



Application Note AN-NIR-096

# Quality Control of Diesel

## Moisture determination within one minute using NIRS

Fuels can incorporate traces of water during the production process, in transport, and while in storage. Excessive water in fuels poses several problems. For example, elevated water content in diesel fuel promotes biological growth in storage tanks, which could lead to metal corrosion and formation of sludge and biofilms. This in turn can cause blockage of fuel filters and therefore damage vehicle fuel injection systems.

The standard specification for diesel fuel quality includes multiple parameters, but water

contamination is the biggest risk factor. According to the European Committee for Standardization, the maximal acceptable amount of water in diesel for commercialization is 200 mg/L (ppm) (EN 590). Usually, this is determined by Karl Fischer (KF) titration, yet this method requires chemicals and takes about five minutes to perform. This Application Note describes how near-infrared spectroscopy (NIRS) is a faster and more cost-efficient alternative to KF titration for the **prediction of water content** in diesel fuel.

## EXPERIMENTAL EQUIPMENT

Samples of diesel with varying water contents (from 103 to 379 mg/L) were measured with a DS2500 Liquid Analyzer in transmission mode (400–2500 nm). Reproducible spectrum acquisition was achieved using the built-in temperature control at 40 °C. For convenience, disposable vials with a pathlength of 8 mm were used, which made cleaning of the sample vessels unnecessary. The Metrohm software package Vision Air Complete was used for all data acquisition and prediction model development.



**Figure 1.** DS2500 Liquid Analyzer and a sample filled in a disposable vial.

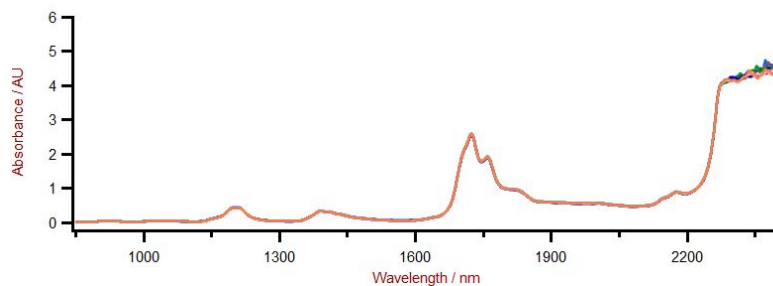
**Table 1.** Hardware and software equipment overview

Equipment	Metrohm number
DS2500 Liquid Analyzer	2.929.0010
DS2500 Holder 8 mm vials	6.7492.020
Disposable vials, 8 mm	6.7402.000
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

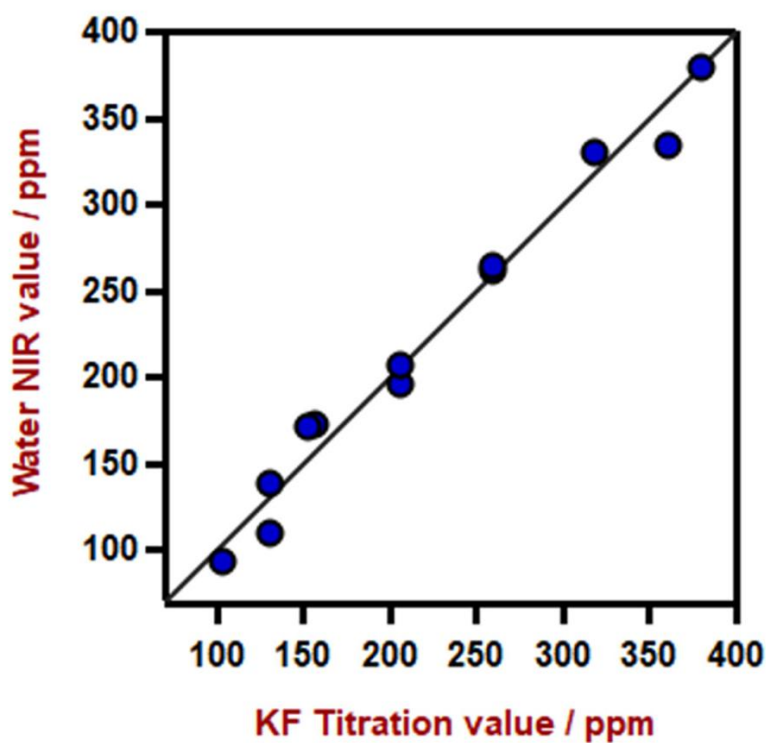
## RESULT

The obtained Vis-NIR spectra (**Figure 2**) were used to create a prediction model for quantification of the moisture content in diesel samples. The quality of the prediction model was evaluated using the correlation diagram, which displays a very high correlation

between the Vis-NIR prediction and the reference values. The respective figures of merit (FOM) display the expected precision of a prediction during routine analysis.



**Figure 2.** Vis-NIR spectra of diesel samples analyzed on a DS2500 Liquid Analyzer.



**Figure 3.** Correlation diagram for the prediction of water content in diesel using a DS2500 Liquid Analyzer. The lab value was evaluated using KF titration.

**Table 2.** Figures of merit for the prediction of water content in diesel using a DS2500 Liquid Analyzer.

Figures of merit	Value
R <sup>2</sup>	0.9776
Standard error of calibration	16 ppm
Standard error of cross-validation	21 ppm

## CONCLUSION

This application note demonstrates the feasibility to determine a key parameter of the quality control of diesel fuel (water content) with NIR spectroscopy. The main advantages of Vis-NIR spectroscopy over wet

chemical methods are that running costs are significantly lower and time-to-result is significantly reduced. Additionally, no chemicals are required and the technique is non-destructive to samples.

**Table 2.** Time to result overview for KF titration

Parameter	Method	Time to result
Water	Karl Fischer titration	5 minutes

Internal reference: AW NIR CH-0064-112021

## CONTACT

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

[info@metrohm.fr](mailto:info@metrohm.fr)



### 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.



### DS2500 - Support pour flacons à usage unique 8 mm

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



## 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)