大阪科学・大学記者クラブ 御中

(同時提供先:文部科学記者会、科学記者会)

2024年6月5日 大阪公立大学

# 氷への浸透力が鍵! 環境負荷を大幅に低減する融氷剤を実現

### <ポイント>

- ◇融氷剤が氷や雪を溶かす新たなメカニズムを解明。
- ◇機械学習により、高性能で環境に優しい融氷剤材料の組み合わせを発見。

### <概要>

融氷剤は、市街地や滑走路、航空機などの雪や氷を溶かすために使用されますが、道路や橋などの金属が錆びたり、環境水へ溶けることで公害の原因となるため、より環境に優しい材料の開発が求められています。

大阪公立大学大学院工学研究科の伊藤 魁大学院生(当時 博士前期課程 2 年)、深津 亜里紗助教、岡田 健司准教授、髙橋 雅英教授らの研究グループは、21 種類の塩の水溶液と 16 種類の有機溶媒を用いて融氷メカニズムを分析。塩と有機溶媒では融氷メカニズムに違いがあること、さらに、氷や雪の表面を覆う薄い水の膜に溶けて凝固点を下げるだけでなく、氷や雪の内部へ入り込み内側から溶かす浸透力が働いていることを明らかにしました。また、機械学習により、塩と有機

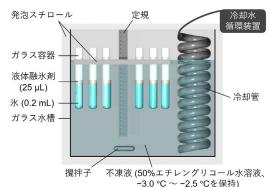


図1 本研究で作製した融氷実験装置の模式図

溶媒の組み合わせが融氷効率を向上させることを導き出し、市販されている 6 種類の融氷剤と比べて性能が高く、環境負荷を大幅に低減できる融氷剤材料の組み合わせを発見しました。本研究成果は、2024 年 6 月 7 日(金)に国際学術誌「Scientific Reports」のオンライン速報版に掲載されました。

道路や飛行機などに積もった雪や氷を融かし、より良い生活をサポートしている融氷剤について、機械学習を用いてより高機能な融氷剤を作製する方針を示せたことを光栄に思います。機械学習法の選定・適用に特に苦労しましたが、結果を可視化できたときは非常に嬉しく思いました。



伊藤 魁大学院生



古くから身近で利用されてきたものの、経験的に材料が選択されてきた 部分も大きい融氷剤について、メカニズムの観点から新たな切り口を提 案しました。実験装置の作製から膨大なデータの収集、機械学習を用い た解析まで、地道な作業をやり遂げた伊藤魁君の努力の賜物です。

深津 亜里紗助教

## <研究の背景>

融氷剤は寒冷な地域において、市街地の道路や屋根、空港の滑走路、航空機の翼などの氷や雪を溶かすために使用されています。コスト、融氷速度、設備への影響などを考慮して、市街地では塩化ナトリウム、塩化カルシウム、塩化マグネシウムなどの塩化物、滑走路では酢酸ナトリウム、ギ酸ナトリウムなどの酢酸塩やギ酸塩、航空機にはプロピレングリコールやエチレングリコールを主成分とした融氷剤が使用されています。しかし、塩化物を使用した融氷剤は、植物の枯損や土壌の固化、自動車や建造物への付着による金属の腐食の原因となり、酢酸塩やギ酸塩、プロピレングリコールやエチレングリコールは、分解されるときに多くの酸素が消費されるため、水生生物に悪影響を及ぼしてしまいます。このような問題の解決に向け、環境への負荷が小さい融氷剤の開発が求められています。

# <研究の内容>

一般的に、融氷剤による融氷メカニズムは凝固点降下によるものと考えられています。しかし、凝固点降下度が高いと必ずしも融氷能力が高くなるわけではないため、新規融氷剤の開発には融氷メカニズムの解明が重要です。融氷剤の効率を示す指標に、氷への浸透力があります。浸透力が大きい融氷剤は、氷や雪に迅速かつ均等に浸透しやすく、少量でも速やかに多くの氷を解かすことができるため、融氷剤の使用量削減や環境負荷低減に貢献できます。そのため本研究では、浸透力が高く高機能な融氷剤の実現を目指して、機械学習を用いた融氷メカニズムの解析および新規融氷剤の組成設計を行いました。

まず、融氷剤の浸透力を精密に比較するため、氷点下でも一定温度を保つことができる装置 (図 1)を作製し、21種類の塩の水溶液と 16種類の有機溶媒の、氷への浸透力を測定しました。次に、実測や化学データベースより各試料の物性値を取得し、機械学習 (XGBoost<sup>※1</sup>、SHAP<sup>※2</sup>)を用いて各試料の浸透力に影響を与える物性 (融氷因子)を解析しました。その結果、(1) 凝固点降下、(2) 融氷剤と水分子の相互作用、(3) 氷結晶へのイオンの浸透、の 3 つの融氷メカニズムが存在することが分かりました。また、有機溶媒は主に(1)によって氷の融解を起こしますが、塩の水溶液では(1)、(2)、(3)が複合的に関与していること、有機溶媒の方が(1)による融氷の効果が大きいことがわかりました。以上から、塩の水溶液と有機溶媒を混合することで互いの弱点を補い合い、浸透力の向上が見込めると考えました。

そこで、有機溶媒の中で比較的環境負荷の小さいプロピレングリコール (PG) を選択し、複数の塩類の水溶液と混合して浸透力を評価したところ、ギ酸ナトリウム水溶液との混合物が最も高い浸透力を示しました。さらに、この混合液は市販されている 6 種類の融氷剤と比較して高い浸透力を示しました (図 2)。この浸透力の向上は、塩の水溶液と有機溶媒の組み合わせによる相乗効果によると考えられます。

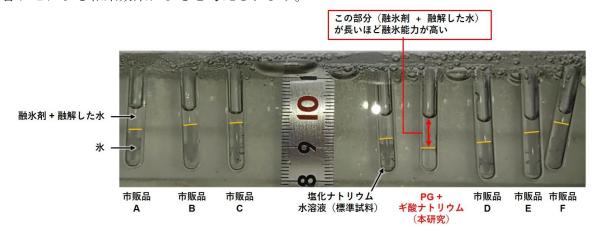


図2 本研究で提案した融氷剤と市販品との融氷能力の比較(融氷剤滴下30分後)

## <期待される効果・今後の展開>

本研究成果は、融氷プロセスに関する新たな知見を提供するとともに、塩類と有機溶媒の長所を組み合わせた、効果的で環境に優しい融氷剤を提案するものです。

本研究で提案した混合物は、典型的な塩系融氷剤に比べて腐食作用が低く、有機系融氷剤に比べて酸素消費量が少ないため、除氷作業や防氷作業の簡便化や融氷剤の使用量削減による環境負荷の低減を可能とする融氷剤への利用が期待されます。

## <資金情報>

本研究は、JSPS 科研費 基盤研究(A)(JP20H00401)、若手研究(JP22K14492)、泉科学技術振興財団、関西エネルギー・リサイクル科学研究振興財団、日本板硝子材料工学助成会の支援を受けて行われました。

## <用語解説>

- ※1 XGBoost…eXtreme Gradient Boosting の略で、機械学習アルゴリズムの一つ。他の多くの手法に比べて、特に予測精度が高いことで知られている。
- ※2 SHAP…SHapley Additive exPlanations の略で、機械学習モデルの予測に対する各変数の影響を説明するための手法。

## <掲載誌情報>

【発表雑誌】Scientific Reports

【論 文 名】Machine learning-assisted chemical design of highly efficient deicers

【著 者】Kai Ito, Arisa Fukatsu\*, Kenji Okada and Masahide Takahashi\*

【掲載 URL】 <a href="https://doi.org/10.1038/s41598-024-62942-y">https://doi.org/10.1038/s41598-024-62942-y</a>

【研究内容に関する問い合わせ先】

大阪公立大学大学院工学研究科

教授 髙橋 雅英 (たかはし まさひで)

TEL: 072-254-9309

E-mail: masa@omu.ac.jp

助教 深津 亜里紗(ふかつ ありさ)

TEL: 072-254-9812

E-mail: fukatsu@omu.ac.jp

【報道に関する問い合わせ先】

大阪公立大学 広報課

担当:竹内

TEL: 06-6605-3411

E-mail: koho-list@ml.omu.ac.jp