



Application Note AN-NIR-113

# Research octane number (RON) determination in isomerate

NIRS offers users fast, efficient analysis with low running costs

Light naphtha isomerization is used by refineries to produce high-octane isomerate products which meet current gasoline specifications. Isomerization increases the octane value of light naphtha by increasing the degree of branching of paraffin molecules. The research octane number (RON) of the target product is dependent on various plant production parameters (e.g., temperature or hydrogen to hydrocarbon ratio). To optimize the plant

process, a reliable and quick analytical method is key.

The standard method to determine RON in isomerate is with expensive and maintenance-intensive engines. In contrast to this, the research octane number can also be analyzed by near-infrared spectroscopy (NIRS). NIRS provides accurate results within one minute without the need for any sample preparation or chemicals.

## EXPERIMENTAL EQUIPMENT

63 different isomerate samples with varying RON values were measured with the Metrohm DS2500 Liquid Analyzer (**Figure 1**) in transmission mode over the full wavelength range of 400–2500 nm. The built-in temperature controller ensured measurement stability with a constant sample temperature of 35 ° C. For

convenience, disposable vials with a pathlength of 8 mm were used which made a cleaning procedure obsolete. The Vision Air Complete software package from Metrohm was used for data acquisition and prediction model development.

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

Equipment	Article number
DS2500 Liquid Analyzer	2.929.0010
DS2500 Holder 8 mm vials	6.7492.020
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

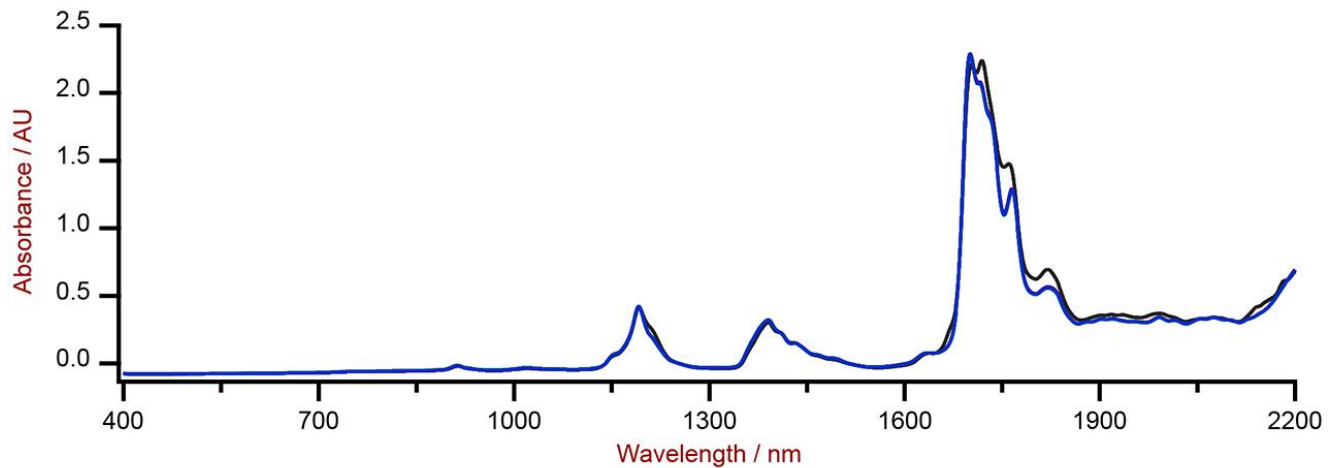


**Figure 1.** Metrohm DS2500 Liquid Analyzer used for the determination of research octane number (RON) in isomerate samples.

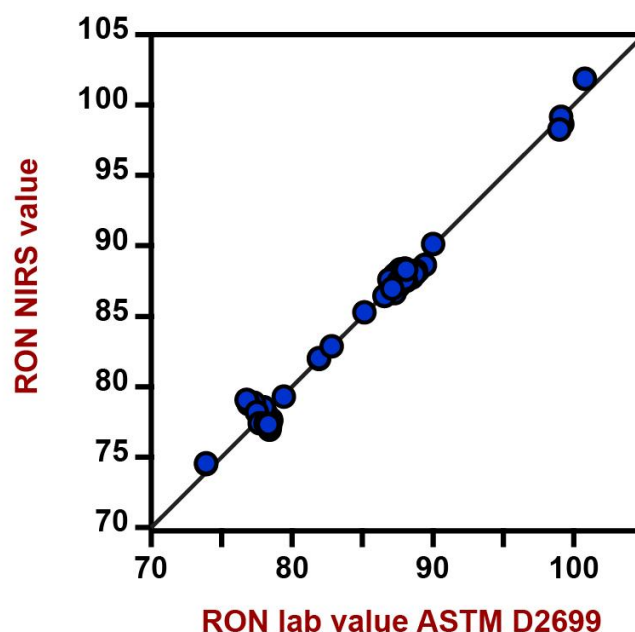
## RESULT

The obtained Vis-NIR spectra (Figure 2) were used to create a prediction model for the quantification of research octane number in isomerate. The quality of the prediction models was evaluated using correlation diagrams based on the cross-validation algorithm. A value of  $R^2 >$

0.98 displays a high correlation between the Vis-NIR prediction and the reference ASTM method. The respective figures of merit (FOM) display the expected precision during routine analysis (Figure 3).



**Figure 2.** Selection of Vis-NIR spectra of isomerate samples analyzed on a DS2500 Liquid Analyzer with 8 mm vials.



**Figure 3.** Correlation diagram and the respective figures of merit for the prediction of RON value using a DS2500 Liquid Analyzer. The lab value was evaluated according to ASTM D2699.

Figures of Merit	Value
R <sup>2</sup>	0.986
Standard Error of Calibration	0.73
Standard Error of Cross-Validation	0.76

## CONCLUSION

This Application Note demonstrates the feasibility of NIR spectroscopy for the analysis of RON in isomerate samples. In comparison to the conventional method, the time to result (Table

2) is a major advantage of Vis-NIR spectroscopy. With NIRS, a single measurement is performed within one minute, while the CFR engine test is much longer.

**Table 2.** Time to result for the determination of RON value with the standard reference method ASTM D2699.

Parameter	Method	Time to result
RON	CFR engine test	~30 minutes per sample

## CONTACT

メトロームジャパン株式会社  
143-0006 東京都大田区平  
和島6-1-1  
null 東京流通センター アネ  
ックス9階

metrohm.jp@metrohm.jp

## CONFIGURATION



### DS2500 Liquid Analyzer

ラホおよび生産環境における品質管理用の堅牢な近赤外分光法。

NIRS DS2500 Liquid Analyzerは、生産チェーン全体に沿った液体のルーチン分析に実績のあるフレキシブルなソリューションです。頑丈な仕様により、NIRS DS2500 Liquid Analyzerは粉塵、湿気、および振動に強い為、過酷な生産環境での使用に理想的です。

DS2500 Liquid Analyzer は400~2500 nmのスペクトル範囲全体をカバーし、サンプルを80°Cまで加熱し、様々な使い捨てハイアルやクオーツキュベットとの互換性を有します。このようにして個々のサンプル要件に対応し得るDS2500 Liquid Analyzerは、1分未満で正確かつ再現性ある結果を得られるようサポートします。さらに一体型のサンプルホルダ検出、および説明不要のVision Airソフトウェアを用いることで、ユーザーが簡単かつ安全に操作できることが保証されます。

サンプル量が多い場合、Metrohmサンプルロケットと組み合わせられたフローセルの導入によって、生産性を著しく向上させることができます。





### 8mmDS2500

直径8 mmのカラス製使い捨てハイアル用インテリジェントホルター



### Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - 汎用性に優れた分光法ソフトウェア。

Vision Air Complete は、規制環境下での使用のための、操作の容易な最新のソフトウェアソリューションです。

Vision Air の利点の概要:

- 調整済みのユーザーインターフェースを伴う個別のソフトウェアアプリケーションにより、直観的かつ容易な操作が保証されます。
- 作業手順の容易な作成およびメンテナンス
- 安全かつ容易なデータ管理のための SQL データベース

バージョン Vision Air Complete (66072208) には、可視近赤外分光法を用いた品質管理のための全てのアプリケーションが含まれています:

- 装置管理およびデータ管理のためのアプリケーション
- メソッド開発のためのアプリケーション
- ルーチン分析のためのアプリケーション

その他の Vision Air Complete ソリューション:

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