

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2)
マイクロ-マクロモデルの定式化と短期・長期解析

正会員 ○近藤 靖史¹ 同 藤村 淳一²
同 村上 周三³ 同 加藤 信介³
同 伊藤 一秀⁴ 同 山本 明⁴

マイクロ-マクロモデル 内部拡散支配型 長期解析

1 序 建材からの VOCs等の放散量、あるいは室内濃度を予測するモデルの構築を目的として、前報(その1)で多孔質材料内部における拡散現象を定式化した。これを基に、適切な境界条件、室内空気に対する拡散モデルを組み合わせることで、IAQ 予測システムが構成できる。ただし、解析対象の条件、求められている情報、使用可能な計算機資源等によって、多様な予測システムが提案できると考えられる(表1 参照)。本報(その2)では、多孔質材料内部については物質拡散方程式を解くことにより詳細に検討(マイクロ)し、室内濃度については完全混合を仮定する方法(マクロ)によって IAQ 予測を行うモデル(これをマイクロ-マクロモデルと呼ぶ、図1 参照)を定式化するとともに、解析例を示す。なお、マイクロ-マイクロモデルについては本報(その5、6)で示す。

2 ミクロ-マクロモデルの概要(図1)

2.1 VOCs 等の輸送方程式

建材内部濃度 境界条件

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_c \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (1) \quad -D_c \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_B = \frac{\alpha_c (C_B - C_r)}{\rho_{air}} \quad (2)$$

(ここで B:境界を表す)

室内濃度 (放散量)

$$\frac{dC_r}{dt} = \frac{Q}{V} (C_{in} - C_r) + \frac{M}{V} \quad (3a) \quad M = A \cdot \frac{\alpha_c (C_B - C_r)}{\rho_{air}} \quad (3b)$$

ここで、C:建材内の気相濃度、C_B:表面濃度、C_r:室内空気中の濃度、C_{in}:給気濃度。次元は全て[kg(VOC)/kg(air)]^{注1}である。D_c:有効拡散係数[m²/s]、α_c:物質伝達率[kg(VOC)/m²s(kg(VOC)/kg(air))]^{注2}、Q:換気量[m³/s]、V:室容積[m³]、A:建材表面積[m²]、M:放散量[kg(VOC)/kg(air)・m³/s]、ρ_{air}:空気密度[kg(air)/m³]

ただし、多孔質材料内部における拡散のモデル化の詳細は前報(その1)を参照されたい。拡散は、建材表面に対して垂直な方向(x 方向)にのみ生じるものとする。また、建材内の有効拡散係数 D_cは濃度場、温度場などに依存すると考えられるが、ここでは一定値と仮定し、線形方程式として扱う。

2.2 建材表面濃度(C_B)の扱い 建材内部濃度に比べ、建材表面濃度(C_B)は極めて小さいので、建材内部の計算の際には C_Bをゼロとして計算を進めた^{文2, 注2}。このようにすることにより、建材内部の差分計算が安定化し、さらに解析解を求めることが可能になる(表2 中の(a)式、(b)式)。

2.3 ミクロ-マクロモデルの分類(表2) ① 建材内部を詳細に差分計算し、比較的解析対象期間が短い場合に適

表1 IAQ 予測システムの分類

	マイクロ-マイクロモデル	マイクロ-マクロモデル
建材内部	固体中拡散方程式 → 差分計算 ・マイクロに解析	固体中拡散方程式 → 同左
室内	流体中拡散方程式 → 差分計算(CFD) ・マイクロに解析	完全混合を仮定 ・マクロに解析
解析対象期間	数時間~数十日	数時間~数日~数年
計算機資源	大(室内濃度分布を考慮可能)	小(室内濃度は一様)

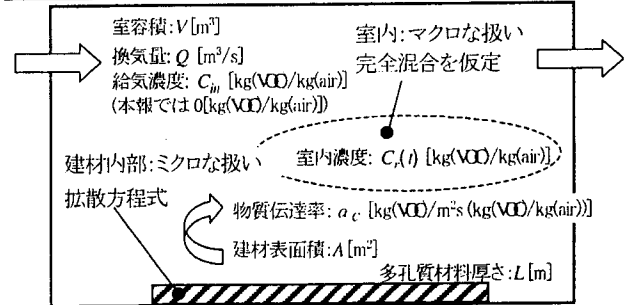


図1 ミクロ-マクロモデルの概要

表2 解析対象期間スケールによるマイクロ-マクロモデルの分類

	Short-Term	Long-Term	Very Long-Term
建材内部	$\frac{\partial C}{\partial t} = D_c \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ 差分計算 $\Delta x = 10^{-6}$ [m](表面近傍) $\Delta t = 10$ [s]程度 ^{注2}	$C = C(x, t)$ 解析解(a)式 任意の時刻、位置を指定可能	$C = C(x, t)$ 解析解(a)式 Long-Termと同様
室内	$\frac{dC_r}{dt} = \frac{Q}{V} (C_{in} - C_r) + \frac{M}{V}$ 空間:一質点、時間:差分 $\Delta t = \text{建材と同期}$	$\frac{dC_r}{dt} = \frac{Q}{V} (C_{in} - C_r) + \frac{M}{V}$ 空間:一質点、時間:差分 $\Delta t = \text{数分~数時間}$	$C_r = \frac{M}{Q} + C_{in}$ 瞬時定常を仮定した解析解
発生項	$M = -A \cdot D_c \frac{\partial C}{\partial x} \Big _B$	$M = A \cdot E(t)$ (b)式	$M = A \cdot E(t)$ (b)式
解析期間	数分~数十時間	数日~数ヶ月	数ヶ月~数年

本文(2)式(左辺)

$$C(x, t) = \frac{4C_0}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)} \cdot \exp\left[-D_c \left\{\frac{(2n-1)\pi}{2L}\right\}^2 t\right] \cdot \sin\frac{(2n-1)\pi}{2L} x \quad (a)$$

$$E(t) = -D_c \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_B = -D_c \frac{\partial C(0, t)}{\partial x} = -\frac{2D_c C_0}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-D_c \left\{\frac{(2n-1)\pi}{2L}\right\}^2 t\right] \quad (b)$$

表3 解析ケースの概要

解析ケース	室温(建材温)	Flushing 時間	有効拡散係数など
case1-1	23[°C]	無し	D _c : 1.1 × 10 ⁻¹¹ [m ² /s] C ₀ : 0.159[kg(VOC)/kg(air)]
case1-2		1[h/day]	
case1-3		8[h/day]	
case2-1	30[°C]	無し	D _c : 4.2 × 10 ⁻¹¹ [m ² /s] C ₀ : 0.159[kg(VOC)/kg(air)]
case2-2		1[h/day]	
case2-3		8[h/day]	

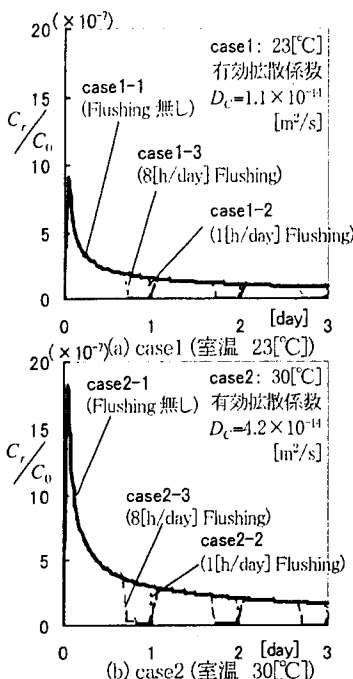


図2 Short-Term モデル (3日目までを表示)

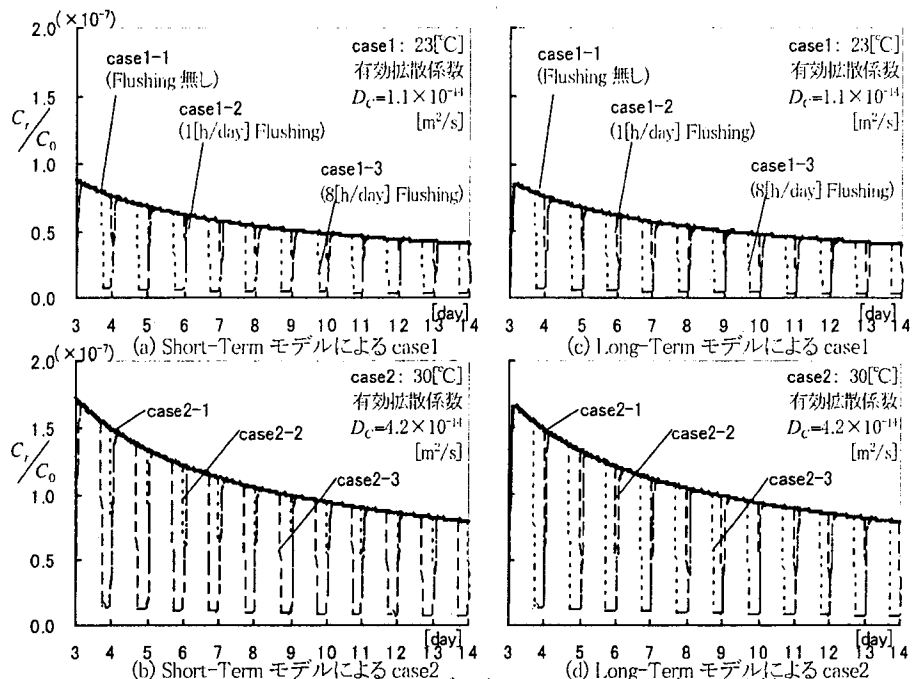


図3 Short-Term モデルと Long-Term モデルの比較 (3日目～14日目までを表示)

ているモデルを Short-Term モデルと呼ぶ。次に、② 解析解を組み合わせて計算負荷が小さく、長期的予測が可能なモデルを2種類提案する。Long-Term モデルは、建材内部濃度は解析解²³⁾で求め、室内濃度に関しては時間についてのみ差分化する。Very Long-Term モデルでは、室内濃度は各時点で瞬時定常であるとして算定する。このモデルでは濃度履歴を追わなくても室内濃度や建材の濃度分布が求まる。

3 数値解析の概要 3.1 解析対象 VOCs 等の発生源であるシート状の合成ゴム SBR(polypropene Styrene-Butadiene Rubber)が床に存在する単室を想定する。SBR シートの厚さは $L=1.5$ [mm] である。解析対象室は室容量 $V=60.75$ [m³]、通常時換気量 $Q=0.027$ [m³/s] (換気回数 1.6 [回/h])、Flushing^{注4)}時換気量は 0.27 [m³/s] (換気回数 16 [回/h])とした。VOCs 等の発生源(SBR)の表面積は $A=20.25$ [m²]とする²¹⁾。

3.2 解析ケース(表3)²¹⁾ 23°C, 30°Cの室温状態について、2通りの Flushing 条件を設定した。なお、材料中初期濃度 C_0 および有効拡散係数 D_c については X.Yang と Q.Chenらの結果²²⁾に従った。

4 解析結果 図2に示す Short-Term モデルの結果は、村上らによるマイクロ-マイクロモデルの結果²⁾(図省略)と良く一致した。図3に Short-Term モデルと Long-Term モデルによる結果を比較する。Long-Term モデルによる結果も Short-Term モデルの結果と同様に良い結果を与えている。ただし、Long-Term モデルの場合は計算初期、例えば1日目について精度良く計算をするためには表2中(a)式の級数を多くとる必要がある^{注3)}。また、有効拡散係数 D_c を3種類想定し、5年間の計算を Very Long-Term モデルにより行なった(図4)。当初、0.5~1年程度は D_c

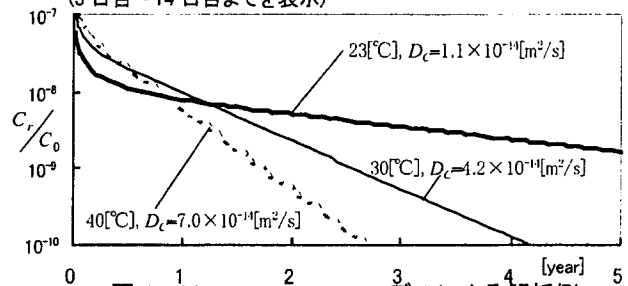


図4 Very Long-Term モデルによる解析例の大きい場合の方が室内濃度は高いが、その後逆転する。このような長期にわたる解析はマイクロ-マイクロモデルでは困難であるが、マイクロ-マクロモデルでは比較的容易に結果を求められる。

5 まとめ ミクロ-マクロモデルを、Short-Term, Long-Term, Very Long-Term の3種類に分類し、これらを定式化し、解の信頼性を確認した。次報(その3)では、これらのモデルを用いてベイクアウトなどの解析例を示す。

注1) (2)式あるいは(3)式右辺は空気密度 ρ_{air} で除している。これは本報では用いる濃度の次元を [kg(VOC)/kg(air)] としているためである。

注2) 建材内の物質輸送と比較して、建材表面から空気中への輸送ははるかに速いので、建材内濃度に比べて建材表面濃度(C_p)はきわめて小さく、室内空気の濃度に近い値である。したがって、放散面近傍の建材内濃度勾配は非常に大きく、数値不安定性が生じ、時間差分間隔 Δt は 10^{-6} [s] 以下にする必要がある。この問題点を解決するために、本報では建材表面濃度(C_p)をゼロとして建材内部を解き、その結果算定される物質フラックスにより建材からのVOCs等の放散量 M を求めた。すなわち、本文(1)式および(2)式左辺で $C_p=0$ として建材内物質フラックスを求め、これに面積 A を乗じて M を求めている。これにより数値的な安定性が得られ、 $\Delta t=10$ [s] 程度で計算可能になる。このように、表面濃度、物質フラックスを室内濃度と無関係に規定することは、物質伝達量、同時に決定されることを意味し、物質伝達率 α_c の仮定が必要でなくなる。今回の計算例では、材料の内部拡散が支配的であったので前述の仮定による誤差はほとんど現れなかったが、内部拡散支配型でない場合については、これが成立しなくなるので注意が必要である。

注3) 表2中の(a)、(b)式は無限級数の和で表現されている。これについて、本報では60項の和の結果を用いている。

注4) Flushingとは、換気量を人為的にまた一時的に増加させて、室内汚染質の排出を促進させることを指す²¹⁾。

[参考文献] [語括弧]は本報(その3)にまとめて示す。

*1 武蔵工業大学 助教授・工博

*2 武蔵工業大学大学院 修士課程

*3 東京大学生産技術研究所 教授・工博

*1 Assoc. Prof., Musashi Institute of Technology, Dr. Eng.

*2 Musashi Institute of Technology

*3 Prof. IS University of Tokyo, Dr. Eng.