



Application Note AN-NIR-024

# Control de calidad de la gasolina de pirólisis: determinación del valor de dieno en un minuto usando NIRS

## Determinación del valor de dieno en un minuto usando NIRS

La gasolina de pirólisis (Pygas) es un subproducto de la producción de etileno, que contiene diolefinas conjugadas no deseadas, lo que la hace inadecuada como combustible para motores. Para superar esta limitación, es necesario reducir el contenido de olefinas por debajo de los 2 mg/g de pygas en una unidad de hidrogenación selectiva (SHU). El valor de dieno, o valor de anhídrido maleico (MAV), generalmente se determina mediante el método

químico húmedo de Diels-Alder (UOP326-17).

Este método químico húmedo requiere varias horas para ser realizado por analistas altamente capacitados. A diferencia del método primario, la espectroscopía del infrarrojo cercano (NIRS) es una solución analítica rápida y económica para la determinación del valor del dieno en la gasolina de pirólisis.

## EQUIPO EXPERIMENTAL

Se analizaron 99 muestras de pygas en un NIRS XDS RapidLiquid Analyzer equipado con viales de vidrio desechables de 8 mm. Todas las medidas se realizaron en modo de transmisión de 400 nm a 2500 nm. El control de temperatura se ajustó a 40 °C para proporcionar un entorno de muestra estable. Por razones de conveniencia, se utilizaron viales desechables con una longitud de paso de 8 mm, lo que hizo que el procedimiento de limpieza fuera obsoleto. El paquete de software Metrohm Vision Air Complete se utilizó para la adquisición de datos y el desarrollo del modelo de predicción.



**Figure 1.** Muestras envasadas en recipientes desechables con paso óptico de 8 mm.

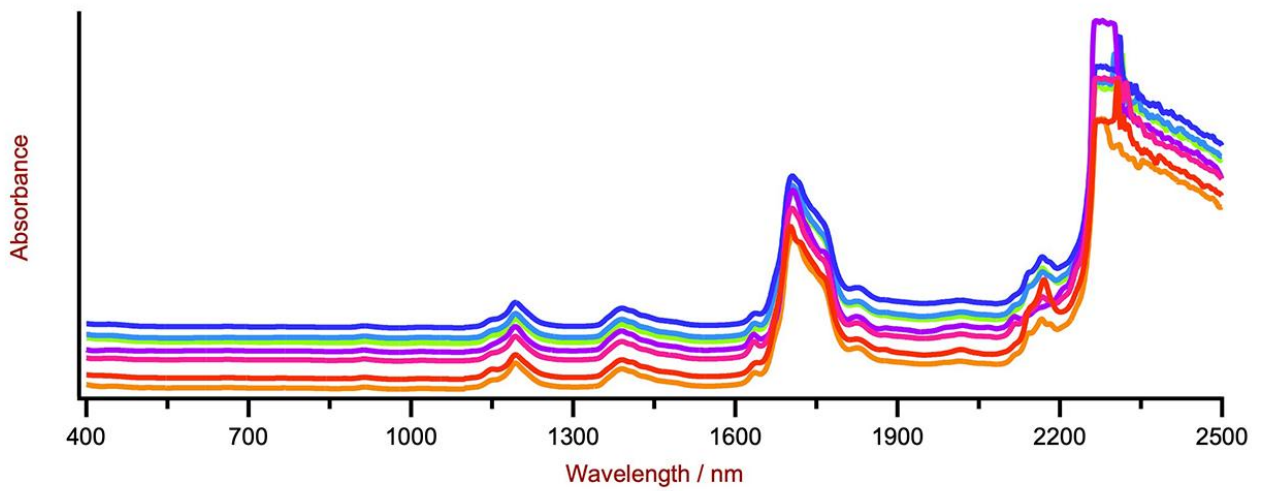
**Tabla 1.** Descripción general del equipo de hardware y software

Equipo	Número de metrohmios
Analizador de líquidos XDS Rapid	2.921.1410
Viales desechables, 8 mm de diámetro, transmisión	6.7402.000
Vision Air 2.0 completo	6.6072.208

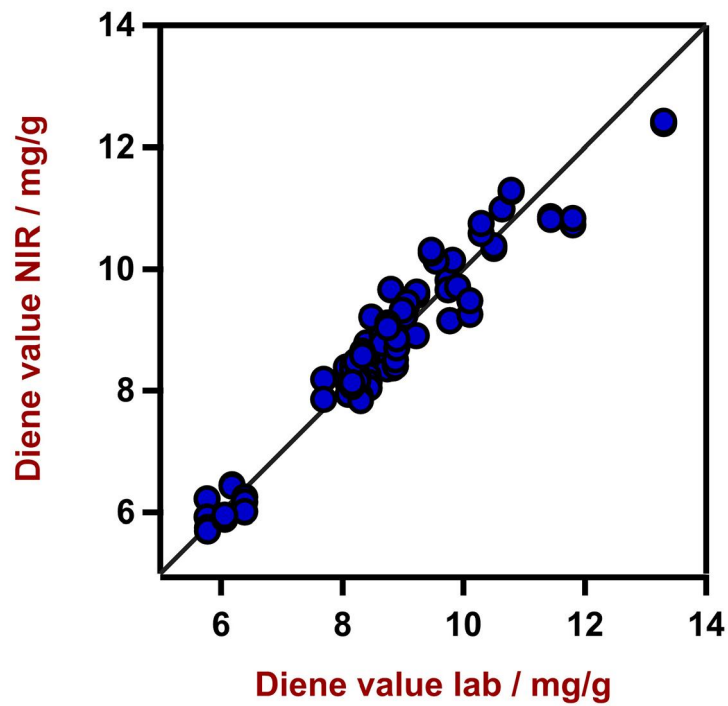
## RESULTADOS

Los espectros Vis-NIR obtenidos (**Figura 2**) se utilizaron para crear un modelo de predicción para la determinación del valor del dieno. Para verificar la calidad del modelo de predicción, se crearon diagramas de correlación que muestran la correlación

entre la predicción Vis-NIR y los valores del método primario (**figura 3**). Las respectivas cifras de mérito (FOM) muestran la precisión esperada de una predicción durante el análisis de rutina.



**Figure 2.** Selección de espectros Vis-NIR de gasolina de pirólisis obtenidos utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer y viales desechables de 8 mm. Por razones de visualización, se aplicó una compensación de espectros.



**Figure 3.** Diagrama de correlación para la predicción del valor del dieno utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer. Los valores de laboratorio se determinaron según el método UOP326-17.

**Tabla 2.** Cifras de mérito para la predicción del valor del dieno usando un XDS RapidLiquid Analyzer.

Figuras de merito	Valor
R <sup>2</sup>	0,9253
Error estándar de calibración	0,42 mg/g
Error estándar de validación cruzada	0,46 mg/g

## CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación muestra la viabilidad de la espectroscopia NIR para el análisis del índice de dieno en la gasolina de pirólisis. En comparación con el método químico húmedo UOP326-17 (Tabla 3), el

tiempo de resultado es una gran ventaja de la espectroscopia NIR, ya que un solo **la medición se realiza en un minuto.**

**Tabla 3.** Tiempo para obtener resultados con el análisis de química húmeda UOP-326 convencional

Parámetro	Método	Tiempo de resultado y flujo de trabajo
valor del dieno	Diels Aliso (UOP326-17)	~6 horas; reflujo, hidrólisis, titulación

## CONTACT

Metrohm Argentina S.A.  
Avda. Regimiento de  
Patricios 1456  
1266 Buenos Aires

[info@metrohm.com.ar](mailto:info@metrohm.com.ar)



### NIRS XDS RapidLiquid Analyzer

Análisis rápidos y precisos de líquidos y suspensiones de toda clase.

El NIRS XDS RapidLiquid Analyzer permite análisis rápidos y precisos de sustancias y fórmulas líquidas. Los resultados de medida precisos se obtienen pulsando un botón, lo que hace que el NIRS XDS RapidLiquid Analyzer se convierta también en una solución tan sencilla como fiable para el control de calidad en el laboratorio y el proceso. Las muestras se presentan en cubetas de cuarzo reutilizables o viales de vidrio desechables; una cámara de muestras con temperatura regulada proporciona unas condiciones de análisis reproducibles y por consiguiente unos resultados de medición exactos.



### Vision Air 2.0 Complete

**Vision Air - Software de espectroscopía universal.**

Vision Air Complete es una solución de software moderna y fácil de usar para su empleo en entornos regulados.

Las ventajas de Vision Air son las siguientes:

- Aplicaciones de software individuales con interfaces de usuario personalizadas para garantizar un manejo intuitivo y fácil
- Fácil creación y mantenimiento de procedimientos operativos
- Base de datos SQL para una gestión de datos segura y sencilla

La versión Vision Air Complete (66072208) incluye todas las aplicaciones para el aseguramiento de la calidad mediante la espectroscopía Vis-NIR:

- Aplicación para la gestión de datos y aparatos
- Aplicación para el desarrollo de métodos
- Aplicación para análisis rutinarios

Más soluciones Vision Air Complete:

- 66072207 (Vision Air Network Complete)
- 66072209 (Vision Air Pharma Complete)
- 66072210 (Vision Air Pharma Network Complete)