

Расчёт полученных величин массовых концентраций определяемых летучих компонентов и их неопределённостей в приготавливаемых весовым методом градуировочных смесях и контрольных образцах

Градуировочные смеси А, В, С, D и контрольные образцы №1 и №2 приготавливаются в соответствии с МВИ п.9.3.1 – п.9.3.6. Расчёт полученных величин массовых концентраций определяемых летучих компонентов и их неопределённостей выполняется компьютерной программой ACCURACY, представляющей собой рабочий шаблон в MS Excel.

Экранное изображение области шаблона, описывающая расчёт массовых концентраций определяемых летучих компонентов и их неопределённостей в градуировочной смеси А, представлена на рис. 1.

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M |
|----|-------------------------------|---------------------------------|-----------------|--|------------|---------------|----------------|---------------------|-----------------|--------------------|---------------|-----------------|------------------------|
| 5 | Градуировочная смесь А | | | | | | | | | | | | |
| 6 | | | | | | | | | | | | | |
| 7 | | | | | | | | | | | | | |
| 8 | | $u(m^i_A)$ | 0,0577 | мг - стандартная неопределенность (погрешность) взвешивания добавляемого <i>i</i> -го определяемого летучего компонента в раствор А. | | | | | | | | | |
| 9 | | $u(C^i(Et))$ | 15 | % - стандартная неопределенность (погрешность) концентрации добавляемого <i>i</i> -го определяемого летучего компонента в исходном этаноле | | | | | | | | | |
| 10 | | $(m^{Et}_i/\rho_{Et}) P^{Et}=V$ | 100000 | мл - объем вносимого этанола | | | | | | | | | |
| 11 | | $u(m^{Et}_i)$ | 0,0577 | мг - стандартная неопределенность (погрешность) взвешивания добавляемого этанола. | | | | | | | | | |
| 12 | | $u(P^{Et})$ | 0,0346 | % - стандартная неопределенность (погрешность) концентрации этанола | | | | | | | | | |
| 13 | | ρ_{Et} | 789300 | мг/л - плотность безводного этанола при нормальных условиях | | | | | | | | | |
| 14 | | Примеси в Et: | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | 2-м-1-пропанол | 1-бутанол | 3-м-1-бутанол | | |
| 15 | | $C(Et)$ | 0,15 | 0 | 0 | 2,5 | 0,16 | 0 | 0 | 0 | 0 | | |
| 16 | | m^i_A (2,5 и 0,25 мг) | 200 | 200 | 200 | 2000 | 200 | 200 | 200 | 200 | 200 | | |
| 17 | | | | | | | | | | | | | |
| 18 | | компонент | $C^i(1)$, мг/л | $u(C^i(1))$, мг | m^i , мг | $u(m^i)$, мг | $m^i(Et)$, мг | $u(C^i(Et))$, мг/л | m^{Et}_i , мг | $u(m^{Et}_i)$, мг | P^{Et} , % | $u(P^{Et})$, % | $\Delta u(C^i(1))$, % |
| 19 | | ацетальдегид | 1990 | 0,014145 | 188 | 0,0577 | 0,0150 | 0,01299 | 80001 | 0,0577 | 96 | 0,0346 | 0,0075 |
| 20 | | метилацетат | 2000 | 0,001424 | 189 | 0,0577 | 0,0000 | 0,00000 | 80001 | 0,0577 | 96 | 0,0346 | 0,0008 |
| 21 | | этилацетат | 2094 | 0,001424 | 198 | 0,0577 | 0,0000 | 0,00000 | 79993 | 0,0577 | 96 | 0,0346 | 0,0007 |
| 22 | | метанол | 20045 | 0,234980 | 1896 | 0,0577 | 0,2500 | 0,21651 | 80001 | 0,0577 | 96 | 0,0346 | 0,0124 |
| 23 | | 2-пропанол | 2033 | 0,015079 | 192 | 0,0577 | 0,0160 | 0,01386 | 80001 | 0,0577 | 96 | 0,0346 | 0,0078 |
| 24 | | 1-пропанол | 2094 | 0,001424 | 198 | 0,0577 | 0,0000 | 0,00000 | 80001 | 0,0577 | 96 | 0,0346 | 0,0007 |
| 25 | | 2-м-1-пропанол | 2000 | 0,001424 | 189 | 0,0577 | 0,0000 | 0,00000 | 80001 | 0,0577 | 96 | 0,0346 | 0,0008 |
| 26 | | 1-бутанол | 2000 | 0,001424 | 189 | 0,0577 | 0,0000 | 0,00000 | 80001 | 0,0577 | 96 | 0,0346 | 0,0008 |
| 27 | | 3-м-1-бутанол | 2073 | 0,001424 | 196 | 0,0577 | 0,0000 | 0,00000 | 80001 | 0,0577 | 96 | 0,0346 | 0,0007 |

Рис. 1 – Область шаблона, описывающая расчёт массовых концентраций определяемых летучих компонентов и их неопределённостей в градуировочной смеси А.

На рис.1 красным цветом выделена область, где выводится величина массовой концентрации компонента. Синим цветом выделен диапазон ячеек, в котором указано, какая масса компонента была внесена. Зелёным цветом окружены ячейки, в которых происходит расчёт и выводится значение абсолютной величины стандартной неопределённости массовой концентрации компонентов градуировочной смеси. Фиолетовым цветом выделена область, в которой указывается величина относительной стандартной неопределённости массовой

концентрации компонентов градуировочной смеси. В программе, в область залитую светло-синим цветом, необходимо внести значения.

Расчёт массовой концентрации i -го летучего компонента в смеси А происходит по следующей формуле:

$$C^i(A) = \frac{m_A^i \cdot P^i + C^i(Et) \cdot (m_A^{Et} / \rho_{Et}) \cdot P^{Et}}{(m_A^{Et} / \rho_{Et}) \cdot P^{Et}}, \quad (1)$$

Расчёт стандартной неопределённости массовой концентрации определяемых летучих компонентов в смеси А происходит по следующей формуле:

$$u(C^i(A)) = \sqrt{((\partial C^i(A) / \partial m_A^i) \cdot u(m_A^i))^2 + ((\partial C^i(A) / \partial C^i(Et)) \cdot u(C^i(Et)))^2 + ((\partial C^i(A) / \partial m_A^{Et}) \cdot u(m_A^{Et}))^2 + ((\partial C^i(A) / \partial P^{Et}) \cdot u(P^{Et}))^2} =$$

$$= \sqrt{((P^i / V) \cdot u(m_A^i))^2 + ((m_A^i \cdot P^i / ((m_A^{Et} / \rho_{Et}) \cdot P^{Et})) / m_A^{Et} \cdot u(m_A^{Et}))^2 + ((m_A^i \cdot P^i) / ((m_A^{Et} / \rho_{Et}) \cdot (P^{Et})^2) \cdot u(P^{Et}))^2 + u(C^i(Et))^2}. \quad (2)$$

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M | N | O |
|----|-------------------------------------|----------------------|---------------------|---|-------------------|----------------|-------------------|-------------------|-----------------------|------------------|----------------------|-----------------------|----------------------|---|---|
| 60 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 61 | Градуировочная смесь В (100) | | | | | | | | | | | | | | |
| 62 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 63 | | m_B^A | 4000 | масса добавленной градуировочной смеси А | | | | | | | | | | | |
| 64 | | m_B^{Et} | 80002 | масса добавленного этанола в смесь В | | | | | | | | | | | |
| 65 | | $u(C^i(Et))$ | 15 | % - стандартная неопределённость (погрешность) концентрации добавляемого i -го определяемого летучего компонента в исходном этаноле | | | | | | | | | | | |
| 66 | | $u(m_B^A)$ | 0,057735 | мг - стандартная неопределённость взвешивания | | | | | | | | | | | |
| 67 | | $u(m_B^{Et})$ | 0,057735 | мг - стандартная неопределённость взвешивания | | | | | | | | | | | |
| 68 | | $u(P^{Et})$ | 0,034641 | % - стандартная неопределённость (погрешность) концентрации этанола | | | | | | | | | | | |
| 69 | | ρ_{Et} | 789300 | мг/л - плотность безводного этанола при нормальных условиях | | | | | | | | | | | |
| 70 | | Примеси в Et: | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | 2-м-1-пропанол | 1-бутанол | 3-м-1-бутанол | | | | |
| 71 | | $C(Et)$ | 0,15 | 0 | 0 | 2,5 | 0,16 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | |
| 72 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 73 | | компонент | $C(3)$, мг/л | $u(C(3))$, мг | $C(1)$, мг/л | $u(C(1))$, мг | $C(Et)$, мг/л | $u(C^i(Et))$, мг | $m_B^{Et}(1)$, мг | $u(m_B^i)$, мг | $m_B^{Et}(3)$, мг | $u(m_B^{Et}(3))$, мг | $\Delta u(C(3))$, % | | |
| 74 | | ацетальдегид | 99,64 | 0,01253 | 1990 | 0,0141 | 0,1500 | 0,0130 | 3600 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0126 | | |
| 75 | | метилацетат | 100 | 0,00138 | 2000 | 0,0014 | 0,0000 | 0,0000 | 3600 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0014 | | |
| 76 | | этилацетат | 104,7 | 0,00145 | 2094 | 0,0014 | 0,0000 | 0,0000 | 3600 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0014 | | |
| 77 | | метанол | 1005 | 0,20795 | 20045 | 0,2350 | 2,5000 | 0,2165 | 3600 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0207 | | |
| 78 | | 2-пропанол | 103 | 0,01335 | 2033 | 0,0151 | 0,1600 | 0,0139 | 3600 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0130 | | |
| 79 | | 1-пропанол | 105 | 0,00145 | 2094 | 0,0014 | 0,0000 | 0,0000 | 3600 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0014 | | |
| 80 | | 2-м-1-пропанол | 100 | 0,00138 | 2000 | 0,0014 | 0,0000 | 0,0000 | 3600 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0014 | | |
| 81 | | 1-бутанол | 100 | 0,00138 | 2000 | 0,0014 | 0,0000 | 0,0000 | 3600 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0014 | | |
| 82 | | 3-м-1-бутанол | 104 | 0,00144 | 2073 | 0,0014 | 0,0000 | 0,0000 | 3600 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0014 | | |

Рис. 2 - Область шаблона, описывающая расчёт массовых концентраций определяемых летучих компонентов и их неопределённостей в градуировочной смеси В. Оранжевым цветом выделены ячейки в которых указана масса добавленной смеси А.

Расчёт массовой концентрации i -го определяемого летучего компонента в смеси В происходит по следующей формуле:

$$C^i(B) = \frac{C^i(A) \cdot m_B^A}{m_B^{Et}(A) + m_B^{Et}} + \frac{C^i(Et) \cdot m_B^{Et}}{m_B^{Et}(A) + m_B^{Et}}, \quad (3)$$

Расчёт стандартной неопределённости массовой концентрации летучих компонентов в смеси В происходит по следующей формуле:

$$u(C^i(B)) = \sqrt{\left(\frac{m_B^A}{m_B^{Et}(A) + m_B^{Et}} \cdot u(C^i(A))\right)^2 + \left(\frac{C^i(A)}{m_B^{Et}(A) + m_B^{Et}} \cdot u(m_B^A)\right)^2 + \left(\frac{C^i(A) \cdot m_B^A}{(m_B^{Et}(A) + m_B^{Et}) \cdot m_B^{Et}} \cdot u(m_B^{Et})\right)^2} \quad (4)$$

$$\sqrt{\left(\frac{m_B^{Et}}{m_B^{Et}(A) + m_B^{Et}} \cdot u(C^i(Et))\right)^2 + \left(\frac{C^i(Et)}{m_B^{Et}(A) + m_B^{Et}} \cdot u(m_B^{Et})\right)^2 + \left(\frac{C^i(Et) \cdot m_B^{Et}}{(m_B^{Et}(A) + m_B^{Et}) \cdot m_B^{Et}} \cdot u(m_B^{Et})\right)^2}$$

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M | N | O |
|-----|------------------------------------|----------------|-----------------|--|-----------------|------------------|------------------|-------------------|------------------|---------------|---------------|------------------|------------------------|---|---|
| 87 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 88 | Градуировочная смесь С (10) | | | | | | | | | | | | | | |
| 89 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 90 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 91 | | m_C^A | 80002 | масса добавленного этанола в смесь С | | | | | | | | | | | |
| 92 | | m_C^{Et} | 400 | масса добавленной градуировочной смеси А | | | | | | | | | | | |
| 93 | | $u(C^i(Et))$ | 15 | % - стандартная неопределенность (погрешность) концентрации добавляемого i-го определяемого летучего компонента в исходном этаноле | | | | | | | | | | | |
| 94 | | $u(m_C^A)$ | 0,0577 | мг - стандартная неопределенность взвешивания | | | | | | | | | | | |
| 95 | | $u(m_C^{Et})$ | 0,0577 | мг - стандартная неопределенность взвешивания | | | | | | | | | | | |
| 96 | | Примеси в Et: | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | 2-м-1-пропанол | 1-бутанол | 3-м-1-бутанол | | | | |
| 97 | | $C^i(Et)$ | 0,15 | 0 | 0 | 2,5 | 0,16 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | |
| 98 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 99 | | компонент | $C^i(4)$, мг/л | $u(C^i(4))$, мг | $C^i(1)$, мг/л | $u(C^i(1))$, мг | $C^i(Et)$, мг/л | $u(C^i(Et))$, мг | $m^{Et}(1)$, мг | $u(m^1)$, мг | m^{Et} , мг | $u(m^{Et})$, мг | $\Delta u(C^i(4))$, % | | |
| 100 | | ацетальдегид | 10,11 | 0,01301 | 1990 | 0,01414 | 0,1500 | 0,01299 | 360 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,1287 | | |
| 101 | | метилацетат | 10,00 | 0,00144 | 2000 | 0,00142 | 0,0000 | 0,00000 | 360 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0144 | | |
| 102 | | этилацетат | 10,47 | 0,00150 | 2094 | 0,00142 | 0,0000 | 0,00000 | 360 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0144 | | |
| 103 | | метанол | 103,20 | 0,21602 | 20045 | 0,23498 | 2,5000 | 0,21651 | 360 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,2093 | | |
| 104 | | 2-пропанол | 11,80 | 0,01387 | 2033 | 0,01508 | 0,1600 | 0,01386 | 360 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,1176 | | |
| 105 | | 1-пропанол | 10,50 | 0,00150 | 2094 | 0,00142 | 0,0000 | 0,00000 | 360 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0143 | | |
| 106 | | 2-м-1-пропанол | 10,00 | 0,00144 | 2000 | 0,00142 | 0,0000 | 0,00000 | 360 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0144 | | |
| 107 | | 1-бутанол | 10,00 | 0,00144 | 2000 | 0,00142 | 0,0000 | 0,00000 | 360 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0144 | | |
| 108 | | 3-м-1-бутанол | 10,40 | 0,00149 | 2073 | 0,00142 | 0,0000 | 0,00000 | 360 | 0,0577 | 80002 | 0,0577 | 0,0143 | | |

Рис. 3 - Область шаблона, описывающая расчёт массовых концентраций определяемых летучих компонентов и их неопределённостей в градуировочной смеси С. Красным цветом выделены ячейки в которых указана масса добавленной смеси А.

Расчёт массовой концентрации i-го летучего компонента в смеси С происходит по следующей формуле:

$$C^i(C) = \frac{C^i(A) \cdot m_C^A}{m_C^{Et}(A) + m_C^{Et}} + \frac{C^i(Et) \cdot m_C^{Et}}{m_C^{Et}(A) + m_C^{Et}} \quad (5)$$

Расчёт стандартной неопределённости массовой концентрации летучих компонентов в смеси С происходит по следующей формуле:

$$u(C^i(C)) = \sqrt{\left(\frac{m_C^A}{m_C^{Et}(A) + m_C^{Et}} \cdot u(C^i(A))\right)^2 + \left(\frac{C^i(A)}{m_C^{Et}(A) + m_C^{Et}} \cdot u(m_C^A)\right)^2 + \left(\frac{C^i(A) \cdot m_C^A}{(m_C^{Et}(A) + m_C^{Et}) \cdot m_C^{Et}} \cdot u(m_C^{Et})\right)^2 + \left(\frac{m_C^{Et}}{m_C^{Et}(A) + m_C^{Et}} \cdot u(C^i(Et))\right)^2 + \left(\frac{C^i(Et)}{m_C^{Et}(A) + m_C^{Et}} \cdot u(m_C^{Et})\right)^2 + \left(\frac{C^i(Et) \cdot m_C^{Et}}{(m_C^{Et}(A) + m_C^{Et}) \cdot m_C^{Et}} \cdot u(m_C^{Et})\right)^2} \quad (6)$$

| | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M | N |
|-----|-------------------------------|-----------------|--|-----------------|------------------|------------------|-------------------|-----------------------|--------------------------|--------------------|-----------------------|------------------------|---|
| 225 | Градуировочная смесь D | | | | | | | | | | | | |
| 226 | m_D^{Et} | 80001 | масса добавленного этанола в смесь D | | | | | | | | | | |
| 227 | m_D^B | 400 | масса добавленной градуировочной смеси B | | | | | | | | | | |
| 228 | $u(m_D^B)$ | 0,0577 | мг - ст неопред взвеш | | | | | | | | | | |
| 229 | $u(m_D^{Et})$ | 0,0577 | мг - ст неопред взвеш | | | | | | | | | | |
| 230 | $u(C^i(Et))$ | 15 | % - стандартная неопределенность (погрешность) концентрации добавляемого i-го определяемого летучего компонента в исходном этаноле | | | | | | | | | | |
| 231 | | | | | | | | | | | | | |
| 232 | Примеси в Et: | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | 2-м-1-пропанол | 1-бутанол | 3-м-1-бутанол | | | |
| 233 | $C^i(Et)=$ | 0,15 | 0 | 0 | 2,5 | 0,16 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | |
| 234 | | | | | | | | | | | | | |
| 235 | компонент | $C^i(9)$, мг/л | $u(C^i(9))$, мг | $C^i(3)$, мг/л | $u(C^i(3))$, мг | $C^i(Et)$, мг/л | $u(C^i(Et))$, мг | $m_{Et}^{Et}(3)$, мг | $u(m_{Et}^{Et}(3))$, мг | m_{Et}^{Et} , мг | $u(m_{Et}^{Et})$, мг | $\Delta u(C^i(9))$, % | |
| 236 | ацетальдегид | 0,604 | 0,01293 | 99,64 | 0,0125 | 0,15 | 0,01299 | 384 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 2,1406 | |
| 237 | метилацетат | 0,500 | 0,00010 | 100 | 0,0014 | 0,00 | 0,00000 | 384 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 0,0195 | |
| 238 | этилацетат | 0,523 | 0,00010 | 104,7 | 0,0014 | 0,00 | 0,00000 | 384 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 0,0195 | |
| 239 | метанол | 5,975 | 0,21548 | 1005 | 0,2080 | 2,50 | 0,21651 | 384 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 3,6063 | |
| 240 | 2-пропанол | 0,928 | 0,01379 | 103 | 0,0134 | 0,16 | 0,01386 | 384 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 1,4861 | |
| 241 | 1-пропанол | 0,523 | 0,00010 | 105 | 0,0014 | 0,00 | 0,00000 | 384 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 0,0196 | |
| 242 | 2-м-1-пропанол | 0,500 | 0,00010 | 100 | 0,0014 | 0,00 | 0,00000 | 384 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 0,0195 | |
| 243 | 1-бутанол | 0,500 | 0,00010 | 100 | 0,0014 | 0,00 | 0,00000 | 384 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 0,0195 | |
| 244 | 3-м-1-бутанол | 0,518 | 0,00010 | 104 | 0,0014 | 0,00 | 0,00000 | 384 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 0,0196 | |

Рис. 4 - Область шаблона, описывающая расчёт массовых концентраций определяемых летучих компонентов и их неопределённостей в градуировочной смеси D. Красным цветом выделены ячейки в которых указана масса добавленной смеси B.

Расчёт массовой концентрации i-го летучего компонента в смеси D происходит по следующей формуле:

$$C^i(D) = \frac{C^i(B) \cdot m_D^A}{m_D^{Et}(B) + m_D^{Et}} + \frac{C^i(Et) \cdot m_D^{Et}}{m_D^{Et}(B) + m_D^{Et}}, \quad (7)$$

Расчёт стандартной неопределённости массовой концентрации летучих компонентов в смеси D происходит по следующей формуле:

$$u(C^i(D)) = \sqrt{\left(\frac{m_D^B}{(m_D^{Et}(A) + m_D^{Et})} \cdot u(C^i(B))\right)^2 + \left(\frac{C^i(B)}{(m_D^{Et}(B) + m_D^{Et})} \cdot u(m_D^B)\right)^2 + \left(\frac{C^i(B) \cdot m_D^B}{(m_D^{Et}(B) + m_D^{Et}) \cdot m_D^{Et}} \cdot u(m_D^{Et})\right)^2 + \left(\frac{m_D^{Et}}{(m_D^{Et}(B) + m_D^{Et})} \cdot u(C^i(Et))\right)^2 + \left(\frac{C^i(Et)}{(m_D^{Et}(B) + m_D^{Et})} \cdot u(m_D^{Et})\right)^2 + \left(\frac{C^i(Et) \cdot m_D^{Et}}{(m_D^{Et}(B) + m_D^{Et}) \cdot m_D^{Et}} \cdot u(m_D^{Et})\right)^2}. \quad (8)$$

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M | N | O |
|----|---|-------------------------------|-----------------|--|-----------------|------------------|------------------|-------------------|---------------------|------------------------|---------------------|------------------------|------------------------|---|---|
| 3 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 4 | | Контрольный образец №1 | | | | | | | | | | | | | |
| 5 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 6 | | m^{Et} | 80001 | масса добавленного этанола | | | | | | | | | | | |
| 7 | | m^B | 800 | масса добавленной градуировочной смеси В | | | | | | | | | | | |
| 8 | | $u(m_{(0)}^B)$ | 0,0577 | мг - стандартная неопределенность (погрешность) взвешивания добавляемого этанола, | | | | | | | | | | | |
| 9 | | $u(m^{Et})$ | 0,0577 | мг - стандартная неопределенность (погрешность) взвешивания добавляемого этанола, | | | | | | | | | | | |
| 10 | | $u(C^{(Et)})$ | 15 | % - стандартная неопределенность (погрешность) концентрации добавляемого i-го определяемого летучего компонента в исходном этаноле | | | | | | | | | | | |
| 11 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 12 | | Примеси в Et: | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | 2-м-1-пропанол | 1-бутанол | 3-м-1-бутанол | | | | |
| 13 | | $C^{(Et)}$ | 0,15 | 0 | 0 | 2,5 | 0,16 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | | |
| 14 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 15 | | компонент | $C^i(8)$, мг/л | $u(C^i(8))$, мг | $C^i(3)$, мг/л | $u(C^i(3))$, мг | $C^i(Et)$, мг/л | $u(C^i(Et))$, мг | $m_{(3)}^{Et}$, мг | $u(m_{(3)}^{Et})$, мг | $m_{(8)}^{Et}$, мг | $u(m_{(8)}^{Et})$, мг | $\Delta u(C^i(8))$, % | | |
| 16 | | ацетальдегид | 1,00 | 0,01288 | 99,64 | 0,0125 | 0,15 | 0,01299 | 768 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 1,2877 | | |
| 17 | | метилацетат | 1,00 | 0,00048 | 100 | 0,0014 | 0,00 | 0,00000 | 768 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 0,0478 | | |
| 18 | | этилацетат | 1,00 | 0,00050 | 104,7 | 0,0014 | 0,00 | 0,00000 | 768 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 0,0500 | | |
| 19 | | метанол | 10,00 | 0,21452 | 1005 | 0,2080 | 2,50 | 0,21651 | 768 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 2,1452 | | |
| 20 | | 2-пропанол | 1,00 | 0,01373 | 103 | 0,0134 | 0,16 | 0,01386 | 768 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 1,3735 | | |
| 21 | | 1-пропанол | 1,00 | 0,00050 | 105 | 0,0014 | 0,00 | 0,00000 | 768 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 0,0502 | | |
| 22 | | 2-м-1-пропанол | 1,00 | 0,00048 | 100 | 0,0014 | 0,00 | 0,00000 | 768 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 0,0478 | | |
| 23 | | 1-бутанол | 1,00 | 0,00048 | 100 | 0,0014 | 0,00 | 0,00000 | 768 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 0,0478 | | |
| 24 | | 3-м-1-бутанол | 1,00 | 0,00050 | 104 | 0,0014 | 0,00 | 0,00000 | 768 | 0,0577 | 80001 | 0,0577 | 0,0497 | | |

Рис. 5 - Область шаблона, описывающая расчёт массовых концентраций расчёт массовых концентраций определяемых летучих компонентов и их неопределённостей в контрольном образце №1.

Расчёт массовой концентрации i-го летучего компонента в контрольном образце №1 происходит по следующей формуле:

$$C_1^i = \frac{C^i(B) \cdot (m_{Et}(B) / \rho_{Et}) \cdot P^{Et} + C^i(0) \cdot (m_{Et}(0) / \rho_{Et}) \cdot P^{Et}}{((m_{Et}(B) + m_{Et}(0)) / \rho_{Et}) \cdot P^{Et}}, \quad (9)$$

Расчёт стандартной неопределённости массовой концентрации i-го летучего компонента в контрольном образце №1 происходит по следующей формуле:

$$u(C_1^i) = \sqrt{((\partial C_1^i / \partial C^i(B)) \cdot u(C^i(B)))^2 + ((\partial C_1^i / \partial m_{Et}(B)) \cdot u(m_{Et}(B)))^2 + ((\partial C_1^i / \partial m_{Et}(0))) \cdot u(m_{Et}(0)))^2 + ((\partial C_1^i / \partial C^i(0)) \cdot u(C^i(0)))^2}. \quad (10)$$

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M | N | O |
|----|-------------------------------|----------------|-----------------|--|-----------------|------------------|------------------|-------------------|--------------------|-----------------------|-----------------|--------------------|------------------------|---|---|
| 29 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 30 | Контрольный образец №2 | | | | | | | | | | | | | | |
| 31 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 32 | | m_c^{Et} | 80003 | масса добавленного этанола | | | | | | | | | | | |
| 33 | | m_c^A | 2000 | масса добавленной градуировочной смеси А | | | | | | | | | | | |
| 34 | | $u(C^i(Et))$ | 15 | % - стандартная неопределенность (погрешность) концентрации добавляемого i-го определяемого летучего компонента в исходном этаноле | | | | | | | | | | | |
| 35 | | $u(m_c^{Et})$ | 0,057735 | мг - стандартная неопределенность (погрешность) взвешивания добавляемого этанола, | | | | | | | | | | | |
| 36 | | $u(m_c^A)$ | 0,0577 | мг - стандартная неопределенность (погрешность) взвешивания добавляемого этанола, | | | | | | | | | | | |
| 37 | | $u(m_c^c)=$ | 0,0577 | мг - стандартная неопределенность (погрешность) взвешивания добавляемого этанола, | | | | | | | | | | | |
| 38 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 39 | | Примеси в Et | | ацетальдегид | метилацетат | этилацетат | метанол | 2-пропанол | 1-пропанол | 2-м-1-пропанол | 1-бутанол | 3-м-1-бутанол | | | |
| 40 | | $C^i(Et)=$ | | 0,15 | 0 | 0 | 2,5 | 0,16 | 0 | 0 | 0 | 0 | | | |
| 41 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 42 | | компонент | $C^i(4)$, мг/л | $u(C^i(4))$, мг | $C^i(1)$, мг/л | $u(C^i(1))$, мг | $C^i(Et)$, мг/л | $u(C^i(Et))$, мг | $m_{Et}^i(1)$, мг | $u(m_{Et}^i(1))$, мг | m_{Et}^i , мг | $u(m_{Et}^i)$, мг | $\Delta u(C^i(4))$, % | | |
| 43 | | ацетальдегид | 50 | 0,012787 | 1990 | 0,0141 | 0,1500 | 0,01299 | 1800 | 0,0577 | 80003 | 0,0577 | 0,0256 | | |
| 44 | | метилацетат | 50 | 0,001412 | 2000 | 0,0014 | 0,0000 | 0,00000 | 1800 | 0,0577 | 80003 | 0,0577 | 0,0028 | | |
| 45 | | этилацетат | 50 | 0,001479 | 2094 | 0,0014 | 0,0000 | 0,00000 | 1800 | 0,0577 | 80003 | 0,0577 | 0,0030 | | |
| 46 | | метанол | 500 | 0,212292 | 20045 | 0,2350 | 2,5000 | 0,21651 | 1800 | 0,0577 | 80003 | 0,0577 | 0,0425 | | |
| 47 | | 2-пропанол | 50 | 0,013632 | 2033 | 0,0151 | 0,1600 | 0,01386 | 1800 | 0,0577 | 80003 | 0,0577 | 0,0273 | | |
| 48 | | 1-пропанол | 50 | 0,001479 | 2094 | 0,0014 | 0,0000 | 0,00000 | 1800 | 0,0577 | 80003 | 0,0577 | 0,0030 | | |
| 49 | | 2-м-1-пропанол | 50 | 0,001412 | 2000 | 0,0014 | 0,0000 | 0,00000 | 1800 | 0,0577 | 80003 | 0,0577 | 0,0028 | | |
| 50 | | 1-бутанол | 50 | 0,001412 | 2000 | 0,0014 | 0,0000 | 0,00000 | 1800 | 0,0577 | 80003 | 0,0577 | 0,0028 | | |
| 51 | | 3-м-1-бутанол | 50 | 0,001464 | 2073 | 0,0014 | 0,0000 | 0,00000 | 1800 | 0,0577 | 80003 | 0,0577 | 0,0029 | | |

Рис. 6 - Область шаблона, описывающая расчёт массовых концентраций расчёт массовых концентраций определяемых летучих компонентов и их неопределённостей в контрольном образце №2.

Расчёт массовой концентрации i-го летучего компонента в контрольном образце №2 происходит по следующей формуле:

$$C_2^i = \frac{C^i(A) \cdot (m_{Et}(A) / \rho_{Et}) \cdot P^{Et} + C^i(0) \cdot (m_{Et}(0) / \rho_{Et}) \cdot P^{Et}}{((m_{Et}(A) + m_{Et}(0)) / \rho_{Et}) \cdot P^{Et}}, \quad (11)$$

Расчёт стандартной неопределённости массовой концентрации i-го летучего компонента в контрольном образце №2 происходит по следующей формуле:

$$u(C_1^i) = \sqrt{((\partial C_1^i / \partial C^i(A)) \cdot u(C^i(A)))^2 + ((\partial C_1^i / \partial m_{Et}(A))) \cdot u(m_{Et}(A)))^2 + ((\partial C_1^i / \partial m_{Et}(0))) \cdot u(m_{Et}(0)))^2 + ((\partial C_1^i / \partial C^i(0)) \cdot u(C^i(0)))^2 + \sqrt{((m_2^{Et} / (m_2^{Et}(1) + m_2^{Et})) \cdot u(C^i(Et)))^2 + ((C^i(Et) / (m_2^{Et}(1) + m_2^{Et})) \cdot u(m_2^{Et}))^2 + ((C^i(Et) \cdot m_2^{Et}) / (m_2^{Et}(1) + m_2^{Et}) \cdot m_2^{Et}) \cdot u(m_2^{Et}))^2}}. \quad (12)$$