



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 isomerase 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 isomerase 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).

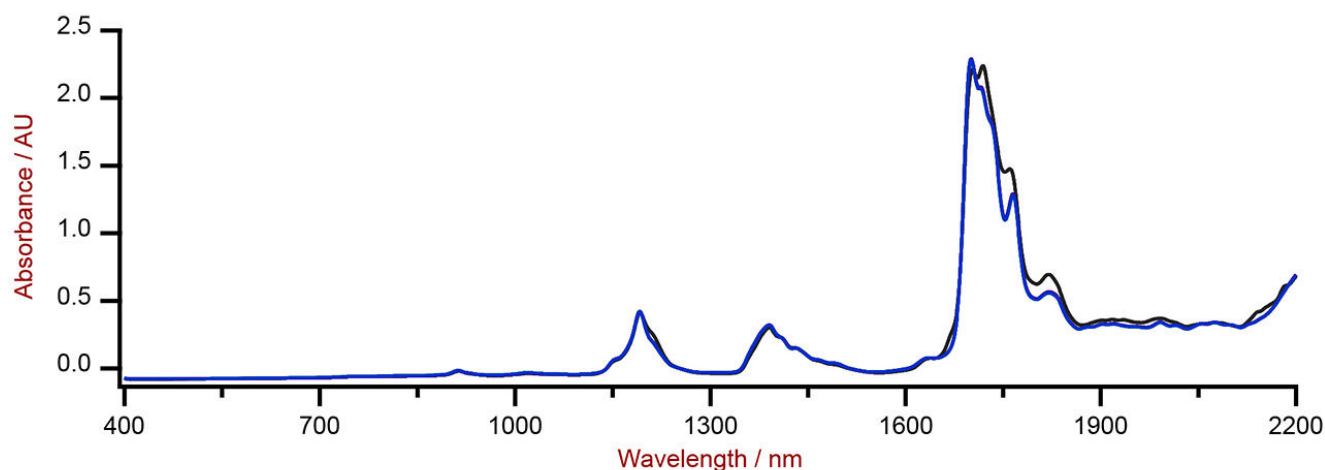


Figure 2. Selection of Vis-NIR spectra of isomerate samples analyzed on a DS2500 Liquid Analyzer with 8 mm vials.

RESULT RON VALUE

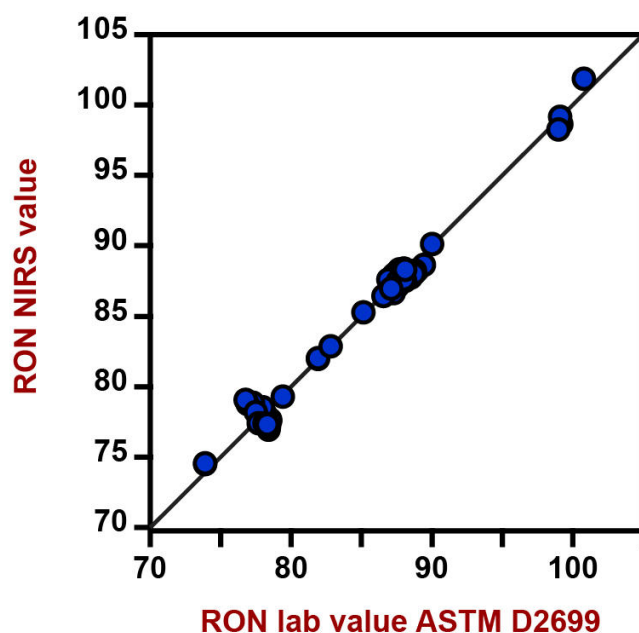


Figure 3. Correlation diagram and the respective figures of merit for the prediction of RON value using a DS2500 Liquid Analyzer. The lab value was evaluated according to ASTM D2699.

Figures of Merit	Value
R^2	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

Metrohm Suisse SA
Industriestrasse 13
4800 Zofingen

info@metrohm.ch

CONFIGURATION



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 DS2500 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)