



Application Note AN-NIR-080

Contrôle de la qualité du diesel

Détermination rapide et simple de l'indice de cétane, du point d'éclair, du CFPP, du D95 et de la viscosité par NIRS

L'indice de cétane (ASTM D613), le point d'éclair (ASTM D56), le point d'obturation du filtre à froid (CFPP) (ASTM D6371), le D95 (ISO 3405) et la viscosité à 40 °C (ISO 3104) sont des paramètres clés à déterminer pour la qualité du diesel. Les méthodes d'essai primaires demandent beaucoup de travail et sont difficiles à mettre en œuvre en raison de la nécessité d'utiliser différentes méthodes d'analyse. Cette note d'application démontre que le XDS

RapidLiquid Analyzer, fonctionnant dans la région spectrale du visible et du proche infrarouge (Vis-NIR), constitue une solution économique et rapide pour la détermination simultanée de ces paramètres clés dans le diesel. La spectroscopie Vis-NIR permet d'analyser le diesel en **moins d'une minute sans préparation de l'échantillon ni utilisation de réactifs chimiques.**

MATÉRIEL EXPÉRIMENTAL

Les échantillons de diesel ont été mesurés en mode transmission avec un analyseur rapide de liquides (RLA) XDS sur toute la gamme de longueurs d'onde (400-2500 nm). La chambre à échantillon à température contrôlée intégrée a été réglée à 30 °C pour assurer un environnement stable à l'échantillon. 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 obsolète. Le logiciel Metrohm Vision Air Complete a été utilisé pour l'acquisition des données et le développement du modèle de prédiction.



Figure 1. Analyseur XDS RapidLiquid avec un flacon jetable de 8 mm rempli d'un échantillon de diesel.

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

Équipement	Metrohm référence
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

RÉSULTATS

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

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.

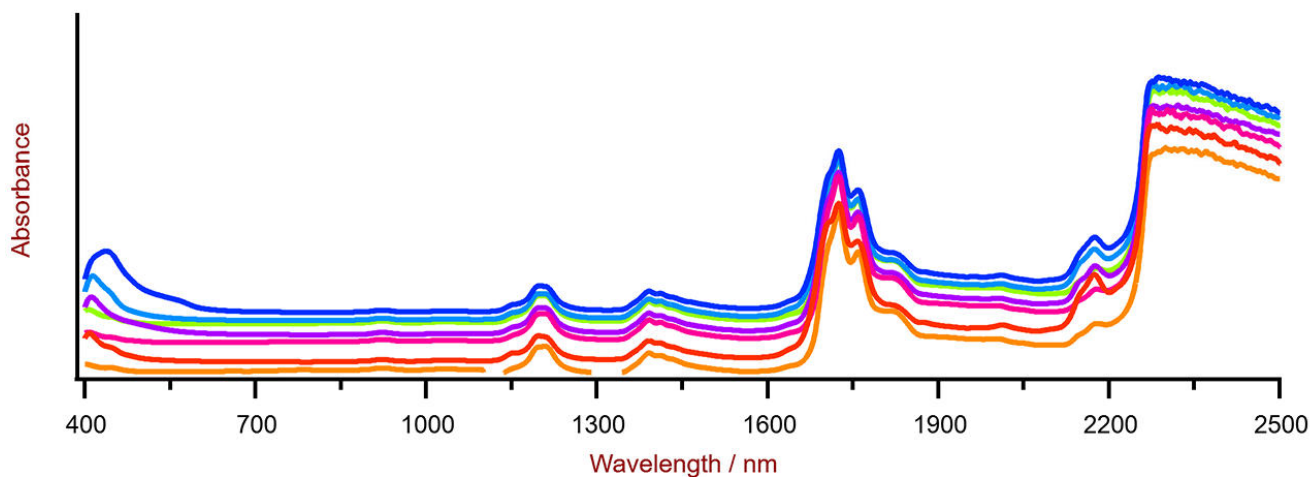


Figure 2. Selection of diesel Vis-NIR spectra obtained using a XDS RapidLiquid Analyzer and 8 mm disposable vials. For display reasons a spectra offset was applied.

RÉSULTATS

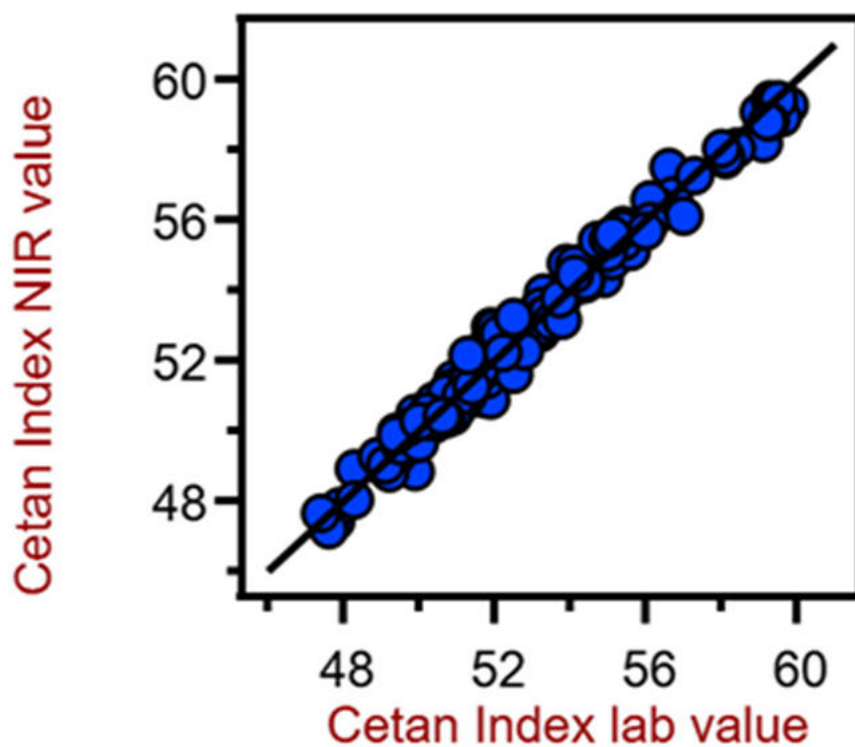


Figure 3. Correlation diagram for the prediction of the cetane index using a XDS RapidLiquid Analyzer. The cetane index lab value was calculated based on the density and distillation range.

Tableau 2. Chiffres de mérite pour la prédiction de l'indice de cétane à l'aide d'un analyseur rapide de liquides XDS.

Figures de mérite	Valeur
R^2	0.991
Erreur standard d'étalonnage	0.093
Erreur standard de la validation croisée	0.143

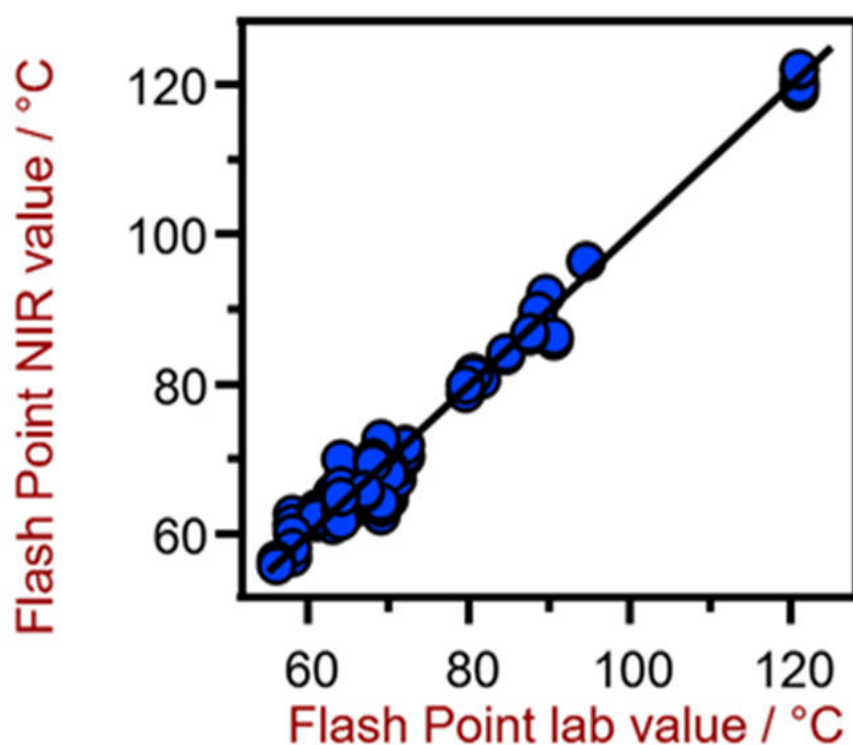


Figure 4. Diagramme de corrélation pour la prédiction du point d'éclair à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid. La valeur de laboratoire du point d'éclair a été évaluée à l'aide d'un analyseur de point d'éclair spécialisé.

Tableau 3. Chiffres de mérite pour la prédiction du point d'éclair à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid.

Figures de mérite	Valeur
R^2	0.977
Erreur standard d'étalonnage	2.22 °C
Erreur standard de la validation croisée	2.50 °C

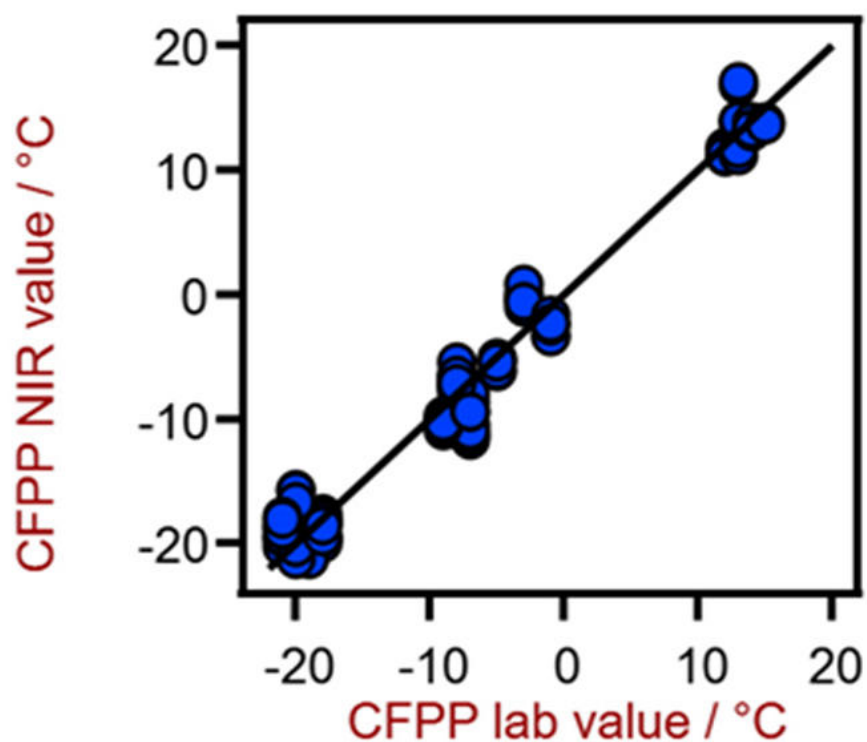


Figure 5. Diagramme de corrélation pour la prédiction du CFPP à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid. La valeur de laboratoire a été évaluée à l'aide de débitmètres.

Tableau 4. Chiffres de mérite pour la prédiction de la PCP à l'aide d'un analyseur rapide de liquides XDS.

Figures de mérite	Valeur
R^2	0.973
Erreur standard d'étalonnage	1.99 °C
Erreur standard de la validation croisée	2.24 °C

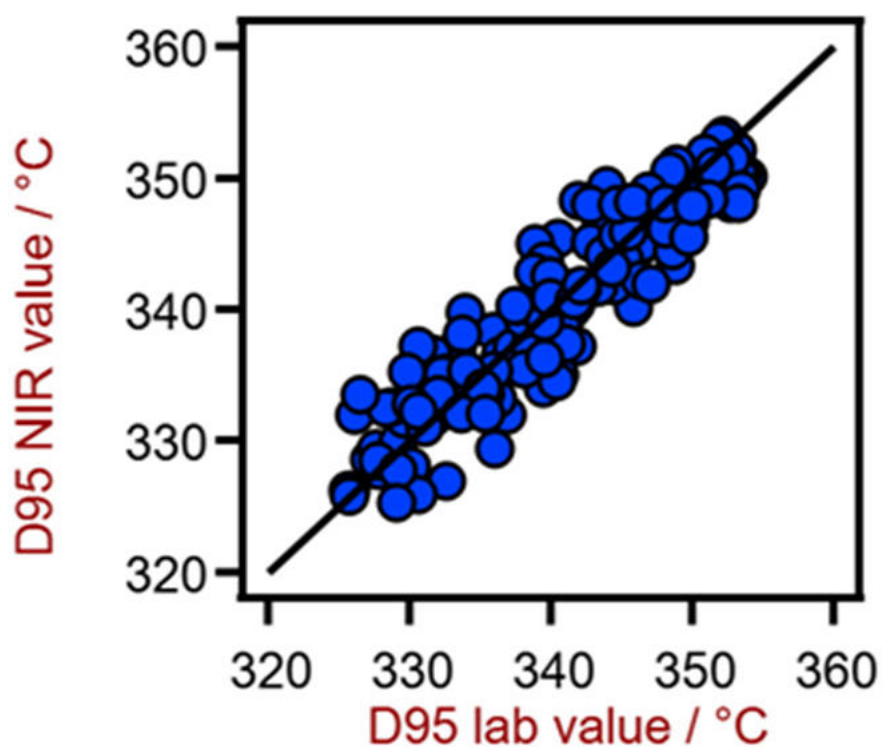


Figure 6. Diagramme de corrélation pour la prédiction de la valeur D95 à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid. La valeur de laboratoire D95 a été évaluée par distillation.

Tableau 5. Chiffres de mérite pour la prédiction du D95 à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid.

Figures de mérite	Valeur
R^2	0.861
Erreur standard d'étalonnage	3.07 °C
Erreur standard de la validation croisée	3.47 °C

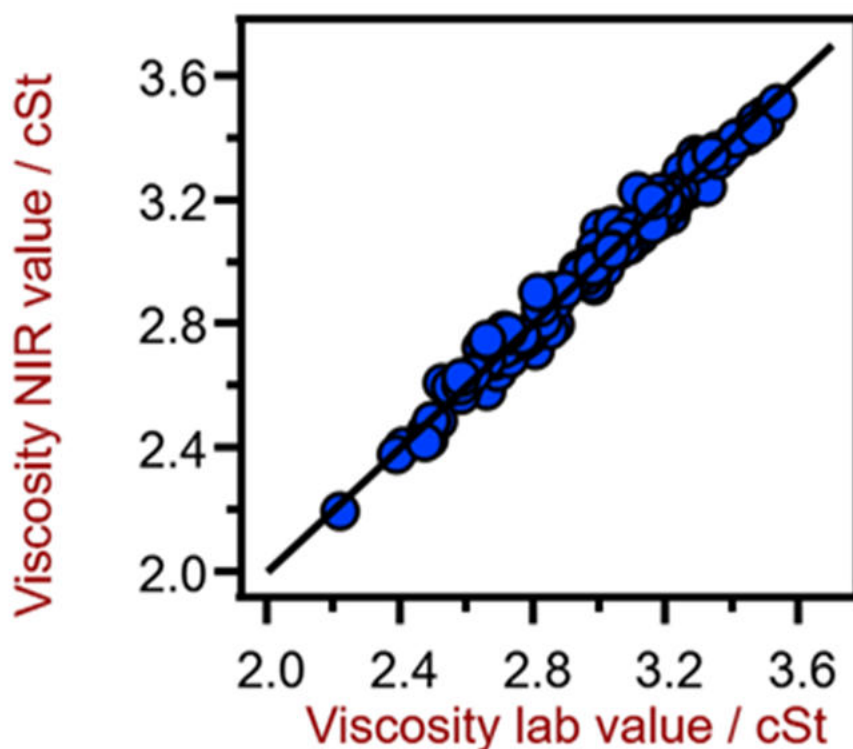


Figure 7. Diagramme de corrélation pour la prédiction de la viscosité à 40 °C à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid. La valeur de laboratoire de la viscosité a été évaluée par viscosimétrie.

Tableau 6. Chiffres de mérite pour la prédiction de la viscosité à 40 °C à l'aide d'un analyseur XDS RapidLiquid.

Figures de mérite	Valeur
R^2	0.983
Erreur standard d'étalonnage	0.038 cSt
Erreur standard de la validation croisée	0.047 cSt

CONCLUSION

Cette étude démontre la faisabilité de la spectroscopie NIR pour l'analyse des paramètres clés des échantillons de diesel. Par rapport aux méthodes standard, **aucune préparation d'échantillon n'est nécessaire**. Les échantillons sont analysés tels quels, ce qui permet une utilisation simple de la

spectroscopie NIR.

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

MATÉRIEL EXPÉRIMENTAL



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)