



Application Note AN-NIR-080

Control de Calidad de Diésel

Determinación rápida y sencilla del índice de cetano, punto de inflamación, CFPP, D95 y viscosidad con NIRS

El índice de cetano (ASTM D613), el punto de inflamación (ASTM D56), el punto de obturación del filtro en frío (CFPP) (ASTM D6371), D95 (ISO 3405) y la viscosidad a 40 °C (ISO 3104) son parámetros clave a determinar para el diésel. calidad. Los métodos de prueba primarios son laboriosos y sumamente difíciles debido a la necesidad de utilizar diferentes métodos analíticos.

Esta nota de aplicación demuestra que el XDS RapidLiquid Analyzer, que opera en la región espectral visible e infrarroja cercana (Vis-NIR), proporciona una **rentable y rápido** solución para el **determinación simultánea** de estos parámetros clave en diésel. La espectroscopia Vis-NIR permite el análisis de diésel en **menos de un minuto sin preparación de muestras ni uso de reactivos químicos**.

EQUIPO EXPERIMENTAL

Las muestras de diésel se midieron en modo de transmisión con un XDS RapidLiquid Analyzer (RLA) en todo el rango de longitud de onda (400–2500 nm). La cámara de muestra de temperatura controlada incorporada se ajustó a 30 °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 obsoleto un procedimiento de limpieza. El paquete de software Metrohm Vision Air Complete se utilizó para la adquisición de datos y el desarrollo del modelo de predicción.



Figure 1. Analizador XDS RapidLiquid con vial desechable de 8 mm lleno de una muestra de diésel.

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 diámetro, transmisión | 6.7402.000 |
| Vision Air 2.0 completo | 6.6072.208 |

Los espectros Vis-NIR obtenidos (**Figura 2**) se utilizaron para crear modelos de predicción para la determinación de parámetros diésel clave. La calidad de los modelos de predicción se evaluó mediante diagramas de correlación, que muestran la correlación

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

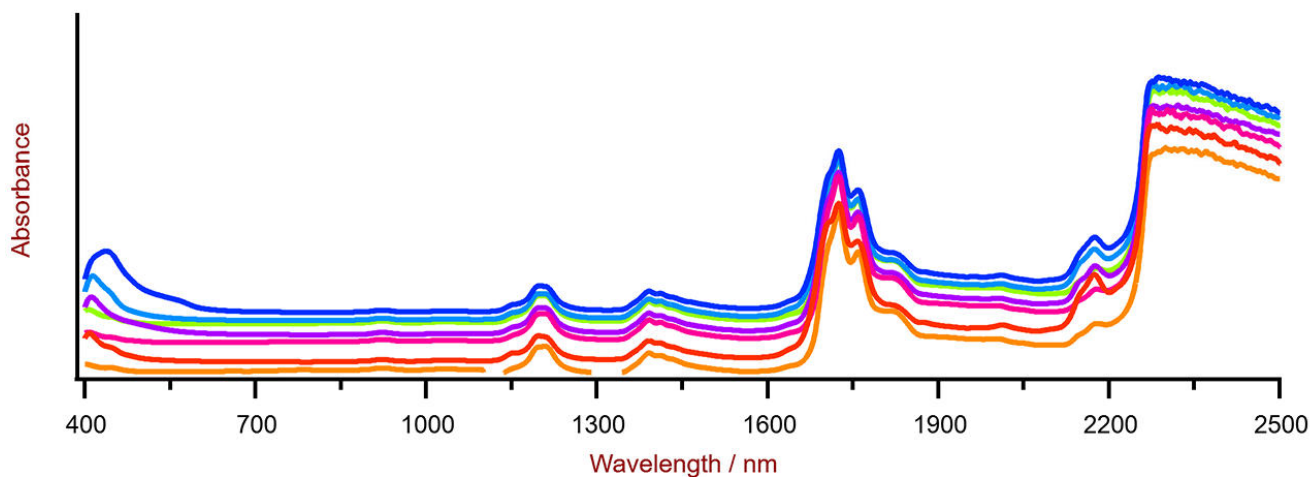


Figure 2. Selección de espectros diésel Vis-NIR obtenidos con un XDS RapidLiquid Analyzer y viales desechables de 8 mm. Por razones de visualización, se aplicó una compensación de espectros.

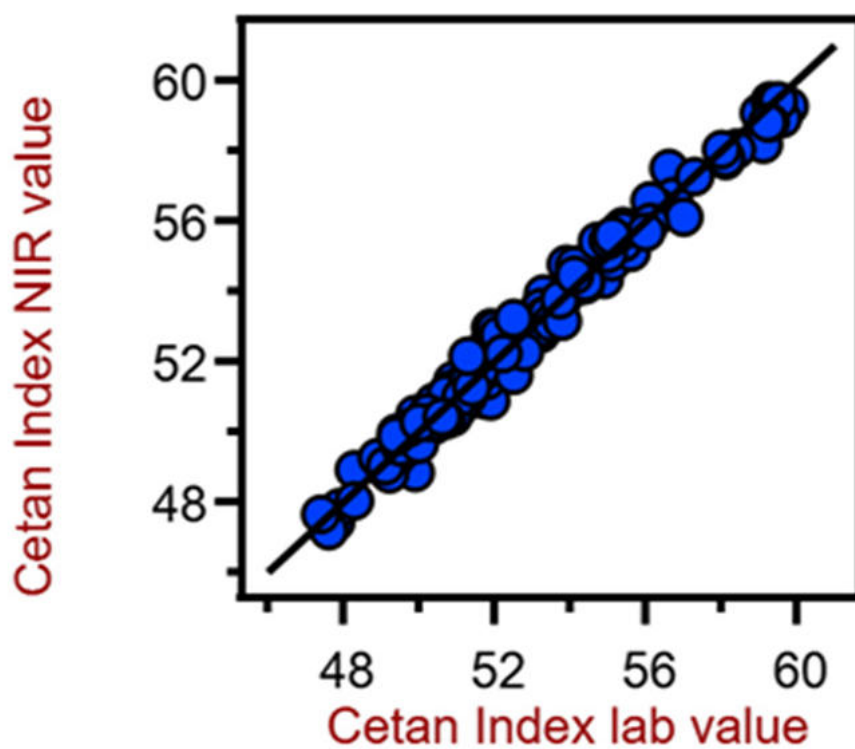


Figure 3. Diagrama de correlación para la predicción del índice de cetano usando un XDS RapidLiquid Analyzer. El valor de laboratorio del índice de cetano se calculó en función de la densidad y el rango de destilación.

Tabla 2. Cifras de mérito para la predicción del índice de cetano utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer.

| Figuras de merito | Valor |
|--------------------------------------|-------|
| R^2 | 0,991 |
| Error estándar de calibración | 0,093 |
| Error estándar de validación cruzada | 0,143 |

RESULTADOS

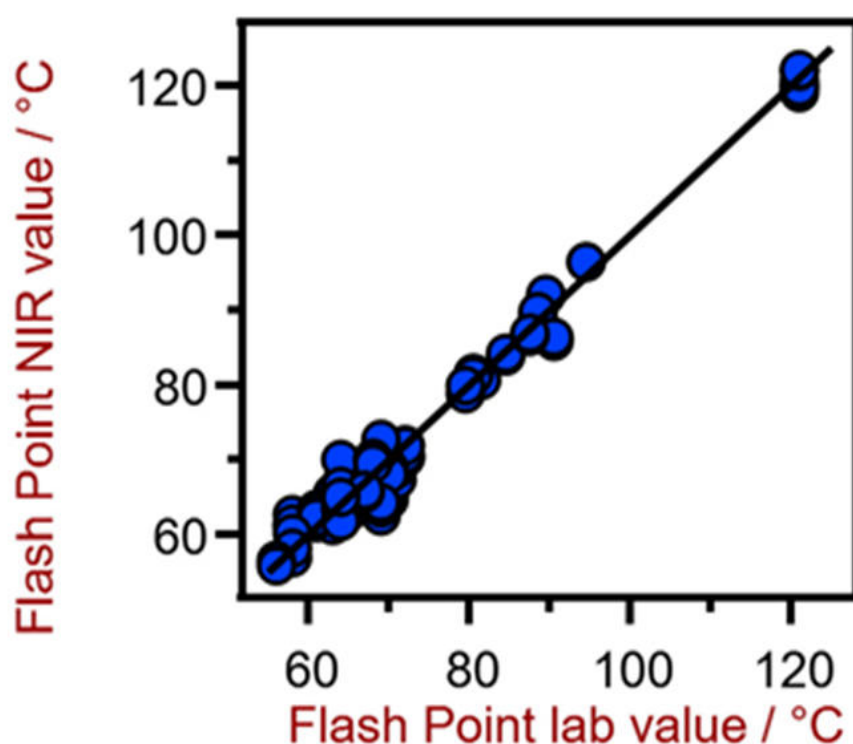


Figure 4. Diagrama de correlación para la predicción del punto de inflamación utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer. El valor de laboratorio del punto de inflamación se evaluó usando un analizador de punto de inflamación dedicado.

Tabla 3. Cifras de mérito para la predicción del punto de inflamación utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer.

| Figuras de merito | Valor |
|--------------------------------------|---------|
| R^2 | 0,977 |
| Error estándar de calibración | 2,22 °C |
| Error estándar de validación cruzada | 2,50 °C |

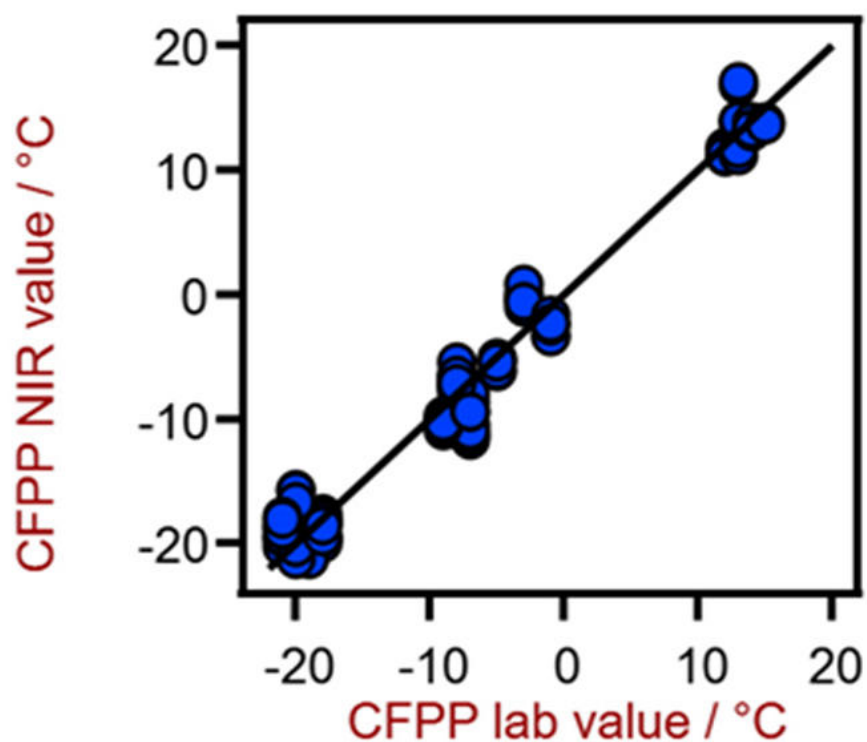


Figure 5. Diagrama de correlación para la predicción de CFPP usando un XDS RapidLiquid Analyzer. El valor de laboratorio se evaluó utilizando medidores de flujo.

Tabla 4. Cifras de mérito para la predicción de CFPP usando un XDS RapidLiquid Analyzer.

| Figuras de merito | Valor |
|--------------------------------------|---------|
| R^2 | 0,973 |
| Error estándar de calibración | 1,99 °C |
| Error estándar de validación cruzada | 2,24 °C |

RESULTADOS

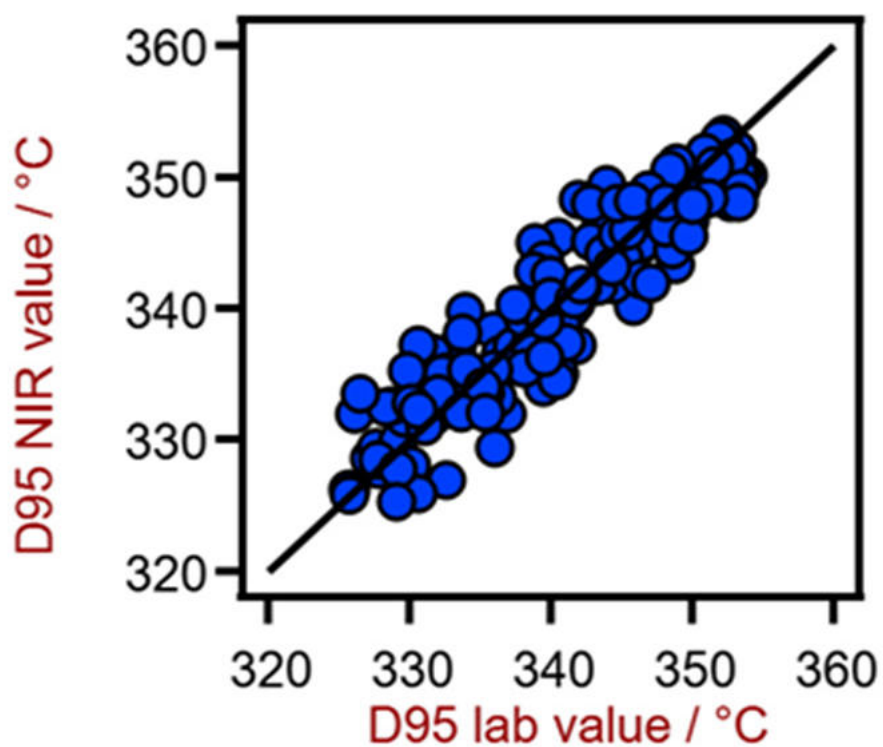


Figure 6. Diagrama de correlación para la predicción del valor D95 utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer. El valor de laboratorio D95 se evaluó mediante destilación.

Tabla 5. Cifras de mérito para la predicción de D95 utilizando un Analizador de Líquidos XDS Rapid.

| Figuras de merito | Valor |
|--------------------------------------|---------|
| R^2 | 0,861 |
| Error estándar de calibración | 3,07 °C |
| Error estándar de validación cruzada | 3,47 °C |

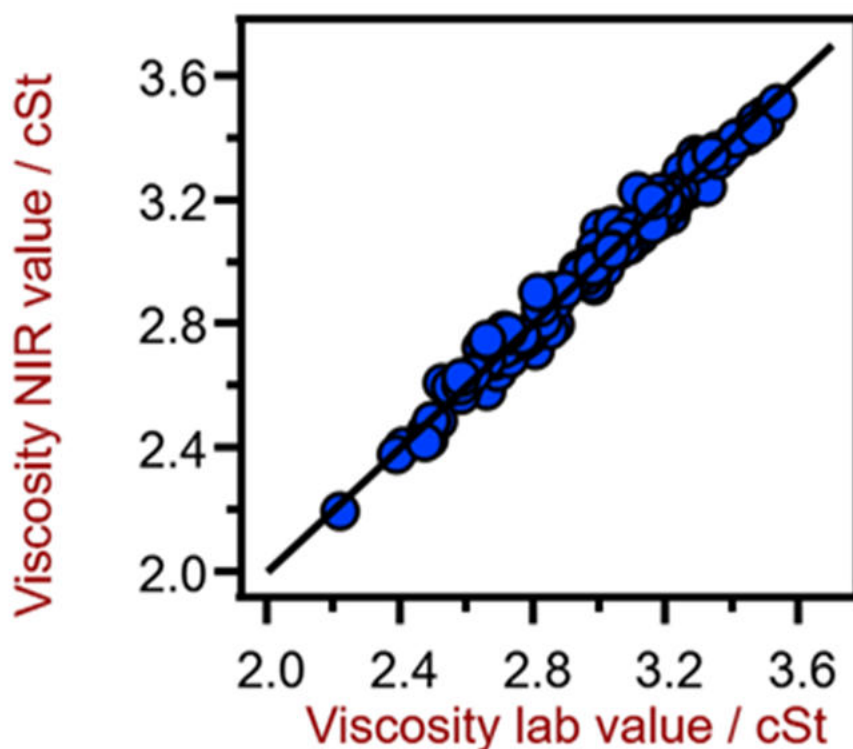


Figure 7. Diagrama de correlación para la predicción de la viscosidad a 40 ° C utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer. El valor de laboratorio de viscosidad se evaluó mediante viscosimetría.

Tabla 6. Cifras de mérito para la predicción de la viscosidad a 40 °C usando un XDS RapidLiquid Analyzer.

| Figuras de merito | Valor |
|--------------------------------------|-----------|
| R^2 | 0,983 |
| Error estándar de calibración | 0,038 cSt |
| Error estándar de validación cruzada | 0,047 cSt |

Este estudio demuestra la viabilidad de la espectroscopia NIR para el análisis de los parámetros clave de las muestras de diésel. En comparación con los métodos estándar, **no se necesita preparación de muestras**. Las muestras se analizan tal cual, lo que permite un funcionamiento sencillo cuando se utiliza

la espectroscopia NIR.

Para ver la información de todos los parámetros clave y obtener la información más reciente, consulte nuestras precalibraciones:

[Precalibraciones](#)

CONTACT

Metrohm Hispania
Calle Aguacate 15
28044 Madrid

mh@metrohm.es

EQUIPO EXPERIMENTAL



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)