

Examen CPI2 - Outils numériques pour l'ingénieur

31 Mai 2021

Consignes générales

L'ensemble de l'examen est à réaliser dans un Jupyter Notebook que vous déposerez sur elearn sur le dépôt prévu à cet effet. Vous rédigerez les réponses à vos questions dans des cellules dédiées du notebook.

Tous les calculs doivent être réalisés à l'aide du notebook, sans calculatrice.

Partie 1 : Boire ou conduire ?

Ce problème traite de la cinétique de dégradation de l'alcool dans l'organisme et du taux d'alcool dans le sang. L'objet est de savoir au bout de combien de temps une personne pourra reprendre sa voiture sachant qu'en France, il n'est autorisé de conduire que si la teneur en alcool dans le sang est inférieure à 0.5 g.L^{-1} . L'approche présentée ici est un modèle simple.

On adopte les conventions suivantes :

- L'estomac est considéré comme un milieu réactionnel de volume constant V_1 égal pour chaque expérience au volume d'alcool absorbé.
- On note C_0 la concentration d'alcool initiale dans l'estomac c'est à dire au moment de l'absorption d'alcool.
- Le sang et les autres liquides contenus dans le corps seront considérés comme un milieu réactionnel unique, dénommé "sang", de volume $V_2 = 40 \text{ L}$ constant pour toutes les expériences.
- On note C_2 la concentration d'alcool dans le sang.

On montre que, en fonction du temps, la concentration d'alcool C_2 dans le sang a pour expression :

$$C_2 = C_0 \frac{V_1}{V_2} (1 - e^{-k_1 t}) - k_2 t$$

avec k_1 la constante de vitesse associée au passage de l'alcool à travers la paroi stomacale et k_2 la constante de vitesse d'oxydation de l'alcool dans le sang. On donne $k_1 = 0,17 \text{ min}^{-1}$ et $k_2 = 7,0 \times 10^{-5} \text{ mol.L}^{-1}.\text{min}^{-1}$.

1) Calculer en mol.L^{-1} la concentration maximale d'alcool dans le sang autorisée pour pour conduire. La masse molaire de l'éthanol est $M = 46 \text{ g.mol}^{-1}$.

2) Calculer C_0 sachant qu'une personne buvant 1 bières à 8% absorbe $V_1 = 33 \text{ cL}$ et $0,45 \text{ mol}$ d'alcool. Combien vaut C_0 si la personne boit 2 bières identiques en même temps ?

3) Écrire une fonction qui retourne les valeurs de la concentration C_2 dans le sang en fonction du temps. En plus du temps, la fonction pourra prendre comme paramètres optionnels le volume V_1 d'alcool absorbé et la concentration C_0 initiale en alcool.

4) Représenter graphiquement cette fonction pour un intervalle de temps entre 0 et 350min dans le cas où la personne boit une bière et dans le cas où elle boit deux bières. Faites apparaître une ligne horizontale correspondant au seuil en dessus duquel il est interdit de conduire. Conclure.

5) Dans le cas où la personne a consommé 2 bières, déterminer à la minute près le temps t_{min} qu'elle devra attendre avant de pouvoir conduire ? Afficher la valeur de la concentration et le temps en heures/minutes.

Partie 2 : Traitements de données de spectrométrie de masse

Dans cette partie on s'intéresse à des résultats de spectrométrie de masse. Cette technique consiste à ioniser et éventuellement fragmenter, en phase gaz, un échantillon et mesurer ensuite la quantité d'ions associée à chaque

rapport m/z , m étant la masse de l'ion et z sa charge. L'échantillon étudié ici est une fraction lourde de pétrole brut. Le mélange contient un très grand nombre de molécules qui sont regroupées par classes en fonction du type et du nombre d'hétéroéléments (N, O, S) qu'elles contiennent.

Télécharger le fichier `raw_data_MS.csv`. Ce fichier contient les colonnes suivantes :

- **Class** indique la classe de molécules, associée aux éléments qu'elle contient.
- **Formula** est la formule brute de la molécule
- **Exp m/z** est la valeur du rapport m/z
- **Total Aboud** est le nombre de fois que la masse m/z est mesurée, son abondance.
- **#X** donne le nombre d'éléments X dans la formule brute
- **X/Y** donne le rapport entre le nombre d'éléments X et le nombre d'éléments Y

1) Créer une **DataFrame** à partir du fichier csv. Les colonnes du fichier sont séparées par des points virgules et les nombres décimaux sont écrits avec des virgules.

Lorsque vous avez lu le fichier, vous afficherez le nombre de lignes et de colonnes ainsi que le type de données contenues dans chaque colonne.

2) Afficher les statistiques pour l'ensemble des colonnes pour se donner une vue d'ensemble du tableau. Commenter la taille et la composition des molécules contenues dans le tableau au vu de ce qui est attendue dans un fluide pétrolier lourd.

3) Combien de molécules contiennent un seul atome de soufre ? Vous afficherez également la liste des classes de composés contenant un seul atome de soufre.

4) Combien de molécules contiennent 2 atomes d'oxygène et un atome de soufre ?

5) Afficher un tableau qui représente le nombre de molécules de chaque classe et en faire une représentation graphique.

6) Identifier les valeurs de m/z , les formules brutes et les classes des molécules qui présentent l'abondance la plus élevée ? On se limitera à une dizaine de molécules.

On va s'intéresser plus spécifiquement à certaines classes de molécules

7) Calculer pour chaque molécule la valeur de la DBE, *Double Bond Equivalent*, qui mesure l'insaturation de la molécule. La DBE est un nombre entier. La DBE donne le nombre de cycles et de double liaisons contenant des atomes de carbone. Par exemple la DBE du benzène est 4 et celle d'un acide benzoïque vaut 5.

$$DBE = C - \frac{H}{2} + \frac{N}{2} + 1$$

où C , H et N sont respectivement le nombre d'atomes de carbone, d'hydrogène et d'azote.

8) Afficher le tableau des molécules de la classe O2. Il s'agit par exemple des molécules contenant des acides carboxyliques.

9) Représenter graphiquement la DBE en fonction du nombre d'atomes de carbone pour la classe O2. Que pouvez vous dire de l'insaturation des molécules de cette classe ?

10) Sachant qu'un alcane linéaire a une formule brute du type C_nH_{2n+2} . Quel est le rapport H/C attendu quand n est grand ? Calculer la moyenne et l'écart type des valeurs de H/C pour la classe O2. Choisir une représentation graphique permettant d'apprécier la distribution des valeurs de H/C pour la classe O2. Les résultats sont-ils en accord avec ceux de la DBE ?

11) Quelle classe de molécules présente la DBE moyenne la plus élevée ? Vous afficherez un tableau permettant de répondre à la question.

12) On s'intéresse maintenant aux composés avec une DBE supérieure ou égale à 15. Afficher un tableau permettant de visualiser l'abondance des composés en fonction de leur classe (en colonnes) et de leur DBE (en lignes).

Visualiser l'abondance des composés appartenant à la classe N4OV, O2 et S2. Quels sont ceux qui présentent la plus grande DBE ?