

近赤外分析計 (NIR) によるガソリンの分析 (セタン指数、TAN、芳香族、硫黄など)

Rapid determination of RON, MON, AKI, aromatic content, and density

近年、燃料による環境負荷低減を大きく推進する目的で燃料品質の向上が求められています。これには、エンジンをより効率的にすることと、燃料中のオクタン含有量を増加させて、より高い圧縮エンジンを利用できるようにすることが必要です。

ガソリンの重要な品質パラメータ、すなわち、研究用オクタン価(RON、ASTM D2699-19)、モーターオクタン価(MON、ASTM D2700-19)、アンチノック指数(AKI)、芳香族含有量(ASTM D5769-15)、お

よび密度の決定には、従来、いくつかの異なる分析方法が必要であり、これらの分析には手間がかかり、教育された分析者が必要となります。このアプリケーションノートでは、可視及び近赤外スペクトル領域(Vis-NIR)の測定が可能なXDSラピッドリキッドアナライザーを用いて、ガソリンのマルチパラメータ分析を行うための費用効率の良い高速分析が可能であることを実証しました。

実験装置

XDS ラピッドリキッドアナライザー(RLA)を用いて、ガソリンサンプルを全波長領域(400~2500nm)にわたって透過測定を行いました。温度コントロール機能を内蔵したサンプルホルダーを用いて、高精度の再現性の良いスペクトル測定を行いました。ガソリンサンプルは光路長8mmの使い捨てバイアルを使用し、サンプル間の洗浄作業は不要としました。メトローム社Vision Airコンプリートソフトウェアを用いて、スペクトル測定と検量線モデルの解析を行いました。



図1. XDSラピッドリキッドアナライザーと8ミリ使い捨てバイアルにガソリンサンプルを充填して温度コントロールしながらの透過測定

表1:ハードウェアおよびソフトウェア装置の概要

装置	メトローム製品番号
XDS RapidLiquid Analyzer	2.921.1410
Disposable vials, 8 mm diameter, transmission	6.7402.000
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

結果

測定されたVis-NIRスペクトル(図2)を用いて、いくつかの主要なガソリンサンプルの測定項目の検量線予測モデルを作成しました。各項目の検量線予測モデルの精度は、検量線予測値とリファレンス値(従来

分析法)の相関関係を示す統計値(FOM)で評価しました。それぞれの統計値(FOM)は、日常分析時の予測精度を示します。

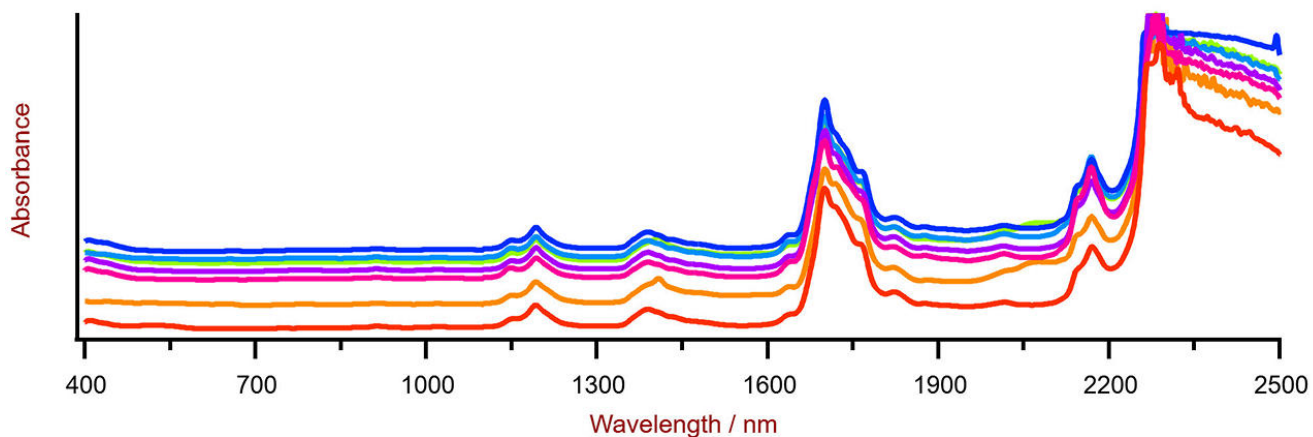


図2. XDSラピッドリキッドアナライザーで8mm使い捨てガラスバイアルにて測定されたガソリンサンプルのVis-NIRスペクトル。上記の表示はオフセット表示にしています。

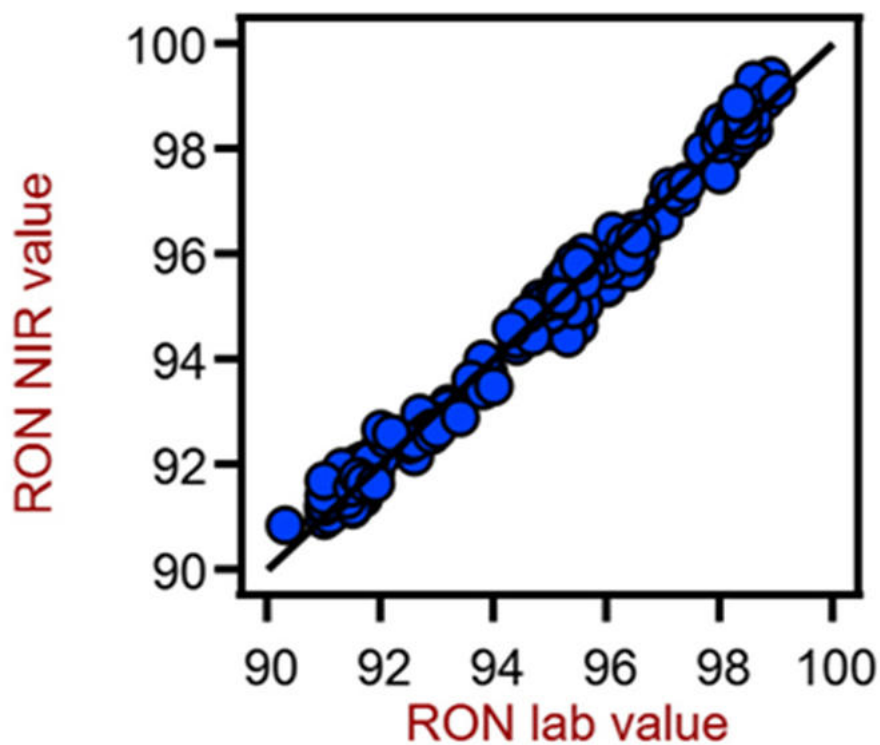


図3. XDSラピッドリキッドアナライザーを用いたガソリンサンプル中のRON値の検量線モデル相関図。従来分析（ラボ）値は、規格化された条件下でのCFRエンジン試験によって得られました。

表2. XDSラピッドリキッドアナライザーを用いたガソリンサンプル中のRON値を予測する検量線モデルの統計値

統計値	数値
R^2 (寄与率)	0.989
検量線における標準誤差(SEC)	0.26
交差検定の標準誤差(SECV)	0.29

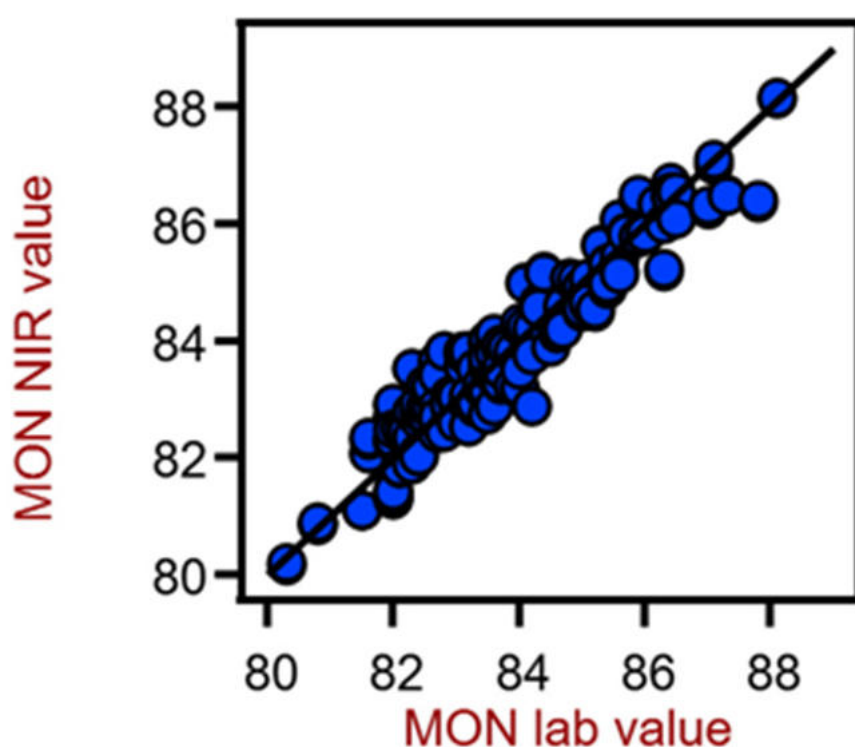


図4. XDSラピッドリキッドアナライザーを用いたガソリンサンプル中のMON値の予測のための検量線モデルの相関図。
(ラボ) 値は、規格化された条件下でのCFRエンジン試験によって得られました。従来分析

表 3. XDSラピッドリキッドアナライザーを用いたガソリンサンプル中のMON値の予測する検量線モデルの各種統計値

統計値	数値
R^2 (寄与率)	0.889
検量線における標準誤差(SEC)	0.50
交差検定の標準誤差(SECV)	0.53

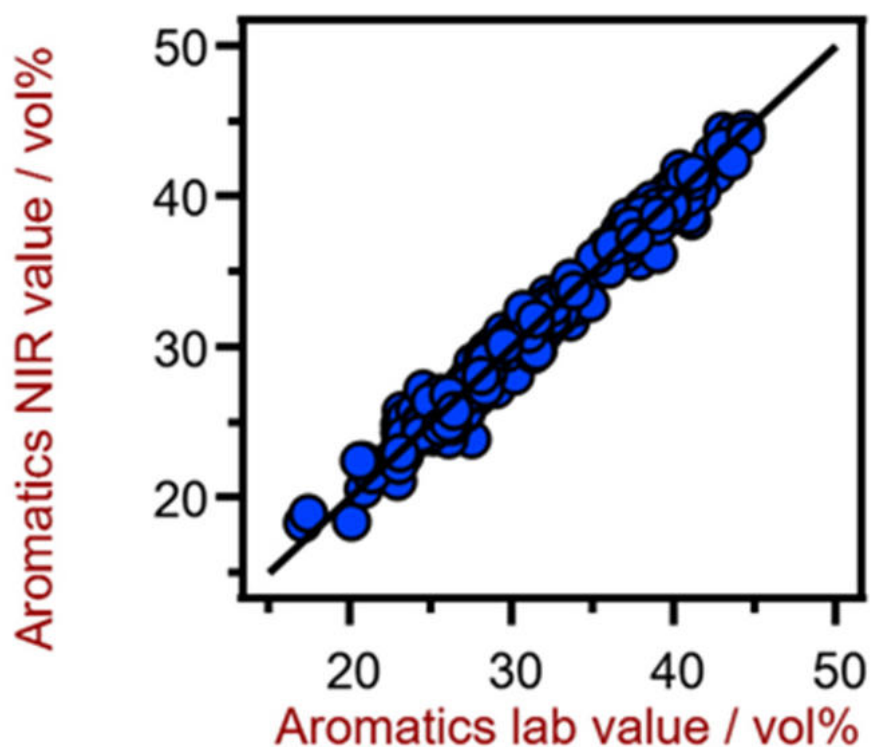


図5. XDSラピッドリキッドアナライザーを用いたガソリンサンプル中の芳香族化合物含有率の推定のための検量線モデルの相関図。従来分析（ラボ）値は、ガスクロマトグラフィー/質量分析により決定しました。

表 4. XDSラピッドリキッドアナライザーを用いたガソリンサンプル中の芳香族化合物含有率の各種統計値

統計値	数値
R^2 (寄与率)	0.974
検量線における標準誤差(SEC)	0.97 vol%
交差検定の標準誤差(SECV)	1.07 vol%

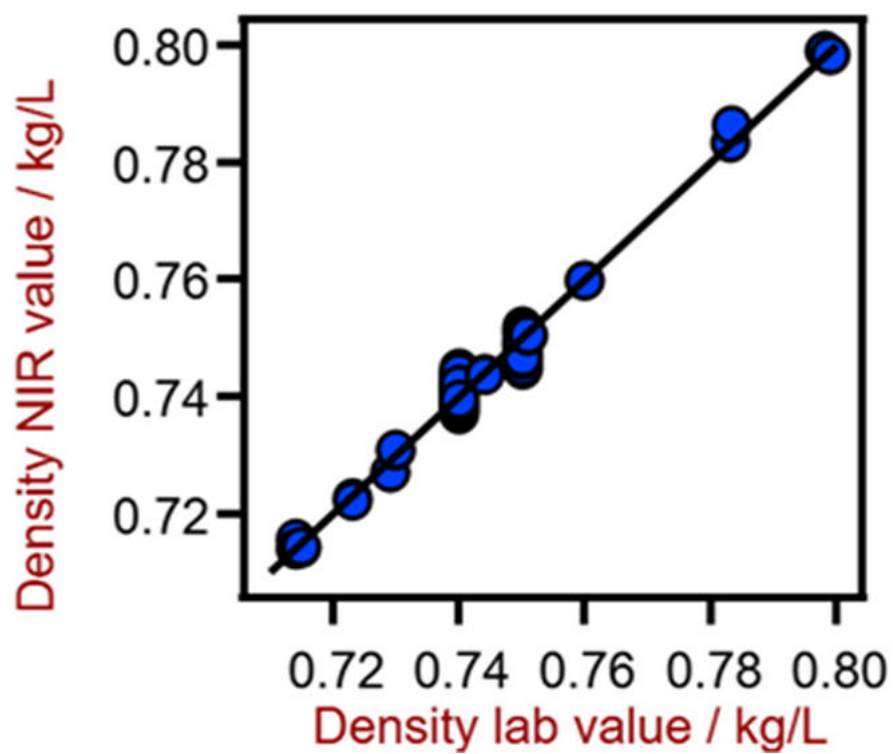


図6. XDSラピッドリキッドアナライザーを用いたガソリンサンプルの密度予測のための検量線モデル相関図。ラボ値は密度計を用いて得られました。

表5. XDSラピッドリキッドアナライザーを用いたガソリン密度の予測の検量線モデルの統計値

統計値	数値
R^2 (寄与率)	0.973
検量線における標準誤差(SEC)	0.0021 kg/L
交差検定の標準誤差(SECV)	0.0023 kg/L

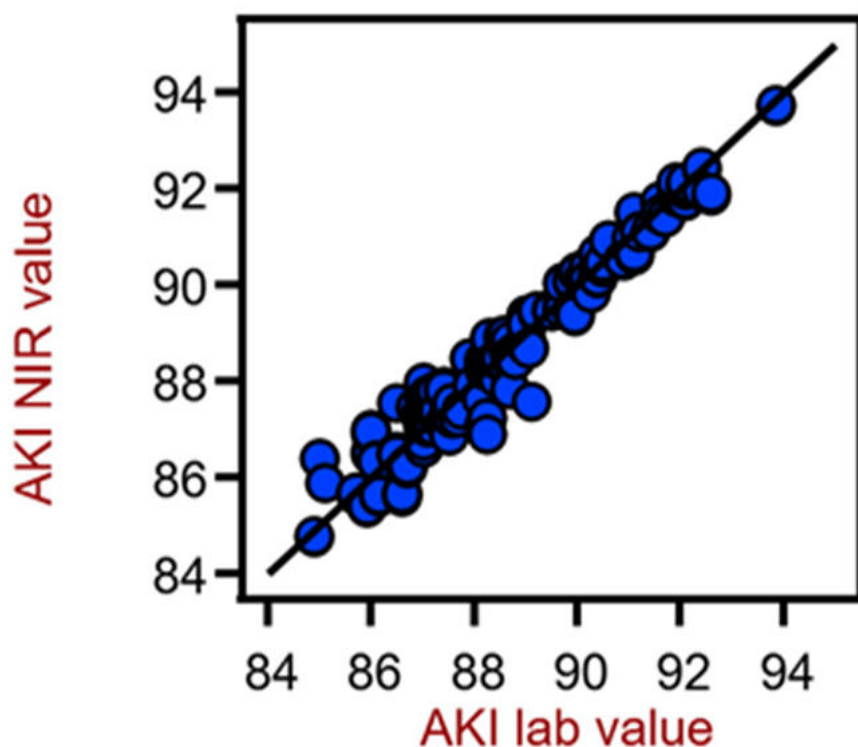


図7. XDSラピッドリキッドアナライザーを用いたガソリンサンプル中のAKI値の検量線モデル相関図。従来分析（ラボ）値は、規格化された条件下でのCFRエンジン試験によって得られました。

表 6. XDSラピッドリキッドアナライザーを用いたガソリンサンプル中のAKI値の予測する検量線モデルの統計値

統計値	数値
R^2	0.945
Standard error of calibration	0.45
Standard error of cross-validation	0.46

結論

このアプリケーションノートでは、RON、MON、AKI、芳香族含有量、密度の測定が近赤外分析(NIR)法で可能であることを示しました。従来の湿式分析法(表7)と比較すると、結果が得られるまでの時

間近赤外分析(NIR)法で大幅に短縮され、1分以内の測定が可能な近赤外分析(NIR)の有用性が明らかになりました。

表 7. 従来の試験手法に要する時間

項目	試験法	測定に要する時間
RON	CFR エンジンテスト	~30 分/サンプル
MON	CFRエンジンテスト	~30 分/サンプル
AKI	CFR エンジンテスト	~30 分/サンプル
Aromatic content	ガスクロマトグラフィ	~45 分/サンプル

最新の主要測定項目の検量線情報は下記のメトローム社のプリキャリブレーション情報をご確認ください:

[Pre-calibrations](#)

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



NIRS XDS RapidLiquid Analyzer

あらゆる種類の液体および懸濁液の迅速で正確な分析。

NIRS XDS RapidLiquid Analyzerは、液体製剤および物質の迅速で正確な分析を可能にします。ボタンを押すだけで正確な測定結果が得られるため、NIRS XDS RapidLiquid Analyzerはラボおよびプロセスにおける品質管理のための信頼性が高くシンプルなソリューションです。サンプルは、再使用可能な石英製キュベットまたは使い捨てガラス製バイアルに置かれます。温度調整されたサンプルコンパートメントは、再現性のある分析条件、およびそれによる正確な測定結果を保証します。



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)