

近赤外分光とケモメトリクスを用いた潤滑油製品識別

Lubricant Product Identification Using Near-Infrared Spectroscopy and Chemometrics

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<sup>1)</sup>、天文学<sup>2)</sup>、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<sup>3)</sup>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<sup>4)</sup>。

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、それゆえに光路長を長くすることが容易であったり、非破壊定量に適する<sup>5)</sup>。これは、近赤外分光よりポピュラーな、中赤外分光(FT-IR)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、潤滑油製品の識別に適用することが本研究の目的である。

2. 近赤外分光による識別

近赤外分光は、有機材料の組成識別に適することを応用した例が既にある。Hoorn らによる論文<sup>6)</sup>では、6 種のプラスチックをハンドヘルドデバイスで分類したことが報告されている。また、Shi らの論文<sup>7)</sup>では、米の品種識別が報告された。適用された機械学習のアルゴリズムは多岐にわたり、PLS(Partial Least Squares)のみならず、SVM(Support Vector Machine)、XGBoost、Random Forest、Gaussian Naïve Bayes、SIMCA(Soft Independent Modeling of Class Analogy)などが使用されている。

潤滑油における識別検査は、例えば、偽造油の識別や、機械のオイル交換で正しいオイルを入れたかどうかの確認などの場面で有効である。偽造油については、世界の総売上高の約 10%が偽造品であるという報告がある<sup>7)</sup>。

本研究では、小型かつ安価な近赤外センサを用いて、市販の潤滑油製品の識別を目的とした実験と、主成分分析(Principal Component Analysis, PCA)による識別を行った。

3. 実験方法と PCA

近赤外吸収スペクトル測定には、分光光度計 (日立 UH5700) を用いた。測定は室温で行い、光路長 2 mm のガラスセルを使用した。

識別のモデル構築に用いた潤滑油を Table 1 に示す。スペクトルデータの前処理には、二次微分とスムージングを採用し、PCA を行った。

Table 1 Lubricants used for discrimination with machine learning of NIR absorption spectra.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
Category	Gear oil	Engine oil	Engine oil	Engine oil	Engine oil	Hydraulic	Hydraulic	Hydraulic	Hydraulic
Base oil	Synthetic	Mineral	Mineral	Mineral	Mineral	Mineral	Mineral	Mineral	Mineral
Grade	320	5W-30	10W-30	10E-40	10W-30	46TX	46	46	46HN

4. 結果と考察

Table 1 に記載の、9 種の潤滑油製品の波長 1000 nm から 2000 nm の範囲の吸収スペクトルを取得した(Fig. 1)。Fig. 1 のスペクトルデータに対して、二次微分とスムージングの前処理を行い、Fig. 2 のスペクトルを得た。前処理後のスペクトルデータを用いて、PCA を行い、第 1 主成分と第 2 主成分をそれぞれ x 軸、y 軸としたスコアプロットを作成した(Fig. 3)。

Fig. 1 を見ると、1200 nm 付近、1400 nm 付近、および、1700 nm から 1900 nm にかけて、吸収ピークが観測された。潤滑油の組成は、約 80%以上が基油、それ以外は各種添加剤であるので、それらの吸収ピークは、主に基油の吸収で

あると考えられる。Fig. 2 は前処理後のスペクトルであるが、二次微分後の負のピークが元のスペクトルの吸収ピークであり、 $-CH-$ 、 $-CH_2-$ の吸収であると考えられる。

Fig. 3 より、近赤外吸収スペクトルと PCA によって、9 種の潤滑油製品の分類に成功したことが判る。作動油はプロットの左側に、エンジンオイルは右側にプロットされる傾向があり、基油の寄与の他に、添加剤の寄与がある可能性があり、さらに詳細な分析や波長選択を行うことで、スペクトルのどのような情報を用いて識別しているのかが解明できると考えられる。

この技術の応用について考察する。Fig. 4 は、近赤外分光と機械学習の潤滑油状態監視への応用の概要を示す図である。潤滑油の情報と、近赤外吸収スペクトルデータを入力し、機械学習の結果を出力する。機械学習の目的変数の選択と、機械学習のアルゴリズムの選択次第で、原理的には、分類（製品識別）、物性予測（粘度、酸価、塩基価）、組成予測（基油、添加剤、酸化）、汚染度予測（水分、粒子）が可能である。すなわち、1 回のスペクトル測定で得たスペクトルデータから、オイル分析に必要な項目のほとんどを予測可能であるといえる。本発表では、潤滑油製品識別について述べたが、例えば、機械に潤滑油を充填する際に識別機能を使用し、機械稼働時には、粘度、酸価、水分、酸化などを監視する、という使い方が、一つの装置で可能となる。これを、オンライン・オンサイト診断に用いるために、近赤外センサで測定を行うことが有益である。

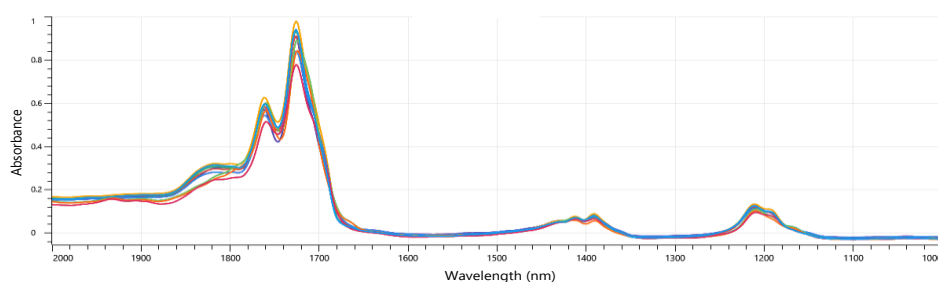


Fig. 1 NIR absorption spectra of 9 lubricant products.

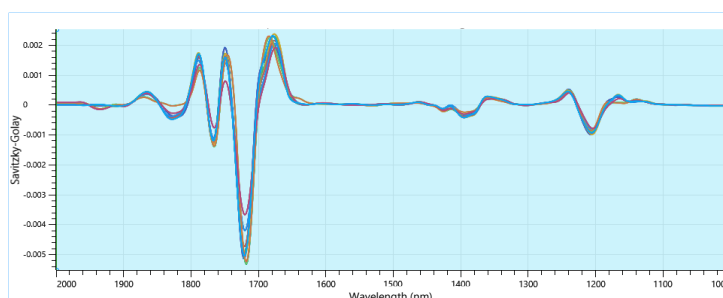


Fig. 2 Spectra obtained after preprocessing (2nd derivative and smoothing)

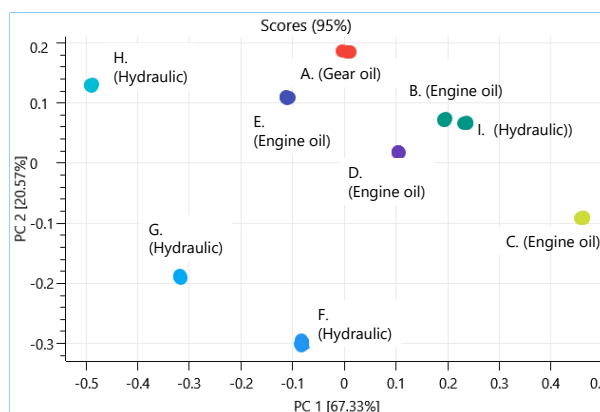


Fig. 3 PCA score plot of 9 lubricant products.

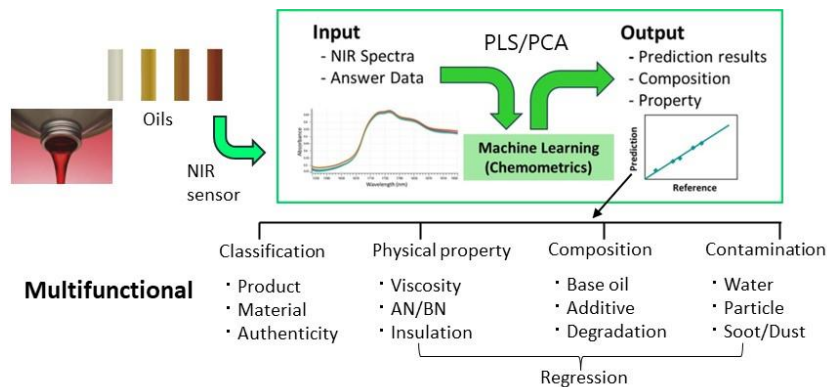


Fig. 4 Outline of the application of NIR spectroscopy and machine learning to lubricant condition monitoring

## 5. まとめ

近赤外分光法と機械学習の一種である PCA を用いて、潤滑油製品 9 種の識別に成功した。識別は、主に基油の違いを基に行われていると考えられる。波長域の変更、スペクトルデータの前処理などにより、識別精度は改善できる可能性がある。また、測定に小型軽量のセンサを用いることで、オンサイト・オンラインでの応用が広がると考えられる。非接触計測が可能であることから、本技術は、オイルセンサの実装、特にレトロフィットが困難である課題に対して、ブレークスルーの可能性はある。

## 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.
- 6) H. van Hoorn, F. Pourmohammadi, A.-W. deLeeuw, A. Vasulkar, J. de Vos, and S. van den Berg: Sensors 25 (2025).
- 7) ALIA to release whitepaper on counterfeiting of lubricants (2021), <https://www.fuelsandlubes.com/aliam-to-release-whitepaper-on-counterfeiting-of-lubricants/>