

近赤外分光と機械学習による潤滑油中の添加剤濃度予測

Prediction of additives in lubricants using near infrared spectroscopy and machine learning

日立製作所（正）小島 恭子

Kyoko Kojima

Hitachi, Ltd

1. はじめに

近赤外分光法は、近赤外域として定義される、波長 800 nm から 2500 nm の範囲の光の透過、反射特性を用いた分光法であり、発展途上で未知の可能性を秘めた非破壊分析技術である。応用が進んでいるのは、環境科学¹⁾、天文学²⁾、脳科学、製薬、食品、化学、石油などの分野である。近赤外分光法が確立したきっかけは、農学者 Norris による小麦粉の水分定量³⁾であった。トライボロジー周辺では、石油製品の品質評価に、近赤外分光装置が用いられる例が知られており、バイオディーゼルの酸化レベルを迅速に決定したことが報告されている⁴⁾。

近赤外分光法の特徴は、その原理に基づくものであり、例えば、測定する吸収ピークは禁制遷移に相当するので、吸収は弱く、それゆえに非破壊定量に適する⁵⁾。これは、近赤外分光よりポピュラーな、(中)赤外分光、FT-IR などとの相違点である。近赤外域の禁制遷移の吸収は、非調和性と深い関連がある XH 伸縮振動(X=C, N, O)の倍音・結合音非常に多く、また、強く表れるのが特徴である。XH 結合は、分子間相互作用に強く寄与することが知られており、粘度などとの物性との相関が強い。すなわち、有機化合物の近赤外吸収スペクトルデータは、潤滑油を含む有機材料の組成の情報と、物性の情報を豊富に含む。禁制遷移の吸収の弱さを利用した非破壊、非接触分析に適するという特徴を、オイル状態監視に適用することが本研究の目的である。

2. 近赤外分光のオイル状態監視への応用

潤滑油の状態監視では、オイルの健全性と機械の健全性の両方が必要であり、前者は主にオイルの余寿命評価を目的とし、オイルの粘度、酸価、元素組成などを計測し、後者は機械の予兆診断を目的とし、オイル中の微粒子、摩耗粉の数と大きさを計測することが多い。前者のオイル健全性について、近赤外分光法は、吸収スペクトルデータがオイルを構成する分子の情報を含有し、また、粘度などの物性は、分子構造と組成によって決定されるというメカニズムに基づけば、あるオイルのスペクトルデータを取得し、また、そのオイルの物性値および組成を求め、予測式を作成すれば、スペクトルデータから物性値および組成値を予測可能であると考えることができ、一部は分光光度計を用いて実際に使われている。スペクトルデータを用いた物性値などの予測には、回帰に適する機械学習のアルゴリズムを使用し、このような技術を、ケモインフォマティクス、あるいはケモメトリクスと呼ぶことができる。

本研究では、小型で装置より安価なセンサを用いた実証を目的とし、添加剤濃度予測を目的とした実験とモデリングを行った。

3. 実験方法とモデリング

近赤外分光法による添加剤濃度予測は、ベースオイルのモデルとしての洗浄油または有機溶剤。添加剤として、BHT とオレアミドを用いた。潤滑油中の添加剤濃度は 0.1 wt% から 20 wt% の間であることが多いことから、添加剤濃度は 0.3 wt% から 3 wt% の間とした。近赤外吸収スペクトルの取得は、光路長 5 mm のガラスセルを使用し、紫外可視近赤外分光光度計 (Hitachi UH5700) および近赤外センサを用いて実施した。添加剤濃度予測のモデリングは、添加剤濃度を目的変数とし、近赤外吸収スペクトルを説明変数とした PLS ((Partial Least Squares Regression)を採用し、クロスバリデーションを行った。モデリングの概念図とフローを Fig. 1 に示す。

4. 結果と考察

4.1 BHT

波長 1750 nm から 2150 nm の間の近赤外吸収スペクトルを取得した。濃度は 0.4 wt% から 2.2 % の間の 3 種の濃度のサンプルを用いた。BHT は、メチル基とベンゼン環の水素原子を有し、水素リッチな分子構造であるため、PLS による BHT の濃度予測は良好な結果であった。Fig. 2 に吸収スペクトル、Fig. 3 に説明分散グラフ、Fig. 4 に予測図を示す。

4.2 オレアミド

波長 2000 nm から 2450 nm の間の吸収スペクトルを取得し、PLS を実施した。オレアミドも水素原子リッチな分子構造であるが、予測精度はやや劣る結果となった ($R^2 = 0.9352$, Cross Validation)。波長域を変更することで、結果が改善できる可能性がある。

5. まとめと今後の展望

潤滑油のモデルサンプルを作成し、近赤外分光法と機械学習の一種である PLS を用いて、非接触計測での油中の添加剤濃度予測に成功した。波長域の変更、スペクトルデータの前処理などにより、予測精度を改善できる可能性がある。近赤外吸収スペクトルは、潤滑油を構成する分子の詳細な構造情報を含有するため 近赤外吸収スペクトルを用いて、潤滑油の物性（粘度など）と組成の予測が期待される。オイルセンサを機械に実装する際に、オイルリーク対策を要求されることがあったり、オイルセンサの実装、とりわけレトロフィットは困難であることから、非接触計測が可能で高機能な近赤外センサを用いたオイル状態監視の実現を目指したい。

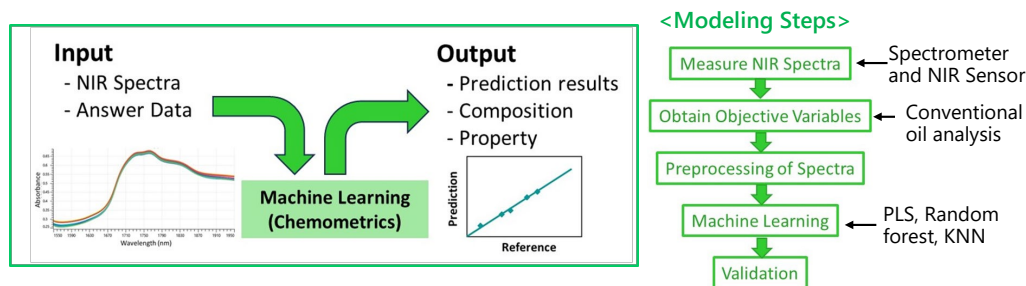


Fig. 1 Conceptual diagram and analysis flow of prediction of physical properties and composition using near-infrared absorption spectra and machine learning.

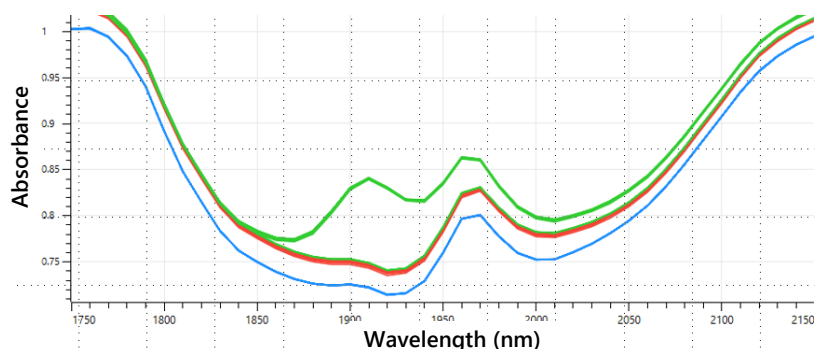


Fig. 2 Near-infrared absorption spectra of BHT-containing oil samples with different concentrations.

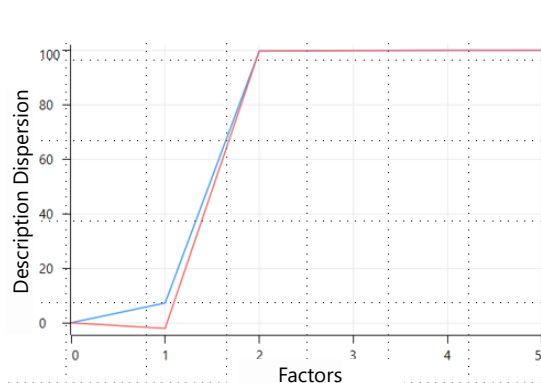


Fig. 3 Explained variance of BHT-contained model Samples.

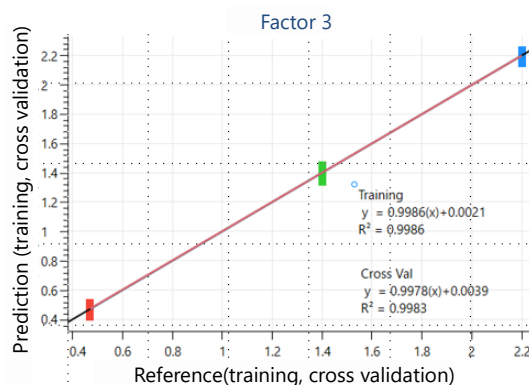


Fig. 4 Prediction of BHT concentration in oil By PLS.

文献

- 1) 武本・関・牧内・高橋 編: 生体・環境計測へ向けた近赤外センシング技術 サイエンスフォーラム, 東京 (1999).
- 2) J. F. Alves, C. J. Lada, and E. A. Lada: Nature 409, (2001) 159.
- 3) I. Ben-Gera and K. H. Norris: J. Food. Sci. 33 (1968) 64.
- 4) G. Varghese, K. Saeed and K. J. Rutt: Determination of the oxidative stability of biodiesel fuels by near-infrared spectroscopy: Fuel 290 (2021).
- 5) 尾崎・池羽田: 近赤外分光 I. 概論: 分光研究 53 (2004) 43.