



Application Note AN-NIR-113

Determinación del número de octano de investigación (RON) en isomerato

NIRS ofrece a los usuarios análisis rápidos y eficaces con bajos costes de funcionamiento

Las refinerías utilizan la isomerización de nafta ligera para producir productos de isomeratos de alto octanaje que cumplen con las especificaciones actuales de gasolina. La isomerización aumenta el octanaje de la nafta ligera al aumentar el grado de ramificación de las moléculas de parafina. El número de octano de investigación (RON) del producto objetivo depende de varios parámetros de producción de la planta (p. ej., la temperatura o la proporción de hidrógeno a hidrocarburo). Para optimizar el proceso

de la planta, es fundamental contar con un método analítico fiable y rápido.

El método estándar para determinar RON en isomerato es con motores caros y que requieren un mantenimiento intensivo. En contraste con esto, el número de octano de investigación también se puede analizar mediante espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS). NIRS proporciona resultados precisos en un minuto sin necesidad de preparación de muestras ni productos químicos.

Se midieron 63 muestras de isomeratos diferentes con diferentes valores de RON con el analizador de líquidos Metrohm DS2500 (**Figura 1**) en modo de transmisión en todo el rango de longitud de onda de 400 a 2500 nm. El controlador de temperatura incorporado garantizó la estabilidad de la medición con una temperatura de muestra constante de 35 °C.

Por comodidad, se utilizaron viales desechables con un paso óptico de 8 mm, lo que hizo obsoleto el procedimiento de limpieza. El paquete de software Vision Air Complete de Metrohm se utilizó para la adquisición de datos y el desarrollo del modelo de predicción.

Tabla 1. Resumen de equipos de hardware y software.

Equipo	Número de artículo
Analizador de líquidos DS2500	2.929.0010
DS2500 Soporte viales de 8 mm	6.7492.020
Vision Air 2.0 completo	6.6072.208



Figure 1. Analizador de líquidos Metrohm DS2500 utilizado para la determinación del número de octano de investigación (RON) en muestras de isomeratos.

RESULTADO

Los espectros Vis-NIR obtenidos (**Figura 2**) se utilizaron para crear un modelo de predicción para la cuantificación del número de octanos de investigación en isomerato. La calidad de los modelos de predicción se evaluó mediante diagramas de correlación basados en el algoritmo de validación

cruzada. Un valor de $R^2 > 0,98$ muestra una alta correlación entre la predicción Vis-NIR y el método ASTM de referencia. Las respectivas cifras de mérito (FOM) muestran la precisión esperada durante el análisis de rutina (**figura 3**).

RESULTADO

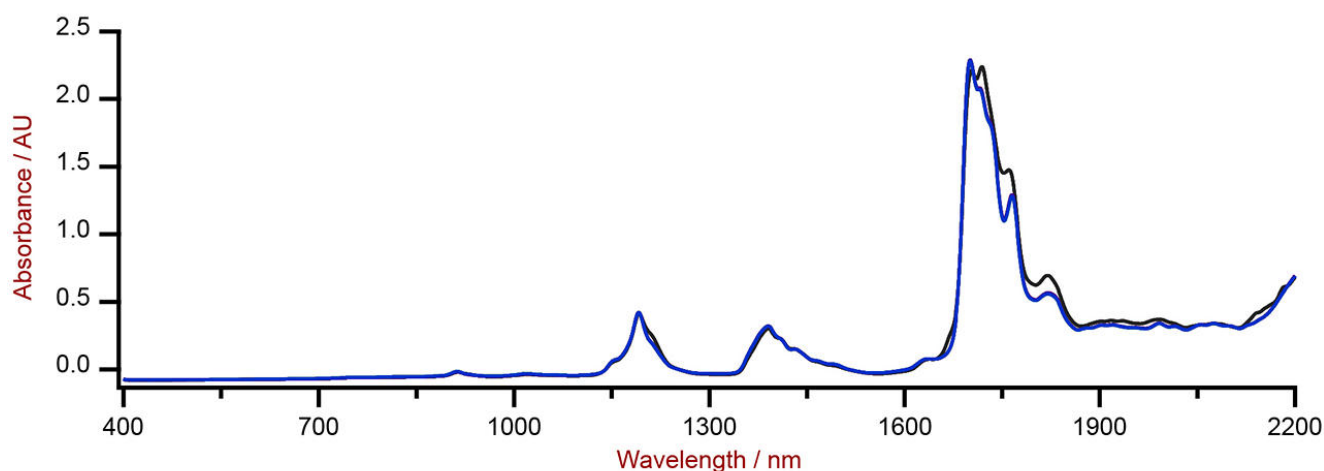


Figure 2. Selección de espectros Vis-NIR de muestras de isomeratos analizadas en un analizador de líquidos DS2500 con viales de 8 mm.

RESULTADO RON VALUE

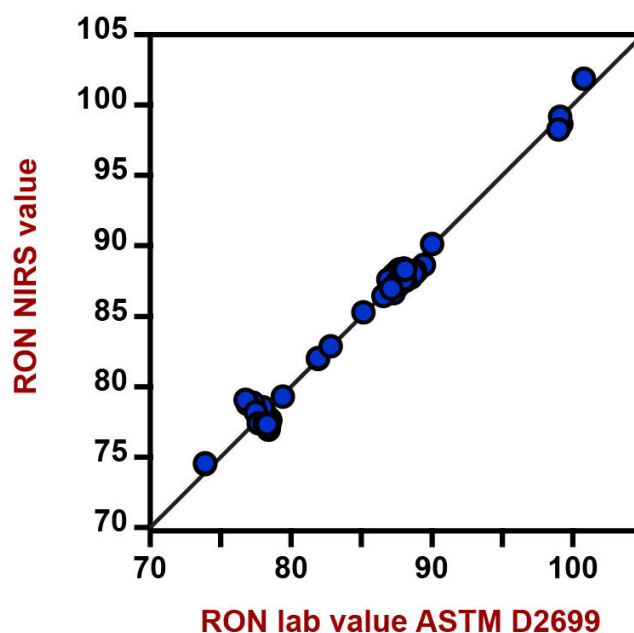


Figure 3. Diagrama de correlación y las respectivas cifras de mérito para la predicción del valor de RON utilizando un analizador de líquidos DS2500. El valor de laboratorio se evaluó de acuerdo con la norma ASTM D2699.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,986
Error estándar de calibración	0,73
Error estándar de validación cruzada	0,76

CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación demuestra la viabilidad de la espectroscopia NIR para el análisis de RON en muestras de isomeratos. En comparación con el método convencional, el tiempo de resultado (Tabla

2) es una gran ventaja de la espectroscopia Vis-NIR. Con NIRS, se realiza una sola medición en un minuto, mientras que la prueba del motor CFR es mucho más larga.

Tabla 2. Tiempo hasta el resultado de la determinación del valor RON con el método de referencia estándar ASTM D2699.

Parámetro	Método	Tiempo de resultado
RON	Prueba de motor CFR	30 minutos por muestra

CONTACT

Metrohm Hispania
Calle Aguacate 15
28044 Madrid

mh@metrohm.es

CONFIGURACIÓN



DS2500 Liquid Analyzer

Sólida espectroscopía del infrarrojo cercano para control de calidad en el laboratorio y en el entorno de producción.

El DS2500 Liquid Analyzer es la solución probada y flexible para los análisis rutinarios de líquidos a lo largo de toda la cadena de producción. Su diseño robusto hace que el DS2500 Liquid Analyzer sea resistente al polvo, la humedad y las vibraciones, lo que hace que sea especialmente adecuado para el uso en entornos de producción adversos.

El DS2500 Liquid Analyzer cubre todo el rango espectral de 400 a 2500 nm, calienta las muestras hasta 80°C y es compatible con diferentes viales desechables y cubetas de cuarzo. El DS2500 Liquid Analyzer puede, por tanto, adaptarse a sus necesidades individuales de muestras y le ayuda a obtener resultados precisos y reproducibles en menos de un minuto. El reconocimiento integrado del portamuestras y el software intuitivo Vision Air garantizan además un funcionamiento fácil y seguro para el usuario.

En el caso de cantidades de muestra más grandes, la productividad se puede aumentar considerablemente utilizando una celda de flujo continuo en combinación con un robot de muestras Metrohm.



DS2500 Soporte para viales desechables de 8 mm

Soporte inteligente para viales desechables de vidrio de 8 mm de diámetro



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)