



Application Note AN-NIR-022

Control de calidad de gasolina

Determinación rápida de RON, MON, AKI, contenido aromático y densidad

En los últimos años, se ha dado un impulso significativo a la reducción de los impactos ambientales de los combustibles mejorando su calidad. Esto requiere que los motores sean más eficientes, además de aumentar el octanaje del combustible para poder utilizar motores de mayor compresión. La determinación de los parámetros clave de calidad de la gasolina, a saber, el índice de octano research (RON, ASTM D2699-19), el índice de octano motor (MON, ASTM D2700-19), el índice

antidetonante (AKI), el contenido de aromáticos (ASTM D5769-15) y la densidad, requiere convencionalmente varios métodos analíticos diferentes, que son laboriosos y necesitan personal cualificado. Esta nota de aplicación demuestra que el XDS RapidLiquid Analyzer, que opera en la región espectral visible e infrarroja cercana (Vis-NIR), proporciona una solución rentable y rápida para el análisis multiparamétrico de la gasolina.

EQUIPO EXPERIMENTAL

Las muestras de gasolina se midieron con el XDS RapidLiquid Analyzer (RLA) en modo de transmisión en todo el rango de longitud de onda (400–2500 nm). La adquisición del espectro reproducible se logró utilizando el portamuestras de temperatura controlada incorporado. Por conveniencia, se utilizaron viales desechables con una longitud de paso de 8 mm, lo que hizo innecesario un procedimiento de limpieza. El paquete de software Metrohm Vision Air Complete se utilizó para la adquisición de datos y el desarrollo del modelo de predicción.



Figure 1. Analizador XDS RapidLiquid y vial desechable de 8 mm lleno de una muestra de gasolina.

Tabla 1. Descripción general del equipo de hardware y software

Equipo	Número de metrohmios
Analizador de líquidos XDS Rapid	2.921.1410
Viales desechables, 8 mm diámetro, transmisión	6.7402.000
Vision Air 2.0 completo	6.6072.208

RESULTADOS

Los espectros Vis-NIR obtenidos (**Figura 2**) se utilizaron para crear modelos de predicción para la determinación de varios parámetros clave del combustible. La calidad de los modelos de predicción se evaluó mediante diagramas de correlación, que

muestran una correlación entre la predicción de Vis-NIR y los valores del método principal. Las respectivas cifras de mérito (FOM) muestran la precisión esperada de una predicción durante el análisis de rutina.

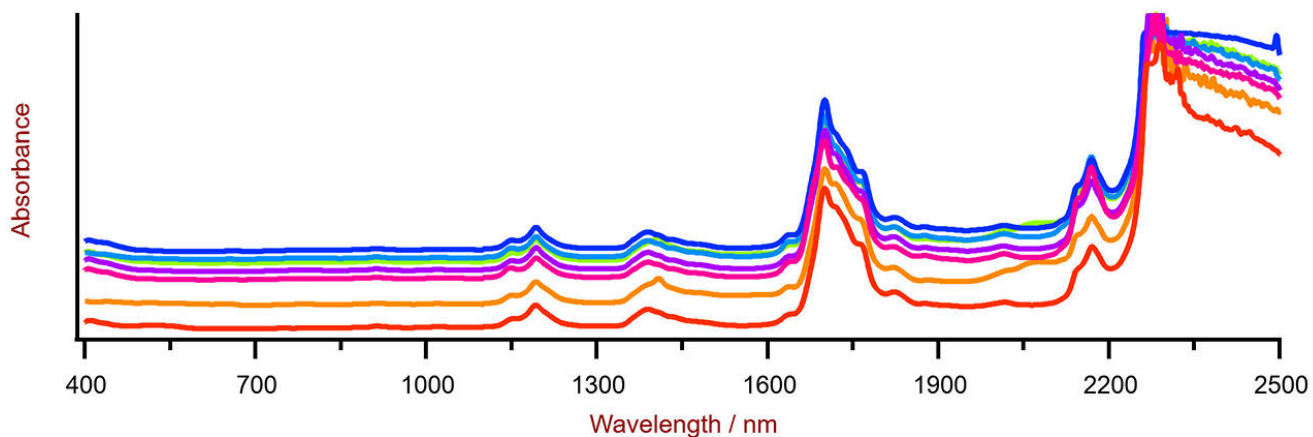


Figure 2. Esta selección de espectros Vis-NIR de gasolina se obtuvo utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer y viales desechables de 8 mm. Por razones de visualización, se aplicó una compensación de espectros.

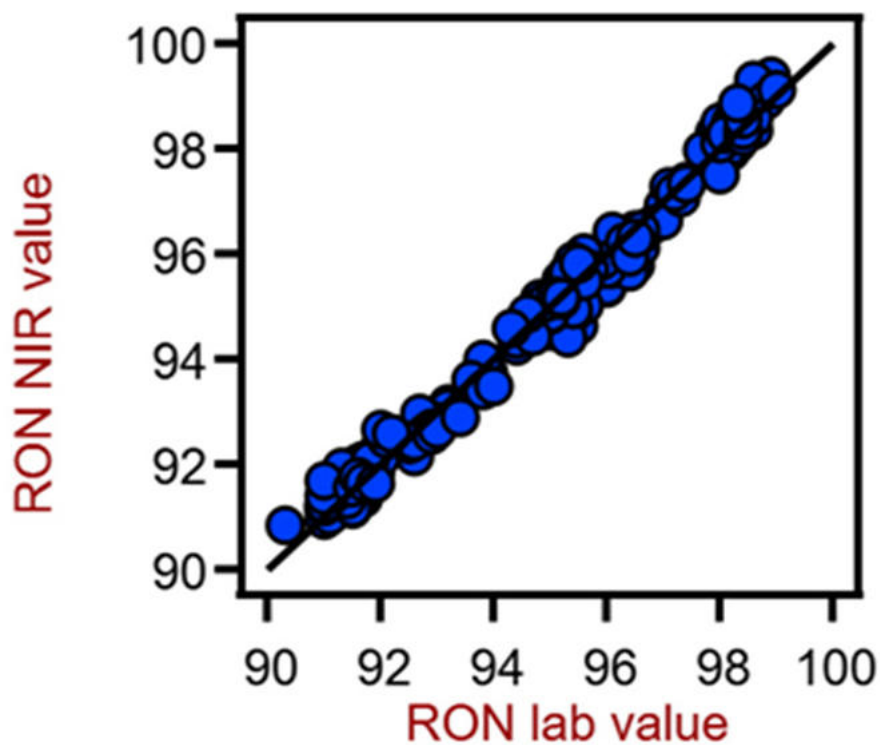


Figure 3. Diagrama de correlación para la predicción del valor de RON en gasolina usando un XDS RapidLiquid Analyzer. Los valores de laboratorio de referencia se determinaron de acuerdo con las pruebas del motor CFR en condiciones controladas.

Tabla 2. Cifras de mérito para la predicción del valor de RON en gasolina utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer.

Figuras de merito	Valor
R ²	0,989
Error estándar de calibración	0,26
Error estándar de validación cruzada	0,29

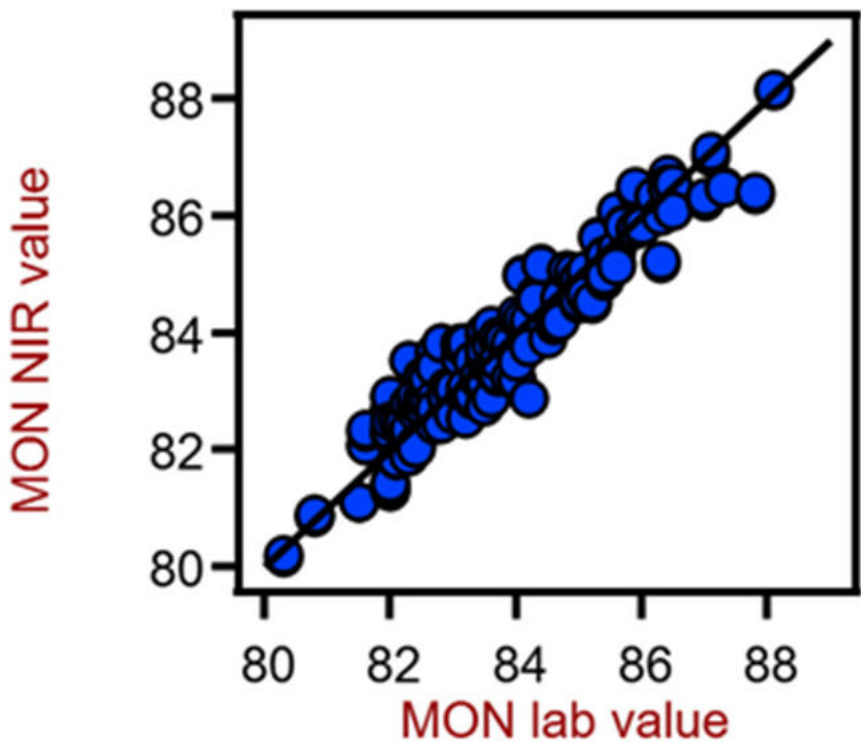


Figure 4. Diagrama de correlación para la predicción del valor MON en gasolina usando un XDS RapidLiquid Analyzer. Los valores de laboratorio de referencia se determinaron de acuerdo con las pruebas del motor CFR en condiciones controladas.

Tabla 3. Cifras de mérito para la predicción del valor MON en gasolina utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer.

Figuras de merito	Valor
R ²	0,889
Error estándar de calibración	0,50
Error estándar de validación cruzada	0,53

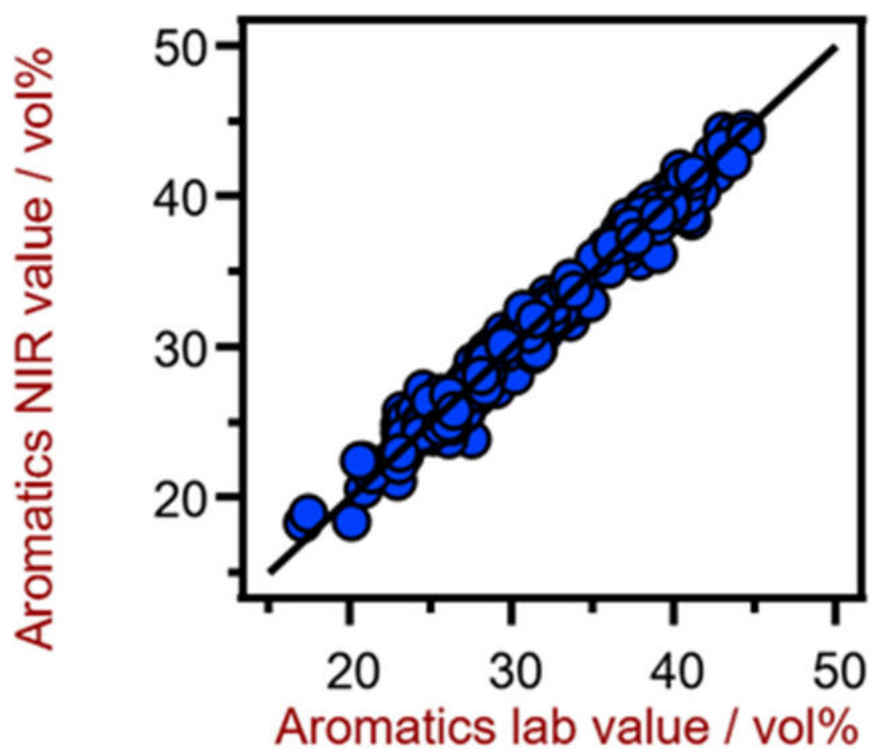


Figure 5. Diagrama de correlación para la predicción del contenido de aromáticos en gasolina usando un XDS RapidLiquid Analyzer. Los valores de laboratorio se determinaron con técnicas de cromatografía de gases/espectrometría de masas.

Tabla 4. Cifras de mérito para la predicción del contenido de aromáticos en gasolina utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,974
Error estándar de calibración	0,97% vol.
Error estándar de validación cruzada	1,07% vol.

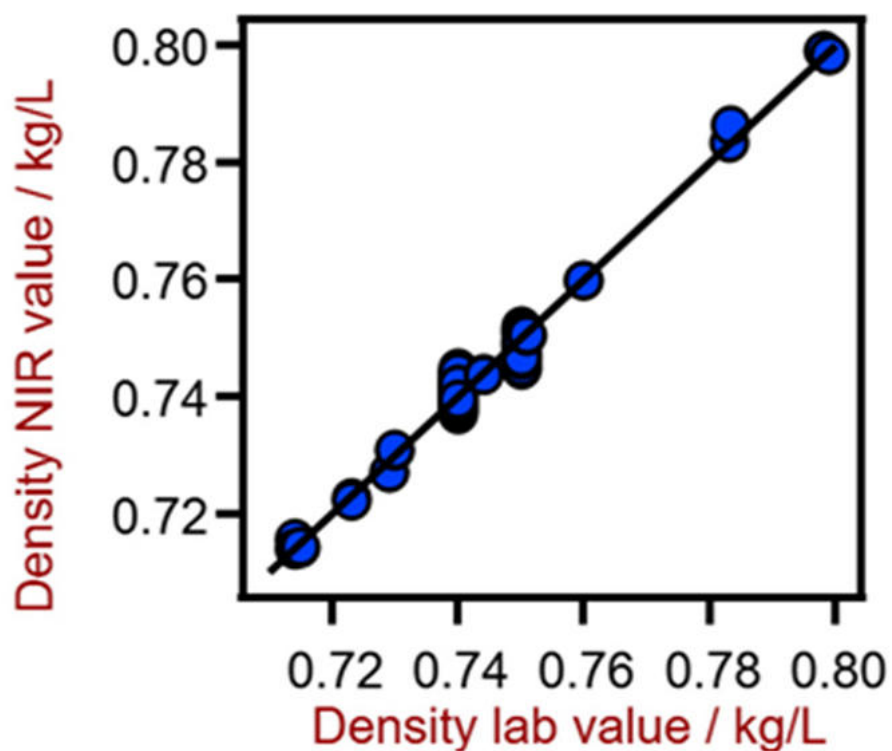


Figure 6. Diagrama de correlación para la predicción de la densidad de la gasolina utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer. Los valores de laboratorio se determinaron utilizando un densímetro.

Tabla 5. Cifras de mérito para la predicción de la densidad de la gasolina utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,973
Error estándar de calibración	0.0021kg/L
Error estándar de validación cruzada	0,0023 kg/L

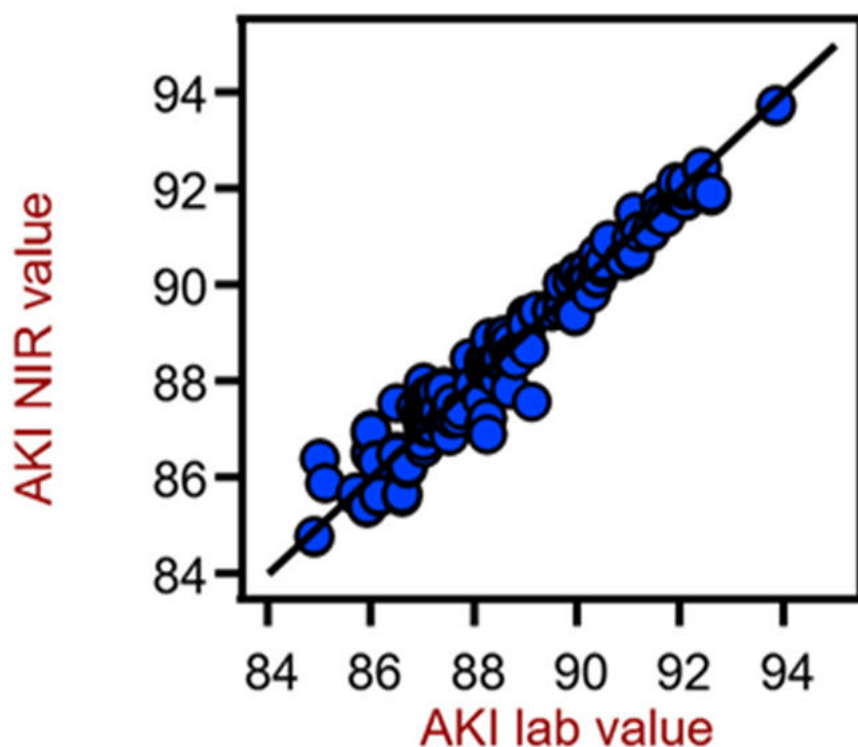


Figure 7. Diagrama de correlación para la predicción del valor AKI en gasolina usando un XDS RapidLiquid Analyzer. Los valores de laboratorio de referencia se determinaron de acuerdo con las pruebas del motor CFR en condiciones controladas.

Tabla 6. Cifras de mérito para la predicción del valor AKI en gasolina utilizando un XDS RapidLiquid Analyzer.

Figuras de merito	Valor
R^2	0,945
Error estándar de calibración	0,45
Error estándar de validación cruzada	0,46

CONCLUSIÓN

Esta nota de aplicación muestra la viabilidad de la espectroscopia NIR para el análisis de RON, MON, AKI, contenido aromático y densidad. En comparación con los métodos químicos húmedos (Tabla 7), el tiempo

de resultado es una gran ventaja de la espectroscopia NIR, ya que un solo la medición se realiza en un minuto.

Tabla 7. Tiempo para obtener resultados con métodos de prueba convencionales

Parámetro	Método	tiempo de resultado
RON	Prueba de motor CFR	30 minutos por muestra
LUN	Prueba de motor CFR	30 minutos por muestra
LRA	Prueba de motor CFR	30 minutos por muestra
Contenido aromático	Cromatografía de gases	~45 minutos por muestra

Para ver la información de todos los parámetros clave y obtener la información más reciente, consulte nuestras precalibraciones:

[Precalibraciones](#)

CONTACT

Metrohm Hispania
Calle Aguacate 15
28044 Madrid

mh@metrohm.es



NIRS XDS RapidLiquid Analyzer

Análisis rápidos y precisos de líquidos y suspensiones de toda clase.

El NIRS XDS RapidLiquid Analyzer permite análisis rápidos y precisos de sustancias y fórmulas líquidas. Los resultados de medida precisos se obtienen pulsando un botón, lo que hace que el NIRS XDS RapidLiquid Analyzer se convierta también en una solución tan sencilla como fiable para el control de calidad en el laboratorio y el proceso. Las muestras se presentan en cubetas de cuarzo reutilizables o viales de vidrio desechables; una cámara de muestras con temperatura regulada proporciona unas condiciones de análisis reproducibles y por consiguiente unos resultados de medición exactos.



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - Software de espectroscopía universal.

Vision Air Complete es una solución de software moderna y fácil de usar para su empleo en entornos regulados.

Las ventajas de Vision Air son las siguientes:

- Aplicaciones de software individuales con interfaces de usuario personalizadas para garantizar un manejo intuitivo y fácil
- Fácil creación y mantenimiento de procedimientos operativos
- Base de datos SQL para una gestión de datos segura y sencilla

La versión Vision Air Complete (66072208) incluye todas las aplicaciones para el aseguramiento de la calidad mediante la espectroscopía Vis-NIR:

- Aplicación para la gestión de datos y aparatos
- Aplicación para el desarrollo de métodos
- Aplicación para análisis rutinarios

Más soluciones Vision Air Complete:

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