

## STANOVENÍ ČÍSLA CELKOVÉ ALKALITY MOTOROVÉHO OLEJE METODOU FTIR SPEKTROMETRIE

MARIE SEJKOROVÁ

*Katedra dopravních prostředků a diagnostiky, Dopravní fakulta Jana Pernera, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice  
Marie.Sejkorova@upce.cz*

Došlo 31.10.11, přepracováno 28.6.12, přijato 27.9.12.

**Klíčová slova:** motorový olej, číslo celkové alkality (TBN), FTIR spektrometrie, regrese na hlavních komponentách (PCR), metoda částečných nejmenších čtverců (PLS), chemometrie

### Úvod

Mezi základní funkce motorového oleje patří: (1) snižování tření pohyblivých součástí, (2) ochrana motoru před účinky tepla, tlaku, koroze, oxidace, (3) čištění vnitřku motoru, (4) chlazení motoru odváděním tepla, (5) utěsnění prostoru mezi pístními kroužky a stěnou válce.

Komponenty použité při výrobě motorového oleje, tedy základový olej a chemické přísady, jejich množství a vzájemné poměry, musí být zvoleny tak, aby požadované vlastnosti motorového oleje byly ve vzájemné rovnováze a aby žádná vlastnost oleje nebyla preferována na úkor jiných vlastností. Mezi zušlechťující chemické přísady přidávané do základového oleje patří kovové detergenty, bezpopelné disperzanty, antioxidantní a protioděrové přísady, modifikátory tření, modifikátory viskozity, odpěňovače a přísady zabraňující tuhnutí oleje<sup>1,2</sup>. Sledování hladiny přísad v mazacích olejích je důležité z hlediska jak prediktivní údržby, tak prodloužení životnosti motoru<sup>1</sup>. Mezi rutinní testy prováděné za účelem monitorování stavu maziva patří měření čísla celkové alkality (TBN), které představuje celkové množství alkalických sloučenin, které přispívají k tzv. alkalické rezervě oleje. Číslo celkové alkality udává množství kyseliny chloristé vyjádřené počtem mg KOH, které je potřebné k neutralizaci všech zásaditých složek přítomných v 1 g vzorku (mg KOH/g). Parametr TBN je široce uznáván zpracovateli olejů i výrobci motorů jako klíčový faktor kvality oleje, a to zejména pro oleje určené pro naftové<sup>2</sup> a plynové motory, jejichž náplně jsou vystaveny poměrně vysokým teplotám a potřebují účinnější ochranu před degradací.

Nositeli alkalické rezervy jsou detergenty na bázi sulfonátů, fenolátů, salicylátů vápníku, hořčičku, sodíku nebo barya. Tyto přísady mají za úkol neutralizovat kyselé zplodiny spalování paliva, které se dostanou do oleje, nebo

kyselé produkty oxidační degradace oleje. Kyselé produkty ze spalování paliva, které se vždy částečně kumulují v oleji, jsou hlavním zdrojem nebezpečné koroze. Další důležitou funkcí detergentů v motorovém oleji je jejich čisticí schopnost. Tyto přísady čistí kovové povrchy motoru a uvolňují různé usazeniny, kaly nebo karbonové povlaky z povrchu mazaných dílů. Uvolněné nečistoty od detergentů přebírají disperzanty, které každou částici nečistoty obalí a nepřipustí vzájemné spojování či shlukování částic a jejich následné usazování. Disperzanty jsou také sekundárním zdrojem základních sloučenin<sup>3</sup>, obvykle dusíkatých složek obsažených v aditivech, které mohou přispět k alkalitě. Kromě detergentů a dispersantů se na neutralizaci kyselin podílejí také některé protioděrové přísady. Vzhledem k tomu, že stanovení jakostních parametrů klasickými laboratorními metodami je pro časovou náročnost nevhodné, rozvíjejí se fyzikální a fyzikálně-chemické instrumentální kontrolní metody pro posuzování stupně opotřebení olejů. V posledních letech došlo k prudkému rozvoji FTIR spektrometrie a rozšíření programového vybavení spektrometrů o složité matematicko-statistické metody. Spojení FTIR spektrometrie s chemometrickou analýzou umožňuje i stanovení parametrů, které se primárně dají označit jako fyzikálně-chemické, tj. nejedná se o vlastnosti olejů, benzinů a naft, kterým lze logickým postupem přiřadit určitý pás a nebo určitou oblast spektra.

Možnosti použití FTIR jako alternativní metody pro kontrolu paliva a oleje je věnována značná pozornost v literatuře<sup>4–10</sup>. Adamsem a spol.<sup>4</sup> byl FTIR analýzou v syntetických turbínových olejích, které se používají ve vojenských letadlových motorech, monitorován obsah antioxidantů a stanovováno číslo celkové kyselosti (TAN). Pro tvorbu kalibračních, predikčních a validačních modelů byly používány a srovnávány algoritmy metody hlavních komponent (PCA) a částečných nejmenších čtverců (PLS). Dvojdímenzionální IR korelační analýza byla použita ke zkoumání a interpretaci pozorovaných trendů ve spektru, tj. dynamiky jak nárůstu kyselých produktů termooxidčních reakcí a vyčerpání antioxidantních přísad, tak funkčních vlastností a opotřebení motoru. Pavoni a spol.<sup>5</sup> zveřejnili popis použití IR transmisní techniky s fixní délkou optické dráhy, s analýzou hlavních komponent a regresní analýzou částečných čtverců, k určení fyzikálně-chemických vlastností benzinů: hustoty, oktanového čísla (OČ), obsahu aromátů atd. Stanovení TAN a TBN v mazacích olejích metodou FTIR publikoval F. R. van de Voort a spol.<sup>6,7</sup>. Návrhem metodiky stanovení falšovaného motorového benzínu pomocí FTIR spektrometrie a více-rozměrné kalibrace se zabýval Al-Ghouti a spol.<sup>9</sup>. Experimentální výsledky ukázaly, že hodnoty hustoty, teploty destilace a FTIR ve spojení s vícerozměrnými metodami, bez nutnosti použití chromatografické separace a dalších drahých přístrojů jako např. přístroje na stanovení oktanového čísla, mohou být vhodným prvkem pro rozlišení zejména čistých motorových benzinů od benzinů ostatních. Tito autoři<sup>10</sup> se rovněž zabývali možnostmi aplikace FTIR a chemometrie pro stanovení viskozitního indexu (VI)

a TBN motorových olejů. Oba parametry lze získat u nových a opotřebených motorových olejů pomocí více-rozměrné kalibrace na základě FTIR dat. V této práci bylo prokázáno, že PLS poskytla přesnější výsledky než regrese na hlavních komponentách (PCR) a klasická metoda nejmenších čtverců (CLS) v predikci parametrů oleje. S vysokou přesností (99–102 %) a shodností (3–11 %) může být technikou FTIR stanoveno TBN v rozmezí 4,57–16,45 mg KOH/g a VI v rozsahu 96–153. Výsledky získané FTIR-PLS byly srovnatelné s těmi, kterých lze dosáhnout nákladnými a časově náročnými metodami ASTM.

Chemometrickým algoritmem PLS byl rovněž vytvořen kalibrační model pro stanovení TAN a TBN pro motorové a hydraulické oleje<sup>11</sup>. Vzhledem k tomu, že infračervená spektra se výrazně odlišují převážně v základovém oleji, je nutné před tvorbou chemometrických modelů rozdělit oleje do několika podobných podskupin. Tak lze docílit u kalibračních modelů s identickým základovým olejem chybu stanovení, která se blíží chybě standardní kalibrační metody. V práci<sup>11</sup> činila chyba stanovení TBN 2,5 % pro vstupní i chemometrické stanovení.

## Experimentální část

K experimentu bylo použito celkem 63 vzorků opotřebených motorových olejů s identickým základovým olejem. Tento soubor byl následně rozdělen na dvě podskupiny vzorků – 56 vzorků kalibračních a 7 validačních. U všech vzorků byla naměřena spektra ve střední infračervené oblasti. Dále byla u všech vzorků stanovena alkalická

rezerva oleje vyjádřená jako (TBN) potenciometrickou titrací. Na obr. 1 je zachycen průběh spektra v oblasti 1850 až 650  $\text{cm}^{-1}$  pro vzorky motorového oleje s rozdílnou hodnotou TBN.

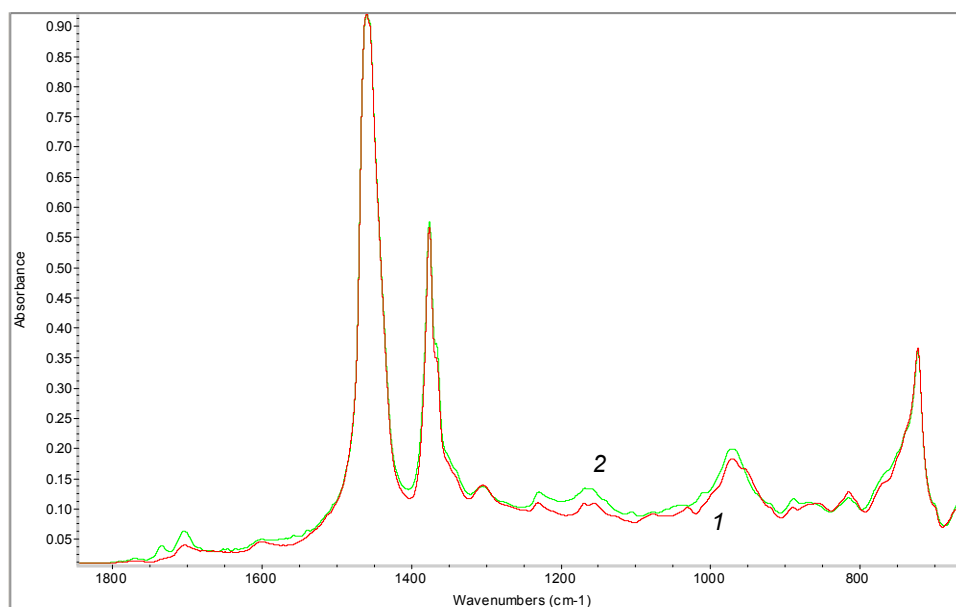
### Infračervená spektroskopie ve střední oblasti

Infračervená spektra byla zaznamenána spektrometrem Nicolet iS10 (Thermo Scientific) s ATR nástavcem (krystal ZnSe) technikou úplné zeslabené reflektance. Počítačový software OMNIC umožňuje nastavení parametrů spektrometru, řídí vlastní měření a provádí požadované následné operace se spektry. Spektra vzorků motorových olejů byla měřena ve spektrálním rozsahu 4000–650  $\text{cm}^{-1}$ . Parametry měření: rozlišení 4  $\text{cm}^{-1}$ , počet akumulací spektra 64.

Naměřená data byla zpracována počítačovým programem TQ analyst verze 8 (Thermo Fisher Scientific, Inc., USA).

### Stanovení TAN

U všech vzorků byla stanovena hodnota TBN dle normy ČSN ISO 3771 potenciometrickou titrací<sup>12</sup> automatickým titrátorem DL 25 (Mettler Toledo). Vzorek oleje byl rozpuštěn v bezvodé směsi chlorbenzenu a koncentrované octové kyseliny a poté byl potenciometricky titrován 0,1 M roztokem kyseliny chloristé v ledové octové kyselině (v poměru 2:1). Pro indikaci bodu ekvivalence byla použita skleněná měrná elektroda a kalomelová srovnávací elektroda s nevodným solným můstkem.



Obr. 1. Ukázka spekter v oblasti vlnočtu 1850–650  $\text{cm}^{-1}$ ; (1) motorový olej s TBN = 7,239 mg KOH/g, (2) motorový olej s TBN = 9,500 mg KOH/g

## Výsledky a diskuse

Hlavním krokem stanovení TBN metodou FTIR spektrometrie je vytvoření kalibračního modelu, který zahrnuje výběr reprezentativní sady kalibračních vzorků, nasnímání spekter a stanovení referenčních hodnot u těchto vzorků, nalezení kalibračního algoritmu a následně validaci vytvořeného modelu.

V průběhu optimalizace kalibračních modelů byly detegovány odlehlé standardy (celkem 14 odlehlých výsledků), u kterých byla nepřesně stanovena referenční hodnota TBN nebo se objevila spektrální odchylka ve změřeném spektru. Odlišná spektra se týkala zejména vzorků opotřebených olejů, kde došlo k průniku chladicí kapaliny do oleje.

### Vývoj kalibračního modelu

Naměřená spektra a hodnoty TBN vzorků motorových olejů zjištěné klasickými metodami byly statisticky vyhodnoceny programem TQ Analyst v 8; pro kalibraci byl použit algoritmus PLS a PCR.

Spojení FTIR spektrometrie s těmito multikomponentními metodami našlo nejširší uplatnění v praktických aplikacích analýzy maziv. Principem kalibrace je získání závislosti mezi spektrální informací a složením vzorku. PLS a PCR pracují s celým spektrem či jeho částmi a podstatou je zhuštění spektrální informace do nových proměnných – hlavních komponent, které jsou lineárními kombinacemi původních absorbcí a jsou vzájemně nekorelované. Rozdíl mezi souřadnicemi vzorků v původních znacích a v hlavních komponentách čili ztráta informace projekcí do menšího počtu rozměrů se nazývá mírou těsnosti proložení modelu hlavních komponent (PC) nebo také chybou modelu PC (cit. <sup>13</sup>).

Principem algoritmu PCR je regrese závisle proměnného parametru TBN, pomocí metody nejmenších čtverců, aplikovaná na malý a správně zvolený podsoubor hlavních komponent. Hlavní nevýhodou metody PCR je, že ke konstrukci modelu může použít i první hlavní komponenty, které mohou popisovat zdroj variability ve spektrech, jenž však není svázán se stanovovaným parametrem.

V průběhu kalibrace metodou PLS je vytvořen matematický vztah mezi maticí absorbančních dat a maticí hodnot TBN vzorků. To je realizováno stanovením počtu hlav-

ních (abstraktních) komponent a současnou regresi a rotací transformovaných matic. Počet abstraktních (latentních) komponent je v průběhu výpočtu určen metodou minimální chyby modelu<sup>14</sup>.

Výstupem u obou metod je lineární regrese mezi vloženými kvantitativními hodnotami a hodnotami predikovanými kalibračním modelem. Výsledkem je rovnice kalibrační přímky, střední kvadratická chyba kalibrace (RMSEC) a korelační koeficient (R), který charakterizuje lineární vztah mezi závislou proměnnou a lineární kombinací sady nezávisle proměnných kalibrační řady. Korelační koeficient vypovídá o kvalitě regresní závislosti mezi laboratorními hodnotami a hodnotami predikovanými pomocí FTIR spektrometrie. Závislost s korelačním koeficientem 0,95–0,99 se považuje za velmi silnou, s korelačním koeficientem 0,80–0,94 za dost silnou, a v rozmezí hodnot 0,50

$$PRESS = \left[ \sum_{i=1}^N (C_{pred} - C_i)^2 \right]^{0,5} \quad (1)$$

až 0,79 za středně silnou závislost. Je-li hodnota korelačního koeficientu nižší než 0,50, je tato závislost považována za bezvýznamnou.

Určení počtu latentních proměnných je klíčovým problémem všech metod tohoto typu, neboť se jedná o určení nejmenšího signifikantního počtu latentních proměnných, které popisují variabilitu zdrojové matice.

Důležitým diagnostickým nástrojem pro vývoj kalibračního modelu je závislost  $PRESS(I)$  (suma čtverců rozdílů mezi predikovanými ( $C_{pred}$ ) a reálnými  $N$  hodnotami analytů ( $C_i$ )), na počtu PLS hlavních komponent použitých ke kalibraci.  $PRESS$  je tedy míra predikční schopnosti kalibračního modelu<sup>15</sup>.

Touto procedurou lze docílit zvýšení výkonnosti metody<sup>16</sup>. Optimální počet PLS hlavních komponent se volí v minimu funkce  $PRESS$ . Vysoký počet PLS komponent snižuje schopnost predikce, protože  $PRESS$  zahrnuje i spektrální šum<sup>17</sup>. Před samotnou tvorbou kalibračních modelů byly testovány různé úpravy infračervených spekter a vybírány části spektra nesoucí charakteristickou informaci.

Multivariační analýza byla použita na oblast spektra, ve které vykazovaly změny v intenzitách absorpčních pásů významnou korelaci v závislosti na změnách hodnot TBN; jednalo se o oblast v rozsahu 1764–1520  $\text{cm}^{-1}$ , která při

Tabulka I

Statistika kalibrace pro stanovení čísla celkové alkality za použití metod částečných nejmenších čtverců a regrese na hlavních komponentách v spektrálním rozsahu 1764–1520  $\text{cm}^{-1}$

Spektrální rozsah	PLS			PCR		
	počet komponent	R	RMSEC [mg KOH/g]	počet komponent	R	RMSEC [mg KOH/g]
Normální	10	0,989	0,0922	10	0,871	0,311
1. derivace	5	0,892	0,286	5	0,695	0,456
2. derivace	2	0,660	0,477	2	0,679	0,465

rozlišení  $4\text{ cm}^{-1}$  obsahovala 61 datových bodů. Chemometrické algoritmy byly rovněž aplikovány na 1. a 2. derivaci absorpčních spekter – lze tak dosáhnout většího rozlišení signálů jednotlivých absorbujících komponent. Tabulka I ukazuje výsledky z PLS a PCR kalibrace z hlediska korelačního koeficientu, průměrné chyby kalibrace modelu a počtu hlavních komponent, které jsou výsledkem komprimace informace obsažené v původních 61 datových bodech absorpční matice.

Jak je patrné z tab. I, nejspokojivějších výsledků kalibrace bylo dosaženo algoritmem PLS aplikovaným na klasický spektrální záznam. Bylo dosaženo silné závislosti ( $R = 0,989$ ) mezi hodnotami TBN předikovanými PLS modelem a hodnotami získanými potenciometrickou titrací. Průměrná chyba kalibrace se blížila hodnotě  $0,1\text{ mg KOH/g}$ . Algoritmem PCR bylo dosaženo ještě dost silné závislosti, ale hodnota RMSEC byla o cca  $0,2\text{ mg KOH/g}$  vyšší než v případě použití algoritmu PLS. U žádného kalibračního modelu se neosvědčilo zvýraznit detaily absorpčního spektra jeho derivováním. V prezentovaném případě byl pro vytvoření kalibračního modelu rovněž použit celý spektrální rozsah ( $650\text{ až }4000\text{ cm}^{-1}$ ), jak publikoval Al-Ghouti a spol.<sup>15</sup>. Silné závislosti ( $R = 0,962$ ) mezi předikovanými a skutečnými hodnotami TBN bylo dosaženo algoritmem PLS za použití 8 hlavních komponent. Parametr RMSEC v tomto případě dosáhl hodnoty  $0,172\text{ mg KOH/g}$ .

U vzorků motorových olejů, které byly použity k ověření kalibrace, se porovnávají hodnoty TBN zjištěné referenční potenciometrickou metodou s hodnotami, které byly předpovězeny prostřednictvím kalibračního modelu.

#### Validace kalibračního modelu

K posouzení predikční schopnosti vytvořeného kalibračního modelu slouží validace. Validace byla provedena pomocí nezávislého souboru 7 vzorků opotřebovaných motorových olejů o známé hodnotě TBN, které nebyly zahrnuty v kalibračním souboru.

Parametrem kvality predikční schopnosti vytvořeného kalibračního modelu je střední kvadratická chyba predikce (RMSEP). Vzhledem k tomu, že RMSEP je odchylka, která se očekává v budoucích předpovědích, je kladen důraz na minimální hodnotu tohoto parametru. RMSEP spolehlivé kalibrace není obvykle o mnoho větší než RMSEC<sup>17,18</sup>. V případě PLS kalibrace aplikované na spektrální oblast  $1764\text{--}1520\text{ cm}^{-1}$  dosáhl parametr RMSEP hodnoty  $0,0933\text{ mg KOH/g}$  a u kalibrace PCR hodnoty  $0,198\text{ mg KOH/g}$ . U testování predikční schopnosti vytvořeného PLS kalibračního modelu pro celou spektrální oblast byla hodnota  $\text{RMSEP} = 0,481\text{ mg KOH/g}$ , tj. výrazně vyšší oproti parametru RMSEC.

Další možností ověření správnosti kalibračního modelu je použití křížové validace (cross validation). Metoda je založena na simulaci predikční fáze při skutečné kalibraci. Při křížové validaci kalibračního modelu byla pro odhady TBN nejprve použita všechna vstupní data, potom byla postupně vynechávána data pro každý kalibrační standard

a ze zbývajících byl vypočten odhad v místě vynechaného bodu. Konstrukce modelu a predikce se opakuje  $n$ -krát ( $n$  je počet standardů použitých ke kalibraci), takže hodnota TBN každého vzorku je stanovena právě jednou. Výstupem této diagnostiky je korelační koeficient křížové validace a střední kvadratická chyba křížové validace (RMSECV). Dostatečně robustní chemometrický model by měl vykazovat pouze malý rozdíl mezi parametry RMSEC a RMSECV. Z regresní analýzy křížové validace PLS modelu (spektrální rozsah  $1764\text{--}1520\text{ cm}^{-1}$ ) byl vyjádřen  $R = 0,832$  a vypočtena chyba křížové validace  $0,357\text{ mg KOH/g}$ .

Výsledky TBN predikované FTIR-PLS při externí a křížové validaci byly dále statisticky porovnány s výsledky potenciometrické titrace. Na základě párového  $t$ -testu ( $\alpha = 0,05$ ) bylo prokázáno, že rozdíly mezi referenčními a předikovanými hodnotami nejsou statisticky významné.

Křížová validace nepotvrdila spolehlivost FTIR-PLS modelu pro stanovení TBN z celého spektrálního rozsahu  $650\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ . Korelační koeficient křížové validace dosáhl hodnoty pouze  $0,639$  a  $\text{RMSECV} = 0,500\text{ mg KOH/g}$ .

#### Závěr

FTIR spektrometrie ve spojení s vícerozměrnou analýzou dat nachází v posledních letech široké uplatnění v petrochemickém průmyslu. Osvědčuje se jako metoda pro rutinní technologickou a laboratorní kontrolu mnoha parametrů paliv a maziv. Mezi běžné testy prováděné za účelem monitorování stavu maziva patří měření čísla celkové alkality (TBN), které udává celkové množství alkalických sloučenin. Tyto přísady mají za úkol neutralizovat kyselý zplodiny spalování paliva nebo kyselý produkt oxidací degradace oleje, jež jsou hlavním zdrojem nebezpečné koroze motoru. Parametr TBN byl získán pro vzorky opotřebovaného motorového oleje na základě vícerozměrné kalibrace FTIR dat. Analýza ukázala, že v předpovědích TBN metoda částečných nejmenších čtverců (PLS) poskytuje přesnější výsledky než regrese na hlavních komponentách (PCR).

Hlavní výhodou navržené metodiky stanovení parametru TBN chemometrickou analýzou ve spojení s FTIR spektrometrií lze spatřovat především v její rychlosti (analýza vzorku trvá asi minutu) a v absenci práce s nebezpečnými chemikáliemi. Časová náročnost stanovení TBN klasickou potenciometrickou titrací spočívá přibližně v 15 minutách vlastního měření a v 5 minutách potřebných na přípravu vzorku. Dále je třeba vzít v potaz čas potřebný na přípravu titračního činidla, údržbu elektrod apod. Metoda FTIR spektrometrie umožňuje multikomponentní analýzu parametrů maziv. Pokud se vytvoří robustní kalibrační modely i pro další ukazatele jakosti maziv (číslo kyselosti, viskozita, hustota, bod tuhnutí, bod vzplanutí aj.) – z jediného spektra lze určit řadu parametrů, přičemž pro každý z nich by běžným analytickým postupem bylo nutné provést samostatné stanovení vyžadující speciální přístro-

kové vybavení.

Nevýhodou těchto postupů je nižší přesnost v porovnání s primárními metodami. Chemometrické modely jsou ideální pro typově shodné oleje jak z hlediska jejich využití v praxi, tak zvláště dle typu základového oleje<sup>19</sup>, a proto by kalibrační standardy měly v maximální míře charakterizovat vlastnosti analyzovaných vzorků.

#### LITERATURA

- Robertson W. (ed.): *Lubrication in Practice*. Macmillan Press Ltd., Houndmills, Basingstoke 1984.
- Herguth W.: *Maint. Tech.* 5, 23 (1992).
- Sharma G. K., Chawla O. P.: *Tribol. Int'l.* 21, 269 (1998).
- Adams M. J., Romeo Me. J., Rawson P.: *Talanta* 73, 629 (2007).
- Pavoni B., Rado N., Pizza R., Frignani S.: *Ann. Di Chim.* 94, 521 (2004).
- Van de Voort F. R., Sedman J., Yaylayan V., Saint Laurent C.: *Appl. Spec.* 57, 1425 (2003).
- Dong J., van de Voort F. R., Ismail A. A., Akochi-Koble E., Pinchuk D.: *Lubr. Eng.* 56, 12 (2000).
- Rawson P., Morris G.: *FTIR Based Oil condition Monitoring for Synthetic Turbine Oils, DSTO-TR-1467*, Melbourne 2003.
- Al-Ghouti M., Al-Degs Y. S., Amer M.: *Talanta* 76, 1105 (2008).
- Al-Ghouti M., Al-Degs Y. S., Amer M.: *Talanta* 81, 1096 (2010).
- Kessner F., Šec K., Turan T.: *Tribotechnické informace 2010*, 1.
- ČSN ISO 3771: *Ropné výrobky – Stanovení čísla celkové alkality – Potenciometrická titrace kyselinou chloristou* (leden 2007).
- Meloun M., Militký J., Hill M.: *Počítačová analýza vícerozměrných dat v příkladech*, str. 60. Academia, Praha 2005.
- Wold S.: *Technometrics* 20, 397 (1978).
- Haaland D. T., Thomas E. V.: *Anal. Chem.* 60, 1193 (1988).
- Maggio R. M., Castellano P. M., Vignaduzzo S. E., Kaufman, T. S.: *J. Pharm. Biomed.* 45, 804 (2007).
- Esbensen K. H.: *Multivariate Data Analysis in Practice*. Camo AS, Oslo 2000.
- Massart D. L., Vandeginste B. G. M., Deming S. N., Michotte Y., Kaufman L.: *Chemometrics*. Elsevier, Amsterdam 1988.
- Sejkorová M., v knize: *Deterioration, dependability, diagnostics* (Rosická Z., Stodola J., Šťastný J., ed.), str. 236, 1. vydání. Handesign, Brno 2011.

**M. Sejkorová** (*Department of Transport Means and Diagnostics, University of Pardubice, Czech Republic*):  
**Determination of Total Alkalinity of Motor Oil by FTIR Spectroscopy**

The article presents methods of determination of total alkalinity of motor oils by FTIR spectroscopy using PLS and PCR chemometric algorithms. The PLS algorithm, applied to the visible spectra (1764–1520 cm<sup>-1</sup>) proved to be the most suitable algorithm in predicting TBN (total base number) values. The main advantage of the PLS model for determination of TBN (compared with potentiometric titration) is its rapidity and minimum consumption of chemicals. The FTIR-PLS models must be supplemented by new standards at certain time intervals due to lubricant and batch differences within the same type of oil.