

# パッシブ型化学物質サンプラーの内部空間を対象とした物質拡散場解析 Numerical Analysis of VOC Emission and Diffusion in Passive Flux Sampler

小沢 麻理\* 伊藤 一秀\*\* 田辺 新一\*\*\* 熊谷 一清\*\*\*\*  
Mari OZAWA, Kazuhide ITO, Shin-ichi TANABE, Kazukiyo KUMAGAI

Keyword : Passive Flux Sampler, ADSEC, Numerical Prediction

## はじめに

化学物質放散速度の測定法が規格化され、更にホルムアルデヒドに関しては放散速度に応じた建材ラベリングが開始されている。JIS A 1901 では20L から 1000L の容積を有する小形チャンバーを用いた化学物質放散速度の測定法が示されており、既に多くの測定例が報告されている。しかし、放散速度に応じた建材のスクリーニングや現場での簡易測定等を意図した場合には、小形チャンバー等を用いたアクティブ型の測定法に対して、簡易的なパッシブ型の放散速度測定法の適用が求められている。パッシブ型の放散速度測定装置に関しては、すでに各種の研究機関で性能評価が行われ、現場測定等に適用された事例の報告がある。しかしながら、パッシブ型の放散速度測定装置内部における化学物質の拡散現象に関しては、十分な予測・解析を行った例は無く、またその適用範囲についても十分な知見が蓄積されているとは言い難い。

このような背景のもと、本研究では代表的なパッシブ型の放散速度測定装置内部の化学物質拡散現象を数値解析により再現し、パッシブ型サンプラーを放散速度測定に適用する際の問題点等を明らかとすることを目的とする。

## 1. パッシブ型の放散速度測定装置

本報では、代表的なパッシブ型の放散速度測定装置である ADSEC ならびに PFS (Passive Flux Sampler) を解析対象とする。

ADSEC とは、早稲田大学田辺研究室で開発されたパッシブ型の放散速度測定装置であり、図 1 に示すように、SUS304 ステンレス製の台形容器を用いた簡易測定装置である。台形容器上面から DSD-DNPH 等の捕集剤を挿入することで、容器下面から放散される対象化学物質を捕集する構造となっている。

パッシブフラックスサンプラー(PFS)は、東京大学柳沢研究室で開発されているパッシブ型の放散速度測定装置であり、図 2 に示すように内径 41mm、高さ 15mm 程度のガラス製シャーレを用いた簡易測定装置である。シャーレ内部の上面には吸着剤 (Carbotrap 20/40 mesh 等) がステンレスメッシュにより設置されており、シャーレ下面に設置された建材から放散される化学物質を上面で吸着捕集する構造となっている。シャーレ周壁の境界条件として化学物質の Free Slip を仮定すること

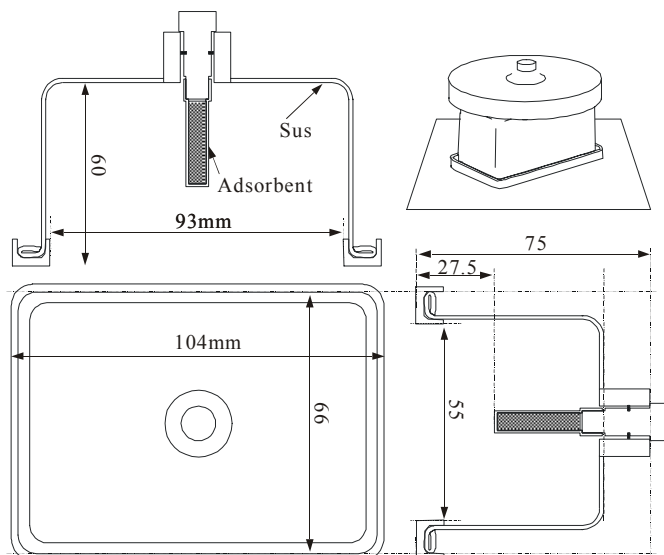


図 1 ADSEC 概要

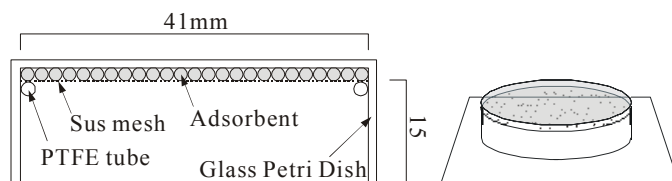


図 2 PFS 概要

が出来れば、シャーレ内では下面から上面に向かう一方方向の拡散のみが形成されるシンプルな構造である。また建材表面からの拡散長を調節することを意図し、建材表面から吸着剤までの距離は可変(5mm~15mm 程度)となっている。

ADSEC ならびに PFS とともに、化学物質の放散速度  $EF$  [ $\mu\text{g}/\text{m}^2\text{h}$ ] は、建材の放散表面積  $S$  [ $\text{m}^2$ ]、捕集時間  $t$  [h] ならびに吸着剤による化学物質捕集量  $M$  [ $\mu\text{g}$ ] の値より (1) 式より算出することとなる。

$$EF = \frac{M}{S \times t} \quad (1)$$

## 2. 数値解析概要

本研究では、上述の ADSEC ならびに PFS の内部空間を対象として、建材から気中放散される化学物質の拡散現象を数値解析により検討する。

### 2.1 ADSEC を対象とした拡散場解析

図 1 に示す ADSEC の内部空間の幾何形状を簡易にモデル化し、非構造格子系(テトラメッシュ)の拡散場解

\* 東京工芸大学工学部建築学科 学部生

\*\*\* 早稲田大学理工学部建築学科 教授 工博

\*\* 東京工芸大学工学部建築学科 助教授 工博

\*\*\*\* 東京大学大学院新領域創成科学研究科 助手

析を行う。図3ならびに表1に解析対象とする幾何形状と境界条件の概要を示す。解析は対称性を考慮し、図3に示す空間の1/4領域のみ行う。ADSEC下面に化学物質放散面を仮定し、上面中央部から挿入された円筒部表面に吸着部位を設定する。吸着面は理想的(仮想的)な吸着剤を仮定し、吸着面における表面濃度  $C_s=0$  を仮定する。すなわち Henry 型の吸着等温式を仮定した場合の Henry 定数  $k_H=\infty$  との仮定に一致する。気中での化学物質拡散は(2)式に示す拡散方程式を対象とした3次元解析を行う。簡易化の為、ADSEC内部を含む雰囲気気条件は等温を仮定する。また濃度差に起因する浮力現象等は解析対象としない。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( D_a \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \quad (2)$$

## 2.2 PFS を対象とした拡散場解析

図2に示すPFSの内部空間をモデル化し、拡散場解析を行う。図4ならびに表2に解析対象とする幾何形状と境界条件の概要を示す。解析は対称性を考慮し、円筒形座標を用いて行う。ADSECの解析と同様に、PFS下面に化学物質放散面を仮定し、PFS上面は一様な吸着面とする。吸着面は、表面濃度  $C_s=0$  を仮定する。気中での拡散場解析に関しては(3)式に示す円筒座標系を用いた場合の拡散方程式を対象として解析を行う。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_a \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) \quad (3)$$

## 2.3 対象化学物質

本報では、理想的(仮想的)な化学物質として Passive Contaminant を仮定する。すなわち解析対象とする化学物質の気中での分子拡散係数は空気と同一と仮定する。

## 3. 数値解析ケース

ADSEC を対象とした数値解析ケースを表3に、PFSを対象とした数値解析ケースを表4に示す。

ADSEC を対象とした解析では、幾何形状は1種類で、建材から放散される化学物質の放散性状を2種類モデル化する。すなわち内部拡散支配型放散をモデル化した  $Flux=const.$  (発生フラックス一定)の条件と、蒸散支配型放散をモデル化した  $C_s=const.$  (建材表面の気相濃度一定)の条件の2種類設定する。

PFS を対象とした解析では、ADSEC の解析と同様に2種類の放散性状をモデル化した境界条件の他、化学物質放散面から吸着面までの拡散距離を3段階(L=5mm, 10mm, 15mm)に変化させ、計6ケースの解析を行う。

## 4. 解析結果

### 4.1 ADSEC 拡散場解析結果

ADSEC 内部を対象とした拡散場解析結果を図5に示

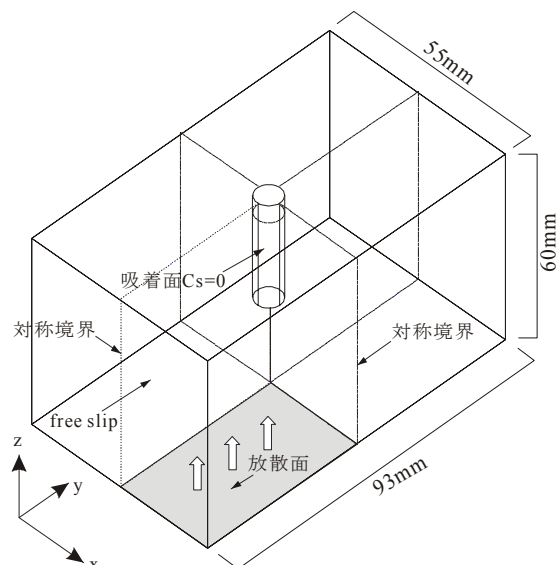


図3 ADSEC 解析対象空間

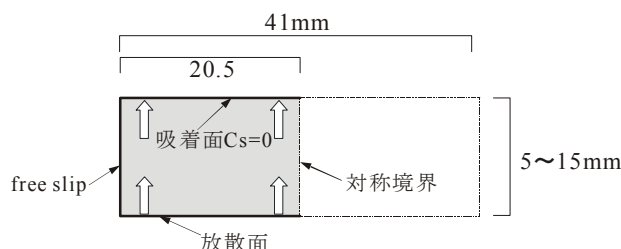


図4 PFS 解析対象空間

表1 ADSEC 計算条件および境界条件

メッシュ	1,278,998 mesh (非構造格子系)
スキーム	拡散項: 2次精度中心差分
放散面条件	Case 1-1: Flux=const. Case 1-2: Cs=const.
吸着面条件	$C_s=0$
その他壁面	Free Slip
温度条件	等温
対象化学物質	Passive Contaminant ( $Da=v$ )

表2 PFS 計算条件および境界条件

メッシュ	5L : 205 (r) × 50 (x) mesh 10L : 205 (r) × 100 (x) mesh 15L : 205 (r) × 150 (x) mesh
スキーム	拡散項: 2次精度中心差分
放散面条件	Case 2-1: Flux=const. Case 2-2: Cs=const.
吸着面条件	$C_s=0$
その他壁面	Free Slip
温度条件	等温
対象化学物質	Passive Contaminant ( $Da=v$ )

す。図中の値は放散面(下面)表面の平均濃度  $C_s$  が1となるよう無次元化して示している(吸着面の表面濃度  $C_s=0$ )。空間内部に形成される濃度分布は Case 1-1 ( $Flux=const.$ )および Case 1-2 ( $C_s=const.$ )でほぼ同一の分布が形成されている。 $Flux$  を一定として与えた Case

1-1 ではADSEC 下面(放散面)において不均一な表面濃度分布が形成されており、とくに吸着剤に近い中央部で表面濃度が小さくなる分布を形成している(図 5 (c)).

#### 4.2 PFS 拡散場解析結果

PFS 内部を対象とした拡散場解析結果を図 6 に示す。放散面に関して  $Flux=const.$  との境界条件を与えた Case 2-1 (L5)、Case 2-1 (L10)および Case 2-1 (L15)は、Case 2-1 (L5)の場合の放散面表面の平均濃度  $C_s$  が 1 となるよう無次元化して示している。また、放散面に関して  $C_s=const.$  との境界条件を与えた Case 2-2 (L5)、Case 2-2 (L10)および Case 2-2 (L15)は、Case 2-2 (L5)の場合の放散面表面の平均  $Flux$  が 1 となるよう無次元化して示している。PFS は放散面から吸着面に向かって一方向の拡散場が形成される構造となっており、そのため各ケースでは放散面(下面)から吸着面(上面)に向かい等勾配の濃度分布が形成されている。放散面に関して  $Flux=const.$  との境界条件を与えた Case 2-1 (L5)、Case 2-1 (L10)および Case 2-1 (L15)では、定常状態において放散面である下面から上面に向かい線形な濃度勾配を形成する。当然のことながら、境界条件として  $Flux$  一定値を与えているため、各ケースにおいて PFS 内部での濃度勾配は同一となり、そのため各ケースで放散面の表面濃度  $C_s$  が異なる結果となる。Case 2-1 (L5)の放散面表面濃度が 1 となるように無次元化した場合、

Case 2-1 (L10)の表面濃度は 2、Case 2-1 (L15)は 3 となる。これは拡散距離である PFS の厚さ  $L$  が Case 2-1 (L5) に対して、Case 2-1 (L10)では 2 倍、Case 2-1 (L15)では 3 倍になっていることに対応している。

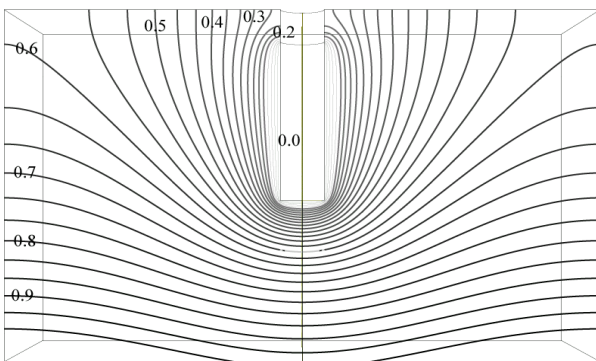
放散面に関して  $C_s=const.$  との境界条件を与えた Case 2-2 (L5)、Case 2-2 (L10)および Case 2-2 (L15)では、放散面における表面濃度  $C_s=1$  (これらのケースでは放散面表面濃度で無次元化している)と吸着面での表面濃度  $C_s=0$  が決定 (固定)されており、この濃度差に従って PFS 内部で濃度勾配が形成される。Case 2-2 (L5)、Case 2-2 (L10)および Case 2-2 (L15)では、拡散距離である PFS の厚さ  $L$  が異なるが、濃度差は 0 から 1 で固定

表 3 ADSEC 解析ケース

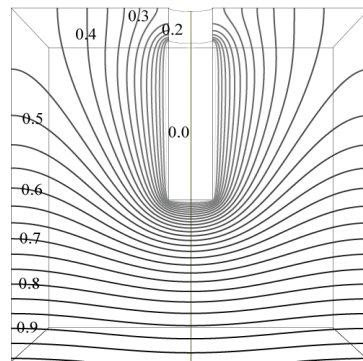
解析ケース	
Case 1-1	物質放散面 : $Flux=const.$
Case 1-2	物質放散面 : $C_s$ (表面濃度) $=const.$

表 4 PFS 解析ケース

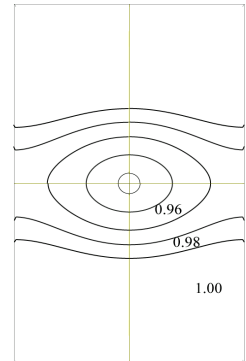
解析ケース		拡散長 $L$
Case 2-1 (L5)	物質放散面 : $Flux=const.$	$L=5$ mm
Case 2-1 (L10)		$L=10$ mm
Case 2-1 (L15)		$L=15$ mm
Case 2-2 (L5)	物質放散面 : $C_s=const.$	$L=5$ mm
Case 2-2 (L10)		$L=10$ mm
Case 2-2 (L15)		$L=15$ mm



(a) Y-Z 対称面

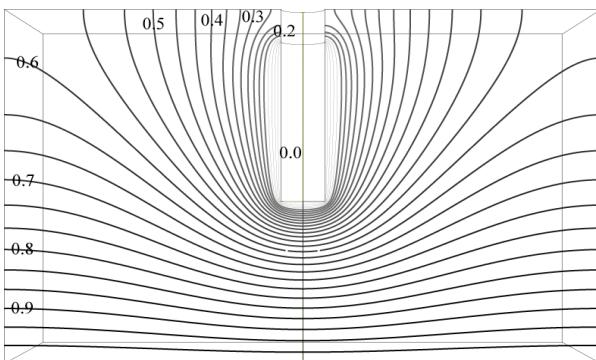


(b) X-Z 対称面

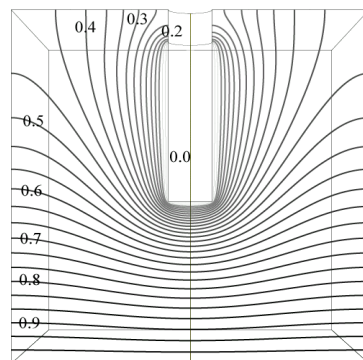


(c) X-Y 底面

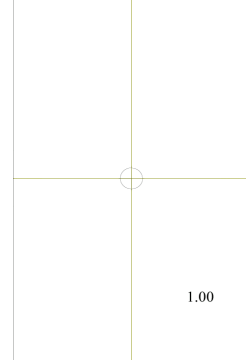
(1) Case 1-1 ( $Flux=const.$ )



(a) Y-Z 対称面



(b) X-Z 対称面



(c) X-Y 底面

(2) Case 1-2 ( $C_s=const.$ )

図 5 ADSEC 拡散場解析結果

されることになるため、各ケースで放散  $Flux$  が異なった結果となる。

PFS を対象とした拡散場解析結果を表面濃度および放散フラックスの観点より整理した表を表 5 に示す。

## 5. 考察

当然の事ながら ADSEC ならびに PFS を対象とした数値解析において、 $Flux=const.$  の境界条件を与えた場合には、拡散長の設定値に依存せず測定される  $Flux$  は一定となる。すなわち、建材内部の有効拡散係数が小さく、放散速度が気中濃度に依存しない内部拡散支配型の建材を対象とした測定を対象とした場合、ADSEC ならびに PFS の両者において放散速度の測定値に差が生じないことを意味する。

化学物質放散面の境界条件として  $C_s=const.$  を仮定した場合は、PFS において拡散長を変化させた場合に、放散速度の測定結果も変化する結果となった。これは、蒸散支配型の建材を測定対象とする場合、拡散長の異なるパッシブ型のサンプラー(例えば ADSEC と PFS)を用いた場合の測定結果も異なることを意味する。

$C_s=const.$  の条件が成立する蒸散支配型の建材を測定対象とする場合、異なるパッシブ型のサンプラーの性能を比較するためには、放散面から吸着面に至る仮想的な一方拡散のみが生じると仮定し、放散面から吸着面に対する直線の拡散長に換算した有効拡散長  $L_e$  の概念を適用して整理することが有効であると考えられる。各サンプラーの有効拡散長  $L_e$  の解析結果は別報にて報告を予定している。

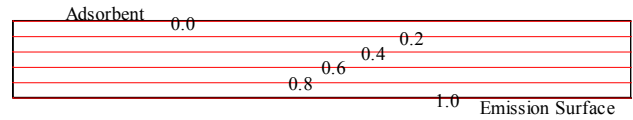
## 6. 結論

- (1) ADSEC ならびに PFS を対象として、放散面に対して 2 種類の境界条件を与えた場合の化学物質拡散場解析を行った結果、ADSEC の場合に放散面条件として一定フラックスを与えた場合に、放散面中央部で表面濃度が小さくなる濃度分布が形成された。
- (2) PFS の場合、放散面条件として一定の表面濃度を与えた場合に拡散長の逆数に比例して放散  $Flux$  が小さくなる結果となった。

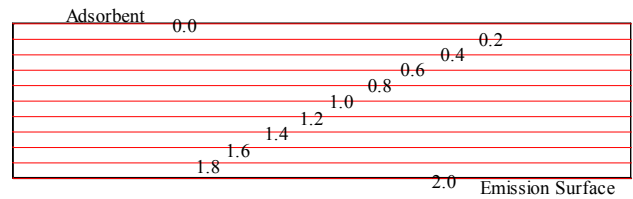
**[注]** 本解析では、放散面・吸着面共に極端に単純化した境界条件を用いている。例えば ADSEC の場合、吸着剤として拡散サンプラーを用いる場合にはサンプラーの表面濃度が 0 ということではなく、内部の活性炭を覆っている素材の中にも濃度勾配が存在することが予想される。現実的な予測を行うためには、より実現象に適合した境界条件とした解析を行う必要があることは言うまでもない。

### [参考文献]

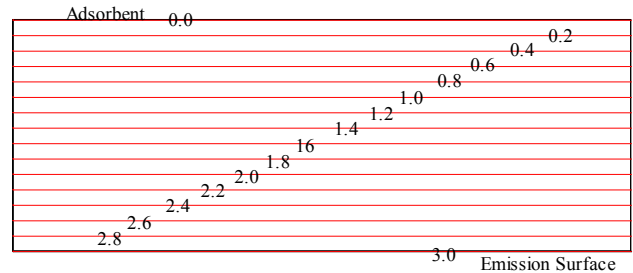
- [1] 田辺新一他 (2001) 建材から発生するアルデヒド類のパッシブ測定法 (ADSEC) の開発、その 1、空気調和・衛生工学会学術講演会講演論文集、pp677-680
- [2] K. Kumagai, et. al. (2002) Development of a Passive type emission rate sampler, Proceedings of the 3rd European Conference on Energy Performance, pp. 23-26



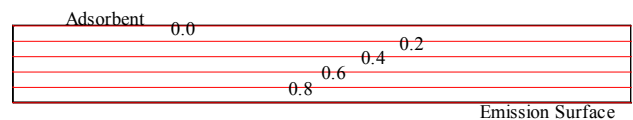
(1) Case 2-1 (L5) ( $Flux=const.$ )



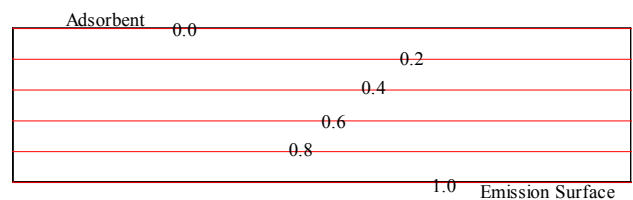
(2) Case 2-1 (L10) ( $Flux=const.$ )



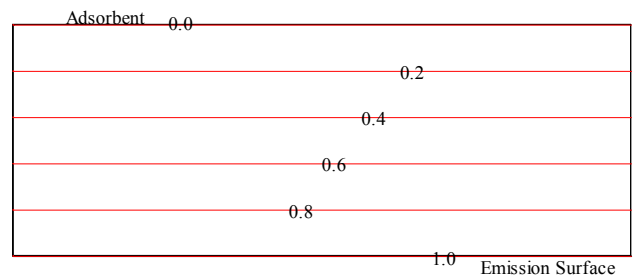
(3) Case 2-1 (L15) ( $Flux=const.$ )



(4) Case 2-2 (L5) ( $C_s=const.$ )



(5) Case 2-2 (L10) ( $C_s=const.$ )



(6) Case 2-2 (L15) ( $C_s=const.$ )

図 6 PFS 拡散場解析結果

表 5 PFS 内表面濃度ならびにフラックス

解析ケース	放散面表面濃度	放散面 Flux
Case 2-1 (L5)	1.0	1.0
Case 2-1 (L10)	2.0	
Case 2-1 (L15)	3.0	
Case 2-2 (L5)	1.0	1.0
Case 2-2 (L10)		0.5 (=1/2)
Case 2-2 (L15)		0.333 (=1/3)

(L5 の値を代表値としてすべて無次元値)