

## Activité 9

# Intégration numérique

### 1 Méthode des rectangles et des trapèzes

1. Définir une fonction de votre choix (dont vous pouvez connaître la primitive!).
2. Écrire le code des deux fonctions  $rectangle(f, debut, fin, pas)$  et  $trapeze(f, debut, fin, pas)$  calculant l'aire sous la courbe  $f$  entre  $a$  et  $b$  avec un incrément de  $pas$ , en utilisant, respectivement, la méthode des rectangles et celle des trapèzes.
3. Vérifier la validité de vos méthodes à l'aide de la fonction choisie.

### 2 Spectre RMN ou de RMN :) et sa courbe d'intégration...

Un format plus ou moins standardisé existe pour sauvegarder les enregistrements de spectres (IR ou RMN). A partir d'un fichier correspondant à une molécule, un autre fichier texte, plus facile à interpréter pour vous a été généré.

Le fichier *RMN.txt* compte environ 1400 lignes; chacune d'elle contient, sous forme de chaînes de caractères séparées par un ; le déplacement chimique et l'intensité du signal. Le fichier commence ainsi :

```
0.0104518209488068;0.0060934236561018
0.0135146470021783;0.00519322683651741
0.0165774730555498;0.00608414558802262
```

Le fichier *RMN.py* contient la trame de résolution de l'exercice. On s'assura d'avoir le fichier *RMN.txt* dans le même dossier que le fichier *RMN.py*

Les premières instructions :

```
1 fichier = open("RMN.txt")
2 lignes = fichier.readlines()
3 fichier.close()
```

permettent d'ouvrir le fichier et de générer la variable *lignes* qui contient un tableau de chaînes de caractère (le premier élément du tableau est "0.121249699346168;0.00290495778376928").

Supposons que l'on récupère dans une variable *l* la chaîne de caractère "0.121249699346168;0.00290495778376928". L'instruction  $t = l.split(";")$  permet de récupérer le tableau de chaîne de caractères : ["0.121249699346168", "0.00290495778376928"].

1. Compléter le fichier *RMN.py* afin de construire deux tableaux(listes) *delta* et *intensite* contenant, respectivement, les différentes valeurs de l'opposé du déplacement chimique et de l'intensité du signal.

2. Tracer la courbe correspondante et s'assurer que l'on a bien l'allure d'un spectre RMN ! L'instruction `plt.xlim(5, 0)` permettra d'orienter l'axe des déplacements chimiques dans le bon sens.
3. Compléter le programme afin de construire deux tableaux *deltaIntegre* et *integre* permettant de tracer la courbe d'intégration du signal.
4. Supprimer les commentaires en fin de fichier afin d'exploiter quelques possibilités de la bibliothèque matplotlib permettant la superposition de courbes avec deux échelles verticales différentes.

**3****Cadeau de Noël**

Bon, vous avez bien travaillé ! Vous avez droit à un cadeau . .

Le format plus ou moins standardisé évoqué est le format jdx. Vous pouvez trouver sur internet de nombreux spectres à ce format. Dans le logiciel « ChimPack » que j'avais commencé à développer, j'avais utilisé une collection de spectres expérimentaux. Le logiciel permettait ensuite d'afficher ou non la courbe d'intégration et de zoomer sur certains massifs.

Vous trouverez dans les fichiers compactés une soixantaine de spectres RMN et autant d'IR. Vous trouverez, par ailleurs, un fichier `jcamp.py` qui permet d'extraire les données et deux fichiers d'exemples `jcamp_rm.py` et `jcamp_ir.py` qui permet de tracer les spectres. Il y a peut-être quelques fichiers qui ne sont pas au format « officiel » et que l'on ne peut pas exploiter ; je n'ai pas eu le temps de tous les tester !