Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки Химическая технология

Отделение химической инженерии

**PYTHON ДЛЯ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

**Отчет по лабораторной работе № 5**

**Введение в библиотеку Pandas**

Выполнил студент гр. 2ДМ24 Грива Д.В.

(Подпись)

21 \_\_декабря\_\_\_\_ 2023 г.

Отчет принят:

Преподаватель

доцент ОХИ ИШПР, к.т.н. В.А. Чузлов

(Подпись)

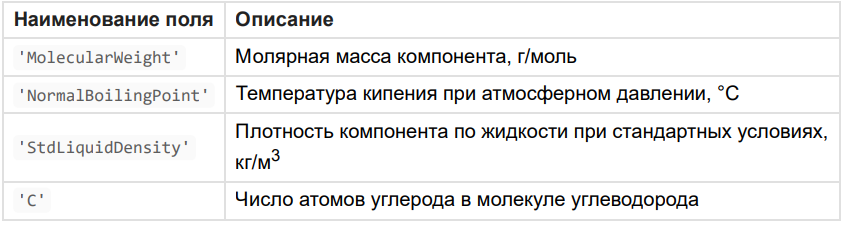
\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2023 г.

Томск 2023 г.

**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:



1. Считайте данную базу в объект pandas.DataFrame.

2. Из полученного объекта pandas.DataFrame получите данные для компонентов, приналежащих классам парафировых, нафтеновых и ароматических углевдородов 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 диаграммму ( scatter ) зависимости плотности жидкости от температуры кипения для каждого класса углеводородов (на одном графике).

**Программная реализация:**

import pandas as pd

import matplotlib.pyplot as plt

file\_path = '/Users/ADMIN/Downloads/compounds\_data.xlsx'

compounds\_df = pd.read\_excel(file\_path)

filtered\_df = compounds\_df[compounds\_df['class'].isin(['P', 'N', 'A'])]

relevant\_columns = ['class', 'MolecularWeight', 'NormalBoilingPoint', 'StdLiquidDensity', 'C']

filtered\_relevant\_df = filtered\_df[relevant\_columns]

grouped\_df = filtered\_relevant\_df.groupby(['class', 'C']).mean()

grouped\_df.reset\_index(inplace=True)

plt.figure(figsize=(10, 6))

markers = {'P': 'o', 'N': 's', 'A': '^'}

for hydrocarbon\_class in grouped\_df['class'].unique():

class\_df = grouped\_df[grouped\_df['class'] == hydrocarbon\_class]

plt.scatter(class\_df['NormalBoilingPoint'], class\_df['StdLiquidDensity'],

label=f'Class {hydrocarbon\_class}', marker=markers[hydrocarbon\_class])

plt.xlabel('Нормальная температура кипения (°C)')

plt.ylabel('Стандартная плотность жидкости (кг/м3)')

plt.title('Зависимость плотности от температуры кипения для различных классов углеводородов')

plt.legend()

plt.grid(True)

plt.show()

**Ответ**:

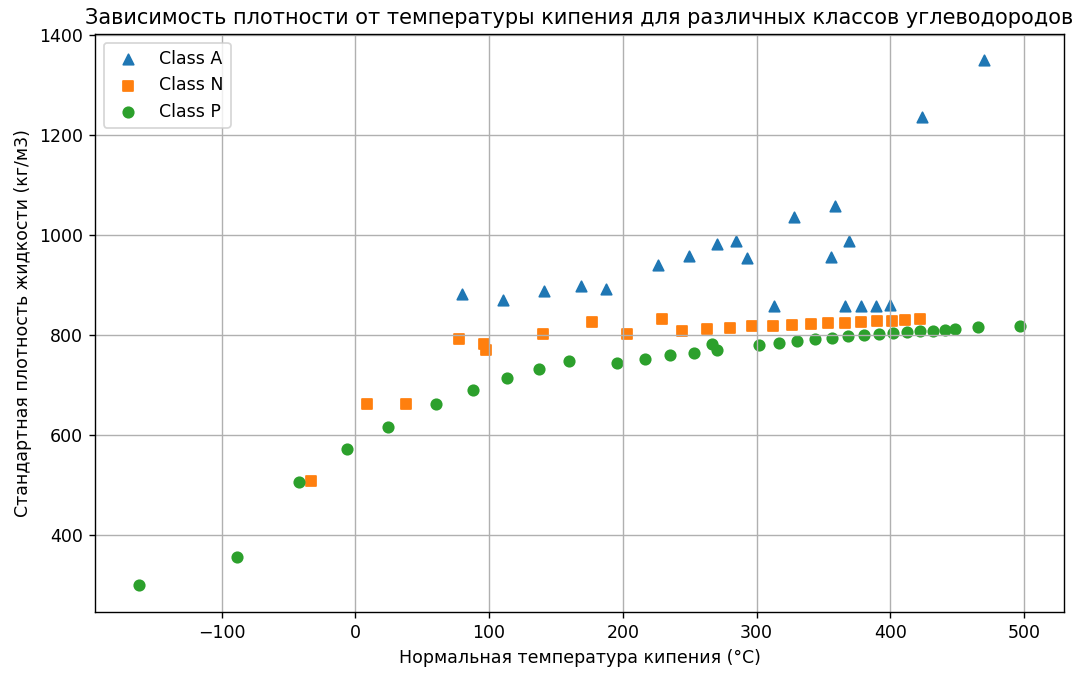


Рисунок 1 – Зависимость плотности от температуры кипения для различных классов углеводородов

На рисунке 1 представлено подробное сравнение температур кипения и плотности жидкостей для различных классов углеводородов: парафиновых, нафтеновых и ароматических.