

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**




Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки 18.04.01 «Химическая технология»
Образовательная программа «Химическая технология подготовки нефти и газа»

ОТЧЕТ ПО ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ № 5

| |
|---|
| По дисциплине |
| РУТНОН ДЛЯ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ |

Студент

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|--------------|----------------------|---|-------------------|
| 2ДМ22 | Лукьянов Д.М. |  | 26.12.2023 |

Руководитель

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|------------------------|--------------------|---------------------------|---------|-------------------|
| доцент ОХИ ИШПР | Чузлов В.А. | к.т.н. | | 27.12.2023 |

ЗАДАНИЕ 1

Дана база данных по индивидуальным компонентам и их физико-химическим параметрам в виде электронной таблицы с расширением файла .xlsx.

В столбце `class` содержится информация о классе углеводорода, к которому принадлежит данный компонент: 'P' – парафиновые, 'N' – нафтеновые, 'A' – ароматические углеводороды.

Описание других важных полей базы данных приведено в таблице:

| Наименование поля | Описание |
|----------------------|--|
| 'MolecularWeight' | Молярная масса компонента, г/моль |
| 'NormalBoilingPoint' | Температура кипения при атмосферном давлении, °C |
| 'StdLiquidDensity' | Плотность компонента по жидкости при стандартных условиях, кг/м ³ |
| 'C' | Число атомов углерода в молекуре углеводорода |

1. Считайте данную базу в объект `pandas.DataFrame`.
2. Из полученного объекта `pandas.DataFrame` получите данные для компонентов, принадлежащих классам парафиновых, нафтеновых и ароматических углеводородов и сохраните эти данные в отдельный объект `pandas.DataFrame`.
3. Для углеводородов указанных выше классов усредните значения молярной массы, плотности и температуры кипения в соответствии с числом атомов углерода и классом углеводорода.
4. Постройте точечную диаграмму (`scatter`) зависимости плотности жидкости от температуры кипения для каждого класса углеводородов (на одном графике).

Программная реализация:

Cell 1

```
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import random as rnd
import numpy as np
```

```
from matplotlib import cm
```

Cell 2

```
df = pd.read_excel('compounds_data.xlsx')  
df
```

Cell 3

```
new_df = df[df['class'].isin(['P', 'N', 'A'])]  
new_df[['C', 'class', 'MolecularWeight', 'StdLiquidDensity',  
        'NormalBoilingPoint']].groupby(['C', 'class']).mean().head(20)
```

Cell 4

```
fig, ax = plt.subplots(figsize=(10,8))  
classes = list(new_df['class'].unique())  
n_colors = len(classes)  
colours = cm.rainbow(np.linspace(0, 1, n_colors))  
for n, cl in enumerate(classes):  
    c=colours[n].reshape(1,-1)  
  
    new_df[new_df['class'] == cl].plot(x='NormalBoilingPoint',  
                                       y='StdLiquidDensity', kind='scatter',  
                                       ax=ax, label=cl, color=c, fontsize=14)  
plt.legend(fontsize=14)  
ax.set_ylabel('Плотность в жидком состоянии, кг/м$^3$', fontsize=14)  
ax.set_xlabel('Температура кипения, °C', fontsize=14);
```

Ответ:

Out [3]:

| | | MolecularWeight | StdLiquidDensity | NormalBoilingPoint |
|-----|-------|-----------------|------------------|--------------------|
| C | class | | | |
| 1.0 | P | 16.042900 | 299.394012 | -161.525000 |
| 2.0 | P | 30.069901 | 355.683014 | -88.599997 |
| 3.0 | N | 42.080300 | 507.402801 | -32.778388 |
| | P | 44.097000 | 506.678009 | -42.101996 |
| 4.0 | N | 56.109233 | 662.207461 | 8.583300 |
| | P | 58.124001 | 572.594513 | -6.115988 |
| 5.0 | N | 69.795834 | 661.754191 | 37.627448 |
| | P | 72.151001 | 616.254679 | 24.478347 |
| 6.0 | A | 78.110001 | 882.190002 | 80.089014 |
| | N | 82.592868 | 791.611093 | 77.639489 |
| | P | 86.177902 | 660.917615 | 59.993811 |
| 7.0 | A | 92.140800 | 870.044006 | 110.649011 |
| | N | 97.833572 | 768.834447 | 97.680627 |
| | P | 100.205002 | 688.922791 | 87.799341 |
| 8.0 | A | 105.157000 | 887.817017 | 141.417678 |
| | N | 111.942500 | 781.669107 | 95.910870 |
| | P | 114.232002 | 713.615736 | 113.716896 |
| 9.0 | A | 118.884301 | 898.054263 | 169.092960 |
| | N | 125.822647 | 801.822050 | 140.673082 |
| | P | 128.259003 | 731.970183 | 137.312953 |

Out [4]:

