



Application Note AN-NIR-094

Indice de brome dans l'essence de pyrolyse

Détermination rapide de l'indice de brome sans produits chimiques

RÉSUMÉ

L'essence de pyrolyse (pygas) et ses fractions distillées contiennent souvent des niveaux élevés de composés insaturés réactifs, ce qui les rend inutilisables comme carburant. Outre la quantité de dioléfines (déterminée par la méthode Diels-Alder), la quantité totale de composants oléfiniques aliphatiques doit également être contrôlée. La méthode standard pour quantifier le degré d'insaturation (indice de brome) dans les hydrocarbures insaturés est le titrage.

Cette méthode chimique humide nécessite le

refroidissement de l'échantillon à une température inférieure à 5 °C afin de minimiser les réactions secondaires telles que l'oxydation ou la substitution. Contrairement à la méthode primaire, la spectroscopie dans le proche infrarouge (NIRS) ne nécessite aucune préparation de l'échantillon et permet de déterminer l'indice de brome en une minute. La technologie NIRS répond aux normes ASTM D8321 et D6122.

180 échantillons de pygaz ont été analysés sur un analyseur de liquide Metrohm DS2500 équipé de flacons en verre jetables. Toutes les mesures ont été effectuées en mode transmission de 400 nm à 2500 nm. La température a été réglée à 40 °C pour assurer la stabilité de l'environnement de l'échantillon. Pour des raisons de commodité, des flacons en verre jetables d'une longueur de trajet de 8 mm ont été utilisés, ce qui rendait inutile toute procédure de nettoyage. L'acquisition des données et le développement du modèle de prédiction ont été effectués à l'aide du logiciel Vision Air complete.



Figure 1. DS2500 Liquid Analyzer.

Tableau 1. Vue d'ensemble des équipements matériels et logiciels.

Equipement	Metrohm référence
DS2500 Liquid Analyzer	2.929.0010
Disposable vials, 8 mm diameter, transmission	6.7402.000
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

RÉSULTAT

Les spectres Vis-NIR obtenus (**figure 2**) ont été utilisés pour créer un modèle de prédiction pour la détermination de l'indice de brome dans le pygaz. Pour vérifier la qualité du modèle de prédiction, des

diagrammes de corrélation ont été créés pour afficher la corrélation entre la prédiction Vis-NIR et les valeurs de la méthode primaire. Les figures de mérite (FOM) respectives sont présentées à la **figure 3**.

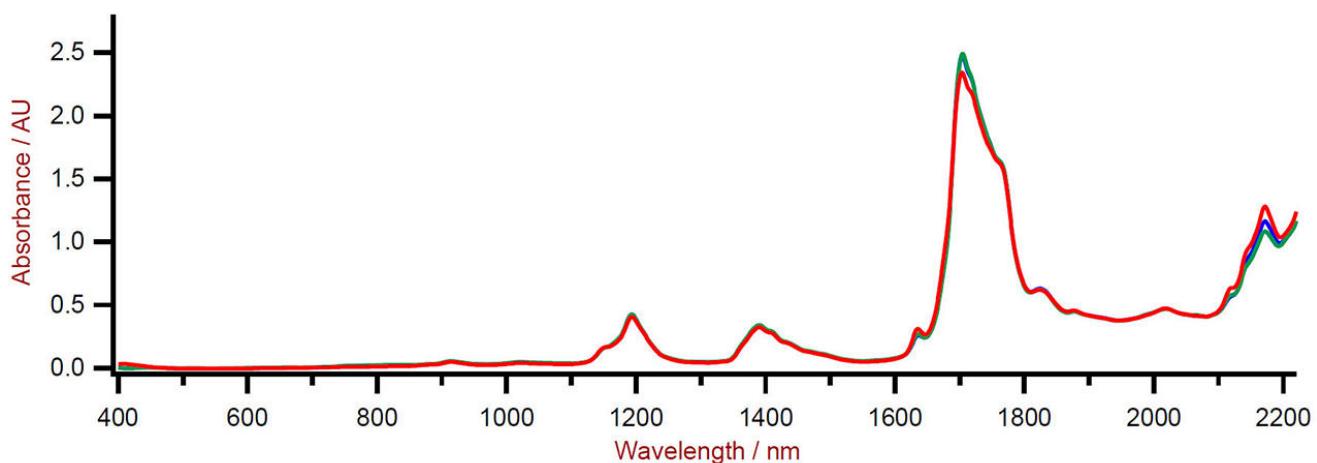


Figure 2. Sélection de différentes essences de pyrolyse Spectres Vis-NIR obtenus à l'aide d'un analyseur de liquide DS2500 et de flacons jetables de 8 mm.

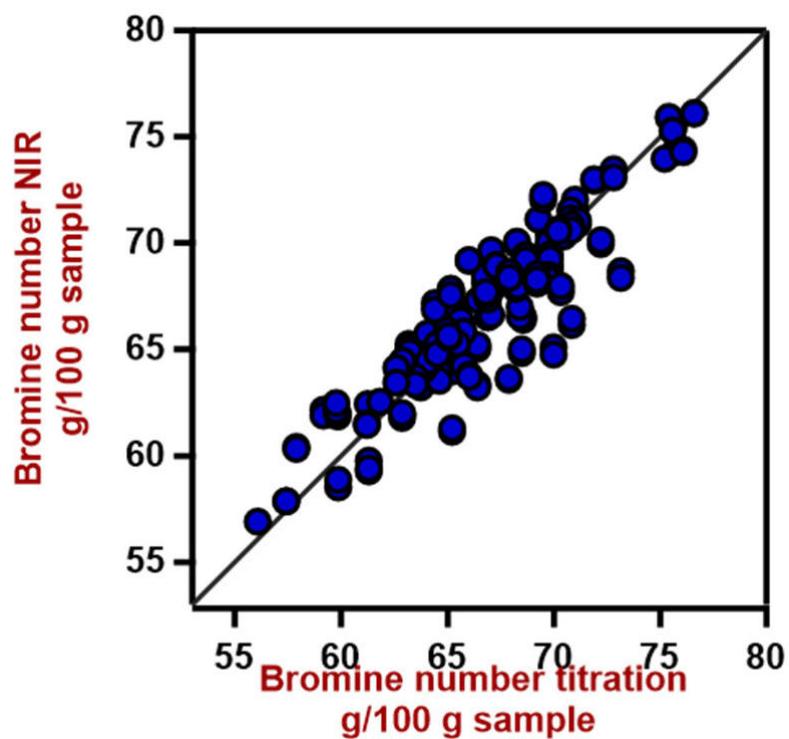


Figure 3. Diagramme de corrélation pour la prédition de l'indice de brome à l'aide d'un analyseur de liquide DS2500.

Tableau 2. Chiffres de mérite pour la prédition de l'indice de brome à l'aide d'un analyseur de liquide DS2500.

Chiffres du mérite	Valeur
R^2	0.836
Erreur standard d'étalonnage	1.84
Erreur standard de la validation croisée	1.89

CONCLUSION

Cette note d'application montre la faisabilité de la spectroscopie NIR pour l'analyse de l'indice de brome dans l'essence de pyrolyse. Contrairement à la méthode chimique humide utilisée dans la norme ASTM D1159 (figure 4 et tableau 3), la spectroscopie NIR ne nécessite aucune préparation d'échantillon ni

aucun produit chimique.

Outre l'indice de brome, d'autres paramètres de qualité tels que l'indice diénique peuvent être déterminés dans le même échantillon avec la spectroscopie NIR.

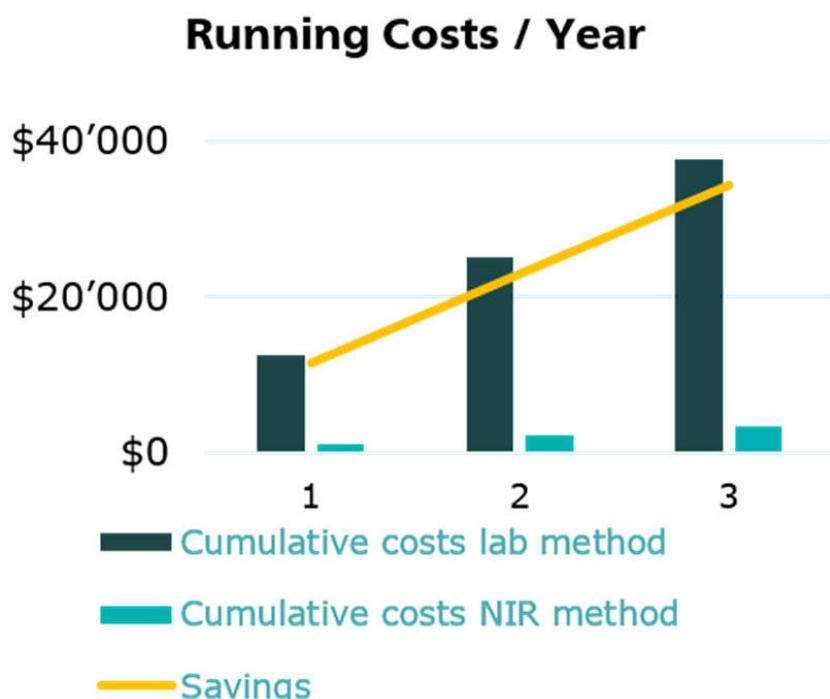


Figure 4. Comparaison des coûts de fonctionnement par an avec la méthode conventionnelle de laboratoire de chimie humide et la NIRS.

Tableau 3. Comparaison des couts et du temps nécessaire pour obtenir un résultat (détermination d'un facteur) avec la méthode conventionnelle de chimie humide en laboratoire et la NIRS.

	Méthode de laboratoire	Méthode NIR
Nombre d'analyses (par jour)	10	10
Couts des consommables et des produits chimiques/mesure	\$6	\$0.50
Temps passé par mesure	30 min	1 min
Total des couts de fonctionnement / année	\$12,533	\$1,125

CONTACT

Metrohm Suisse SA
Industriestrasse 13
4800 Zofingen

info@metrohm.ch

MATÉRIEL EXPÉRIMENTAL



DS2500 Liquid Analyzer

Spectroscopie proche infrarouge robuste pour le contrôle qualité en laboratoire et en environnement de production.

L'analyseur DS2500 Liquid Analyzer est la solution éprouvée et souple destinée aux analyses de routine d'échantillons liquides, tout au long de la chaîne de fabrication. Sa conception robuste fait du DS2500 Liquid Analyzer un appareil insensible à la poussière, à l'humidité et aux vibrations, et donc particulièrement adapté aux rudes conditions d'un environnement de production.

Le DS2500 Liquid Analyzer couvre l'ensemble de la gamme spectrale de 400 à 2500 nm, chauffe les échantillons jusqu'à 80 °C et est compatible avec divers flacons à usage unique et cuves en quartz. Le 2500 Liquid Analyzer, lequel s'adapte à vos exigences individuelles en matière d'échantillons, vous permet d'obtenir des résultats précis et reproductibles en moins d'une minute. Avec sa détection du support d'échantillon intégrée et le logiciel Vision Air intuitif, un maniement simple et sûr est également garanti pour l'utilisateur.

En présence de grandes quantités d'échantillons, l'utilisation d'une cellule à flux continu associée à un robot passeur d'échantillons Metrohm peut augmenter considérablement la productivité.



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - logiciel universel de spectroscopie.

Vision Air Complete est une solution logicielle moderne et simple d'utilisation pour une application dans un environnement réglementé.

Aperçu des avantages de Vision Air :

- Des applications logicielles individuelles avec interface utilisateur adaptée sont le garant d'un maniement intuitif et simple
- Établissement et suivi simples des procédures de travail
- Base de données SQL pour une gestion sûre et simple des données

La version Vision Air Complete (66072208) comprend toutes les applications d'assurance qualité par spectroscopie Vis-NIR :

- Application de gestion des instruments et des données
- Application de développement de méthodes
- Application d'analyse de routine

Autres solutions Vision Air Complete :

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



DS2500 - Support pour flacons à usage unique 8 mm
Support intelligent pour flacons en verre à usage unique de 8 mm de diamètre