personnalisé et ne peut donc pas être évaluée. Le calculateur personnalisé indique la position d'une erreur de syntaxe dans une instruction de calcul soit en plaçant le texte en rouge, soit par un marqueur de position d'erreur (^). Le marqueur de position d'erreur indique l'élément de syntaxe inattendu.

Seules les instructions de calcul de syntaxe correcte sont évaluées. Même si une instruction est correcte d'un point de vue syntaxique, elle peut produire des erreurs d'exécution suite à l'indisponibilité des données ou à la présence d'un type de données ou d'une valeur inattendu. Le calculateur personnalisé ne suit pas la position de l'erreur pour les erreurs d'exécution.

## Erreurs de syntaxe

Ces erreurs sont détectées lors du contrôle de syntaxe. Toutes les erreurs de syntaxe terminent immédiatement le contrôle de syntaxe et un message d'erreur adéquat apparaît. Si une instruction de calcul contient plus d'une erreur de syntaxe, seule la première est détectée et affichée.

| Code | Description | Cause |
|---|---|---|
| 2 | 'by' expected (« by » attendu) | Il manque la clause **by** (instructions **transpose** et **group**). |
| 4 | 'do' expected (« do » attendu) | Il manque la clause **Do** (instruction **group**). |
| 5 | End of line expected<br>(fin de ligne attendue) | L'instruction se termine par un ou plusieurs éléments syntaxiques non nécessaires et donc inattendus. |
| 6 | « = » expected (« = » attendu) | Il manque un signe (le premier mot d'une instruction est mal orthographié et traité comme un nom de variable par le calculateur personnalisé). |
| 7 | Expression expected<br>(Expression attendue) | Il manque une expression (il manque la partie droite d'une expression contenant un opérateur de comparaison). |
| 8 | Factor expected<br>(facteur attendu) | Il manque un facteur (dans une expression après un opérateur *, / ou **and**). |

| | | |
|---|---|---|
| 9 | For expected (for attendu) | Il manque une clause **For** dans une instruction contenant au moins une sous-colonne (instructions **select** et **from**). |
| 11 | « into » expected (« into » attendu) | Il manque la clause **into** (instructions **select, from, transpose,** et **group**). |
| 12 | '(' expected [« ( » attendu] | Il manque une parenthèse gauche (dans un appel de fonction). |
| 14 | Name expected (nom attendu) | Nom incorrect (le nom ne commence pas par une lettre) |
| 15 | Number expected (nombre attendu) | Nombre incorrect (chiffres suivis d'un point décimal suivi de lettres) |
| 17 | ')' expected [« ) » attendu] | Il manque une parenthèse droite (le nombre de parenthèses gauches et droites ne correspond pas ; dans un appel de fonction). |
| 18 | 'select' expected (« select » attendu) | Il manque une clause **Select** (instruction **from**). |
| 19 | string expected (chaîne attendue) | Il manque une chaîne (spécification de format dans une instruction **format**) |
| 20 | Term expected (terme attendu) | Il manque un terme (dans une expression après un +, - ou un opérateur). |
| 21 | 'then' expected (« then » attendu) | Il manque une clause **Then** (instruction **if**). |
| 22 | 'using' expected (« using » attendu) | Il manque une clause **Using** (instruction **format**). |
| 24 | Invalid column type (type de colonne non valide) | Une colonne qui n'est pas une sous-colonne est spécifiée comme sous-colonne ou une colonne qui est une sous-colonne n'est pas spécifiée comme telle (instructions **select** et **from**). |
| 25 | DB column expected (colonne de base de données attendue) | La colonne spécifiée n'est pas une colonne de la base de données spécifiée (instruction **select**). |
| 26 | DB table expected (table de base de données attendue) | La table spécifiée n'existe pas dans la base de données (instruction **select**). |
| 27 | Compound expected (composé attendu) | Le composé spécifié n'existe pas dans la base de données (instructions **select** et **from**). |
| 28 | Variable not found (variable introuvable) | La variable spécifiée n'existe pas (instruction **format**). |
| 29 | Table not found (table introuvable) | La table spécifiée n'existe pas (instruction **format**). |

| | | |
|---|---|---|
| 30 | Column not found<br>(colonne introuvable) | La colonne spécifiée n'existe pas dans la table spécifiée (instruction **format**). |
| 32 | Table already exists<br>(la table existe déjà) | Spécification d'une table existant déjà dans une clause INTO<br>(instructions **select, from, transpose** et **group**). |
| 41 | Duplicate column name<br>(nom de colonne en double) | Une colonne est spécifiée plus d'une fois (instructions **select** et **from**). |
| 42 | Column is read only<br>(la colonne est en lecture seulement) | Affectation directe ou indirecte d'une expression à une colonne de table obtenue à partir de la base de données (instructions d'affectation de colonne). |

### Erreurs de calcul

Dans certains cas vous pouvez avoir à inclure des messages d'erreur dans vos calculs pour le rapport définitif. A ce stade de génération de rapport c'est la seule façon de consulter les messages d'erreur de calcul parce que le calcul est effectué au moment de la génération du rapport et les résultats du calcul intégrés dans ce rapport.

### Erreurs d'exécution

Ces erreurs sont détectées à l'exécution. Si une erreur d'exécution apparaît plus d'une fois dans une même ligne de calcul, elle n'est signalée qu'une fois.

| Code | Description | Cause |
|---|---|---|
| 37 | Bad argument<br>(argument incorrect) | Une fonction a été appelée avec une valeur d'argument interdite. |
| 38 | Overflow (saturation) | Le résultat d'une opération est trop grand. |
| 39 | Division by zero (division par zéro) | Tentative de division par zéro. |
| 40 | Type mismatch<br>(non-correspondance de type) | Le type du ou des opérandes est incompatible avec l'opération tentée. |

### Bad argument (argument incorrect)

Cette erreur d'exécution apparaît en cas d'appel d'une fonction arithmétique avec une valeur d'argument interdite. Les opérations suivantes produisent cette erreur :

- Fonctions arithmétiques (log, ln) avec argument négatif ou nul. L'argument peut être une constante, une variable ou une colonne.
- Fonction arithmétique (sqrt) avec argument négatif. L'argument peut être une constante, une variable ou une colonne.

### Overflow (saturation)

Cette erreur d'exécution apparaît quand le résultat numérique d'une opération est trop grand ou trop petit. Les opérations suivantes produisent cette erreur :

- Addition (+), soustraction (-), multiplication (*) de grands opérandes numériques. Les deux opérandes peuvent être une constante, une variable ou une colonne.
- Division (/) d'opérandes nuls ou proches de zéro. Les deux opérandes peuvent être une constante, une variable ou une colonne.
- Fonctions arithmétiques (exp, sqr) et fonctions de regroupement (mean, rstdev, stdev, sum, var) appliquées à de grands opérandes. L'argument peut être une constante, une variable ou une colonne.
- Négation (not) de valeurs numériques supérieures à `2147483646`.

### Division by zero (division par zéro)

Cette erreur d'exécution apparaît en cas de division d'une valeur non nulle par zéro. Les opérations suivantes produisent cette erreur :

- Division (/) d'un opérande non nul par un opérande nul. Les deux opérandes peuvent être une constante, une variable ou une colonne.

### Type mismatch (non-correspondance de type)

Cette erreur d'exécution apparaît quand un argument ou opérande d'un opérateur n'est pas du type approprié. Les opérations suivantes produisent cette erreur :

- Addition (+), soustraction (-), multiplication (*), division (/), conjonction (et) et disjonction (ou) d'une chaîne et d'un opérateur numérique. Les deux opérandes peuvent être une constante, une variable ou une colonne. Peu importe lequel des arguments est de type chaîne ou de type numérique.
- Négation (not) et changement de signe (-) sur un opérande chaîne. Les opérandes peuvent être une constante, une variable ou une colonne.
- Soustraction (-), multiplication (*), division (/), conjonction (et) et disjonction (ou) de deux opérateurs de chaîne. Les deux opérandes peuvent être une constante, une variable ou une colonne.
- Fonctions arithmétiques (abs, exp, ln, log, sqr, sqrt) et fonctions de regroupement (mean, rstdev, stdev, sum, var) appliquées à des arguments de type chaîne. L'argument peut être une constante, une variable ou une colonne.

# Calculs faisant appel aux champs personnalisés

Comme indiqué dans la section « Utilisation des champs personnalisés » page 23, vous pouvez utiliser des champs personnalisés pour transférer des données associées à des échantillons vers la base de données ChemStore C/S s'ils ne sont pas inclus dans le modèle de base de données standard. Ces données peuvent permettre de calculer des données associées au composé à l'aide des calculs personnalisés décrits dans la section « Pour comprendre les assistants de script de calcul personnalisé » page 64.

Cette section décrit comment calculer avec les macro-fonctions intégrées quelques données souvent utilisées.

## Facteur de réponse original

Pour un composé donné, le facteur de réponse original est le facteur de réponse calculé en divisant la quantité indiquée dans la table d'étalonnage par la surface du pic. Le champ facteur de réponse de la base de données contient le facteur de réponse calculé, après avoir effectué une moyenne, tel qu'il apparaît dans la table d'étalonnage de la ChemStation. Utilisez la fonction ChemStoreCompoundVal pour obtenir le facteur de réponse original de chaque composé des analyses d'étalonnage du composé spécifié.

1. Créez un champ personnalisé pour chaque composé dont vous souhaitez obtenir le facteur de réponse original. Pour le nom des champs, utilisez de préférence une convention incluant le nom du composé pour en faciliter l'identification.
2. Ajoutez les champs personnalisés à une étude et sélectionnez le bouton **field details (détails du champ)**.
3. Dans la section data entry (saisie des données) sélectionnez **by ChemStation function (par une fonction ChemStation)** et pour la fonction, tapez `ChemStoreCompoundVal` *(« AmtPerRespOrg », « NomduComposé »)*. Remplacez `NomduComposé` par le nom approprié pour ce composé (celui de la table des composés).

# Liste des fonctions intégrées

### ChemStoreAreaSum(signal$)

La fonction ChemStoreAreaSum calcule la somme des aires de tous les pics d'un chromatogramme d'une acquisition (signal) spécifiée ou de toutes les acquisitions. Si une acquisition (signal) est spécifiée, seuls les pics de cette acquisition sont additionnés. Si ce paramètre est omis, tous les pics du chromatogramme sont additionnés.

Paramètres :

[signal$]

Vous pouvez spécifier un signal soit numériquement, soit par sa description complète, soit par les n premiers caractères de sa description. Le paramètre doit être entré entre guillemets car il s'agit d'une chaîne de caractères.

**Exemple**

ChemStoreAreaSum (« 2 »)

Somme de tous les pics de la seconde acquisition de ChromRes[1].Signal

ChemStoreAreaSum (1)

Erreur - utilisez ChemStoreAreaSum (« 1 »)

ChemStoreAreaSum (« »)

Somme de tous les pics de toutes les acquisitions ouvertes.

ChemStoreAreaSum (« DAD1 B, Sig=305,190 Ref=550,100 »)

Somme de tous les pics du signal « DAD1 B, Sig=305,190 Ref=550,100 »

ChemStoreAreaSum (« DAD1 B »)

Somme de tous les pics DAD1, voie B.

### ChemStoreCompoundVal(expression$,composé$)

La fonction ChemStoreCompoundVal renvoie, par composé, une valeur notée expression$ pour le composé composé$.

Paramètres :

[expression$] : spécifie les informations à renvoyer

[composé$] : nom du composé tel qu'il apparaît exactement dans la table d'étalonnage de la ChemStation. Les noms de composés ne font pas la distinction entre majuscules et minuscules.

**Exemple** ChemStoreCompoundVal (« FirstPeak~MeasRetTime », « Biphényle »)

Renvoie le temps de rétention du pic désigné comme le composé « Biphényle ».

ChemStoreCompoundVal (« AmtPerRespOrg », « Biphényle »)

Renvoie le facteur de réponse original du composé « Biphényle »

### ChemStoreCompoundText(expression$,composé$)

La fonction ChemStoreCompoundText renvoie, par composé, une chaîne de caractères (texte) notée expression$ pour le composé composé$.

Paramètres :

[expression$] : spécifie les informations à renvoyer

[composé$] : nom du composé tel qu'il apparaît exactement dans la table d'étalonnage de la ChemStation. Les noms de composés ne font pas la distinction entre majuscules et minuscules.

**Exemple** ChemStoreCompoundText$ (« FirstPeak~IntPeakType », « Biphényle »)

Renvoie le type du pic identifié comme le composé « Biphényle » tel que « BV ». Consultez l'aide en ligne de ChemStation pour une description des codes de la ligne de la base.

# Calcul de temps

## Synchronisation du temps

Un système ChemStation plus étant constitué de plusieurs composants, il est nécessaire de synchroniser les horloges pour que les différentes parties du système indiquent la même heure.

Les horloges des PC clients et serveur doivent être synchronisées au moyen des outils standard normalement disponibles sur le réseau.

Les instruments d'analyse qui possèdent une horloge en temps réel servant à dater les événements, comme le système Agilent CPL 1100, sont synchronisés lors du démarrage de la ChemStation.

Les modules individuels de la série Agilent CPL 1100 se synchronisent sur le système à chaque nouvelle injection.

## Horodatage

Sur un système ChemStation plus, tous les événements qui se produisent sont horodatés. Un événement peut être l'injection d'un échantillon, l'enregistrement d'une méthode sur le disque, la fin d'un transfert sur une base de données, l'approbation d'une analyse, etc. Il y a généralement deux possibilités d'enregistrer l'horodatage:

- horodatage à partir du fuseau horaire configuré ;
- horodatage ignorant le fuseau horaire configuré.

Les horodatages de la base de données ChemStore C/S (Oracle ou Access) sont enregistrés indépendamment des fuseaux horaires du PC serveur ou du PC review client. C'est la raison pour laquelle, si on modifie le fuseau horaire de l'un des ordinateurs, l'horodatage indiqué par ChemStore C/S ne change pas.

L'horodatage des journaux de la ChemStation est aussi indépendant du fuseau horaire configuré dans l'ordinateur. Cela concerne par exemple l'heure de début et de fin de méthode ou de séquence, les messages d'erreur et les avertissements.

L'horodatage des fichiers de données et de méthodes de ChemStation respecte en revanche la configuration du fuseau horaire du PC sur lequel ils sont créés. Il s'agit par exemple de l'heure d'injection, l'heure des étalonnages, l'heure de l'enregistrement d'une méthode, etc.

Cette dépendance du fuseau horaire ne peut se remarquer que si les fichiers de données sont transmis en dehors des limites du fuseau horaire, ou si le fuseau horaire du PC qui élabore le rapport est modifié après l'acquisition des données.

## Fuseaux horaires

Afin de pouvoir comparer des événements qui se produisent dans différents fuseaux horaires, la ChemStation enregistre les horodatages dépendant du fuseau horaire en temps universel - UTC (Universal Coordinated Time). L'UTC est, en pratique, l'heure du méridien de Greenwich (Greenwich Main Time) (GMT) ; tous les autres fuseaux horaires sont calculés à partir de celui-ci.

Pour enregistrer un horodatage dépendant du fuseau horaire, tel que l'heure d'injection, la ChemStation procède de la manière suivante :

1. L'événement se produit.
2. L'heure locale est lue sur le système.
3. La variable système TZ est lue, elle indique le fuseau horaire de l'ordinateur.
4. L'heure UTC est calculée à partir de TZ et de l'heure locale.
5. L'UTC est enregistrée en secondes depuis le 01/01/1970 à 00:00:00.

Pour retrouver un horodatage dépendant du fuseau horaire, tel que l'heure d'injection, la ChemStation procède de la manière suivante :

1. La variable système TZ est lue, elle indique le fuseau horaire de l'ordinateur.
2. L'UTC est lue en secondes depuis le 01/01/1970 à 00:00:00 à partir des fichiers.
3. La variable système TZ est utilisée pour calculer l'heure locale de ce PC au moment où l'événement se produit.
4. L'heure locale de l'événement en secondes depuis le 01/01/1970 à 00:00:00 est convertie en fonction du format configuré.

Etant donné que l'enregistrement d'un événement et la consultation de cet événement peuvent être effectués à partir d'ordinateurs situés dans des fuseaux horaires différents, les horodatages dépendant du fuseau horaire varient en fonction de la variable système TZ.

## Configuration du fuseau horaire sur le PC

Sous Windows 2000 et Windows XP, le fuseau horaire du PC peut être modifié au moyen de l'onglet Time Zone [Fuseau horaire] de l'utilitaire Date/Time [Date/Heure] du Control Panel [Panneau de configuration]. Malheureusement, la ChemStation ne peut pas lire ce paramètre, il est donc nécessaire d'affecter la bonne valeur à la variable système TZ.

Le programme d'installation du client ChemStore C/S définit la variable système TZ dans la base de registre Windows. Si le paramètre de fuseau horaire de votre ordinateur est modifié après l'installation, vous devez mettre à jour manuellement la variable système TZ à partir de l'onglet Properties [Propriétés] de My Computer [Poste de travail].

Consultez le Guide d'installation de ChemStore dans la section « Informations de référence » pour trouver les instructions de modification de la variable TZ.

**REMARQUE** Notez que lorsque le fuseau horaire du panneau de configuration contient une valeur positive, par exemple *(GMT +01:00) Bruxelles, Berlin, Berne, Rome, Stockholm, Vienne,* la variable TZ doit être négative : *WES-01WED01*.

# Index


## A

administrateur, 132
administrateur labo, 132
analyse, 22
  retraitée, 55
analyse de tendance, 25
analyse retraitée, 55
analyses, 147
  approbations, 14, 45, 49, 55
  marquage, 45, 49, 55
  rejet, 45, 49, 55
aperçu, 125
approbation des analyses, 14, 45, 49, 55
archivage, 15, 139, 171
  automatisé, 139
  interactif, 143
archivage automatisé, 139
archivage interactif, 143
axes
  graphique, 45, 50
axes des graphiques, 45, 50, 99

## B

barre d'outils
  principale, 38
  seconde, 42, 47
barre d'outils principale, 38
base de données
  endommagée, 173
base de données endommagée, 173, 182
boîte de dialogue des préférences, 125
bonnes pratiques de fabrication, 128
bonnes pratiques de laboratoire, 128
BPFc, 128
BPL, 128

## C

calculs, 100
  valeur simple, 184
calculs de valeurs simples, 184
champ calculé, 104
champ personnalisé, 37
champs personnalisés, 22, 23, 27
ChemStation, 12, 26, 55
ChemStoreAreaSum, 206
ChemStoreCompoundText, 207
ChemStoreCompoundVal, 207
chimiste, 131
CHKDSK, 179
chromatogramme, 22
chromatogrammes, 100
clause WHERE, 29
coefficient
  corrélation, 188, 189
  écart type, 188, 189
coefficient de corrélation, 188, 189
coefficient de variation, 52
colonne, 99
compteur, 52
configuration des tables, 50
critères
  recherche, 27
critères de recherche, 27

## D

date/heure, 24
données
  exportation, 15
  externes, 23
  extraction, 13
  organisation, 13
  revue, 14
  transfert, 26
données brutes, 22, 55
données externes, 23
droit d'accès, 128
droits d'accès des utilisateurs, 128, 131

## E

écart type, 52, 185
  coefficients, 188, 189
  échantillons, 187
  relatif, 52
  résiduel, 187
écart type de l'échantillon, 187
écart type relatif, 185
écart type résiduel, 187
éditeur de modèle de rapport, 92
éléments, 96, 100
en-tête, 100
en-tête de page, 95, 100
en-tête de section, 104
entier, 24
erreur relative de coïncidence, 189

état
  approbation, 31, 45, 49
  champ personnalisé, 25
état d'approbation, 31, 45, 49
état d'un champ personnalisé, 25
étiquettes
  paragraphes, 60
étiquettes de paragraphes, 60
étude, 22, 27, 135
exclusion d'analyse, 45
exponentielle, 190
exportation de données, 15
extensibilité, 17
extraction des données, 13, 27

## F

fichier, validation, 166
fichiers
  endommagés, 173
  rechargement, 55
fichiers de données brutes, 26
fichiers de méthode, 26
fichiers de séquence, 26
filtre, 31, 138
  complémentaire, 32
filtre complémentaire, 32
format
  nombre, 50
format de nombre, 50
fuseaux horaires, 209

## G

GMT, 209
graphique, 100, 106
  contrôle, 52
graphique de contrôle, 14, 25, 52
graphique de tendance, 14

## H

horodatage, 208

## I

installation, 12
intégrité
  données, 128
intégrité des données, 128

## J

jeu de données, 94
journal, 165
journal d'audit, 14, 35, 128
journal des transactions, 128

## L

ligne médiane, 53
lignes
  seuil, 53
lignes de seuil, 53
liste de sélection, 24
liste des analyses, 44
liste des composés, 49
logarithme, 190
lot, 45, 49, 55

## M

macro, 136
marquage des analyses, 45, 49, 55
maximum, 52, 184
menu, 38
méthode, 22
minimum, 52, 184
mise à niveau, 17
modèle de rapport, 138
mot de passe, 128, 129
moyenne, 52, 184

## N

nombre, 184
notification
  e-mail, 162
notification par e-mail, 162
NT service pack, 180

## O

ODBC, 12
opérateur, 131
optimisation du disque dur, 173
organigramme des flux de données, 21
organigramme des tâches, 20
organisation des données, 13
origine, 185

## P

Paramètres réglables de l'interface utilisateur, 53
personnalisation des rapports, 15
pied de page, 100
pondération, 185
précision
  nombre, 50
précision des nombres, 50
profil d'utilisateur, 128, 132
puissance, 190

## R

rapport
  inter-échantillons, 25
  inter-instruments, 25
  personnalisation, 15
rapport inter-échantillons, 25
rapport inter-instruments, 25
rapport post-séquence, 125
rapport récapitulatif de séquence, 125
rapports, 15, 92
récapitulatif des statistiques, 52, 184
rechargement de fichiers, 55
réel, 24
réglages
  interface utilisateur, 53
réglages de l'interface utilisateur, 53, 138
régression linéaire, 185
regroupement, 110
rejet des analyses, 45, 49, 55
requête, 27, 28, 138
  générateur, 29

résidus, 187
restauration, 15, 139
restauration, analyses, 148
résultats
  transfert, 13
retraitement, 55
revue
  composés, 40
  échantillons, 39, 41
revue d'échantillons, 39, 41
revue de composés, 40
revue de données, 14
revue de lots, 33
RSD, 52, 185

## S

saisie des données, 136
saut de page, 100
sauvegarde, 170
  stratégie, 170
seconde barre d'outils, 42, 47
section, 97
section de données, 95, 100, 101
sécurité, 129
  données, 128
sécurité des données, 128
séquence, 22, 125
service pack, 180
seuils critiques, 53
seuils d'alarme, 53
somme, 52, 184
spectres, 22, 100
SQL, 28
statistiques, 42, 47, 51, 111
  récapitulatifs, 52, 184
  régression, 40, 185
statistiques de régression, 40, 52, 185
stratégie de restauration après destruction, 181
style d'affichage des dates, 50
suppressions d'analyses, 58

## T

table, 98, 100
  échantillons, 45
  récapitulative d'échantillons, 45
  récapitulative des résultats, 49
  résultats, 50
table d'échantillons, 45
table des résultats, 50
table récapitulative d'échantillons, 45
table récapitulative des résultats, 49
tableau, 104
tables
  configuration, 50
texte, 24
transfert des résultats, 13
type de courbe, 185
type de données, 24, 136
TZ, 209

## U

UTC, 209

## V

valeur de hachage, 167
validation des fichiers, 166
variance, 52, 184
verrouillage de ChemStore et de ChemStation, 129
verrouillage de la session, 129
version, 31
  nombre, 56
version autonome, 12
version client/serveur, 12
versions, 56
vrai/faux, 24
vue arborescente, 95

## X

XML, 145

# Index

**www.agilent.com**

## Contenu de ce manuel

Ce manuel est une introduction aux principaux concepts de ChemStore C/S Agilent. Il aborde les principales fonctionnalités du produit et vous donne des indications pour définir vos études et gérer vos données.

Il contient :

- Un aperçu rapide des fonctions et des possibilités de ChemStore C/S Agilent,
- Des détails d'utilisation de ChemStore C/S Agilent
- Des détails de configuration de ChemStore C/S Agilent pour l'adapter aux différents besoins des laboratoires et des utilisateurs,
- Des détails complets sur la façon dont ChemStore C/S Agilent effectue toute une série de calculs statistiques.

© Agilent Technologies 2002, 2004

Imprimé en Allemagne
03/04

G2181-93010

Agilent Technologies