



Application Note AN-NIR-114

Determinazione di RON, aromatici, benzene, olefine e densità nel riformato mediante NIRS

Analisi multiparametrica con risultati consegnati in un minuto

I raffinatori utilizzano il processo di reforming catalitico per produrre riformato ad alto numero di ottano. Questo riformato viene utilizzato per miscele di benzina premium o materie prime petrolchimiche. La determinazione dei parametri di qualità chiave del riformato, vale a dire il numero di ottano di ricerca (RON, ASTM D2699), il contenuto aromatico (ASTM D5769), il contenuto di benzene, il contenuto di

olefine e la densità, richiede metodi convenzionali lunghi e laboriosi.

Al contrario, tutti questi parametri (e altri) possono essere misurati mediante spettroscopia nel vicino infrarosso (NIR). Metrohm DS2500 Liquid Analyzer, che opera nella regione spettrale del visibile e del vicino infrarosso (Vis-NIR), fornisce risultati entro un minuto senza alcuna preparazione del campione.

STRUMENTI DI ANALISI

507 diversi campioni di riformato sono stati misurati su Metrohm DS2500 Liquid Analyzer (**Figura 1**). Tutte le misurazioni sono state eseguite in modalità di trasmissione da 400 a 2500 nm utilizzando fiale monouso da 8 mm. Il controllo della temperatura dell'analizzatore è stato impostato a 35 °C per tutte le

misurazioni per garantire le migliori prestazioni e la massima qualità dei dati. L'acquisizione dei dati e lo sviluppo del modello di previsione sono stati eseguiti con il pacchetto software Metrohm Vision Air Complete.



Figure 1. Metrohm DS2500 Liquid Analyzer utilizzato per la determinazione del numero di ottano di ricerca (RON), aromatici, benzene, olefine e densità nel riformato.

Tabella 1. Panoramica delle apparecchiature hardware e software.

Strumento	Codice articolo
DS2500 Liquid Analyzer	2.929.0010
DS2500 Holder 8 mm vials	6.7492.020
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

RISULTATO

Gli spettri Vis-NIR misurati (Figura 2) sono stati utilizzati per creare un modello di previsione per la quantificazione di tutti e cinque i parametri. La qualità dei modelli di previsione è stata valutata utilizzando diagrammi di correlazione che mostrano un'elevata

correlazione ($R^2 > 0,98$) tra la previsione Vis-NIR e i metodi di riferimento per tutti i parametri. Le rispettive figure di merito (FOM) mostrano la precisione attesa e confermano la fattibilità durante l'analisi di routine (Figure 3-7).

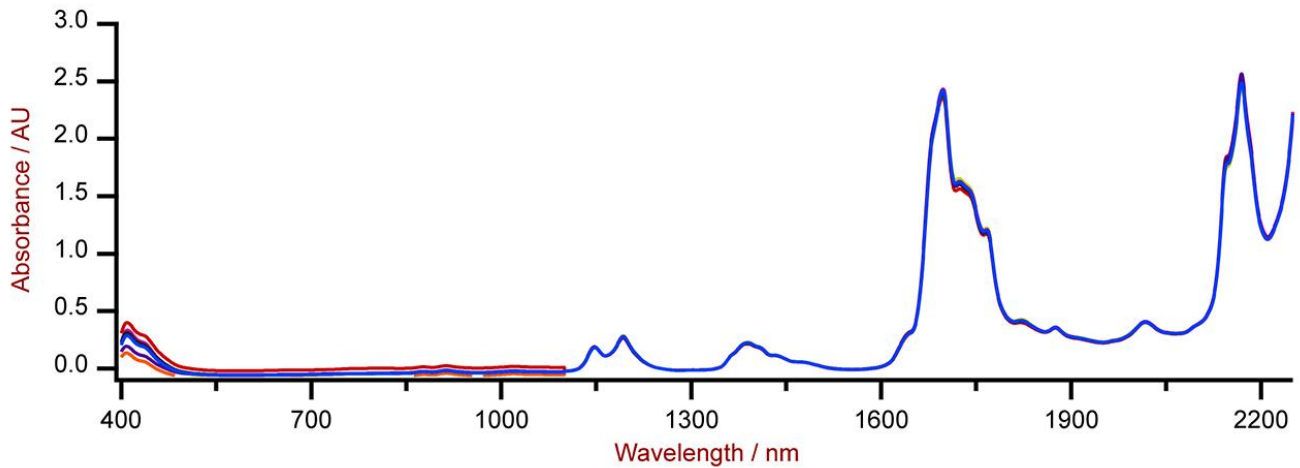


Figure 2. Selezione degli spettri Vis-NIR di campioni di riformato analizzati su Metrohm DS2500 Liquid Analyzer con fiale da 8 mm.

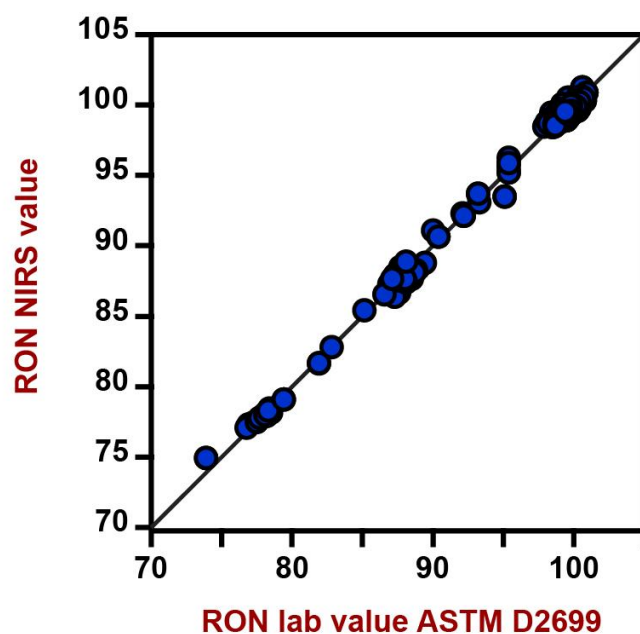


Figure 3. Diagramma di correlazione e rispettive figure di merito per la previsione del valore RON utilizzando DS2500 Liquid Analyzer. Il valore di laboratorio è stato valutato secondo ASTM D2699.

Figure di Merito	Valore
R^2	0.996
Standard Error of Calibration	0.34
Standard Error of Cross-Validation	0.36

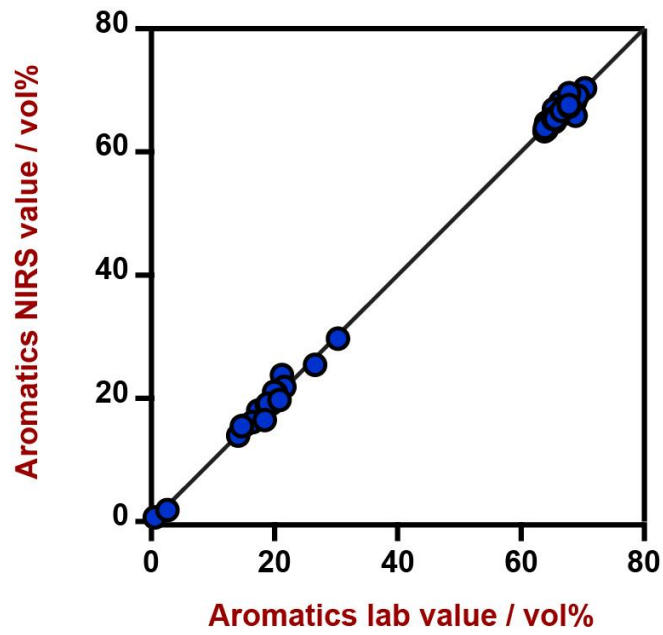


Figure 4. Diagramma di correlazione e relative figure di merito per la previsione del contenuto aromatico utilizzando un DS2500 Liquid Analyzer. Il valore di laboratorio è stato valutato mediante gascromatografia (GC).

Figure di Merito	Valore
R^2	0.999
Standard Error of Calibration	0.88 vol%
Standard Error of Cross-Validation	0.91 vol%

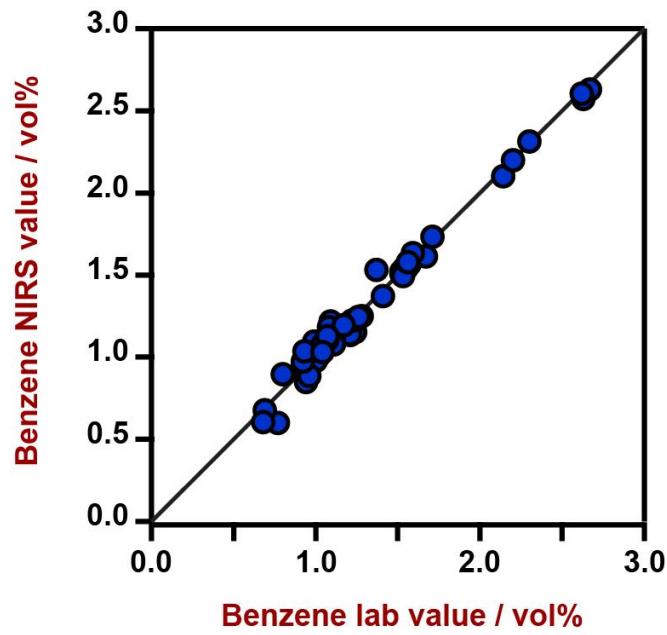


Figure 5. Diagramma di correlazione e rispettive figure di merito per la previsione del contenuto di benzene utilizzando DS2500 Liquid Analyzer. Il valore di laboratorio è stato valutato mediante gascromatografia (GC).

Figure di Merito	Valore
R^2	0.984
Standard Error of Calibration	0.066 vol%
Standard Error of Cross-Validation	0.088 vol%

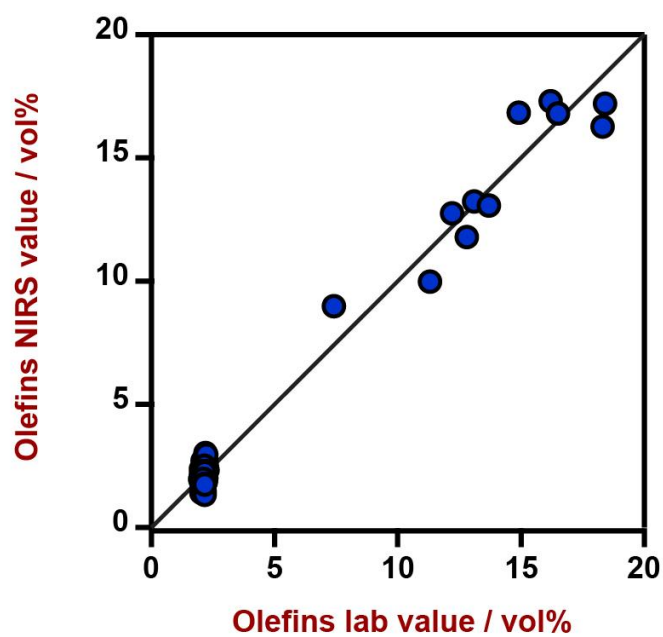


Figure 6. Diagramma di correlazione e rispettive figure di merito per la previsione del contenuto di olefine utilizzando DS2500 Liquid Analyzer. Il valore di laboratorio è stato valutato mediante gascromatografia (GC).

Figure di Merito	Valore
R^2	0.982
Standard Error of Calibration	0.71 vol%
Standard Error of Cross-Validation	0.87 vol%

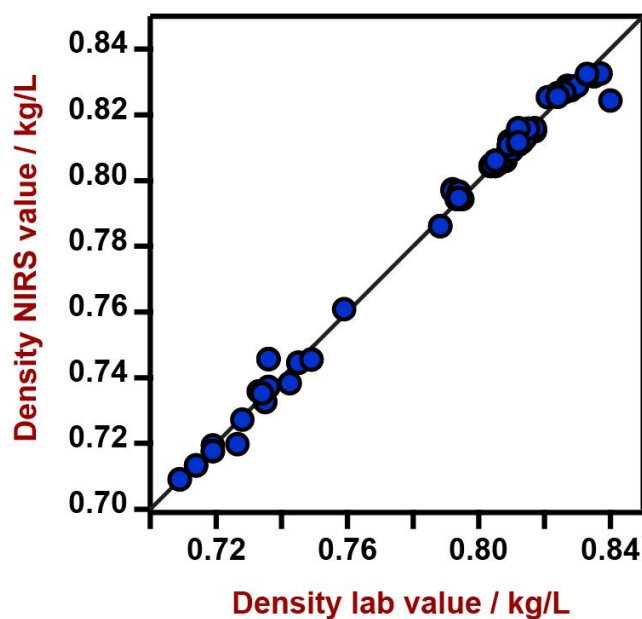


Figure 7. Diagramma di correlazione e rispettive figure di merito per la previsione del contenuto di benzene utilizzando DS2500 Liquid Analyzer. Il valore di laboratorio è stato valutato utilizzando un densimetro.

Figure di Merito	Valore
R ²	0.993
Standard Error of Calibration	0.0029 kg/L
Standard Error of Cross-Validation	0.0034 kg/L

CONCLUSIONE

Questa Application Note dimostra la fattibilità dell'analizzatore di Metrohm DS2500 Liquid Analyzer per la determinazione di RON, contenuto aromatico, contenuto di benzene, contenuto di olefina e densità in campioni di riformato. Rispetto ai metodi

convenzionali, la spettroscopia Vis-NIR consente una determinazione rapida (**Tabella 2**) senza alcuna preparazione del campione. Guadagni significativi si ottengono grazie al risparmio di tempo e alla riduzione dell'uso e dei rifiuti chimici.

Tabella 2. Tempo per ottenere una panoramica dei parametri di RON, contenuto aromatico, contenuto di benzene e contenuto di olefine mediante metodi standard.

Parametro	Metodo	Tempo del risultato
RON	CFR engine test	30 minuti per campione
Aromatic content	Gas Chromatography	45 minuti per campione
Benzene content	Gas Chromatography	45 minuti per campione
Olefin content	Gas Chromatography	45 minuti per campione

CONTACT

Metrohm Italiana Srl
Via G. Di Vittorio, 5
21040 Origgio (VA)

info@metrohm.it

CONFIGURAZIONE



DS2500 Liquid Analyzer

Robusta spettroscopia nel vicino infrarosso per il controllo qualità in laboratorio e in campo produttivo.

Il DS2500 Liquid Analyzer è la soluzione comprovata e flessibile per l'analisi di routine di sostanze solide, creme ed eventualmente anche liquidi lungo tutta la catena produttiva. Il design robusto rende il DS2500 Liquid Analyzer insensibile a polvere, umidità e vibrazioni e quindi ideale per l'utilizzo in ambienti di produzione difficili.

Il DS2500 Liquid Analyzer copre l'intero intervallo spettrale da 400 fino a 2500 nm, riscalda i campioni fino a 80 °C ed è compatibile con diversi vial monouso e cuvette in quarzo. Essendo quindi adattabile alle proprie personali esigenze in base al campione, il DS2500 Liquid Analyzer vi aiuta a ottenere risultati precisi e riproducibili in meno di un minuto. Con l'ausilio del riconoscimento del supporto del campione integrato e del software Vision Air intuitivo l'utente ha la garanzia di un uso sicuro e semplice.

In caso di quantità più grandi di campioni, è possibile aumentare notevolmente la produttività mediante l'impiego di celle di flusso in combinazione con un robot per campioni Metrohm.

DS2500 Supporto per vial monouso da 8 mm

Supporto intelligente per vial monouso in vetro con diametro di 8 mm





Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - Software universale per la spettroscopia.

Vision Air Complete è una soluzione software moderna e facile da utilizzare per l'impiego in ambiente regolamentato.

Panoramica dei vantaggi di Vision Air:

- le applicazioni software individuali con interfacce utente personalizzate garantiscono un funzionamento intuitivo e semplice
- semplice creazione e manutenzione dei protocolli
- banca dati SQL per una gestione dei dati sicura e semplice

La versione Vision Air Complete (66072208) include tutte le applicazioni per la garanzia della qualità tramite spettroscopia Vis-NIR:

- applicazione per la gestione degli strumenti e dei dati
- applicazione per lo sviluppo di metodi
- applicazione per l'analisi di routine

Altre soluzioni Vision Air Complete:

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