



Application Note AN-NIR-022

Contrôle de la qualité de l'essence

Détermination rapide du RON, du MON, de l'AKI, de la teneur en aromates et de la densité

Ces dernières années, des efforts considérables ont été déployés pour réduire l'impact des carburants sur l'environnement en améliorant la qualité des carburants. Pour ce faire, les moteurs doivent être plus efficaces et la teneur en octane du carburant doit être augmentée pour permettre l'utilisation de moteurs à plus haute compression. La détermination des principaux paramètres de qualité de l'essence, à savoir l'indice d'octane recherche (RON, ASTM D2699-19), l'indice d'octane moteur (MON, ASTM D2700-19),

l'indice anti-coups (AKI), la teneur en aromatiques (ASTM D5769-15) et la densité, nécessite traditionnellement plusieurs méthodes analytiques différentes, qui sont laborieuses et requièrent un personnel qualifié. Cette note d'application démontre que l'analyseur XDS RapidLiquid, fonctionnant dans la région spectrale du visible et du proche infrarouge (Vis- NIR), constitue une solution économique et rapide pour l'analyse multiparamétrique de l'essence.

EXPERIMENTAL EQUIPMENT

Les échantillons d'essence ont été mesurés avec le XDS RapidLiquid Analyzer (RLA) en mode transmission sur toute la gamme de longueurs d'onde (400-2500 nm). L'acquisition reproductible des spectres a été réalisée à l'aide du porte-échantillon intégré à température contrôlée. Pour des raisons de commodité, des flacons jetables d'une longueur de trajet de 8 mm ont été utilisés, ce qui a rendu la procédure de nettoyage inutile. Le logiciel Metrohm Vision Air Complete a été utilisé pour l'acquisition des données et le développement du modèle de prédiction.



Figure 1. XDS RapidLiquid Analyzer et un flacon jetable de 8 mm rempli d'un échantillon d'essence.XDS RapidLiquid Analyzer et un flacon jetable de 8 mm rempli d'un échantillon d'essence.

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

| Equipement | Numéro Metrohm |
|---|----------------|
| XDS RapidLiquid Analyzer | 2.921.1410 |
| Flacons à usage unique, diamètre 8 mm, transmission | 6.7402.000 |
| Vision Air 2.0 Complete | 6.6072.208 |

RESULTS

Les spectres Vis-NIR obtenus (**figure 2**) ont été utilisés pour créer des modèles de prédiction pour la détermination de plusieurs paramètres clés du carburant. La qualité des modèles de prédiction a été évaluée à l'aide de diagrammes de corrélation, qui

montrent une corrélation entre la prédiction Vis-NIR et les valeurs de la méthode primaire. Les figures de mérite respectives (FOM) indiquent la précision attendue d'une prédiction au cours d'une analyse de routine.

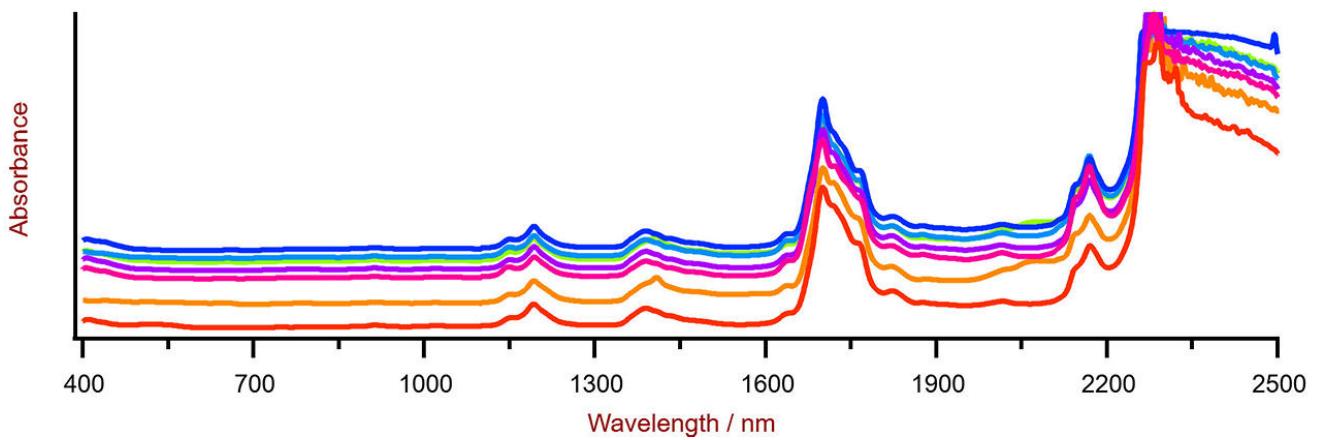


Figure 2. Cette sélection de spectres Vis-NIR de l'essence a été obtenue à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid et de flacons jetables de 8 mm. Pour des raisons d'affichage, un décalage des spectres a été appliqué.

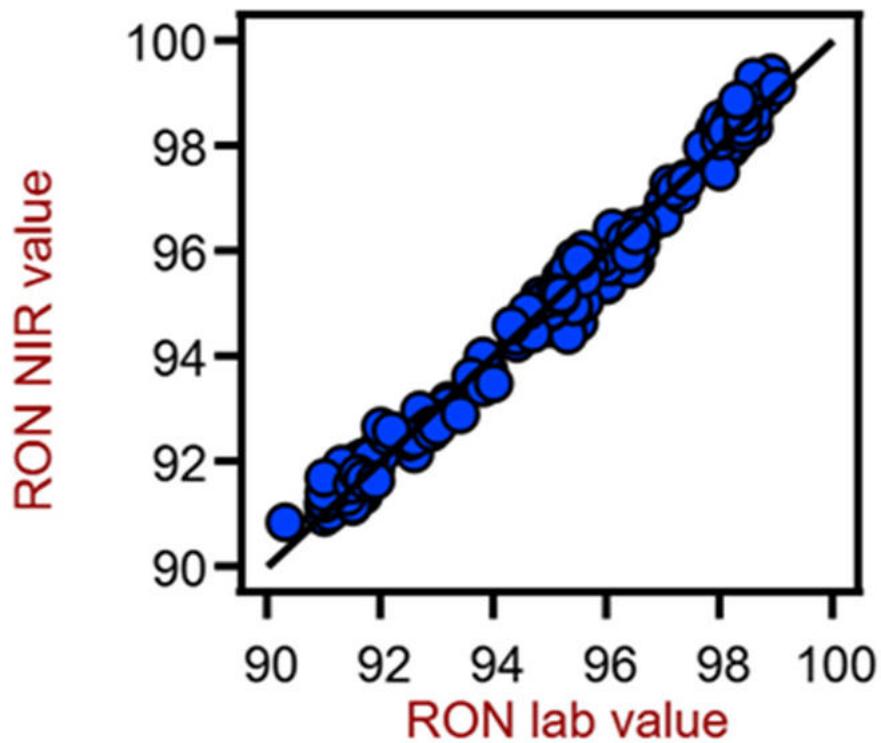


Figure 3. Diagramme de corrélation pour la prédition de la valeur RON dans l'essence à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid. Les valeurs de référence du laboratoire ont été déterminées selon des essais de moteurs CFR dans des conditions contrôlées.

Tableau 2. Chiffres de mérite pour la prédiction de la valeur RON dans l'essence à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid.

| Figures de mérite | Valeur |
|--|--------|
| R ² | 0.989 |
| Erreur standard d'étalonnage | 0.26 |
| Erreur standard de la validation croisée | 0.29 |

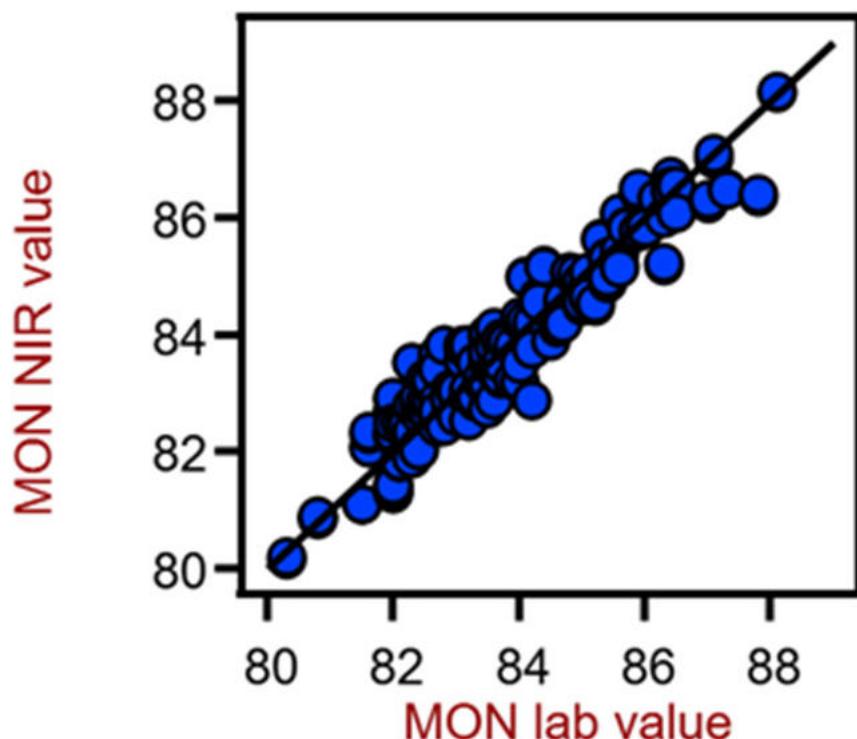


Figure 4. Diagramme de corrélation pour la prédiction de la valeur MON dans l'essence à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid. Les valeurs de référence du laboratoire ont été déterminées selon des essais de moteurs CFR dans des conditions contrôlées.

Tableau 3. Chiffres de mérite pour la prédiction de la valeur MON dans l'essence à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid.

| Figures de mérite | Valeur |
|--|--------|
| R ² | 0.889 |
| Erreur standard d'étalonnage | 0.50 |
| Erreur standard de la validation croisée | 0.53 |

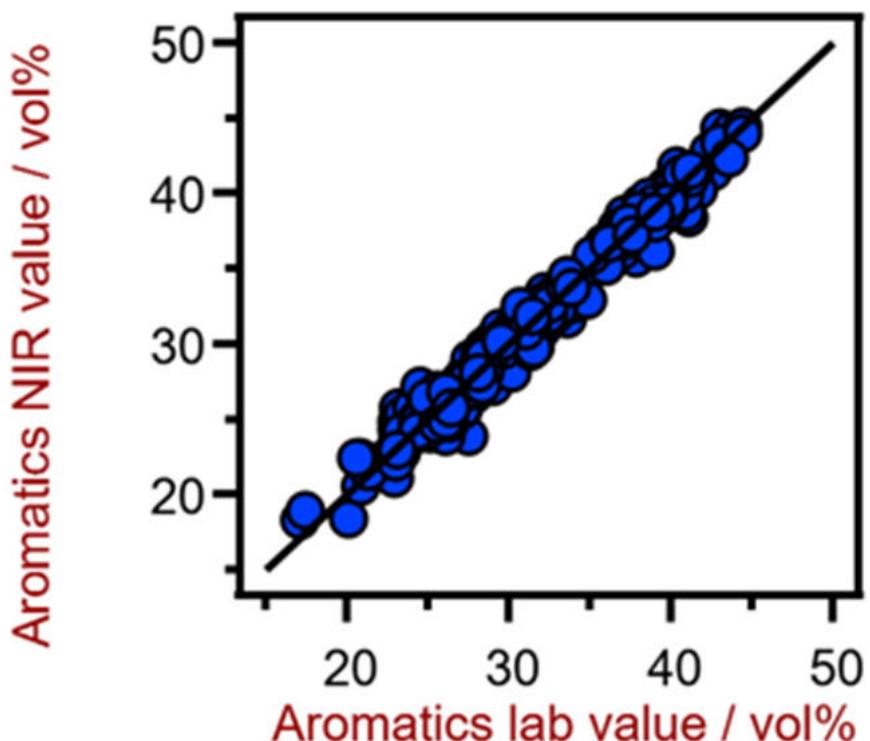


Figure 5. Diagramme de corrélation pour la prédiction de la teneur en aromatiques dans l'essence à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid. Les valeurs de laboratoire ont été déterminées à l'aide de techniques de chromatographie en phase gazeuse et de spectrométrie de masse.

Tableau 4. Chiffres de mérite pour la prédiction de la teneur en aromatiques dans l'essence à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid.

| Figures de mérite | Valeur |
|--|-----------|
| R ² | 0.974 |
| Erreur standard d'étalonnage | 0.97 vol% |
| Erreur standard de la validation croisée | 1.07 vol% |

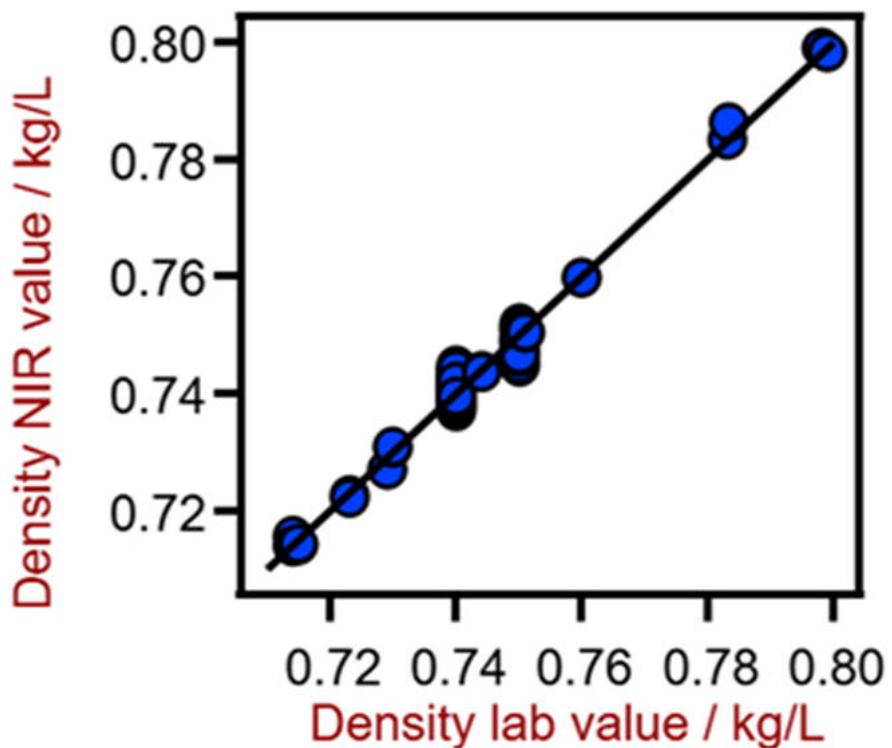


Figure 6. Diagramme de corrélation pour la prédiction de la densité de l'essence à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid. Les valeurs de laboratoire ont été déterminées à l'aide d'un densimètre.

Tableau 5. Chiffres de mérite pour la prédiction de la densité de l'essence à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid.

| Figures de mérite | Valeur |
|--|-------------|
| R^2 | 0.973 |
| Erreur standard d'étalonnage | 0.0021 kg/L |
| Erreur standard de la validation croisée | 0.0023 kg/L |

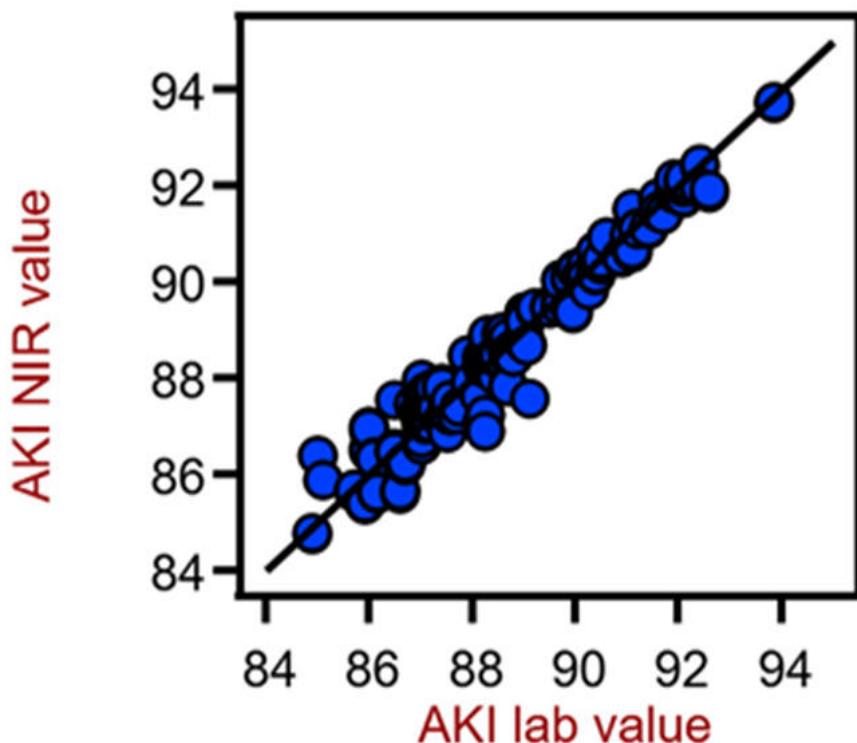


Figure 7. Diagramme de corrélation pour la prédiction de la valeur de l'IRA dans l'essence à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid. Les valeurs de référence du laboratoire ont été déterminées en fonction d'essais de moteurs CFR dans des conditions contrôlées.

Tableau 6. Chiffres de mérite pour la prédiction de la valeur AKI dans l'essence à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid.

| Figures de mérite | Valeur |
|--|--------|
| R ² | 0.945 |
| Erreur standard d'étalonnage | 0.45 |
| Erreur standard de la validation croisée | 0.46 |

CONCLUSION

Cette note d'application montre la faisabilité de la spectroscopie NIR pour l'analyse du RON, du MON, de l'AKI, de la teneur en aromatiques et de la densité. Par rapport aux méthodes chimiques par voie humide

(tableau 7), la spectroscopie NIR présente l'avantage majeur de réduire le temps nécessaire à l'obtention des résultats, puisqu'une seule mesure est effectuée en une minute.

Tableau 7. Délai d'obtention des résultats avec les méthodes d'essai conventionnelles

| Paramètres | Méthode | Délai d'obtention des résultats |
|--------------------|----------------------------------|---------------------------------|
| RON | Essai du moteur CFR | 30 minutes par échantillon |
| MON | Essai du moteur CFR | 30 minutes par échantillon |
| AKI | Essai du moteur CFR | 30 minutes par échantillon |
| Teneur en aromates | Chromatographie en phase gazeuse | 45 minutes par échantillon |

Pour consulter les informations relatives à tous les paramètres clés et obtenir les informations les plus récentes, veuillez consulter nos étalonnages préalables :

Pré-calibrations

CONTACT

Metrohm France
13, avenue du Québec - CS
90038
91978 VILLEBON
COURTABOEUF CEDEX

info@metrohm.fr



NIRS XDS RapidLiquid Analyzer

Des analyses rapides et précises de liquides et suspensions de toutes sortes.

L'analyseur NIRS XDS RapidLiquid Analyzer permet des analyses rapides et précises de formules et substances liquides. Des résultats de mesure précis obtenus par simple pression d'une touche font du NIRS XDS RapidLiquid Analyzer une solution aussi fiable que simple pour le contrôle qualité en laboratoire et en production. Les échantillons sont présentés dans des cuvettes en quartz réutilisables ou des flacons en verre à usage unique ; une chambre à échantillons tempérée assure la reproductibilité des conditions d'analyse et, par conséquent, l'exactitude des résultats de mesure.



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)