



# **A numerical method for calculating the quantitative composition of complex water-ethanol mixtures**

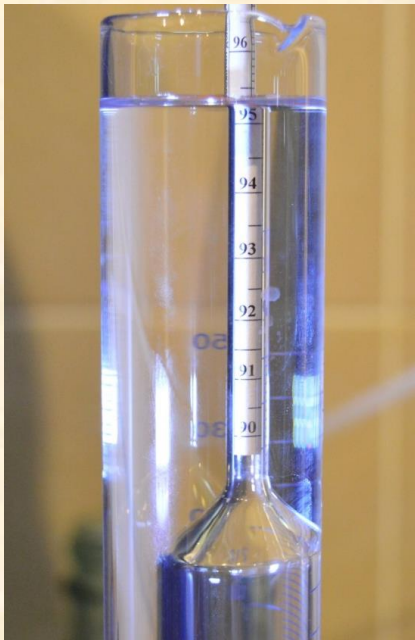
Made by: Anton Korban

# Strength

The determination of the strength of the sample of alcohol beverage is one of the key actions while routine quality control tests.

*Strength = The volumetric ethanol content in solution*

$$strength = \frac{V_{ethanol}}{V_{sample}} \cdot 100\%$$



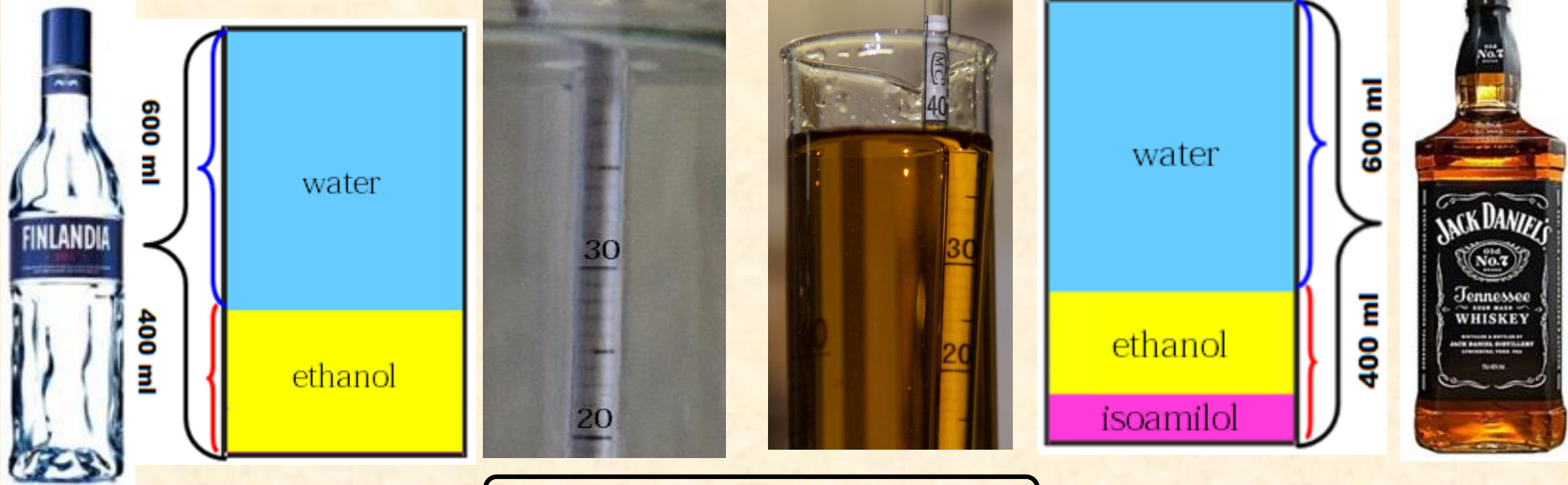
Densimeter usage



Температура, °С	Содержание спирта при 20 °С, % (по объему)						Температура, °С
	100	99	98	97	96	95	
	Плотность водно-спиртового раствора, г/см³						
+7	0,80032	0,80543	0,81012	0,81452	0,81868	0,82264	+7
6	116	628	097	537	953	349	6
5	200	711	181	621	0,82037	433	5
4	285	796	264	704	120	516	4
3	369	880	347	787	203	598	3
2	454	964	430	870	286	681	2
1	539	0,81047	513	953	368	763	1
0	623	130	596	0,82035	450	845	0
—1	0,8071	0,8121	0,8168	0,8212	0,8253	0,8293	—1
2	79	30	76	20	61	0,8301	2
3	88	38	84	28	70	09	3
4	96	46	93	37	78	17	4
5	0,8105	55	0,8201	45	86	25	5
6	13	63	10	53	94	34	6
7	22	72	18	62	0,8303	42	7
8	30	80	26	70	11	50	8
9	39	89	35	78	19	58	9
10	47	97	43	86	27	67	10
11	55	0,8205	51	95	36	75	11
12	63	13	60	0,8303	44	83	12
13	71	21	68	11	53	92	13
14	79	30	76	20	61	0,8400	14
15	88	38	84	28	69	09	15
16	96	46	93	36	78	17	16
17	0,8204	54	0,8301	45	86	25	17
18	12	62	69	53	94	33	18

Alcoholometric tables 2

# How to determine strength **correctly**?

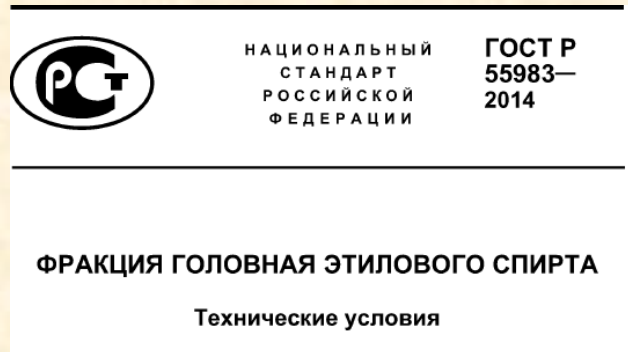


✓ True



✗ False

# Inaccurate data example



Наименование показателя	Значение показателя для головной фракции, вырабатываемой	
	из мелассы	из крахмалосодержащего сырья
Объемная доля этилового спирта, % не менее	92,0	92,0
Объемная доля метилового спирта в пересчете на безводный спирт, %, не более	0,05	6,0
Массовая концентрация сивушного масла в пересчете на безводный спирт, г/дм <sup>3</sup> , не более	1,5	2,5
Массовая концентрация альдегидов в пересчете на безводный спирт, г/дм <sup>3</sup>	35,0	35,0
Массовая концентрация эфиров в пересчете на безводный спирт, г/дм <sup>3</sup> , не более	60,0	60,0
Массовая концентрация летучих кислот, г/дм <sup>3</sup> безводного спирта, не более	1,0	2,0

Total content of impurities reaches 13 % in anhydrous alcohol

## 7.2.1 Определение запаха

25 см<sup>3</sup> головной фракции при температуре 20 °С наливают в колбу с широким горлом вместимостью 100—150 см<sup>3</sup> с притертой пробкой. Колбу открывают для определения запаха на 5—8 с.

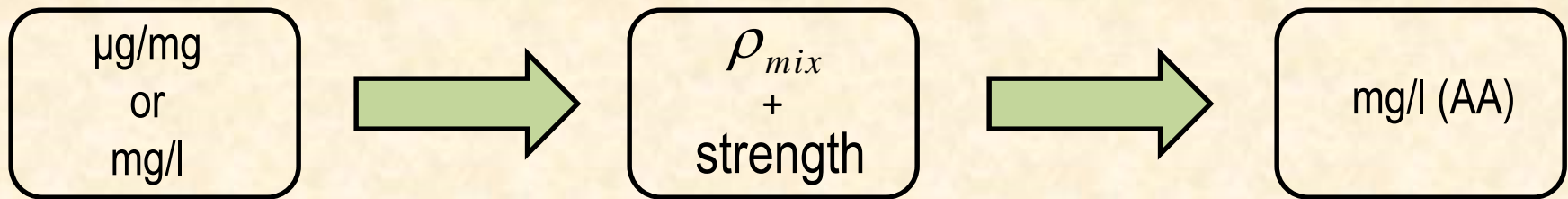
## 7.3 Определение объемной доли этилового спирта — по ГОСТ 3639.

Reference to areometric determination of strength

# Determination of volatiles contamination

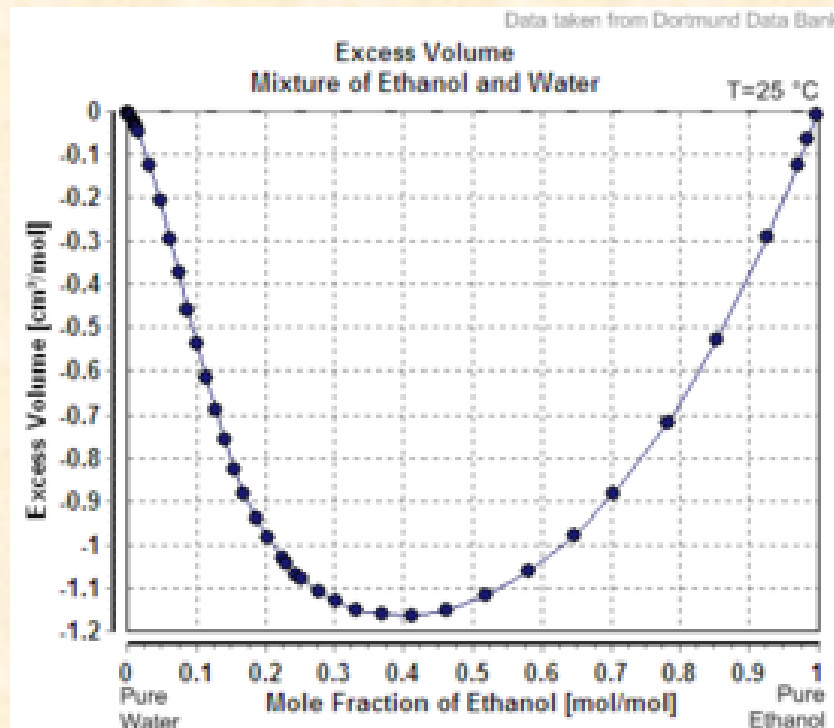
Volatile compounds – associated components,  
appeared during ethanol production

The concentrations of volatile components must be  
presented in mg/l (AA) (Absolute Alcohol)



# Contraction phenomenon

While mixing pure components (ethanol and water) the final solution has less volume than the sum of volumes of pure components





# The proposed method of calculation

Every water-ethanol solution appears to be divided into hydrous and anhydrous parts:

$$\rho_{mix} = C_{water} \cdot \rho_{water}^{eff} + (1 - C_{water}) \cdot \sum_{(i)} \rho_i \cdot C_i^*$$

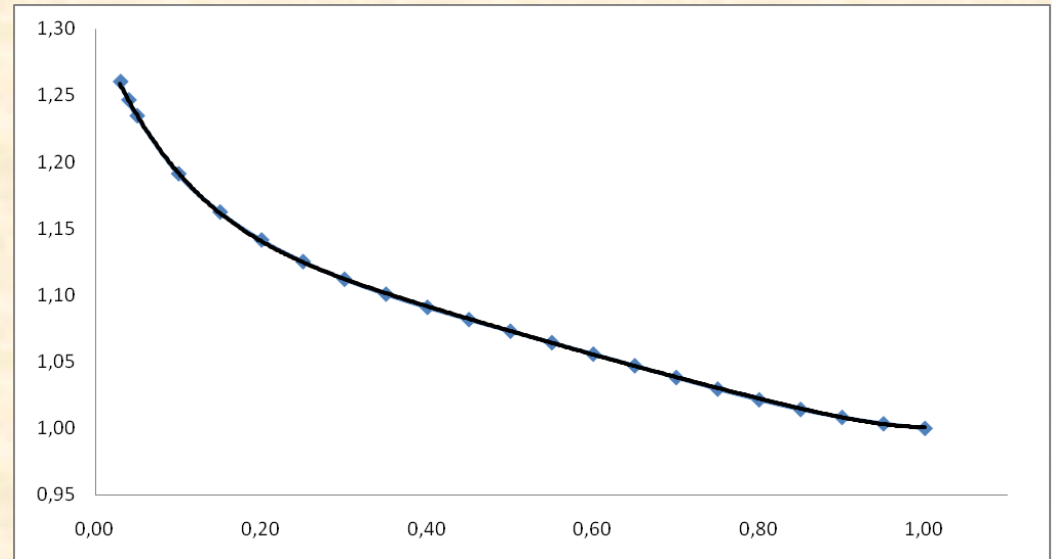
$$\rho_{water}^{eff} = \rho_{water}^{20} \cdot F(C_{water}, C_{ethanol})$$

The effective water density appeared to be depending on F value

$$F = \frac{\rho_{mix} - C_{ethanol} \cdot \rho_{ethanol}}{C_{water} \cdot \rho_{water}^{20}}$$

F value can be calculated from the official water-ethanol density tables and finally be presented as function of water volumetric concentration

$$x = \frac{C_{water}}{C_{water} + C_{ethanol}}$$



$$F(C_w, C_{Eth}) = a \cdot x^6 + b \cdot x^5 + c \cdot x^4 + d \cdot x^3 + e \cdot x^2 + f \cdot x + g$$

# The proposed method of calculation

The relationship between ml/ml and mg/l (AA) values can be demonstrated as:

$$C_i^* = \left( \frac{\tilde{C}_i}{\rho_i} \right) / \left( \sum_{(i)} \frac{\tilde{C}_i}{\rho_i} \right) \quad \tilde{C}_i = RRF_i \cdot \frac{A_i}{A_{Et}} \cdot \rho_{Et} = \left( \frac{\tilde{C}_i^{st}}{A_i^{st}} / \frac{\tilde{C}_{Et}^{st}}{A_{Et}^{st}} \right) \cdot \frac{A_i}{A_{Et}} \cdot \rho_{Et} = \tilde{C}_i^{st} \cdot \frac{A_{Et}^{st}}{A_i^{st}} \cdot \frac{A_i}{A_{Et}}$$

Substituting volumetric concentration in anhydrous part:

$$C_W^{(j+1)} = \frac{\rho_T \cdot \sum_{(i)} \frac{\tilde{C}_i}{\rho_i} - \sum_{(i)} \tilde{C}_i}{\rho_W \cdot F^{(j+1)}(x^{(j+1)}) \cdot \sum_{(i)} \frac{\tilde{C}_i}{\rho_i} - \sum_{(i)} \tilde{C}_i}$$

$$x = \frac{C_W}{C_W + C_{Eth}}$$

$$F(C_W, C_{Eth}) = a \cdot x^6 + \dots + g$$

$C_i$  -ml/ml solution  
 $C_i^*$  -ml/ml of anhydrous part  
 $\tilde{C}_i$  -mg/l (AA)

$$C_i = (1 - C_W) \cdot C_i^*$$

← Determined directly from GC measurements



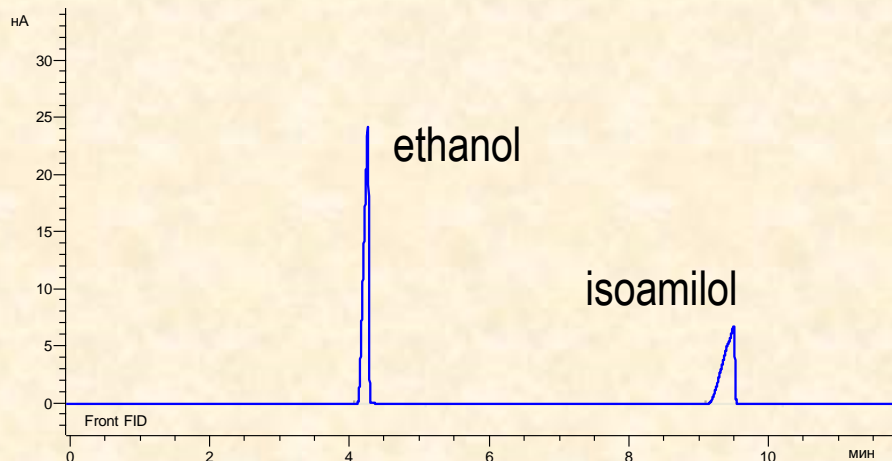
# Experimental tests

The RRFs' values were calculated according to GC analysis of both bought and prepared standard solutions

Ten samples were prepared by mixing pure ethanol and water and then they were analysed by the proposed method

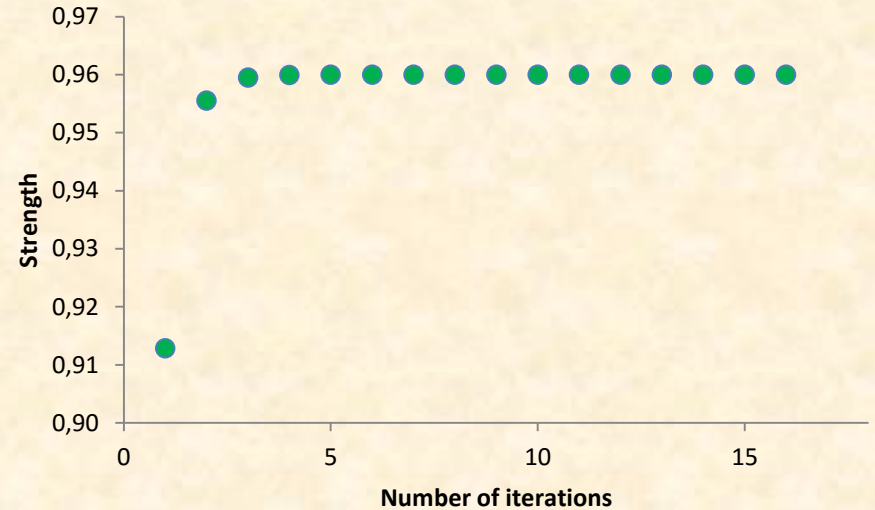
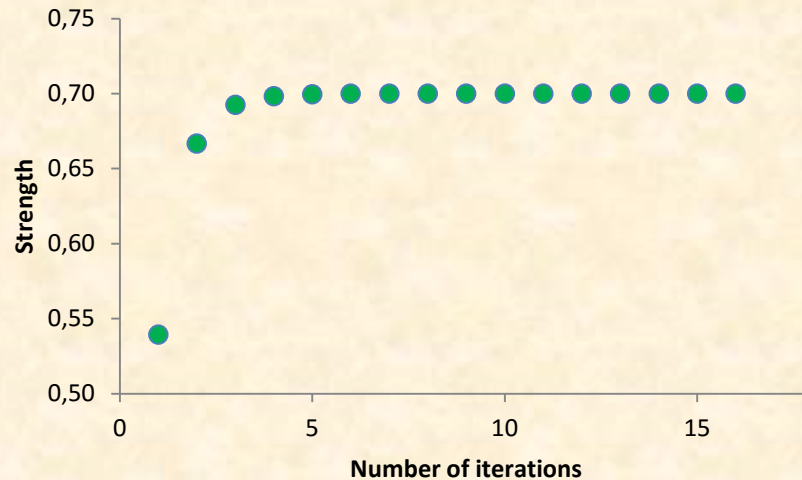
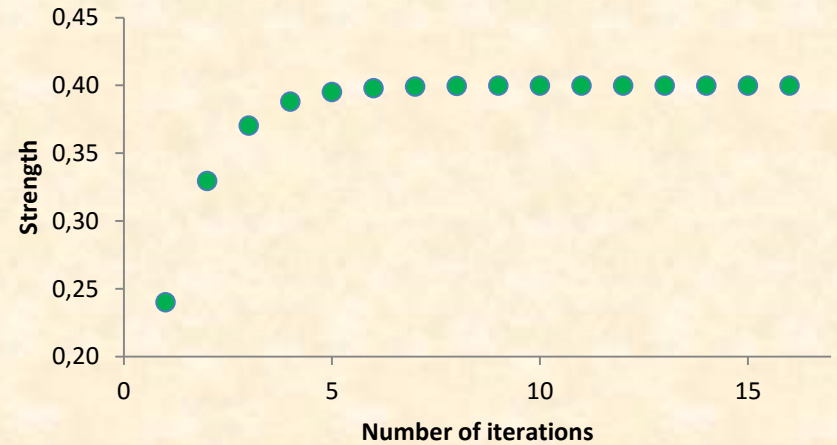
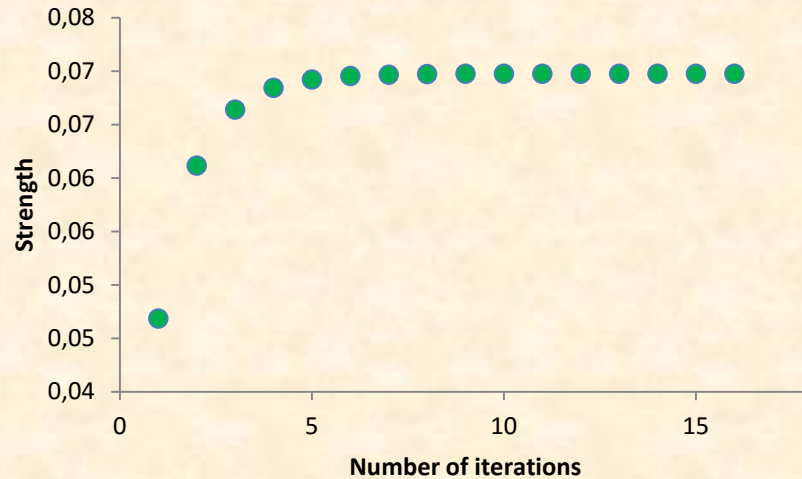
Areometer	10,0%	20,0%	30,0%	40,0%	50,0%	60,0%	70,0%	80,0%	90,0%	95,5%
GC analysis	9,97%	19,97%	29,96%	39,99%	49,99%	59,99%	69,99%	79,99%	89,95%	95,49%
bias	-0,03%	-0,03%	-0,04%	-0,01%	-0,01%	-0,01%	-0,01%	-0,01%	-0,05%	-0,01%

A complex mixture of water, ethanol and isoamil alcohol in the ratio of 20:60:20



method	strength value, %	bias, %
areometer	80,2	33,7
proposed	59,3	1,2

# Cyclical calculations



# On-line calculator AlcoDrinks

<http://inp.bsu.by/calculator/vcalcr.html>

Название пробы:

Пример - CRM LGC5100 Whisky-Congeners

Компонент	Плотность*, мг/л	RRF		Площадь, произвольн. ед.	Концентрация, мг/л (AA) ▾
		Средний**	<input type="checkbox"/> Собственный		
ацетальдегид	783400	1.337	1.337	31.216	75.844
изобутиральдегид	793800	1.109	1.109	0	0
этилформнат	916800	1.321	1.321	0	0
ацетон	784500	1.300	1.300	0	0
метилацетат	934200	1.387	1.387	3.481	8.774
этилацетат	900300	1.117	1.117	121.388	246.401
метанол	786600	1.223	1.223	23.757	52.800
2-бутанон	805000	0.900	0.900	0	0
2-пропанол	785000	0.969	0.969	0.917	1.615
<b>этанол</b>	<b>789300</b>	<b>1.000</b>	<b>1.000</b>	<b>434338</b>	<b>789300 (39.90 об. %)</b>
диацетил	990000	2.019	2.019	0	0
2-бутанол	806300	0.853	0.853	0	0
1-пропанол	805300	0.679	0.679	471.362	581.619
изобутанол	801800	0.581	0.581	585.582	618.270
изоамилацетат	876000	0.707	0.707	0	0
1-бутанол	809800	0.648	0.648	4.443	5.232
изоамилол	813000	0.632	0.632	775.877	891.095
гексанол	815300	0.600	0.600	0	0
этиллактат	1032800	1.908	1.908	0	0
циклогексанол	962400	0.556	0.556	0	0
бензиловый спирт	1041900	0.909	0.909	0	0
фенилэтанол	1013000	0.730	0.730	0	0
<b>проба</b>	<b>948060</b>				

Печать результатов

