

## 揮発性有機化合物の室内放散・吸脱着等のモデリングとその数値予測

### Physical Model and Numerical Analysis of VOCs Emission from Building Materials within room

山本 明, 東京大学大学院,  
村上 周三, 東京大学生産技術研究所,  
加藤 信介, 東京大学生産技術研究所,  
近藤 靖史, 武藏工業大学,  
伊藤 一秀, 東京大学大学院,  
YAMAMOTO Akira, Univ. of Tokyo,  
MURAKAMI Shuzo, IIS Univ. of Tokyo,  
KATO Shinsuke, IIS Univ. of Tokyo,  
KONDO Yasushi, Musashi Industrial Univ.,  
ITO Kazuhide, Univ. of Tokyo,

東京都港区六本木 7-22-1, [akiray@cc.iis.u-tokyo.ac.jp](mailto:akiray@cc.iis.u-tokyo.ac.jp)  
東京都港区六本木 7-22-1, [murakami@iis.u-tokyo.ac.jp](mailto:murakami@iis.u-tokyo.ac.jp)  
東京都港区六本木 7-22-1, [kato@iis.u-tokyo.ac.jp](mailto:kato@iis.u-tokyo.ac.jp)  
東京都世田谷区玉堤 1-28-1, [ykondo@eng.musashi-tech.ac.jp](mailto:ykondo@eng.musashi-tech.ac.jp)  
東京都港区六本木 7-22-1, [kazuhide@cc.iis.u-tokyo.ac.jp](mailto:kazuhide@cc.iis.u-tokyo.ac.jp)  
7-22-1, Roppongi, Minato-ku, Tokyo, Japan  
7-22-1, Roppongi, Minato-ku, Tokyo, Japan  
7-22-1, Roppongi, Minato-ku, Tokyo, Japan  
1-28-1, Tamadutsumi, Setagaya-ku, Tokyo, Japan  
7-22-1, Roppongi, Minato-ku, Tokyo, Japan

Indoor air quality is greatly affected by the emission and sorption of VOCs (Volatile Organic Compounds) from building materials. In this paper, the emission and sorption (adsorption / desorption) of such compounds and their distribution in a room are analyzed by a computational fluid dynamics (CFD) technique. The physical process of emission and sorption from building materials are mathematically modeled. Contaminant distribution in a room is calculated with the models. The adsorbent has little effect on room air concentration when the amount is little. However, the enough adsorbent in room makes lower concentration and good indoor air quality.

#### 1. 序

近年、建材等から放散される VOCs (揮発性有機化合物: Volatile Organic Compounds) 等による室内空気汚染が問題となっており、IAQ(Indoor Air Quality: 室内空気質)予測モデルの開発が進められている。これまでに様々なモデルが提案されているが、VOCs 等が建材表面あるいは多孔質材料の内部において吸脱着・拡散する現象について、その物理性状を厳密にモデル化し予測手法に組み込んだ例は少ない。本報では VOCs の建材からの放散現象のモデル化および数値解析手法について述べる。さらに VOCs の汚染分布予測を簡易に行うため、建材が、① VOCs を相当量含有し専ら室内汚染源となる建材と、② 吸脱着効果により室内濃度に影響を及ぼす建材とをそれぞれ個別にモデル化した予測モデルを示す。また、このモデルを用い、室内濃度汚染分布予測を CFD 解析により検討した。

#### 2. 支配方程式<sup>1,2)</sup>

##### 2-1 モル分率による VOCs 量の評価と各種単位系(表 1)

空気中に放散される VOCs は単一物質とみなしてモデル化する。VOCs 量を気中濃度で表す方式にはさまざまな方法がありえる。ここでは、VOCs の分圧  $p$  に対する大気圧  $P$  の比であるモル分率(もしくは分圧比) $C_{m/m}$ [mol/mol]を使用する<sup>3,4)</sup>。モル分率  $C_{m/m}$  は、分圧  $p$ [Pa]や質量濃度  $C_{w/w}$ [g/g]、IAQ 評価でよく用いられる濃度(単位体積あたりの VOCs 量) $C$ [g/m<sup>3</sup>]に換算されることが可能である((1)式)。

##### 2-2 室内空気中の輸送方程式(表 2)

空気中に放散された VOCs は室内気流により移流・拡散され吸込口より排出される((2)式)。本報では境界粘性低層の拡散現象を解明するため、低 Re 型  $k\cdot\epsilon$  モデルに基づく気流解析を使用する。

##### 2-3 建材中の輸送方程式(表 2、図 1)

VOCs は主に建材空隙中を拡散移動し、建材実質部での拡散は一般に無視される。空隙間では気相による濃度勾配による拡散からモル分率  $C_{m/m}$  を用いて(3)式、実質部では空隙との吸脱着により吸着量  $C_{ad}$  を用いて(4)式と表現される。

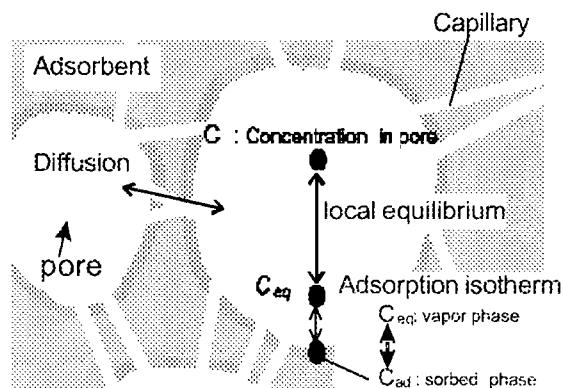
##### 2-4 吸着等温式(表 2)

温度一定条件における平衡状態のモル分率  $C_{eq}$  と吸着量

Table 1. Concentration unit of VOCs

$$C_{m/m} = \frac{p}{P} = \frac{n/V}{n_{air}/V} = C_{w/w} \cdot \frac{M_{air}}{M_{VOC}} = \frac{C}{\rho_{air}} \cdot \frac{M_{air}}{M_{VOC}} \quad (1)$$

$C_{m/m}$ : Molar fraction (Ratio of partial pressure) of VOCs [mol<sub>VOC</sub>/mol<sub>air</sub>] ( $= [Pa_{VOC}/Pa_{air}]$ )  
 $p$ : Partial pressure of VOCs[Pa]  
 $P$ : Total pressure[Pa]  
 $n$ : Number of mole of VOCs[mol]  
 $n_{air}$ : Number of mole of mixed air[mol]  
 $V$ : Unit volume [m<sup>3</sup>]  
 $\rho_{air}$ : Mixed air density[g<sub>air</sub>/m<sup>3</sup>]  
 $C_{w/w}$ : Weight density[g<sub>voc</sub>/g<sub>air</sub>]  
 $C$ : Concentration(VOC weight per unit volume)[g<sub>voc</sub>/m<sup>3</sup>]  
 $M_{VOC}$ : Molecular volume of VOCs[g/mol]  
 $M_{air}$ : Molecular volume of mixed air[g/mol]



$C_{eq}$ : The vapor phase concentration in equilibrium with the solid phase concentration  $C_{ad}$  on the surface of material [Pa<sub>VOC</sub>/Pa<sub>air</sub>]  
 $C_{ad}$ : The solid (adsorbed) phase concentration on the surface of pores [mol<sub>VOC</sub>/mol<sub>soi</sub>]

Fig. 1 Detailed Structure within material

$C_{ad}$  の関係は吸着等温式<sup>1</sup>((6)式)により表現される。建材中の微小空隙中では局所的に吸着平衡状態となり  $C_{m/m} = C_{eq}$  の関係が成り立つ。

## 2-5 建材中の内部拡散に関する簡略輸送方程式(表2)<sup>2,3)</sup>

(3),(4),(6)式より、内部拡散支配型材料内の VOCs 輸送に関する簡略化された拡散輸送方程式((7)式)が得られる。このとき  $D_c$ ((8)式)は建材からの VOCs の放散履歴により実験的に推定する<sup>2,4,5)</sup>。また、建材表面から空気中への VOCs 輸送量と、建材内から建材表面への輸送量は保存される((9)式)。内部拡散支配型の建材からの VOCs の放散過程は最終的に(2)(7)(9)式により記述される。

## 2-6 吸脱着面における簡易界面汚染質輸送(表2、図2)

図2に示すように建材内部の吸脱着を陽に解析せず、建材の見かけの表面でのみで建材全体の吸脱着効果を評価する簡易モデルを考察する<sup>6,7)</sup>。吸脱着効果の大きい建材表面において、吸着材の見かけの微小表面要素  $dS$  を挟み、室内方向と吸着材内部方向に微小厚  $dh$  で構成される空気中と吸着材中の二つのC.V.を考える。(3)<sup>4,5)</sup>(4)式をそれぞれのC.V.で体積積分を行う。ただし空気中微小C.V.内は吸着平衡状態にありモル分率の時間変化がないと仮定する。これらを整理して簡易モデルを得る((12)式)。ここで  $\rho'_{sol}$  (=  $\rho_{sol} dS/dV$ )は吸着材の面密度を表す。吸脱着面からの VOCs の放散過程は最終的に(2)(12)式により記述される。

Table 2. Physical models for VOC transfer

### 1. Transportation in room air

$$\frac{\partial C_{m/m}}{\partial t} + \frac{\partial (u_i C_{m/m})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \left( D_a + \frac{v_t}{\sigma} \right) \frac{\partial C_{m/m}}{\partial x_j} \right) \quad (2)$$

$D_a$  : Molecular diffusion coefficient of VOCs in room air [ $m^2/s$ ]

$\sigma$  : Turbulent Planckl number( $\approx 1.0$ )

$v_t$  : Turbulence eddy viscosity

### 2. Diffusive and sorptive transportation in materials

#### Through the pores (air phase)

$$k \frac{\partial C_{m/m}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D'_c \frac{\partial C_{m/m}}{\partial x_i} \right) - \frac{M_{air}}{\rho_{air}} adv \quad (3)$$

#### On the surface of the pores (sorbed phase)

$$\rho'_{sol} \frac{\partial C_{ad}}{\partial t} = adv \quad (4)$$

$$adv = -\alpha S (C_{eq} - C_{m/m}) \quad (5)$$

$adv$  : Adsorption rate (per volume)[mol/m<sup>3</sup>s]

It happens only on the surface of pores.

$k$  : Porosity in material [ $m^3/m^3$ ]

$D'_c$  : Molecular diffusion coefficient of VOCs in the pores of the material [ $m^2/s$ ]

$\rho_{sol}$  : Net density of the adsorbent [mol<sub>sol</sub>/m<sup>3</sup>]

$\alpha$  : Sorptive rate between pores and surface [mol<sub>VOC</sub>/m<sup>2</sup>s(mol<sub>VOC</sub>/mol<sub>sol</sub>)]

$S$  : Surface area of pores per unit volume [ $m^2/m^3$ ]

#### 3. Generalized Adsorption Isotherm

$$C_{ad} = f(C_{eq}) \quad (6)$$

### 4. Simple transportation model governed by effective diffusion

$$\frac{\partial C_{m/m}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_c \frac{\partial C_{m/m}}{\partial x_i} \right) \quad (7)$$

$$D_c = D'_c / (k + \rho'_{sol} \cdot M_{air} / \rho_{air} \cdot \partial f / \partial C_{m/m}) \quad (8)$$

$D_c$  : Effective diffusion coefficient of VOCs in material [ $m^2/s$ ]

### 5. Boundary conditions at the air-material interface

It is expressed as the conversion law

at the surface of the material.

$$-D_c \frac{\partial C_{m/m}}{\partial x} \Big|_{B-} = -D_a \frac{\partial C_{m/m}}{\partial x} \Big|_{B+} \quad (9)$$

$B$ : Air-material surface,

$B-$ : Material-side region,  $B+$ : Air-side region

### 6. Simple transportation model on sorptive surface

Volume integration is performed for Eqs.(2) and (3) in each C.V.

In air

$$0 = D_a \frac{\partial C_{m/m}}{\partial x} \Big|_{B-} dS - \frac{M_{air}}{\rho_{air}} adv \cdot dV \quad (10)$$

On adsorbent

$$\rho'_{sol} \frac{\partial C_{ad}}{\partial t} dV = adv \cdot dV \quad (11)$$

Then,

$$-\rho'_{sol} D_a \frac{\partial C_{m/m}}{\partial x} \Big|_{B-} = -M_{air} \left( \rho'_{sol} \frac{\partial C_{ad}}{\partial t} \right) dV = -\rho'_{sol} M_{air} \frac{\partial C_{ad}}{\partial t} = -ads \quad (12)$$

$ads$  : Adsorption rate (per area)[mol/m<sup>2</sup>s] (negative of ads corresponds to desorption rate)

$\rho'_{sol}$  : Plane density of the material( $= \rho_{sol} dV/dS$ )[mol<sub>sol</sub>/m<sup>2</sup>]

$C_{m/m} \Big|_{B-}$  : Molar fraction on the surface of sorptive material[Pa<sub>VOC</sub>/Pa<sub>air</sub>]

#### 1. Henry Isotherm

$$C_{ad} = k_h \cdot C_{eq} = k_h \cdot C_{m/m} \Big|_{B-} \quad (13)$$

$k_h$  : Henry's coefficient [-]

Adsorption rate :  $ads$

$$ads = \rho'_{sol} M_{air} k_h \frac{\partial C_{m/m}}{\partial t} \Big|_{B-} \quad (14)$$

#### 2. Langmuir Isotherm

$$C_{ad} = \frac{C_{ad} k_l C_{eq}}{1 + k_l C_{eq}} = \frac{C_{ads} k_l C_{m/m} \Big|_{B-}}{1 + k_l C_{m/m} \Big|_{B-}} \quad (15)$$

$k_l$  : Langmuir's coefficient [1/(Pa/Pa)]

$C_{ads}$  : Concentration of saturated adsorption[Pa/Pa]

Adsorption rate :  $ads$

$$ads = \frac{\rho'_{sol} M_{air} C_{ads} k_l}{(1 + k_l C_{m/m} \Big|_{B-})^2} \frac{\partial C_{m/m}}{\partial t} \quad (16)$$

#### 3. PolanyiDR Isotherm

$$C_{ad} = C_{ads} \exp \left[ -k_p \left\{ \left( \frac{T}{V_M} \right) \ln \left( \frac{C_{sat}}{C_{eq}} \right) \right\}^2 \right] \quad (17)$$

$k_p$  : PolanyiDR's coefficient [-]

$V_M$  : Molar volume [cm<sup>3</sup>/mol]

T : Absolute temperature[K]

$C_{sat}$  : Concentration of saturated adsorption [Pa/Pa]

$C_{sat}$  : Ratio of saturated vapor pressure[Pa/Pa]

Adsorption rate :  $ads$

$$ads = \frac{2\rho'_{sol} M_{air} k_p (T/V_M)^2 C_{ads}}{C_{m/m}} \quad (18)$$

$$\ln \left( \frac{C_{sat}}{C_{m/m} \Big|_{B-}} \right) \exp \left[ -k_p \left\{ \left( \frac{T}{V_M} \right) \ln \left( \frac{C_{sat}}{C_{m/m} \Big|_{B-}} \right) \right\}^2 \right] \frac{\partial C_{m/m}}{\partial t}$$

### 3. 吸着等温式及びその吸着速度(表2、図3)

#### 3-1 Henry型吸着等温式<sup>6)</sup>

気中 VOCs 濃度が希薄であるとき、VOCs の吸着量とモル分率に線型関係が成り立つ。これを Henry 型吸着等温式((13)式)と呼び、吸着速度  $ads$  は(14)式と表現される。

#### 3-2 Langmuir型吸着等温式<sup>6)</sup>

吸着質が飽和吸着量  $C_{ads}$  に達すると、それ以上吸着しないことをモデル化した Langmuir 型吸着等温式 ((15)式)がある。このときの吸着速度  $ads$  は、(16)式と表現される。

#### 3-3 PolanyiDR 型吸着等温式<sup>7,8)</sup>

多孔質固体上で起こる物理吸着現象を定式化したものである。吸着質が吸着材表面の微小空間に充填される時、吸着ボテンシャル理論による自由エネルギーが最小となるように振る舞うことに基づいている。吸着材と吸着質の関係はその種類にかかわらず特性曲線により表すことができ、特に等温過程では(17)式と表現できる。このときの吸着速度  $ads$  は、(18)式となる。PolanyiDR 型吸着等温式には吸脱着現象の温度依存性が陽に組み込まれており、温度変化を考慮した吸脱着効果を組み込んだ室内空気質解析を行うのに都合がよい。

#### 3-4 吸着等温式で用いられる定数の推定

図3にYu<sup>9)</sup>の行った活性炭へのトルエン吸着実験結果(25°C)を示す。これは比較的空気中での低濃度のトルエンのモル分率  $C_{eq} (= C_{ad})$  に対する活性炭への吸着量  $C_{ad}$  の関係を示している。これを基に Henry 型、Langmuir 型、PolanyiDR 型吸着等温式で用いられる定数を推定した(表3)。

### 4. 解析対象及び解析条件

床面に内部拡散支配型の汚染源である SBR(polypropene Styrene Butadiene Rubber)と、左右壁面に活性炭の吸着材を配置した2次元居室を対象として解析する(図4)。吹出・吸込口幅  $L_0 (= 0.06m)$ 、吹出風速  $U_0$  及び空気密度  $\rho_{air}$  で諸量の無次元化を行う。解析条件などについては表4に示す。

#### 4-1 解析対象空間(2次元)

この解析対象については精密模型実験により詳細な風速データが得られている<sup>10)</sup>。吹出風速を  $1/10U_0 (= 0.1[m/s])$ 、換気回数  $1.6[\text{回}/\text{h}]$ とした場合の流れ場を低 Re 型  $k-\epsilon$  モデル(MKC model)を用いて解析した<sup>3,11)</sup>。

#### 4-2 床面(汚染源)

SBR(合成ゴム)の床を汚染源とする。合成ゴムの厚さは  $0.025L_0 (= 1.5mm)$  とし、合成ゴム中の VOCs に関しては均一に初期吸着濃度  $C_0 = 1.92 \times 10^3 [\text{g}/\text{m}^3]$  ( $\rho_0 = 5.26 \times 10^3 [\text{Pa}]$ ) を与える<sup>4,5)</sup>。

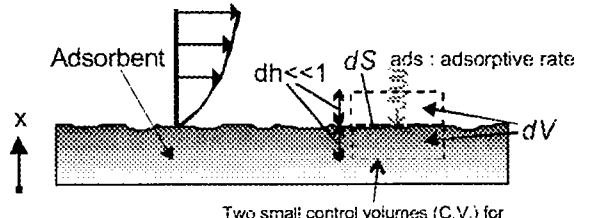
#### 4-3 壁面(吸着材)

吸着材を設置した壁面は吸着材の面密度や材料特性により吸着量が非常に異なる。ここでは、石炭を原料とした活性炭を対象とした。活性炭は一般に  $1.0[\text{g}]$ あたり吸着の有効表面積が約  $10^3 [\text{m}^2]$  である。壁面面積が壁面に設置した活性炭の総表面積に等しくなるよう吸着面の面密度  $\rho'_{sol}$   $= 1.0 \times 10^{-3} [\text{g}/\text{m}^2] (= 8.33 \times 10^2 [\text{mol}/\text{m}^2])$  を基本ケースとした。

### 5. 解析ケース(表5)

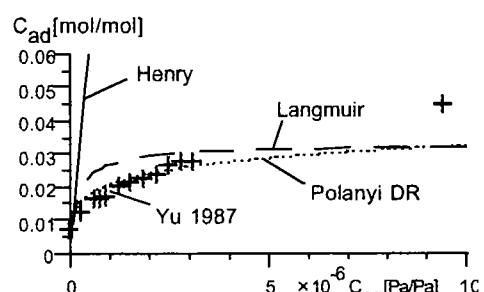
壁面に吸着材を設置せず床面に内部拡散支配型の汚染源のみをもつ場合を基本ケース(Case1)とする。Case2, Case3-1, Case4 は壁面に吸着材のあるケースで、それぞれ実験<sup>9)</sup>により推定した Henry 型、Langmuir 型、PolanyiDR 型吸着等温式を利用する。

また、Langmuir 型吸着等温式を対象として、壁面に設置する活性炭の面密度を  $10^2$ 倍、 $10^4$ 倍と増やしたケースを Case3-2, Case3-3 として検討する。

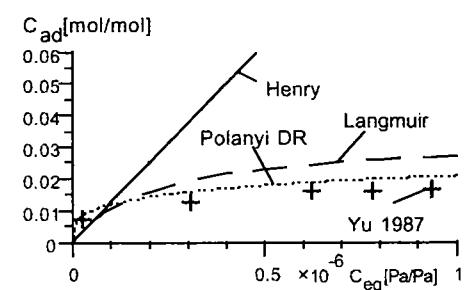


$dV$ : Volume of the C.V.,  $dS$ : Surface element of the C.V.  
 $dh$ : Thin thickness of the C.V.

Fig. 2 Modeling of sorption on sorptive material



(a)  $C_{eq}$  vs.  $C_{ad}$  in high concentration of  $C_{eq}$



(b)  $C_{eq}$  vs.  $C_{ad}$  in low concentration of  $C_{eq}$

Fig.3 Representative adsorption isotherm and experimental data

Table. 3 Parameters in adsorption isotherms

Adsorption Isotherm	Parameters (25 °C)
Henry Isotherm	$k_h [\cdot] = 1.25 \times 10^5$
Langmuir Isotherm	$k_l [1/(mol/mol)] = 4.79 \times 10^6$ $C_{ads} [mol/mol] = 3.26 \times 10^2$
PolanyiDR Isotherm	$C_{sat} [\text{Pa}/\text{Pa}] = 3.94 \times 10^2$ $k_p [(cm^3/mol \cdot K)^2] = 1.3 \times 10^{-3}$ $C'_{ads} [mol/mol] = 5.6 \times 10^2$ $V_M [cm^3/mol] = 106.0$

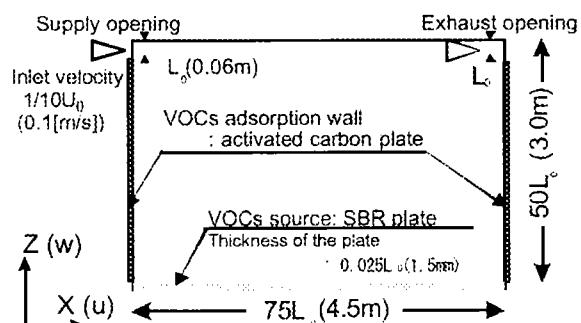


Fig. 4 Room model (2 dimension)

## 6. 解析結果・考察

### 6.1 平均風速分布

本解析では、壁面近傍の粘性低層を精密に解析するため、 $y^+=10$  内に 3 メッシュ以上確保している。図 5,6 に示すように低 Re 型  $k-\epsilon$  モデルによる解析結果は精密模型実験結果と非常によく一致し、充分な流れ場を予測することを示す。

### 6.2 室内空間における VOCs 濃度履歴

室内に汚染質が存在しない状態において汚染源、吸着材を設置し、その後から 24 時間後までの室平均濃度履歴を図 7 に示す。濃度  $C$  を汚染源 SBR 内の初期吸着濃度  $C_0 (=1.92 \times 10^{-3} [\text{g}/\text{m}^3])$  で無次元化した値を示す。吸着面の有無による気相濃度の変化はそれほど大きくななく、約 6 時間後以降の室平均濃度に対して吸脱着の影響はほとんど見られない。ただしこのケースでは、壁面に設置された吸着材の量が極めて少ないと留意されたい。24 時間経過後の室平均無次元濃度  $C/C_0$  は  $0.22 \times 10^{-6}$  までに減少し、ほぼ定常状態となる(濃度分布は省略)。なお、吸着材のない Case1 に比べて吸着材を設置した Case2, Case3-1 では、解析初期における室平均濃度の最大値が低下しており、吸着面が室内の VOCs 濃度の上昇を抑制していることがわかる。Case2 と Case3-1 において吸着面近傍の VOCs 濃度は非常に希薄なので、Henry 型、Langmuir 型吸着等温式の評価がほとんど変わらず違いは見られない。希薄濃度域で吸着量を大きく評価する PolanyiDR 型吸着等温式を用いた Case4 では室平均濃度の最大値が低下している。

さらに、Case3-1 において吸着材の量を増加させた場合、室平均濃度の最大値が低下し、Case3-3 においては、落ち着いてからも室平均濃度が約半分にまで低下している様子が見られる。

### 6.3 室内濃度分布

解析開始から 1 時間後の Case1 と Case4 における VOCs の室内濃度分布を図 8 に示す。吸着材が壁面に設けられることにより、室全体に高濃度の VOCs が拡散することが抑制されている。気流性状の影響により左壁面近傍の汚染質濃度が右壁面近傍に比べて 4 倍ほど(1 時間経過後)高い。対応して左壁面の吸着量は右壁面に比べかなり大きく、吸着材は室全体の濃度分布の関連から最適配置がありえることがわかる。定常状態になるにつれて室内濃度分布への吸着材の影響は小さくなる。24 時間後の無次元濃度  $C/C_0$  の最大値はコーナー部床付近で  $2.43 \times 10^{-6}$  と平均濃度の約 11.0 倍となる(図は省略)。

### 6.4 吸脱着面における吸着量の履歴・分布(図 9)

今回の解析対象の場合、汚染質は室内気流により主に左壁面の方向に輸送されることから(図 8)、吸脱着量は左壁面側が大きくなる。左壁面への単位面積あたりの平均吸着量  $\rho_{sol}^+ \cdot C_{ad}^{+4} [\text{g}/\text{m}^2]$  の解析開始から 24 時間の履歴を図 9 に示す。汚染源 SBR プレートの初期濃度  $C_0$  を利用した、SBR プレートの単位面積あたりの VOC 初期吸着量  $C_{ad0} (= 0.288 [\text{g}/\text{m}^2])$  により無次元化した値を示す。壁への吸着量は  $\rho_{sol}^+$  を小さく設定したケースでは汚染源に比べて極めて少ない。Case2 は Case3-1 に比べて解析開始後の高濃度領域で吸着量を大きく評価している。また Case4 では継続的に吸着量が大きく評価される。吸着材を増やしたケースについて Case3-2 において吸着材の量を増加させることにより単位面積あたりの吸着量は増加するが、吸着材の増加量ほどの効果は見られない。これは吸着材の吸着能力(吸着速度)に限界があるからだと思われる。

## 7. 結論

(1) VOCs の建材内部、特に多孔質材料の内部における吸脱着を考慮した物質拡散方程式を導出した。

Table.4 Conditions of numerical analysis

Number of grid points (2 D)
Air regions : $68(x) \times 64(z) (=4.5 \text{m}^W \times 3.0 \text{m}^H)$
Material region dominated by internal diffusion : $68(x) \times 41(z) (=4.5 \text{m}^W \times 1.5 \times 10^{-3} \text{m}^H)$
Width of the mesh adjacent to the surface : $0.6 \times 10^{-3} \text{m}$
Region of adsorptive surface for side walls: $55(z) (=2.94 \text{m}^H) \times 2$
Reynolds number: $U_0 L_0 / \nu = 4.2 \times 10^3$
Molecular diffusion coefficient of VOCs in air : $D_a = 5.94 \times 10^{-6} [\text{m}^2/\text{s}]$
Effective diffusion coefficient of VOCs in the SBR : $D_c = 1.1 \times 10^{-11} [\text{m}^2/\text{s}]$
Initial VOC concentration in the SBR : $C_0 = 1.92 \times 10^{-3} [\text{g}/\text{m}^3]$ $(\rho_{air} = 5.26 \times 10^3 [\text{Pa}], C_{initial} = 0.05 [\text{Pa}/\text{Pa}])$
Inflow velocity : $0.1 U_0 (= 0.1 [\text{m}/\text{s}])$
air change rate : $1.6 [1/\text{h}]$
Molecular weight: $M_{tol} = 92.0 [\text{g}/\text{mol}] (\text{as toluene})$ $M_{air} = 28.8 [\text{g}/\text{mol}] \quad M_{car} = 12.0 [\text{g}/\text{mol}] (\text{as carbon})$
Air Density : $\rho_{air} = 1.20 \times 10^3 [\text{g}/\text{m}^3]$
Atmospheric pressure : $P = 1.01 \times 10^5 [\text{Pa}]$

Table. 5. Cases analyzed

Adsorption Isotherm	Case Number
SBR plate only	Case 1
Henry Isotherm	Case 2 ( $\rho_{sol}^+ = 1 \times 10^{-3} [\text{g}/\text{m}^2]$ )
Langmuir Isotherm	Case 3-1 ( $\rho_{sol}^+ = 1 \times 10^{-3} [\text{g}/\text{m}^2]$ ) Case 3-2 ( $\rho_{sol}^+ = 1 \times 10^{-4} [\text{g}/\text{m}^2]$ ) Case 3-3 ( $\rho_{sol}^+ = 1 \times 10^{-5} [\text{g}/\text{m}^2]$ )
PolanyiDR Isotherm	Case 4 ( $\rho_{sol}^+ = 1 \times 10^{-3} [\text{g}/\text{m}^2]$ )

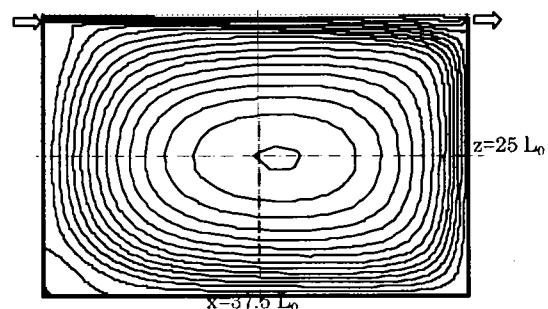


Fig. 5 Stream line (Analytical result by CFD)

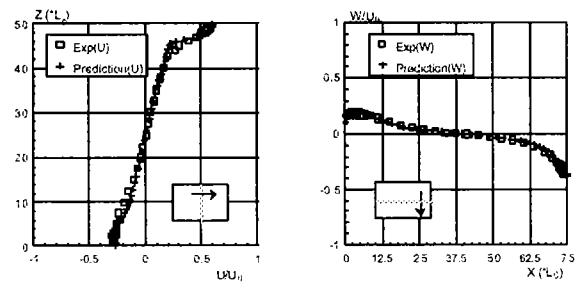


Fig. 6 Results of mean velocity

- (2) 建材内部の拡散の支配的な建材に対するモデルのほかに、室内空気からの吸着を建材表面における吸脱着のみで代表した簡易なモデルを作成し、室内空気の化学物質汚染質計算への組み込みを行った。
- (3) 放散量の時間変化の小さい VOCs 発生源があり吸着材の影響が小さい場合、解析初期に発生する高濃度の VOCs 放散は抑制されるが、定常状態に近づくにつれてその影響は小さくなる。しかし、室平均濃度の最大値は低下するので、間欠的な換気などを行う非定常状態では吸着効果が室内濃度低下に有効であると思われる。また、吸着材の効果が増すにつれて室平均濃度を半分程度まで減少させることができるとなる。
- (4) 室内濃度分布は一様でないので、吸着材の設置場所は重要となる。

#### 注

- 1)VOC 量の指標は物質移動の原理により忠実である観点からモル分率  $C_{\text{mol}}$  で表現した方程式を用い、数値解釈結果に関しては理解の容易さから濃度 C(単位体積当たりの質量)で表現した。
- 2)VOCs の物質移動を建材表面のみに着目した簡易なモデル化により計算負荷を減らせるという利点がある。
- 3)吸着材表面では  $D_c$  は  $Da$  に等しくなると考えられる。
- 4)  $C'_{ad}$  は、吸着材の単位質量当たりの吸着質量を表す。

$$C'_{ad} = C_{ad} M_{VOC} / M_{sol}$$

#### 参考文献

- (1) 加藤他：揮発性有機化合物の放散・吸脱着現象のモデルリングとその数値予測に関する研究(その 9) 空気調和・衛生工学会梗概集 1999.9
- (2) 村上、加藤、山本他：同題(その 1,5,6) 日本建築学会梗概集 1999.9
- (3) 加藤他：室内化学物質による呼吸空気質汚染の数値解析とその制御に関する研究(その 1) 日本建築学会梗概集 1998.9
- (4) Bluyssen et al, European database of indoor air pollution sources, TNO Report 95-BBI-R0826. 1995
- (5) X.Yang and Q. Chen et al, Prediction of short-term and long-term VOC emissions from SBR bitumen-backed carpet under different temperatures, ASHRAE 1998
- (6) 荒井他:工学のための物理化学 pp121-123
- (7) Shen et al : Adsorption Technology for Air and Water Pollution Control, chap.II,XIII Chelsea MI Lewis Publishers Inc., pp.21-47,256-277 1992
- (8) Axley. New mass transport elements and compounds for the NIST IAQ model. NIST GCR pp.95-676 1995.
- (9) Yu et al, Adsorption of trace organic contaminants in air, Royal Institute of Technology 1987
- (10) 鈴木、伊藤、加藤、村上：不完全混合室内的居住域換気効率の評価に関する研究(その 3) 空気調和衛生工学会講演論文集 1996.9
- (11) Chikamoto et al: Numerical Simulation of Velocity and Temperature Fields within Atrium based on Modified  $k-\epsilon$  model Incorporating Damping Effect due to Thermal Stratification Room Air Convection and Ventilation Effectiveness, ASHRAE Transaction 1997 pp.501-509

#### 謝辞

本研究の一部は、科学技術庁科学技術振興調整費(生活・社会基盤研究 生活者ニーズ対応研究「室内化学物質空気汚染の解明と健康・衛生居住環境の開発」)に基づいて設けられた建築学会学術委員会・室内化学物質空気汚染調査研究委員会(委員長:村上周三 東京大学生産技術研究所教授)の活動の一環として実施したものである。関係各位に深甚なる謝意を表する次第である。

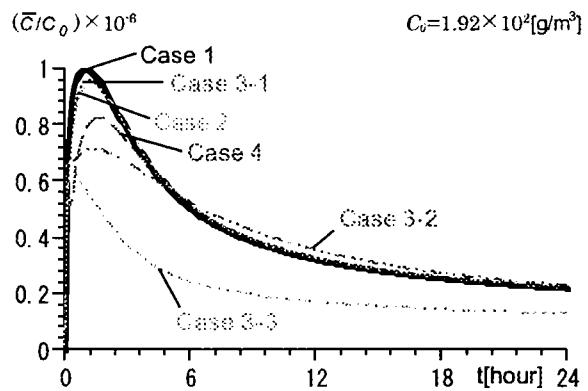
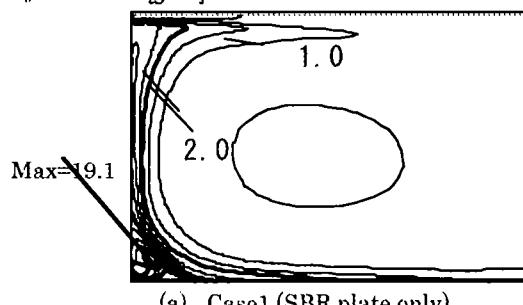
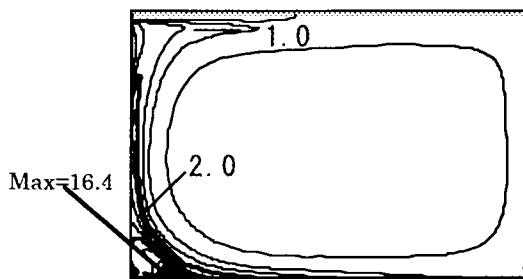


Fig. 7 Time history of room-averaged concentration

$$C_0 = 1.92 \times 10^2 [\text{g/m}^3]$$



(a) Case 1 (SBR plate only)



(b) Case 4 (PolanyiDR Isotherm)

Fig. 8 Concentration distribution of VOCs  
(1 hour after the start of analysis)

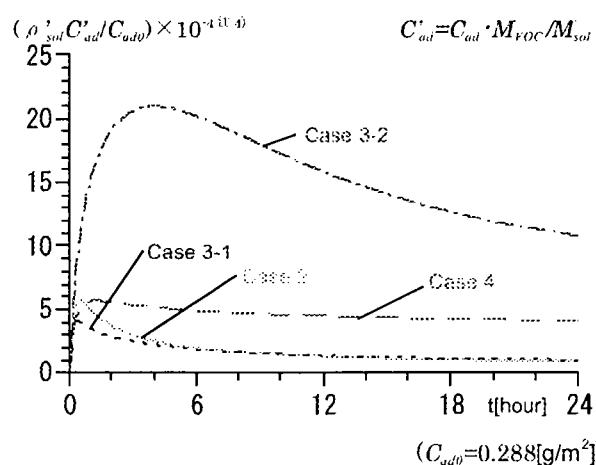


Fig. 9 Time history of solid phase concentration of VOCs adsorbed by sorptive material