



Application Note AN-NIR-114

# Determinación de RON, aromáticos, benceno, olefinas y densidad en reformado por NIRS

## Análisis multiparámetro con obtención de resultados en un minuto

Las refinerías utilizan el proceso de reformado catalítico para producir reformado de alto octanaje. Este reformado se utiliza para mezclas de gasolina premium o materia prima petroquímica. La determinación de los parámetros clave de calidad del reformado, a saber, el número de octanos de investigación (RON, ASTM D2699), el contenido de aromáticos (ASTM D5769), el contenido de benceno, el contenido de olefinas y la densidad, requiere

métodos convencionales laboriosos y que consumen mucho tiempo.

Por el contrario, todos estos parámetros (y más) se pueden medir mediante espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR). El analizador de líquidos Metrohm DS2500, que funciona en la región espectral visible e infrarroja cercana (Vis-NIR), proporciona resultados en un minuto sin necesidad de preparación de la muestra.

## EXPERIENCIA

Se midieron 507 muestras reformadas diferentes en el analizador de líquidos Metrohm DS2500 (Figura 1). Todas las mediciones se realizaron en modo de transmisión de 400 a 2500 nm utilizando viales desechables de 8 mm. El control de temperatura del

analizador se fijó en 35 °C para todas las mediciones a fin de garantizar el mejor rendimiento y los datos de la más alta calidad. El desarrollo del modelo de predicción y adquisición de datos se realizó con el paquete de software Metrohm Vision Air Complete.



**Figure 1.** Analizador de líquidos Metrohm DS2500 utilizado para la determinación del número de octanos de investigación (RON), compuestos aromáticos, benceno, olefinas y densidad en reformados.

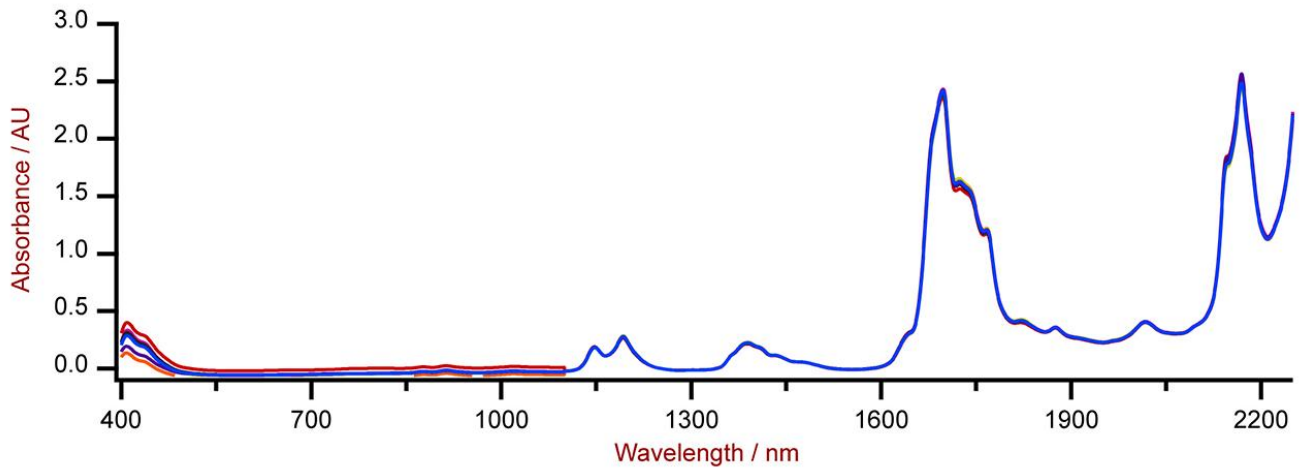
**Tabla 1.** Resumen de equipos de hardware y software.

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

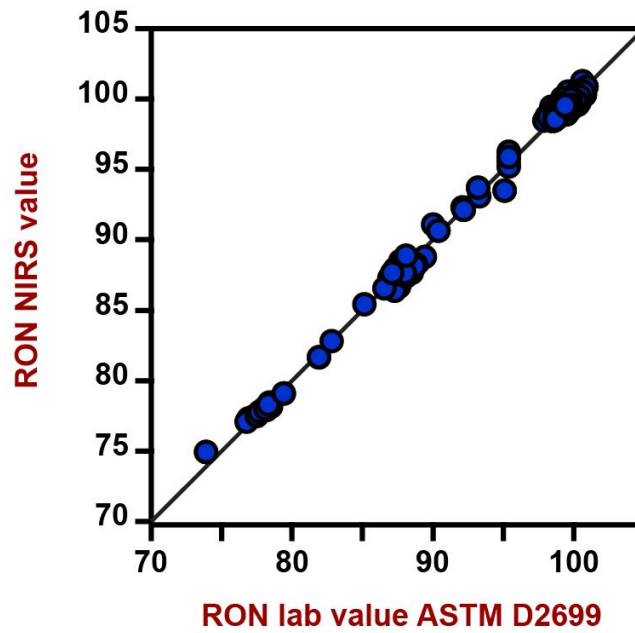
## RESULTADO

Los espectros Vis-NIR medidos (Figura 2) se utilizaron para crear un modelo de predicción para la cuantificación de los cinco parámetros. La calidad de los modelos de predicción se evaluó mediante diagramas de correlación que muestran una alta

correlación ( $R^2 > 0,98$ ) entre la predicción Vis-NIR y los métodos de referencia para todos los parámetros. Las respectivas cifras de mérito (FOM) muestran la precisión esperada y confirman la viabilidad durante el análisis de rutina (Figuras 3–7).

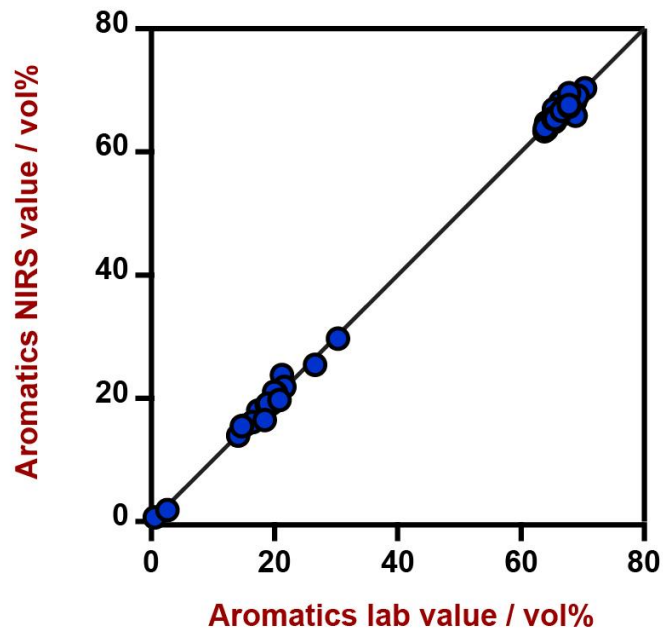


**Figure 2.** Selección de espectros Vis-NIR de muestras reformadas analizadas en un analizador de líquidos Metrohm DS2500 con viales de 8 mm.



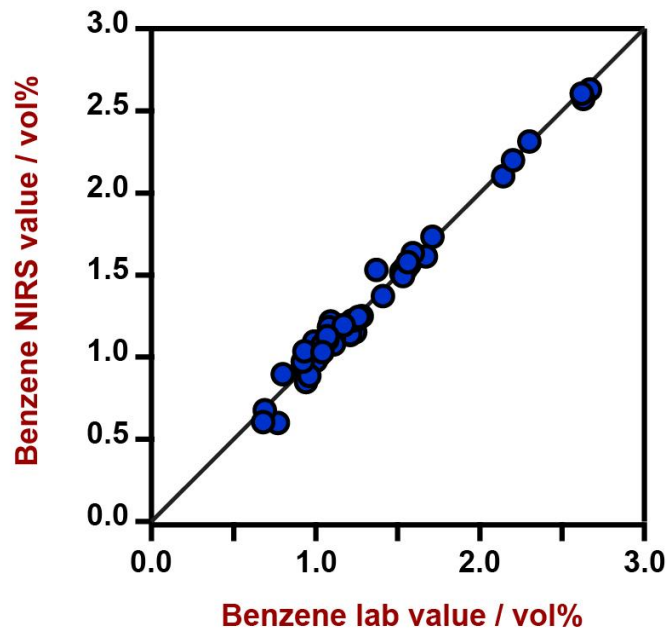
**Figure 3.** Diagrama de correlación y las respectivas cifras de mérito para la predicción del valor de RON utilizando un analizador de líquidos DS2500. El valor de laboratorio se evaluó de acuerdo con la norma ASTM D2699.

Figuras de merito	Valor
$R^2$	0,996
Error estándar de calibración	0,34
Error estándar de validación cruzada	0,36



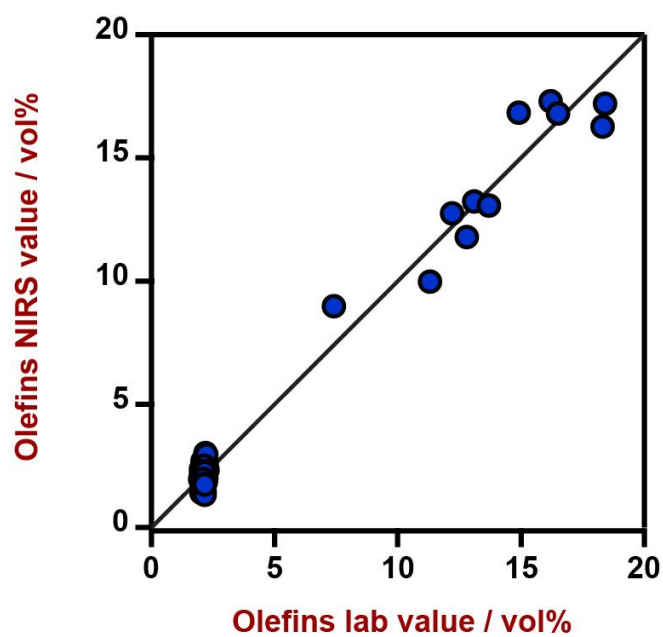
**Figure 4.** Diagrama de correlación y las respectivas cifras de mérito para la predicción del contenido de aromáticos utilizando un Analizador de Líquidos DS2500. El valor de laboratorio se evaluó mediante cromatografía de gases (GC).

Figuras de merito	Valor
$R^2$	0,999
Error estándar de calibración	0,88% vol.
Error estándar de validación cruzada	0,91% vol.



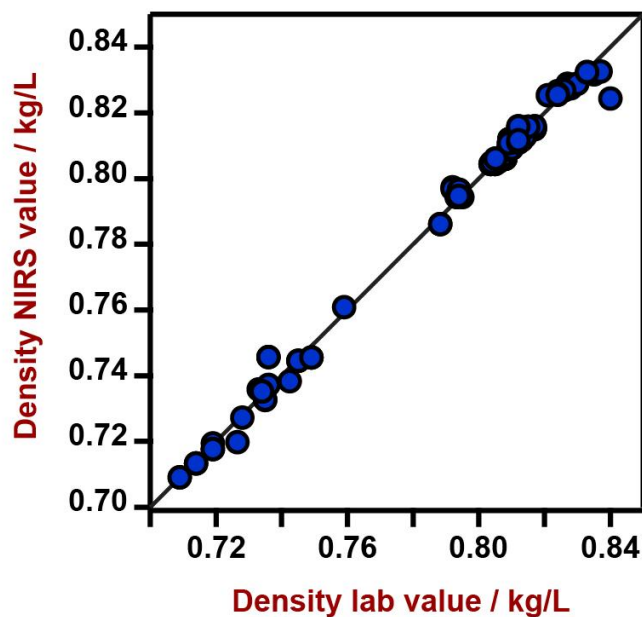
**Figure 5.** Diagrama de correlación y las respectivas cifras de mérito para la predicción del contenido de benceno usando un Analizador de Líquidos DS2500. El valor de laboratorio se evaluó mediante cromatografía de gases (GC).

Figuras de merito	Valor
$R^2$	0,984
Error estándar de calibración	0.066 vol%
Error estándar de validación cruzada	0.088 vol%



**Figure 6.** Diagrama de correlación y las respectivas cifras de mérito para la predicción del contenido de olefinas usando un Analizador de Líquidos DS2500. El valor de laboratorio se evaluó mediante cromatografía de gases (GC).

Figuras de merito	Valor
R <sup>2</sup>	0,982
Error estándar de calibración	0,71% vol.
Error estándar de validación cruzada	0,87% vol.



**Figure 7.** Diagrama de correlación y las respectivas cifras de mérito para la predicción del contenido de benceno usando un Analizador de Líquidos DS2500. El valor de laboratorio se evaluó utilizando un densímetro.

Figuras de merito	Valor
R <sup>2</sup>	0,993
Error estándar de calibración	0.0029kg/L
Error estándar de validación cruzada	0.0034kg/L

## CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación demuestra la viabilidad del analizador de líquidos Metrohm DS2500 para la determinación de RON, contenido de aromáticos, contenido de benceno, contenido de olefinas y densidad en muestras reformadas. En comparación con los métodos convencionales, la espectroscopia

Vis-NIR permite una determinación rápida (Tabla 2) sin ninguna preparación de la muestra. Se logran ganancias significativas a través del ahorro de tiempo, así como la reducción en el uso y desperdicio de químicos.



**Tabla 2.** Descripción general del tiempo de resultado para los parámetros de RON, contenido de aromáticos, contenido de benceno y contenido de olefinas mediante métodos estándar.

Parámetro	Método	Tiempo de resultado
RON	Prueba de motor CFR	30 minutos por muestra
Contenido aromático	Cromatografía de gases	~45 minutos por muestra
Contenido de benceno	Cromatografía de gases	~45 minutos por muestra
Contenido de olefina	Cromatografía de gases	~45 minutos por muestra

## CONTACT

Metrohm Hispania  
Calle Aguacate 15  
28044 Madrid

[mh@metrohm.es](mailto: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)