

Small Test Chamber 内の揮発性有機化合物放散速度、物質伝達率の数値解析

Numerical analysis of chemical compounds emission rate and mass transfer coefficient in Small Test Chamber

朱 清宇, 東京大学大学院, 東京都港区六本木 7-22-1, E-mail: qzhu@cc.iis.u-tokyo.ac.jp
 村上周三, 東京大学生産技術研究所, 東京都港区六本木 7-22-1, E-mail: murakami@iis.u-tokyo.ac.jp
 加藤信介, 東京大学生産技術研究所, 東京都港区六本木 7-22-1, E-mail: kato@iis.u-tokyo.ac.jp
 近藤靖史, 武蔵工業大学, 東京都世田谷区玉堤 1-28-1, E-mail: ykondo@eng.musashitech.ac.jp
 伊藤一秀, 東京大学大学院, 東京都港区六本木 7-22-1, E-mail: kazuhide@iis.u-tokyo.ac.jp
 Qingyu Zhu, Graduate School, University of Tokyo, 7-22-1 ROPPONGI MINATO-KU TOKYO
 Shuzo Murakami, IIS, University of Tokyo, 7-22-1 ROPPONGI MINATO-KU TOKYO
 Shinsuke Kato, IIS, University of Tokyo, 7-22-1 ROPPONGI MINATO-KU TOKYO
 Yasushi Kondo, Musashi Industrial University, 1-28-1 TAMAZUTSUMI SETAGAYA -KU TOKYO
 Kazuhide Ito, Graduate School, University of Tokyo, 7-22-1 ROPPONGI MINATO-KU TOKYO

This study is performed as a part of the research which examines the emission and diffusion characteristics of volatile organic compounds (henceforth VOCs etc.) from indoor building materials, such as paint. In this paper, emission rate and mass transfer coefficient from the surface of building materials in a Small Test Chamber are predicted on the basis of a low-Reynolds number $k-\epsilon$ model (Abe-Nagano model). CFD results show good correspondence with the experimental results.

1. はじめに

本研究は、ペイント等室内の建材から発生する室内の揮発性有機化合物（以降 VOCs 等）の発生量を予測する研究の一貫として行われたものである⁽¹⁾。建材内の VOCs の透過抵抗が小さく、その室内放散速度が建材表面境界層の気中拡散速度に律速されるものを蒸散支配型建材と称する。この VOCs 放散速度は、建材表面での物質伝達率に依存するため、これを精度よく解析することが必要とされる。本研究では低 Re 型 $k-\epsilon$ モデル (Abe-Nagano model⁽²⁾) に基づく CFD 解析手法を用いて、この建材表面の物質伝達率を正確に予測することを目的としている。本稿では蒸散支配型 VOCs 放散建材をモデル化した純水及び純液 Decane の蒸散を解析対象とし、その物質伝達率に関する CFD 解析を実験結果と比較する。

2. 解析対象 (Fig.1, Fig.2)

解析は、Small Test Chamber^{(Note(1))} を用いた建材からの揮発性有機化合物の放散特性を測定する基礎実験を対象とする (Fig.1)。Small Test Chamber は建材表面での気流性状を制御するため以下の仕様としている。

- (1) Small Test Chamber は建材テストピース表面上を定められた風速で気流が流れる Inner chamber (Fig.2 上部) とこの Inner chamber を格納する outer chamber (Fig.2 下部) より構成される。
- (2) 両者の相互位置関係は Fig.3 のメッシュ図に示す。
- (3) Inner chamber にはファンが設置されており、Inner chamber 測定室内 (Fig.2 参照) 内のテストピース設置面上部における風速をファンの回転数により制御する。
- (4) 検討対象建材は inner chamber 測定室内中心位置 (Fig.2 上部の Target material) に設置される。
- (5) 新鮮空気は outer chamber 上部に設置された supply opening より供給する。排気は同じく outer chamber 上部の exhaust opening から排出する。
- (6) Small Test Chamber は恒温室内に設置され、一定温度に制御される。なお、本研究では Inner chamber 測定室内の平均風速を 0.1 m/s と固定して、outer chamber 内全体の換気回数が 5 回/h と 0.1 回/h の二種のケースを扱う。

3. 解析対象建材、解析ケース、解析条件 (Table.1~4, Fig.3)

蒸散支配型放散建材モデルとして、純水及び純液 Decane の積体を使用した 2 ケースを扱う (Table.1)。CFD 解析における建材温度は実験値より、純水の場合 21.8°C、及び純液 Decane の場合 22.7°C を与える。case1 の場合 outer chamber の換気回数は 0.1 回/h とし、case2 の場合 outer chamber の換気回数は 5 回/h とした。両ケースともに、Small Test Chamber 測定室

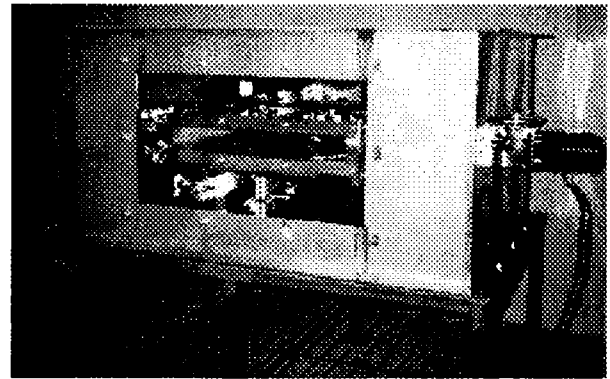


Fig.1 Small Test Chamber

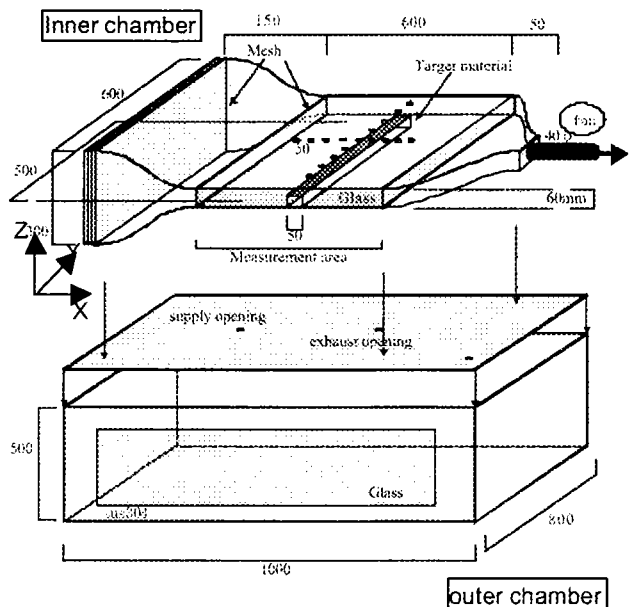


Fig.2 Small Test Chamber measurement system

内の温度は 23°C である。測定室内の風速は実験に対応し、inner chamber の fan の位置に実験時に対応する 2.69 m/s を強制的

Table. 1 Analysis case

	Temperature in Small Test Chamber	Temperature at Liquid Surface	Evaporating Liquid	ACH of out chamber
case1	23°C	21.8°C	Water	0.1/h
case2	23°C	22.7°C	Decane	5/h

に与える(Table.4)。CFD 解析では純水及び純液 Decane 内の輸送は無視し、液面位置の変動も無視する。空気中の初期濃度は 0 とする。純水と純液 Decane の液面上の気中濃度は飽和蒸気圧より求める(Table. 2)。

物質伝達率を正確に予測するためには、壁面近くの速度分布・乱れエネルギーを詳細に知る必要がある。そのため気流解析は低 Re 型 k-ε モデル (Abe-Nagano model⁽²⁾) に基づく 3 次元の CFD 解析を行う。建材表面の第 1 メッシュの壁座標 z^+ は 0.03 とした。Y 方向の空間の対称性により、半分の領域のみを計算する。計算条件、メッシュ分割、境界条件を Table.4 に示す。Fig.3 に解析メッシュを示す。

流れ場の CFD 解析の後に、inner chamber 測定室内の建材設置位置(Fig.2 上部の Target material) に表面濃度(飽和蒸気圧、詳細は Table.3)を与え、Small Test Chamber 内の放散物質の拡散場解析を行う。

4. 流れ場の解析結果 (Fig. 4, 5, 6)

Fig.4 (1)~(2)に case2 の場合の X-Z 断面(Y=0.4m)と X-Y 断面(Z=0.25m)のスカラー風速分布図を示す。Fig.5 (1)~(3)に inner chamber 内測定室における case1 と case2 の主流 U の風速分布を示す。両ケース共に inner chamber 内の通過風量は同じだが、Outer chamber の換気回数が 50 倍異なるため Inner chamber 内の風速分布に若干の差が生じている。風速は測定室中心位置(Fig.5(3))の平均風速 U_{center} で無次元化して示す。Fig.5 (1)に示される様に、Inner chamber 下流の fan に近づくにつれ case1 と case2 共に境界層の発達を観察される。CFD 解析結果は実験結果と十分な精度で一致している(Fig.5 (1)~(3))。床付近で実験結果にバツキが存在するのは、サーミスタ風速計のブロッキングなどによる測定誤差のためと考えられる(Fig.5(3))。

また Fig.6 に Line Z (cf. Fig.5)における乱流エネルギー k 及び乱流拡散係数 v_t の分布を示す。 k は U_{center} の二乗、 v_t は U_{center} 及び代表長さ(inner chamber 高さの半幅) d で無次元化している。また比較のため Fig6 (2)には分子拡散係数 ν の分布も併せて示す。 k 及び v_t の値は inner chamber 中心位置で最も大きく、凸型の分布となる。今回解析で用いた inner chamber 内の流れは、中心風速(U_{center})で 0.1m/s と低速であり、 U_{center} とチャンネル半幅で定義したレイノルズ数 $Re=(U_0L_0)/\nu$ (Note(3))が 210 であり、また、絞りよりプロット位置 Line Z までの助走距離 L_x で定義したレイノルズ数 $Re=(U_0L_x)/\nu$ も 2,100 と小さい。このため、 v_t は case1 では ν と同程度のオーダーであり、case2 においても ν の 10 倍程度にとどまっている。

5. 濃度場の CFD 解析結果と物質伝達率測定の解析結果

5.1 濃度場の CFD 解析結果(Table.5, Fig.7)

流れ場解析に基づき、拡散場解析を行う。case1 の場合には、CFD 解析による純水の放散速度は 28.1 (g/m²h)、Small Test Chamber の exhaust での濃度は 2.3(kPa)である。case2 の場合、CFD 解析による Decane の放散速度は 42.7 (g/m²h)、Small Test Chamber の exhaust での Decane 濃度は 0.8x10⁻² (kPa)である。Small Test Chamber の exhaust の濃度を参照濃度とした場合の物質伝達率は純水 : 0.9x10² (g/m²h・kPa)、Decane : 2.7x10² (g/m²h・kPa)となる。Decane の物質伝達率は純水の値の 3 倍程度となった(Table.5)。Fig.6(1)~(2)に純水と Decane の予測濃度分布断面図(Y=0.4m)を示す。両者の濃

Table. 2 Empirical Equation for Vapor pressure P_w , Mass concentration C_0 at liquid surface and Diffusion Coefficient of D_a (Note 2)

Vapor Pressure P_w (Pa)⁽³⁾
 $\log_{10} P_w = A - B/(C+T) - 3$ (1)

Mass concentration C_0 (g_{vol}/m³)
 $C_0 = \rho_a \frac{M_1 P_w}{M_2 P - P_w}$ (2)

Diffusion Coefficient of D_a (m²/s)⁽³⁾
 $D_a = \frac{6.7 \times 10^{-8} \times T^{1.83}}{P} \left[\left(\frac{T_{c1}}{P_{c1}} \right)^{1/3} + \left(\frac{T_{c2}}{P_{c2}} \right)^{1/3} \right]^{-3} \sqrt{\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}}$ (3)

P_w : vapor pressure (Pa), A,B,C: constant, M_1, M_2 : molecular weight, P: atmospheric pressure in Small Test Chamber(Pa), ρ_a : density of air (g/m³), D_a : diffusion coefficient in air (m²/s) (Note(2)), T: temperature(°C), P_{c1}, P_{c2} : criticality pressure (Pa), T_{c1}, T_{c2} : criticality temperature(°C),...

Table. 3 Diffusion Coefficient of D_a and Mass concentration C_0 at liquid surface (derived from eqs (1)~(3) in Table 2)

	Temperature (°C)	C_0 (g _{vol} /m ³)	D_a (m ² /s)
Water	21.8	19.9	2.27x10 ⁻⁵
Decane	22.7	10.0	4.75x10 ⁻⁶

Table. 4 Conditions of CFD analysis

Turbulence model	Low-Re k-ε model (Abe-Nagano model ⁽²⁾)
Grid points (3D)	216,600 (Half of the space is calculated.)
Space difference	QUICK (Convection term)
Outer chamber Supply opening B.C.	$U_{in} = 14.4\text{m/s (5/h)}$, or 0.29m/s (0.1/h) , $U_{in} = l_{in}/17 \cdot L_0$, $K_{out} = 3/2 \cdot (U_{in} \times 0.05)^2$, $f_{in} = C_{\nu} \cdot K_{in}^{3/2} / l_{in}$
Outer chamber Exhaust opening B.C.	$U_{out} = (\text{mass flow})$, $K_{out}, f_{out} = \text{free slip}$
Fan (enforced value)	$U_{fan} = 2.69\text{m/s}$, $K_{fan} = 3/2 \cdot (U_{fan} \times 0.05)^2$, $f_{fan} = 1/7 \cdot L_0$, $f_{fan} = C_{\nu} \cdot K_{fan}^{3/2} / l_{fan}$
Wall boundary	No-slip

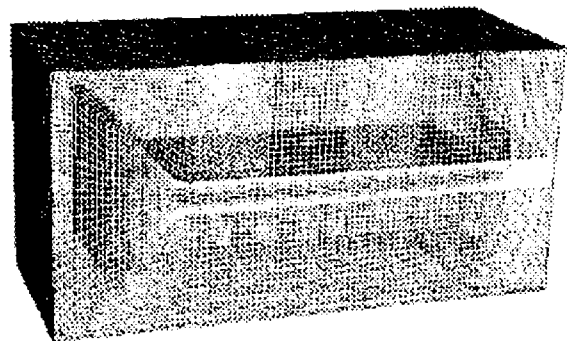
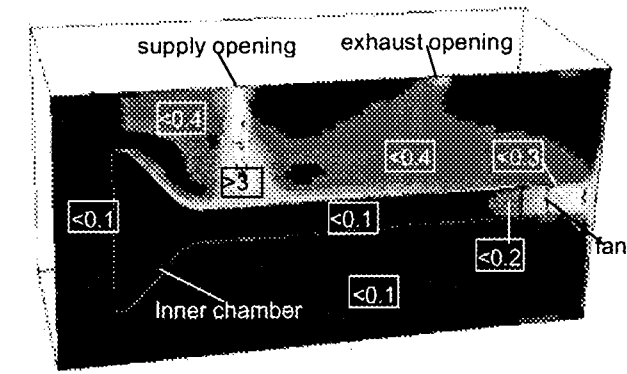


Fig. 3 grid design of Small Test Chamber

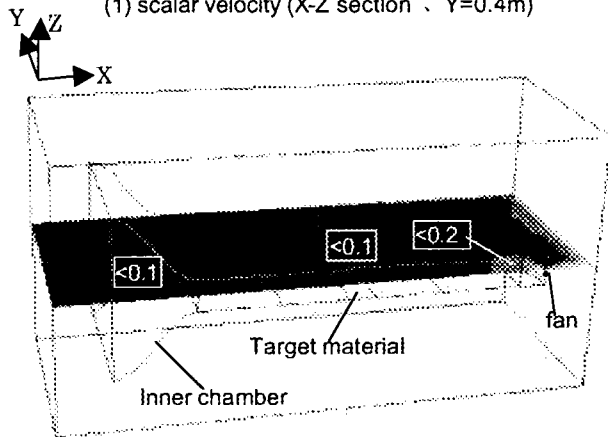
度分布は相似とならない。

5.2 物質伝達率測定(Table.5)

CFD 解析と同様な条件(Table.1)による実験では、液体重量変化の測定により全放散量を測定し、放散速度(g/m²h)を算出し



(1) scalar velocity (X-Z section, Y=0.4m)



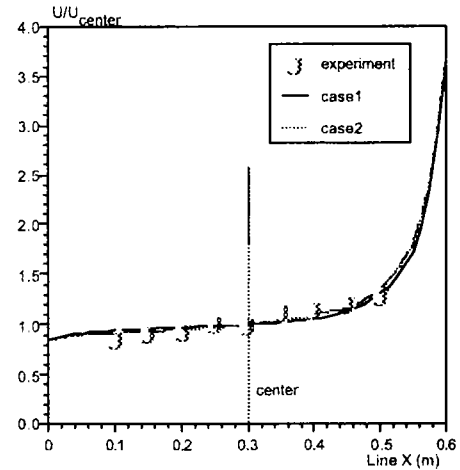
(2) scalar velocity (X-Y section, Z=0.25m)

Fig.4 Velocity field in Small Test Chamber
(unit: m/s, air change rate:5/h)

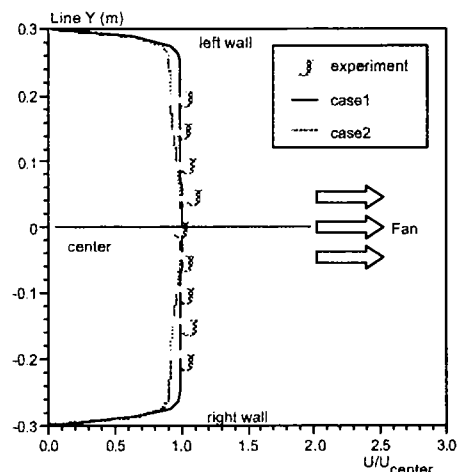
ている。実験結果を Table.5 に示す。本実験条件下において、case1 の場合には、純水の放散速度は $29.9 \text{ (g/m}^2\text{h)}$ 、Small Test Chamber の exhaust での純水濃度は 2.4 (kPa) である。case2 の場合には、Decane の放散速度は $46.4 \text{ (g/m}^2\text{h)}$ Small Test Chamber の exhaust での Decane 濃度は $1.0 \times 10^2 \text{ (kPa)}$ である。よって、この場合の物質伝達率は純水： $1.2 \times 10^2 \text{ (g/m}^2\text{h} \cdot \text{kPa)}$ 、Decane： $2.9 \times 10^2 \text{ (g/m}^2\text{h} \cdot \text{kPa)}$ となる。Decane の物質伝達率は CFD 解析に対応し純水の値の 2.4 倍程度となった。CFD 解析結果は実験結果と定量的に十分な精度で一致している。熱伝達と湿気伝達について Lewis の関係^{(Note(4))}を仮定し、Lewis Number を 1 (kg/kg) と近似した場合、case1 の実験条件における流れ場は対流熱伝達率が $5.2 \text{ (W/m}^2\text{C)}$ の流れ場に相当する。

5.3 考察

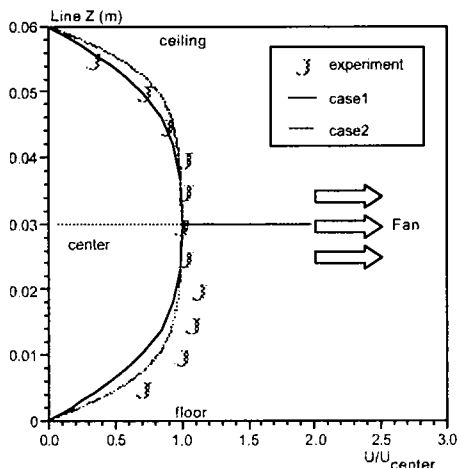
本稿で示した物質伝達率の解析では、純水と Decane 物質伝達率値が約 3 倍程度異なる結果となった。これは、今回解析で用いた inner chamber 内の流れが中心風速 (U_{center}) で 0.1 m/s と低速であり、 U_{center} とチャンネル半幅で定義したレイノルズ数 $Re = (U_0 L_0) / \nu$ が 210 と大変小さく、またシュミット数 $Sc = \nu / D_a$ ^{(Note(5))} が Decane の $Sc = 3.16$ と純水の $Sc = 0.66$ と約 5 倍異なることに原因がある^{(Note(6))}。今回の解析条件では、 $(Re \cdot Sc)$ が小さく、また両者で大きく異なるため、純水と Decane で拡散場が相似にならず、物質伝達率が異なる結果となった。充分 Re 数が大きい場合、 Sc の差異は相対的に小さくなりすべての物質で伝達率やその無次元数であるシャーウッド数 $Sh = (h \cdot d) / D_a$ ^{(Note(4))} は一致するものと考えられる。



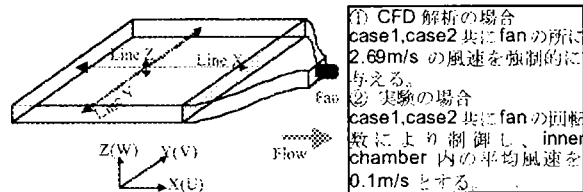
(1) U(x) distribution along center stream line



(2) U(y) distribution in cross direction



(3) U(z) distribution in Vertical direction



(4) Measurement Line

Fig. 5 Velocity distribution in inner chamber
(Comparison of experiment and CFD)

Table. 5 Mass Transfer Rate of Water and Decane

	case1 (Water)		case2 (Decane)	
	Exp.	CFD	Exp.	CFD
Emission rate (g/m ² h)	29.9	28.1	46.4	42.7
Exhaust concentration (measure) (g/m ³)	2.4 kPa (18.0)	2.3 kPa (17.5)	1.0 × 10 ⁻² kPa (6.0 × 10 ⁻¹)	0.8 × 10 ⁻² kPa (5.3 × 10 ⁻¹)
Exhaust concentration (perfect mix.) (g/m ³)	2.5 kPa (18.5)		1.1 × 10 ⁻² kPa (6.2 × 10 ⁻¹)	
Saturated vapor pressure (temperature, g/m ³)	2.6 kPa (21.8°C, 19.9)	2.6 kPa (21.8°C, 19.9)	0.17 kPa (22.7°C, 10.0)	0.17 kPa (22.7°C, 10.0)
Mass transfer coefficient (g/m ² h·kPa) (g/m ² h·(g/m ³))	1.2 × 10 ² (15.7)	0.9 × 10 ² (12.0)	2.9 × 10 ² (4.9)	2.7 × 10 ² (4.5)

6. 結論

- CFD 解析手法による蒸散支配型の化学物質放散に関してモデル化を行い、純水と純液 Decane からの放散(蒸散)現象を解析した。
- CFD による inner chamber 内測定胴の風速分布は実験結果と良く一致した。
- CFD 解析による液面上部風速 0.1m/s での放散速度は純水 : 28.1 (g/m²h, 21.8°C)、Decane : 42.7 (g/m²h, 22.7°C) となった。また物質伝達率は純水 : 0.9 × 10² (g/m²h·kPa)、Decane : 2.7 × 10² (g/m²h·kPa) となった。CFD 解析結果は実験結果と十分な精度で一致し、CFD は物質伝達率を十分な精度で解析できることが示された。

Notes :

- 実物の室内規模の Large Chamber に対して、建材のテストピースで実験する小型の Chamber を Small Test Chamber と称する。
- H₂O 定数 A=7.7423, B=1554.16, C=219; P_{g1}, P_{g2}: Decane 及び H₂O, 空気の臨界圧力(Pa) (P_{c1}:2.1×10⁶, P_{c2}:22×10⁶); T_{c1}, T_{c2}: Decane 及び H₂O, 空気の臨界温度 (°C) (T_{c1}: (Decane :330.4, H₂O :374.2 T_{c2}:140.7); M, M₂: Decane 及び H₂O, 空気の分子量 (M: (Decane :142.3, H₂O :18.02), M₂:28.97)。
- U₀:代表速度(m/s), L₀:代表長さ(m), ν:空気の動粘性係数(m²/s)。
- Lewis の関係は α_d(α·C_p) = Le で示される。ここで α_d: 対流熱伝達率(W/m²°C), C_p: 空気の比熱(0.24kcal/kg°C), Le :Lewis Number(kg/kg), α: 物質(湿気)伝達率(kg/m²h·(kg/kg)), 1 kcal/h = 1.16 W, h_d:物質伝達率(g/m²h (g/m³)), d:代表長さ=0.03 (m), D_a: 空気における物質拡散係数(m²/s)。
- ν:空気の動粘性係数(m²/s), D_a:空気中における物質拡散係数(m²/s)。
- 無次元化されたスカラー量(φ)の輸送方程式を以下に示す:

$$\frac{\partial \phi^*}{\partial t} + \frac{\partial (u_i^* \phi^*)}{\partial x_i^*} = \frac{1}{\text{Re Sc}} \left[\frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 \phi^*}{\partial x_i^2} + \frac{1}{\text{Sc}} \frac{\partial^2 \phi^*}{\partial x_j^2} \right]$$
 ここで、添え字*は量を表し、
 φ: VOC 濃度, u_i^{*}= u_i/U₀, x_i^{*}= x_i/L₀, t^{*}= t/(L₀/U₀), L₀:代表長さ(m), U₀:代表速度(m/s), レイノルズ数 Re=(U₀L₀)/ν, シュミット数 Sc= ν/D_a, ν:空気の動粘性係数(m²/s), D_a:空気中における物質拡散係数(m²/s), i=(1,2,3), j=(1,2,3)。
- 本 CFD 解析は Fluent5.0 (Fluent Inc.®) を用いて行った。

参考文献 :

- 伊藤, 村上, 加藤, 朱清宇ら (1999), 揮発性有機化合物の放散・吸脱着等のモデリングとその数値予測に関する研究 (その 14), 日本空気調和・衛生工学会学術講演梗概集
- 安部, 長野, 近藤, (1992), はく離・再付着を伴う乱流場への適用を考慮した k-ε モデル, 日本機化学会論文集(B 編), 58 巻, 554 号, pp. 57-64
- 化学工学協会編: 化学工学便覧, 改訂三版 (1968 年)

(Room temperature 23.2°C, U_{center}=0.1m/s)

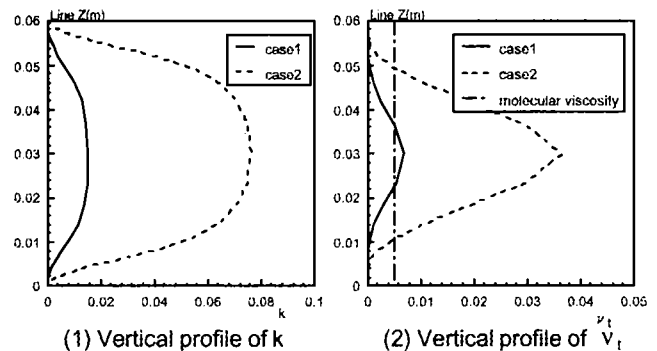


Fig. 6 Distribution of k and v₁ in inner chamber (at Line Z)

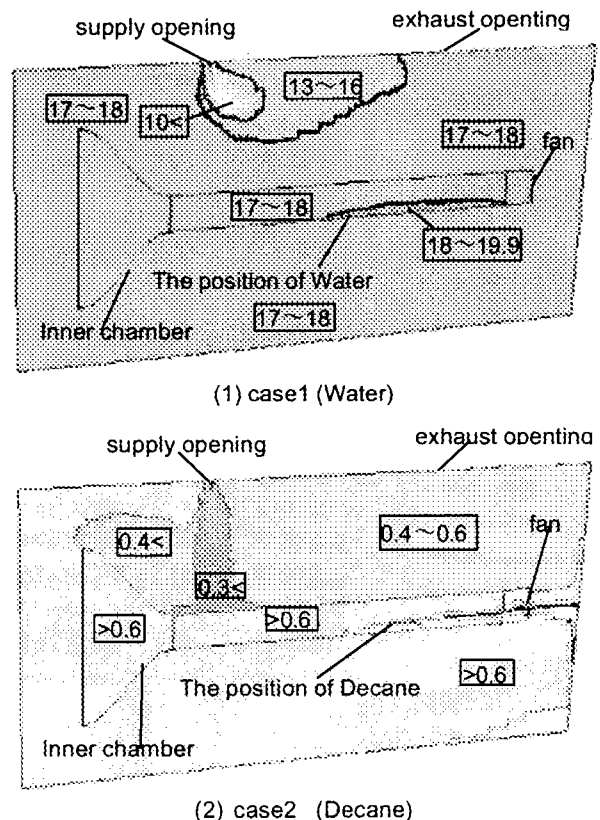


Fig. 7 Predicted Decane and Water's Concentration Distributions Of a cross section (X-Z, g/m³)