

**Онлайн-калькулятор расчета
массовых концентраций
летучих компонентов в
спиртосодержащей продукции**

РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

Содержание

1 Назначение	3
2 Область применения	3
3 Функциональные возможности	3
4 Рабочая область	4
4.1 Кнопка очистки содержимого таблицы	5
4.2 Блок калибровки.....	6
4.3 Блок испытания образца.....	7
5 Сообщения об ошибках	9
6 Принцип расчета	9
6.1 Расчет концентраций летучих компонентов в калибровочной смеси	9
6.2 Расчет значений калибровочных коэффициентов RF и RRF	9
6.3 Расчет концентраций летучих компонентов в испытуемом образце спиртосодержащей продукции	10
7 Пример использования программы.....	11
7.1 Установление калибровочных характеристик	11
7.2 Испытание образца	13

1 Назначение

Программа предназначена для выполнения расчетов при проведении хроматографического анализа по определению количественного содержания летучих компонентов в этанолсодержащей продукции.

2 Область применения

Программа разработана для применения в испытательных лабораториях по контролю качества и безопасности алкогольной и спиртосодержащей продукции для расчета значений массовых концентраций летучих компонентов в спиртосодержащей продукции.

3 Функциональные возможности

Программа позволяет осуществлять расчет значений массовых концентраций летучих компонентов в спиртосодержащей продукции в режиме онлайн с помощью браузера.

Программа позволяет задать условия, согласно которым будет сгенерирована таблица, отвечающая потребностям пользователя: предоставляет выбор калибровочной смеси, количества измерений калибровочной смеси и испытуемого образца.

Программа позволяет распечатать и сохранить полученный отчет.

4 Рабочая область

Рабочая область программы состоит из двух блоков: блок калибровки и блок испытания образца (рис. 1).

Онлайн-калькулятор

№	Компонент	Калибровка по РВ-1							Испытуемый образец			Бренди
		Паспортная концентрация, мг/л	Паспортная концентрация, мг/л АА	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.	RF	RRF	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.	Концентрация, мг/л АА
1	Ацетальдегид	9.80	24.50	2.7639	2.7444	0	8.90	2.139	19.2962	0	0	172.02
2	Метилацетат	9.20	23.00	2.7939	2.8248	0	8.19	1.969	3.8888	0	0	31.91
3	Этилацетат	9.00	22.50	4.5542	4.4945	0	4.97	1.195	56.7694	0	0	282.74
4	Метанол, мг/л	80.78	201.96	30.6524	30.4877	0	6.61	1.589	52.0961	0	0	345.01
	Метанол, (об. %)	0.0102										0.0436 (об. % АА)
5	2-пропанол	8.70	21.75	4.3737	4.3422	0	4.99	1.200	0	0	0	—
6	Этанол		789300	190243	189210	0	4.16	1.000	189384	0	0	789300
7	1-пропанол	8.00	20.00	5.8342	5.8404	0	3.43	0.825	79.0383	0	0	271.76
8	Изобутанол	8.00	20.00	7.0155	6.9469	0	2.86	0.688	422.6014	0	0	1211.76
9	1-бутанол	8.10	20.15	6.9032	6.8646	0	2.93	0.704	1.1144	0	0	3.27
10	Изоамилол	8.10	20.15	7.5100	7.4182	0	2.70	0.649	1213.5535	0	0	3282.48

Очистить всё
Печать

а
б

Рис. 1. Рабочая область программы: а) блок калибровки, б) блок испытания образца.

Более подробное описание программы представлено в п. 4.1-4.4 настоящего руководства пользователя.

4.1 Кнопка очистки содержимого таблицы

Кнопка «Очистить всё» предназначена для очистки содержимого таблицы. При нажатии на данную кнопку осуществляется полная очистка содержимого таблицы, в результате которой очищаются все ячейки.

а)

№	Компонент	Калибровка по РВ-1							Испытуемый образец			Бренди
		Паспортная концентрация, мг/л	Паспортная концентрация, мг/л АА	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.	RF	RRF	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.	Концентрация, мг/л АА
1	Ацетальдегид	9.80	24.50	2.7639	2.7444	0	8.90	2.139	19.2962	0	0	172.02
2	Метилацетат	9.20	23.00	2.7939	2.8248	0	8.19	1.969	3.8888	0	0	31.91
3	Этилацетат	9.00	22.50	4.5542	4.4945	0	4.97	1.195	56.7694	0	0	282.74
4	Метанол, мг/л	80.78	201.96	30.6524	30.4877	0	6.61	1.589	52.0961	0	0	345.01
	Метанол, (об. %)	0.0102										0.0436 (об. % АА)
5	2-пропанол	8.70	21.75	4.3737	4.3422	0	4.99	1.200	0	0	0	—
6	Этанол		789300	190243	189210	0	4.16	1.000	189384	0	0	789300
7	1-пропанол	8.00	20.00	5.8342	5.8404	0	3.43	0.825	79.0383	0	0	271.76
8	Изобутанол	8.00	20.00	7.0155	6.9469	0	2.86	0.688	422.6014	0	0	1211.76
9	1-бутанол	8.10	20.15	6.9032	6.8646	0	2.93	0.704	1.1144	0	0	3.27
10	Изоамилол	8.10	20.15	7.5100	7.4182	0	2.70	0.649	1213.5535	0	0	3282.48

Очистить всё Печать

б)

№	Компонент	Калибровка по РВ-1							Испытуемый образец			Бренди
		Паспортная концентрация, мг/л	Паспортная концентрация, мг/л АА	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.	RF	RRF	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.	Концентрация, мг/л АА
1	Ацетальдегид	0	0	0	0	0	—	—	0	0	0	—
2	Метилацетат	0	0	0	0	0	—	—	0	0	0	—
3	Этилацетат	0	0	0	0	0	—	—	0	0	0	—
4	Метанол, мг/л	0	0	0	0	0	—	—	0	0	0	—
	Метанол, (об. %)	0										—
5	2-пропанол	0	0	0	0	0	—	—	0	0	0	—
6	Этанол		789300	0	0	0	—	—	0	0	0	—
7	1-пропанол	0	0	0	0	0	—	—	0	0	0	—
8	Изобутанол	0	0	0	0	0	—	—	0	0	0	—
9	1-бутанол	0	0	0	0	0	—	—	0	0	0	—
10	Изоамилол	0	0	0	0	0	—	—	0	0	0	—

Очистить всё Печать

Очистка

Рис. 2. Внешний вид таблицы: а) до очистки, б) после очистки.

4.2 Блок калибровки

Блок калибровки программы предназначен для внесения данных о используемых калибровочных смесях (концентрации, значения откликов) и расчетов калибровочных коэффициентов RF и RRF (рис. 3).

Рассчитанные значения концентрации летучих компонентов в калибровочной смеси в размерности 1 мг на 1 л безводного этанола (AA – Absolute Alcohol)

№	Компонент	Калибровка по РВ-1						Испытуемый образец			Бренди	
		Паспортная концентрация, мг/л	Паспортная концентрация, мг/л AA	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.	RF	RRF	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.	Концентрация, мг/л AA
1	Ацетальдегид	9.80	24.50	2.7639	2.7444	0	8.90	2.139	19.2962	0	0	172.02
2	Метилацетат	9.20	23.00	2.7939	2.8248	0	8.19	1.969	3.8888	0	0	31.91
3	Этилацетат	9.00	22.50	4.5542	4.4945	0	4.97	1.195	56.7694	0	0	282.74
4	Метанол, мг/л	80.78	201.96	30.6524	30.4877	0	6.61	1.589	52.0961	0	0	345.01
	Метанол, (об. %)	0.0102										0.0436 (об. % AA)
5	2-пропанол	8.70	21.75	4.3737	4.3422	0	4.99	1.200	0	0	0	—
6	Этанол		789300	190243	189210	0	4.16	1.000	189384	0	0	789300
7	1-пропанол	8.00	20.00	5.8342	5.8404	0	3.43	0.825	79.0383	0	0	271.76
8	Изобутанол	8.00	20.00	7.0155	6.9469	0	2.86	0.688	422.6014	0	0	1211.76
9	1-бутанол	8.10	20.15	6.9032	6.8646	0	2.93	0.704	1.1144	0	0	3.27
10	Изоамилол	8.10	20.15	7.5100	7.4182	0	2.70	0.649	1213.5535	0	0	3282.48

Летучие компоненты

Поле для ввода паспортных значений концентраций калибровочной смеси

Поля для ввода значений откликов калибровочной смеси

Рассчитанные значения калибровочных коэффициентов

Рис. 3. Внешний вид блока калибровки.

4.3 Блок испытания образца

Блок испытания образца предназначен для внесения данных полученных в ходе измерений испытуемого образца и расчетов концентраций летучих компонентов в испытуемом образце (рис. 4).

Поля для ввода значений откликов испытуемого образца

Поле для ввода названия испытуемого образца

№	Компонент	Калибровка по РВ-1							Испытуемый образец			Бренди
		Паспортная концентрация, мг/л	Паспортная концентрация, мг/л АА	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.	RF	RRE	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.	Концентрация, мг/л АА
1	Ацетальдегид	9.80	24.50	2.7639	2.7444	0	8.90	2.139	19.2962	0	0	172.02
2	Метилацетат	9.20	23.00	2.7939	2.8248	0	8.19	1.969	3.8888	0	0	31.91
3	Этилацетат	9.00	22.50	4.5542	4.4945	0	4.97	1.195	56.7694	0	0	282.74
4	Метанол, мг/л	80.78	201.96	30.6524	30.4877	0	6.61	1.589	52.0961	0	0	345.01
	Метанол, (об. %)	0.0102										0.0436 (об. % АА)
5	2-пропанол	8.70	21.75	4.3737	4.3422	0	4.99	1.200	0	0	0	—
6	Этанол		789300	190243	189210	0	4.16	1.000	189384	0	0	789300
7	1-пропанол	8.00	20.00	5.8342	5.8404	0	3.43	0.825	79.0383	0	0	271.76
8	Изобутанол	8.00	20.00	7.0155	6.9469	0	2.86	0.688	422.6014	0	0	1211.76
9	1-бутанол	8.10	20.15	6.9032	6.8646	0	2.93	0.704	1.1144	0	0	3.27
10	Изоамилол	8.10	20.15	7.5100	7.4182	0	2.70	0.649	1213.5535	0	0	3282.48

Очистить всё

Печать

Рассчитанные значения концентрации летучих компонентов в испытуемом образце в размерности 1 мг на 1 л безводного этанола (АА – Absolute Alcohol)

4.4 Кнопка печати таблицы

Кнопка «Печать» предназначена для печати содержимого таблицы. При нажатии на данную кнопку осуществляется печать содержимого таблицы.

При распечатке страницы необходимо указывать альбомную раскладку листа. При использовании для работы браузеров «Google Chrome», «Opera» или «Mozilla Firefox» необходимо осуществить следующие действия (рис. 5):

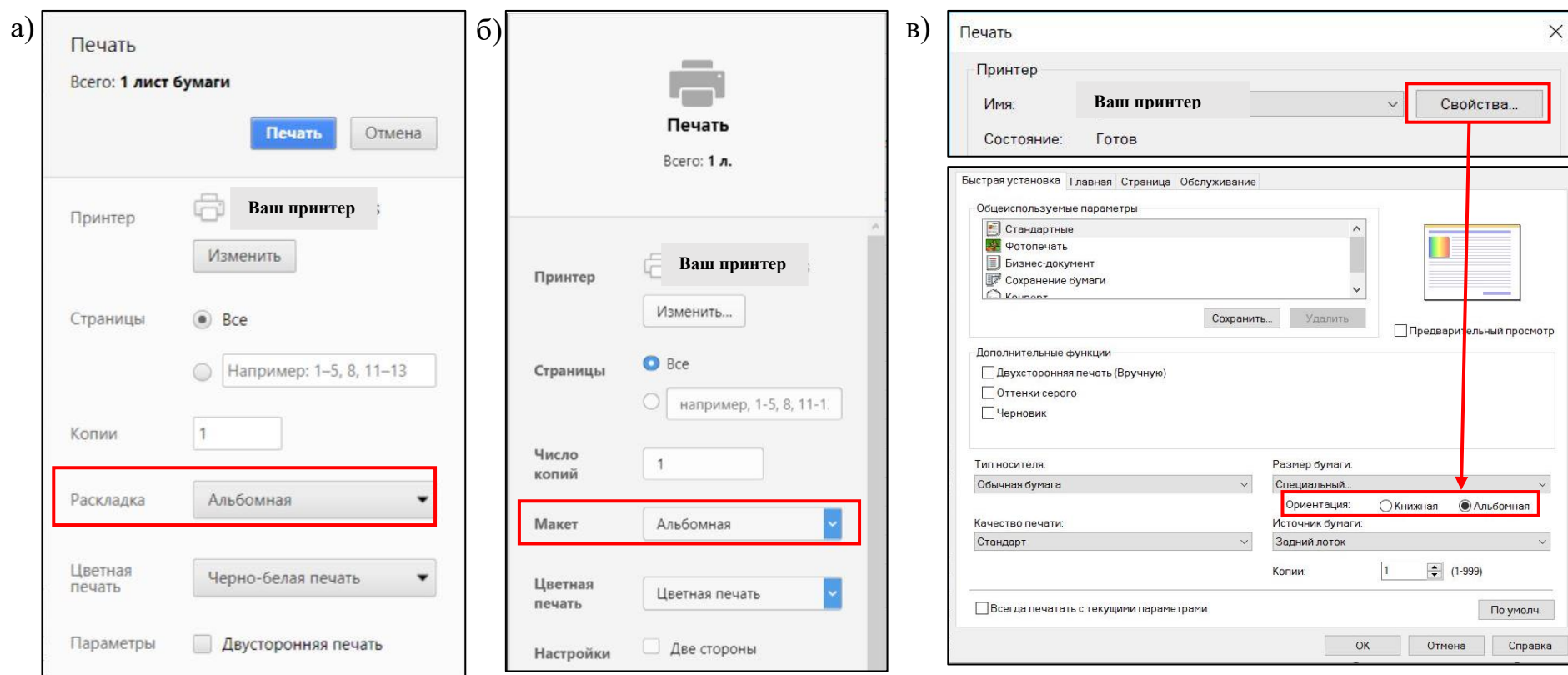


Рис. 5. Установка альбомной раскладки в браузерах: а) «Google Chrome», б) «Opera», в) «Mozilla Firefox».

5 Сообщения об ошибках

При использовании программы возможно появление сообщений об ошибках. Примеры подобных сообщений приведены в таблице 1.

Таблица 1. Сообщения об ошибках

Текст сообщения	Причина возникновения ошибки	Решение
Этанол!	Не указаны значения откликов для этанола.	Указать значения откликов для этанола.
Ethanol!		

6 Принцип расчета

Принцип расчета массовых концентраций летучих компонентов в спиртосодержащей продукции основан на использовании этанола в качестве внутреннего стандарта.

6.1 Расчет концентраций летучих компонентов в калибровочной смеси

Программа позволяет работать с концентрациями летучих компонентов в калибровочной смеси с размерностью 1 мг на 1 л смеси. При этом производится пересчет значений в размерность 1 мг на 1 л безводного этанола (Absolute Alcohol – АА). Для этого используется следующая формула:

$$C_{i(\text{мг/л АА})} = \frac{C_i(\text{мг/л})}{\varphi_{\text{Этанол}}}, \quad (1)$$

где $C_{i(\text{мг/л})}$ – значение паспортной концентрации i -го летучего компонента в калибровочной смеси, мг/л;

$C_{i(\text{мг/л АА})}$ – значение паспортной концентрации i -го летучего компонента в калибровочной смеси, мг/л АА;

$\varphi_{\text{Этанол}}$ – объемная доля этилового спирта в калибровочной смеси (0,4 для смеси «РВ»).

6.2 Расчет значений калибровочных коэффициентов RF и RRF

Калибровочный блок программы производит расчет значений калибровочных коэффициентов RF и RRF (Relative Response Factor).

Расчет калибровочных коэффициентов RF i -ых компонентов осуществляется по формуле:

$$RF_i = \frac{C_i (\text{мг/л})}{\langle A_i^{Кал} \rangle}, \quad (2)$$

где $\langle A_i^{Кал} \rangle$ – среднее значение откликов i -ых летучих компонентов, полученных при измерении калибровочной смеси.

После этого производится расчет относительных коэффициентов чувствительности i -ых летучих компонентов относительно этанола $RRF_i^{\text{Этанол}}$.

$$RRF_i^{\text{Этанол}} = \frac{RF_i}{RF_{\text{Этанол}}}, \quad (3)$$

где RF_i – калибровочных коэффициент i -го летучего компонента;

RF_{Eth} – калибровочный коэффициент этанола.

6.3 Расчет концентраций летучих компонентов в испытуемом образце спиртосодержащей продукции

В блоке испытуемого образца программа производит расчет массовых концентраций летучих компонентов в испытуемом образце спиртосодержащей продукции с помощью следующей формулы:

$$C_i^* (\text{мг/л}) = RRF_i^{\text{Этанол}} \cdot \frac{\langle A_i^{\text{Исп}} \rangle}{\langle A_{\text{Этанол}}^{\text{Исп}} \rangle} \cdot \rho_{\text{Этанол}}, \quad (4)$$

где $\langle A_i^{\text{Исп}} \rangle$ – среднее значение откликов i -ых летучих компонентов, полученных при измерении испытуемого образца;

$\langle A_{\text{Этанол}}^{\text{Исп}} \rangle$ – среднее значение откликов этанола, полученных при измерении испытуемого образца;

$\rho_{\text{Этанол}}$ – плотность этанола, $\rho_{\text{Этанол}} = 789300$ мг/л.

7 Пример использования программы

7.1 Установление калибровочных характеристик

Паспортные значения концентраций, указанные в паспорте на СО (стандартный образец) заносятся в поле «Паспортное значение концентрации, мг/л» (рис. 6, а). После этого программа осуществляет пересчет значений концентраций летучих компонентов в СО из размерности 1 мг на 1 л смеси в размерность 1 мг на 1 л безводного этанола в поле «Концентрация, мг/л АА*» (рис. 6, б).

№	Компонент	Калибровка по РВ-1						
		а) Паспортная концентрация, мг/л	б) Паспортная концентрация, мг/л АА*	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.	RF	RRF
1	Ацетальдегид	0	0	0	0	0	—	—
2	Метилацетат	0	0	0	0	0	—	—
3	Этилацетат	0	0	0	0	0	—	—
4	Метанол, мг/л	0	0	0	0	0	—	—
	Метанол, (об. %)	0						
5	2-пропанол	0	0	0	0	0	—	—
6	Этанол		789300	0	0	0	—	—
7	1-пропанол	0	0	0	0	0	—	—
8	Изобутанол	0	0	0	0	0	—	—
9	1-бутанол	0	0	0	0	0	—	—
10	Изоамилол	0	0	0	0	0	—	—

Рис. 6. Внешний вид полей: а) «Паспортное значение концентрации, мг/л», б) «Концентрация, мг/л АА*»

На рис. 7 представлена измеренная хроматограмма градуировочной смеси РВ-1 логарифмическом масштабе.

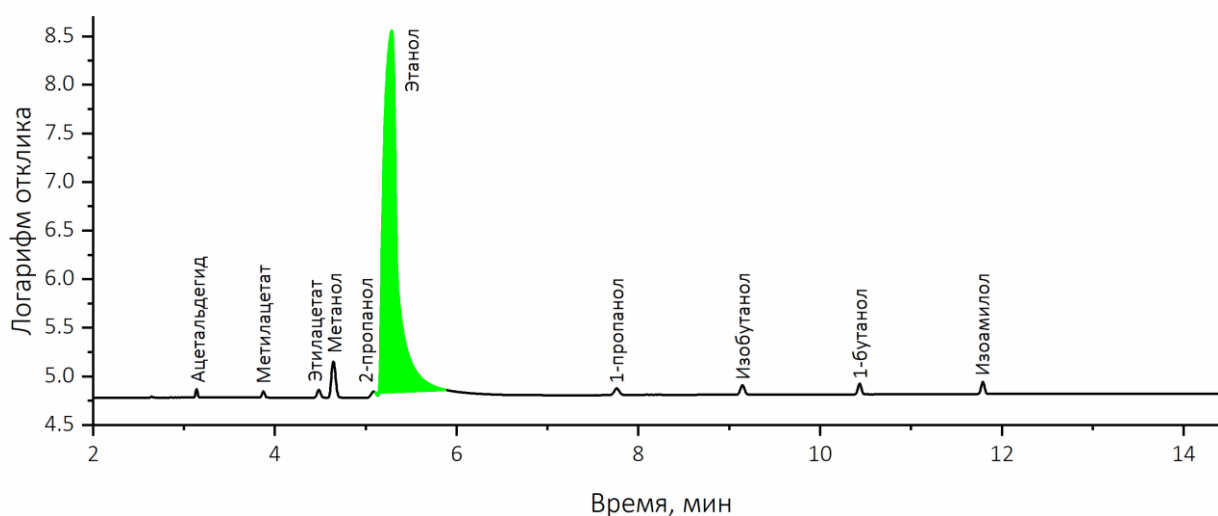


Рис. 7. Хроматограмма смеси РВ-1 в логарифмическом масштабе.

Данные значений откликов, полученные в ходе измерений, вносятся в поле «Отклик, произвольные единицы» (рис 8).

№	Компонент	Калибровка по РВ-1				
		Паспортная концентрация, мг/л	Паспортная концентрация, мг/л АА	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.
1	Ацетальдегид	9.80	24.50	2.7639	2.7444	0
2	Метилацетат	9.20	23.00	2.7939	2.8248	0
3	Этилацетат	9.00	22.50	4.5542	4.4945	0
4	Метанол, мг/л	80.78	201.96	30.6524	30.4877	0
	Метанол, (об. %)	0.0102				
5	2-пропанол	8.70	21.75	4.3737	4.3422	0
6	Этанол		789300	190243	189210	0
7	1-пропанол	8.00	20.00	5.8342	5.8404	0
8	Изобутанол	8.00	20.00	7.0155	6.9469	0
9	1-бутанол	8.10	20.15	6.9032	6.8646	0
10	Изоамилол	8.10	20.15	7.5100	7.4182	0

Рис. 8. Внесение данных о значениях откликов компонентов калибровочной смеси.

После этого программа рассчитывает значения RF и RRF, которые отображаются в полях «RF» и «RRF» соответственно (рис. 9).

№	Компонент	Калибровка по РВ-1					RF	RRF
		Паспортная концентрация, мг/л	Паспортная концентрация, мг/л АА	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.		
1	Ацетальдегид	9.80	24.50	2.7639	2.7444	0	8.90	2.139
2	Метилацетат	9.20	23.00	2.7939	2.8248	0	8.19	1.969
3	Этилацетат	9.00	22.50	4.5542	4.4945	0	4.97	1.195
4	Метанол, мг/л	80.78	201.96	30.6524	30.4877	0	6.61	1.589
	Метанол, (об. %)	0.0102						
5	2-пропанол	8.70	21.75	4.3737	4.3422	0	4.99	1.200
6	Этанол		789300	190243	189210	0	4.16	1.000
7	1-пропанол	8.00	20.00	5.8342	5.8404	0	3.43	0.825
8	Изобутанол	8.00	20.00	7.0155	6.9469	0	2.86	0.688
9	1-бутанол	8.10	20.15	6.9032	6.8646	0	2.93	0.704
10	Изоамилол	8.10	20.15	7.5100	7.4182	0	2.70	0.649

Рис. 9. Внешний вид заполненного блока калибровки.

7.2 Испытание образца

В качестве примера приводится испытание образца бренди.

Производится газохроматографическое измерение образца Бренди. В поле «ИСПЫТУЕМЫЙ ОБРАЗЕЦ» указывается название образца «Бренди» (рис. 10)

Испытуемый образец	Бренди
--------------------	--------

Рис. 10. Указание исходных параметров: название испытуемого образца

На рис. 11 представлена измеренная хроматограмма образца бренди в логарифмическом масштабе.

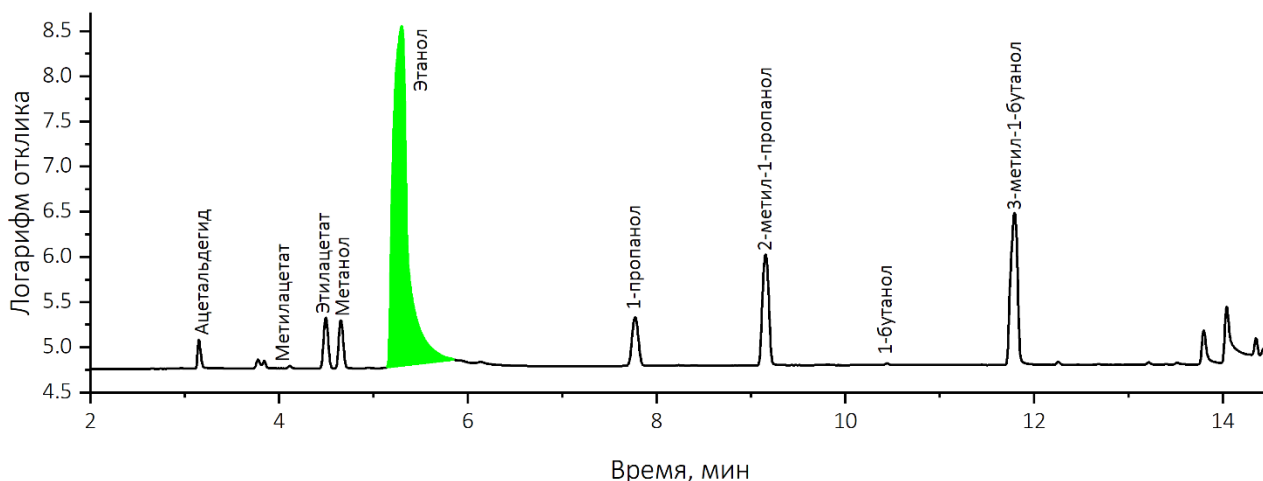


Рис. 11. Хроматограмма образца бренди.

Данные значений откликов, полученные в ходе измерений, вносятся в поле «Отклик, произвольные единицы» (рис 12).

Испытуемый образец		Бренди	
Отклик 1, отв. ед.	Отклик 2, отв. ед.	Отклик 3, отв. ед.	Концентрация, мг/л АА
19.2962	0	0	172.02
3.8888	0	0	31.91
56.7694	0	0	282.74
52.0961	0	0	345.01
0.0436 (об. % АА)			
0	0	0	—
189384	0	0	789300
79.0383	0	0	271.76
422.6014	0	0	1211.76
1.1144	0	0	3.27
1213.5535	0	0	3282.48

Рис. 12. Внесение данных о значениях откликов компонентов испытуемого образца.

После этого программа производит расчет значений концентраций летучих компонентов в испытуемом образце в размерности 1 мг на 1 л безводного этанола (рис. 13).

Онлайн-калькулятор

№	Компонент	Калибровка по РВ-1							Испытуемый образец			Бренди
		Паспортная концентрация, мг/л	Паспортная концентрация, мг/л АА	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.	RF	RRF	Отклик 1, отн. ед.	Отклик 2, отн. ед.	Отклик 3, отн. ед.	Концентрация, мг/л АА
1	Ацетальдегид	9.80	24.50	2.7639	2.7444	0	8.90	2.139	19.2962	0	0	172.02
2	Метилацетат	9.20	23.00	2.7939	2.8248	0	8.19	1.969	3.8888	0	0	31.91
3	Этилацетат	9.00	22.50	4.5542	4.4945	0	4.97	1.195	56.7694	0	0	282.74
4	Метанол, мг/л	80.78	201.96	30.6524	30.4877	0	6.61	1.589	52.0961	0	0	345.01
	Метанол, (об. %)	0.0102										0.0436 (об. % АА)
5	2-пропанол	8.70	21.75	4.3737	4.3422	0	4.99	1.200	0	0	0	—
6	Этанол		789300	190243	189210	0	4.16	1.000	189384	0	0	789300
7	1-пропанол	8.00	20.00	5.8342	5.8404	0	3.43	0.825	79.0383	0	0	271.76
8	Изобутанол	8.00	20.00	7.0155	6.9469	0	2.86	0.688	422.6014	0	0	1211.76
9	1-бутанол	8.10	20.15	6.9032	6.8646	0	2.93	0.704	1.1144	0	0	3.27
10	Изоамилол	8.10	20.15	7.5100	7.4182	0	2.70	0.649	1213.5535	0	0	3282.48

Очистить всё
Печать

Рис. 13. Внешний вид заполненной таблицы.