



Расчёт концентрации летучих микропримесей в алкогольной продукции

Калькулятор предназначен для сравнительной оценки метрологических характеристик различных хроматографических методов анализа алкогольной и другой спиртосодержащей продукции

ОВ

КОНЦЕНТРАЦИИ ГР

ПЛОЩАДИ ГР

КАЛИБРОВКА

ОБРАЗЦЫ ПРОДУКЦИИ

ОТЧЁТ

ФОРМУЛЫ

Основные параметры методов и градуировочных растворов (ГР)

1. Для анализа спиртосодержащей продукции применяются следующие хроматографические методы: метод внешнего стандарта (абсолютной градуировки), в котором используется набор градуировочных растворов (ГР), традиционный метод внутреннего стандарта с использованием дополнительного референсного вещества, добавляемого к ГР и образцам продукта в известной концентрации, и новый модифицированный метод внутреннего стандарта (ММВС), в котором в качестве внутреннего стандарта используется этанол, присутствующий в ГР и продуктах.
2. Начальным этапом всех методов является калибровка - определение градуировочных характеристик при анализе ГР с аттестованными значениями концентрации $C^{\text{аттест}}$ летучих компонентов. На следующем этапе с использованием установленных градуировочных коэффициентов проводится определение содержания компонентов-аналитов в образцах $C^{\text{изм}}$.
3. Во всех методах используется несколько градуировочных растворов (ГР), в которых содержатся компоненты-аналиты в заведомо известных концентрациях. Набор ГР соответствует нескольким уровням концентрации, что необходимо для установления градуировочных коэффициентов и проверки линейности отклика детектора. Для работы калькулятора необходимо указать число компонентов-аналитов и количество ГР.
4. В разных методах анализа алкогольной продукции могут быть использованы разные единицы измерения концентрации. Для корректных расчётов и удобного сравнения различных методов выполняют конверсию значений концентрации из "исходных" единиц измерения в "конечные" единицы, в которых будут производиться вычисления в методах. В калькуляторе имеются следующие варианты единиц измерения (обозначение б.с. - безводный спирт.): мг/л ($\text{мг/л} = \text{мг/дм}^3$), мг/л б.с., %об., %об. б.с., г/100л б.с. ($\text{г/100л б.с.} = \text{мг/100 см}^3 \text{ б.с.}$), мкг/г.
5. В методе ММВС расчёты производятся на б.с., поэтому для работы по ММВС в качестве "конечных" единиц измерения можно установить: мг/л б.с., %об. б.с., г/100л б.с., мг/100 см³ б.с.. Если "исходные" единицы измерения также на б.с., то сведений о крепости ГР и образцов продукции не требуется.
6. Для выполнения градуировки хроматографа по методам, в которых используется внутренний стандарт (традиционный или ММВС), определяют значения относительных факторов отклика *RRF* (relative response factor). При этом используется один градуировочный уровень, обычно с "промежуточным" значением концентрации. Остальные уровни применяются для оценки линейности отклика детектора

Укажите количество компонентов
Число компонентов:

Укажите число уровней концентрации
Число уровней концентрации:

3

Введите номер градуировочного уровня

Номер уровня градуировки (для расчёта RRF):

3

Укажите исходные единицы измерения концентрации

Исходные единицы измерения:

мг/л 

Укажите единицы измерения концентрации, в которых необходимо получить результаты

Конечные единицы измерения:

мг/л 

В случае конверсии единиц измерения с пересчётом на безводный спирт приведите значение крепости ГР в %об. (от 0.5 до 100)

Крепость ГР, %об.:

40

В случае использования единиц измерения мкг/г приведите значение плотности ГР при температуре 20 °C в кг/м³ = г/л (от 772 до 1000)

Плотность ГР, кг/м³:

948.06

Кнопка "Передать значения" ->

Главное меню ->

Концентрации компонентов градуировочных растворов (ГР). Конверсия единиц измерения концентрации

Заполните таблицу:

Таблица 1. Значения концентрации компонентов в образце, выраженные в исходных единицах измерения мг/л

№	Наименование компонента	Уровень концентрации		
		1	2	3
1	метанол 	21.634	107.54	203.11

2	этанол	✓	0	0	0
3	3-пентанол	✓	228.73	227.65	226.16

Кнопка "Передать значения" ->

Главное меню ->

Таблица 2. Значения концентрации компонентов в образце, конвертированные в заданные единицы измерения мг/л б.с.

№	Наименование компонента	Уровень концентрации		
		1	2	3
1	метанол	54.085	268.85	507.775
2	этанол	789270	789270	789270
3	3-пентанол	571.825	569.125	565.4

Внесение данных из хроматограмм

Введите число повторных измерений для уровня концентрации 1

Число повторных измерений

2

Уровень концентрации 1.

Значения площади пиков компонентов в образце

№	Наименование компонента	Концентрация, мг/л б.с.	Площадь пика, ед.площади	
			1	2
1	метанол	54.085	0.00164	0.001655
2	этанол	789270	29.0017	28.957
3	3-пентанол	571.825	0.0346	0.03461

Кнопка "Передать значения" ->

Главное меню ->

Введите число повторных измерений для уровня концентрации 2

Число повторных измерений

2

Уровень концентрации 2.

Значения площади пиков компонентов в образце

№	Наименование компонента	Концентрация, мг/л б.с.	Площадь пика, ед.площади	
			1	2
1	метанол	268.85	0.00805	0.00796

2	этанол	789270	28.9454	28.94586
3	3-пентанол	569.125	0.015244	0.015139

Кнопка "Передать значения" ->

Главное меню ->

Введите число повторных измерений для уровня концентрации 3

Число повторных измерений

2

Градуировочный уровень

Уровень концентрации 3.

Значения площади пиков компонентов в образце

№	Наименование компонента	Концентрация, мг/л б.с.	Площадь пика, ед.площади	
			1	2
1	метанол	507.775	0.0151	0.01512
2	этанол	789270	28.808	29.0155
3	3-пентанол	565.4	0.0341	0.0343

Кнопка "Передать значения" ->

Главное меню ->

Калибровка

Выберите методы калибровки:

- модифицированный метод внутреннего стандарта с этанолом
- метод внешнего стандарта (абсолютная градуировка)
- метод внутреннего стандарта (дополнительный референс)

В случае выбора метода внутреннего стандарта укажите референсное вещество

Референсное вещество (внутренний стандарт):

3-пентанол



Кнопка "Передать значения" ->

Главное меню ->

⇨ Калибровка по модифицированному методу внутреннего стандарта (референс - этанол) ->

⇨ Калибровка по методу внешнего стандарта (абсолютная градуировка) ->

⇨ Калибровка по методу внутреннего стандарта (референс - 3-пентанол) ->

Калибровка по модифицированному методу внутреннего стандарта (референс - этанол)

Градуировка $C/C_{eth} = RRF \cdot A/A_{eth}$; $RRF = 1.2309696731761$

Компонент №1: метанол

Саттест, мг/л б.с.	Сизм, мг/л б.с.	СКО, мг/л б.с.	Предел повторяемости, мг/л б.с.	ОСКО, %	Смещение, %	Число повторных измерений
54.085	55.2346	0.4158	1.1519	0.75	2.13	2
268.85	268.69	2.14	5.93	0.80	-0.06	2
507.775	507.771	2.102	5.822	0.41	-0.00	2

Градуировка $C/C_{eth} = RRF \cdot A/A_{eth}$; $RRF = 0.60558799167497$

Компонент №3: 3-пентанол

Саттест, мг/л б.с.	Сизм, мг/л б.с.	СКО, мг/л б.с.	Предел повторяемости, мг/л б.с.	ОСКО, %	Смещение, %	Число повторных измерений
571.825	570.76	0.74	2.05	0.13	-0.19	2
569.125	250.854	1.229	3.404	0.49	-55.92	2
565.4	565.4	0.5	1.5	0.09	-0.00	2

Градуировка $C/C_{eth} = RRF \cdot A/A_{eth}$

Коэффициенты градуировки и линейности отклика ПИД

№	Название компонента	Градуировочный коэффициент $RRF_{\text{этанол}}$	Коэффициент детерминации R^2	Коэффициент корреляции C_P
1	метанол	1.23	0.99984	0.99995
2	этанол	1	-	-
3	3-пентанол	0.606	0.01212	0.99999

Кнопка "Передать значения" ->

Главное меню ->

- ⇨ Калибровка по модифицированному методу внутреннего стандарта (референс - этанол) ->
- ⇨ Калибровка по методу внешнего стандарта (абсолютная градуировка) ->
- ⇨ Калибровка по методу внутреннего стандарта (референс - 3-пентанол) ->

Калибровка по методу внешнего стандарта (абсолютная градуировка)

Градуировка $C = RF \cdot A$; $RF = 33593.500146239$ (мг/л б.с.)/(ед.площади)

Компонент №1: метанол

Саттест, мг/л б.с.	Сизм, мг/л б.с.	СКО, мг/л б.с.	Предел повторяемости,	ОСКО, %	Смещение, %	Число повторных
-----------------------	--------------------	-------------------	--------------------------	------------	----------------	--------------------

мг/л б.с.

измерений

54.085	55.3453	0.3563	0.9870	0.64	2.33	2
268.85	268.916	2.138	5.922	0.79	0.02	2
507.775	507.598	0.475	1.316	0.09	-0.03	2

Градуировка $C = RF \cdot A$; $RF = 18387.852592405$ (мг/л б.с.)/(ед.площади)**Компонент №3: 3-пентанол**

Саттест, мг/л б.с.	Сизм, мг/л б.с.	СКО, мг/л б.с.	Предел повторяемости, мг/л б.с.	ОСКО, %	Смещение, %	Число повторных измерений
571.825	636.312	0.130	0.360	0.02	11.28	2
569.125	279.339	1.365	3.782	0.49	-50.92	2
565.4	628.865	2.600	7.203	0.41	11.22	2

Градуировка $C = RF \cdot A$ **Коэффициенты градуировки и линейности отклика ПИД**

№	Название компонента	Градуировочный коэффициент RF , (мг/л б.с.)/(ед.пл.)	Коэффициент детерминации R^2	Коэффициент корреляции C_P
1	метанол	3.36e+4	0.99996	0.99999
2	этанол	0	-	-
3	3-пентанол	1.84e+4	-0.00231	-0.07352

Кнопка "Передать значения" ->

Главное меню ->

- ⇨ Калибровка по модифицированному методу внутреннего стандарта (референс - этанол) ->
- ⇨ Калибровка по методу внешнего стандарта (абсолютная градуировка) ->
- ⇨ Калибровка по методу внутреннего стандарта (референс - 3-пентанол) ->

Калибровка по методу внутреннего стандарта (референс - 3-пентанол)Градуировка $C/C_{st} = RRF \cdot A/A_{st}$; $RRF = 2.0326942435702$ **Компонент №1: метанол**

Саттест, мг/л б.с.	Сизм, мг/л б.с.	СКО, мг/л б.с.	Предел повторяемости, мг/л б.с.	ОСКО, %	Смещение, %	Число повторных измерений
54.085	55.3377	0.3450	0.9555	0.62	2.32	2
268.85	609.589	1.867	5.172	0.31	126.74	2
507.775	507.772	1.624	4.500	0.32	-0.00	2

Градуировка $C/C_{st} = RRF \cdot A/A_{st}$ **Коэффициенты градуировки и линейности отклика ПИД**

№	Название компонента	Градуировочный коэффициент $RRF_{3\text{-пентанол}}$	Коэффициент детерминации R^2	Коэффициент корреляции C_p
1	метанол	2.03	0.97194	0.99999
2	этанол	1.65	-	-
3	3-пентанол	1	-	-

Кнопка "Передать значения" ->

Главное меню ->

⇨ Калибровка по модифицированному методу внутреннего стандарта (референс - этанол) ->

⇨ Калибровка по методу внешнего стандарта (абсолютная градуировка) ->

⇨ Калибровка по методу внутреннего стандарта (референс - 3-пентанол) ->

Внесение параметров образцов продукции

Укажите количество образцов алкогольной продукции

Количество образцов:

Кнопка "Передать значения" ->

Главное меню ->

Укажите название образца продукции и количество его повторных измерений

Название образца:

Число повторных измерений:

Для выполнения расчёта на безводный спирт при абсолютной градуировке укажите значение крепости образца продукции, в %об. (от 0.5 до 100)

Крепость образца продукта, %об. (от 0.5 до 100):

В случае использования единиц измерения мкг/г и абсолютной градуировки приведите значение плотности образца продукции при температуре 20 °C, в кг/м³ = г/л (от 772 до 1000)

Плотность образца продукта при температуре 20 °C, в кг/м³ = г/л (от 772 до 1000):

Если надо выполнить расчёт по методу внутреннего стандарта, то укажите концентрацию вещества внутреннего стандарта в мг/л

Концентрация вещества "3-пентанол" в продукте, в мг/л:

Кнопка "Передать значения" ->

Главное меню ->

Значения площади пиков компонентов в образце "Вино"

№	Наименование компонента	Площадь пика, ед.площади	
		1	2
1	метанол	0.01695	0.01704
2	этанол	12.9809	13.04125
3	3-пентанол	0.033306	0.033353

Кнопка "Передать значения" ->

Главное меню ->

К следующему продукту ->

Результаты для образца Вино, полученные по методу ММВС (референс - этанол)

Градуировка $C/C_{eth} = RRF \cdot A/A_{eth}$

№	Название компонента	Сизм, мг/л б.с.	СКО, мг/л б.с.	Предел повторяемости, мг/л б.с.	ОСКО, %	RRF ^{этанол}
1	метанол	1269.06	0.59	1.63	0.05	1.23
2	3-пентанол	1219.86	3.61	10.00	0.30	0.606

Главное меню ->

⇨ Результаты при использовании внутреннего стандарта "этанол" ->

⇨ Результаты при абсолютной градуировке ->

⇨ Результаты при использовании внутреннего стандарта "3-пентанол" ->

Результаты для образца Вино, полученные при абсолютной градуировке

Градуировка $C = RF \cdot A, (\text{мг/л б.с.})/(\text{ед.площади})$

№	Название компонента	Сизм, мг/л б.с.	СКО, мг/л б.с.	Предел повторяемости, мг/л б.с.	ОСКО, %	RF, (мг/л б.с.)/(ед.пл.)
1	метанол	1261.71	4.72	13.09	0.37	3.36e+4
2	3-пентанол	1349.38	8.42	23.32	0.62	1.84e+4

Главное меню ->

⇨ Результаты при использовании внутреннего стандарта "этанол" ->

⇨ Результаты при абсолютной градуировке ->

⇨ Результаты при использовании внутреннего стандарта "3-пентанол" ->

Результаты для образца Вино, полученные по методу внутреннего стандарта (референс - 3-пентанол)

Градуировка $C/C_{st} = RRF \cdot A/A_{st}$

№	Название компонента	Сизм, мг/л б.с.	СКО, мг/л б.с.	Предел повторяемости, мг/л б.с.	ОСКО, %	RRF ^{3-пентанол}
1	метанол	1230.64	3.07	8.50	0.25	2.03
2	3-пентанол	1182.93	0.00	0.00	0.00	1

[Главное меню ->](#)

- Результаты при использовании внутреннего стандарта "этанол" ->
- Результаты при абсолютной градуировке ->
- Результаты при использовании внутреннего стандарта "3-пентанол" ->

Укажите название образца продукции и количество его повторных измерений

Название образца:

Число повторных измерений:

Для выполнения расчёта на безводный спирт при абсолютной градуировке укажите значение крепости образца продукции, в %об. (от 0.5 до 100)

Крепость образца продукта, %об. (от 0.5 до 100):

В случае использования единиц измерения мкг/г и абсолютной градуировке приведите значение плотности образца продукции при температуре 20 °C, в кг/м³ = г/л (от 772 до 1000)

Плотность образца продукта при температуре 20 °C, в кг/м³ = г/л (от 772 до 1000):

Если надо выполнить расчёт по методу внутреннего стандарта, то укажите концентрацию вещества внутреннего стандарта в мг/л

Концентрация вещества "3-пентанол" в продукте, в мг/л:

[Кнопка "Передать значения" ->](#)

[Главное меню ->](#)

Значения площади пиков компонентов в образце "Виски"

№	Наименование компонента	Площадь пика, ед.площади	
		1	2
1	метанол	<input type="text" value="0.002258"/>	<input type="text" value="0.002175"/>
2	этанол	<input type="text" value="29.5443"/>	<input type="text" value="29.4638"/>

3

3-пентанол

0.03689

0.0339845

[Кнопка "Передать значения" ->](#)[Главное меню ->](#)[К следующему продукту ->](#)

Результаты для образца Виски, полученные по методу ММВС (референс - этанол)

Градуировка $C/C_{eth} = RRF \cdot A/A_{eth}$

№	Название компонента	Сизм, мг/л б.с.	СКО, мг/л б.с.	Предел повторяемости, мг/л б.с.	ОСКО, %	$RRF_{этанол}$
1	метанол	72.9875	1.7918	4.9634	2.45	1.23
2	3-пентанол	574.061	32.176	89.127	5.60	0.606

[Главное меню ->](#)[🕒 Результаты при использовании внутреннего стандарта "этанол" ->](#)[🕒 Результаты при абсолютной градировке ->](#)[🕒 Результаты при использовании внутреннего стандарта "3-пентанол" ->](#)

Результаты для образца Виски, полученные при абсолютной градировке

Градуировка $C = RF \cdot A, (\text{мг/л б.с.})/(\text{ед.площади})$

№	Название компонента	Сизм, мг/л б.с.	СКО, мг/л б.с.	Предел повторяемости, мг/л б.с.	ОСКО, %	$RF,$ $(\text{мг/л б.с.})/(\text{ед.пл.})$
1	метанол	72.6439	1.9235	5.3281	2.65	3.36e+4
2	3-пентанол	635.722	36.856	102.092	5.80	1.84e+4

[Главное меню ->](#)[🕒 Результаты при использовании внутреннего стандарта "этанол" ->](#)[🕒 Результаты при абсолютной градировке ->](#)[🕒 Результаты при использовании внутреннего стандарта "3-пентанол" ->](#)

Результаты для образца Виски, полученные по методу внутреннего стандарта (референс - 3-пентанол)

Градуировка $C/C_{st} = RRF \cdot A/A_{st}$

№	Название компонента	Сизм, мг/л б.с.	СКО, мг/л б.с.	Предел повторяемости, мг/л б.с.	ОСКО, %	RRF ^{3-пентанол}
1	метанол	69.6678	2.1960	6.0830	3.15	2.03
2	3-пентанол	547.463	0.000	0.000	0.00	1

[Главное меню ->](#)

- [🔗 Результаты при использовании внутреннего стандарта "этанол" ->](#)
- [🔗 Результаты при абсолютной градуировке ->](#)
- [🔗 Результаты при использовании внутреннего стандарта "3-пентанол" ->](#)

[ПЕРЕДАТЬ ЗНАЧЕНИЯ](#)