

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8)

小型 desiccator を対象とした蒸散支配型放散の CFD 解析

正会員○朱 清宇\*1 同 村上 周三\*2  
同 加藤 信介\*2 同 近藤 靖史\*3  
同 伊藤 一秀\*1 同 山本 明\*1

蒸散支配型放散 CFD Bake-out

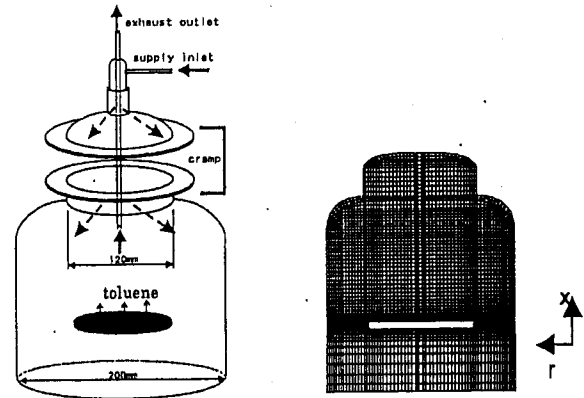
1 序 前報(その 1~7)に引き続き、建材からの揮発性有機化合物(以降 VOCs 等)の放散・拡散・吸着現象のモデル化、並びに CFD(計算流体力学)による解析法に関して検討する。本報では特に蒸散支配型 VOCs 放散の建材に着目し、その放散過程の CFD 解析手法を検討する。ここでは、特に建材や空気温度の上昇により建材中の VOCs 拡散係数や材料表面における VOCs の蒸気圧を増加させて、短期的に空中に放散する VOCs を増加させて、その後の放散量を減ずる方法、即ち Bake-out 効果に関しても検討を加える。

2 小型 desiccator 実験の概要 本解析では図 1(1)に示す小型の desiccator 内に設置した建材からの VOCs 放散を解析対象とする。また図 1(2)に CFD 解析メッシュを示す。desiccator 容積は  $5 \times 10^{-3} \text{ m}^3$  (5L)。換気量は  $5.0 \text{ L/h}$  ( $5.0 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$ , 換気回数 1.0 回/h)。吹出風速は  $0.00191 \text{ m/s}$ 。また測定対象となる建材の設置面は desiccator 床面より高さ  $70 \text{ mm}$  位置。建材設置面積は  $9.5 \times 10^{-3} \text{ m}^2$  (直径  $110 \text{ mm}$  の円形)。Loading Factor は  $1.9(\text{m}^2/\text{m}^3)$ 。建材は上面からの一面放散とする。吹出風速は遅いので、層流と見られる。

3 解析対象建材 本解析では蒸散支配型放散建材モデルとして、図 2 に示すように純 toluene のみの場合と、壁紙材+toluene の場合の 2 ケース想定する。Toluene 内の輸送抵抗は無視できるとし、1 質点でモデル化する。即ち液面位置の変動は無視出来るとする。また壁紙材+toluene の場合、toluene の厚さは無視し、壁紙材は  $0.05 \text{ mm}$  と仮定する。壁紙材内部と空気中の初期濃度は 0 とする。bake-out の効果を検討するため、温度を  $23^\circ\text{C}$  と  $40^\circ\text{C}$  の 2 ケース設定する(表 1)。壁紙材内部の拡散係数  $D_a$  は  $1.1 \times 10^{-9} (23^\circ\text{C})$  及び  $7.0 \times 10^{-9} (40^\circ\text{C})$  と仮定した<sup>注1)</sup>。

4 蒸散支配型化学物質放散の CFD 解析手 液体 toluene と室内空気の境界面における濃度、即ち CFD 解析の境界条件となる濃度は液面における toluene 蒸気圧より求まる。即ち、液面における toluene 濃度  $C_0$  は各温度における toluene 蒸気圧量と同値となる。液体 toluene 初期量  $M_0$ <sup>注2)</sup> を表 2 に示す。液体 toluene 初期量  $M_0$  が 0 になる時点で、蒸発過程は終了する。気化した toluene は室内気流により輸送され、排出口より排出される。計算及び解析条件は表 4 に示す。表 5 はその放散過程の支配方程式を示す。本報では建材設置後、2 週間の解析を行う。

5 流れ場の解析結果 図 3(1)には平均風速分布を示す。Desiccator の吹出口と排出口に近い領域以外では、風速は  $0.001 \text{ m/s}$  以下となっていた。図 3(2)には建材の設置面近傍の風速分布を示す。建材の設置面表面近傍、風速は非常に小さく、最大風速は  $1 \times 10^{-4} \text{ m/s}$ 、最小風速は  $8 \times 10^{-8} \text{ m/s}$  である。



(1)概要図 (2)解析格子分割図  
図 1 解析対象小型 desiccator



(1) toluene のみ (2) 壁紙材+toluene  
図 2 対象建材のモデル化

表 1 解析ケース

Case	Desiccator 温度( $^\circ\text{C}$ )	材料
Case1	23	toluene
Case2	23	壁紙材+toluene
Case3	40	toluene
Case4	40	壁紙材+toluene

表 2 toluene の濃度  $C_0$ 、初期量  $M_0$  と空気中における拡散係数  $D_a$

温度( $^\circ\text{C}$ )	$C_0 (\mu\text{g}/\text{m}^3)$	$M_0 (\mu\text{g})$	$D_a (\text{m}^2/\text{sec})$
23	$4.02 \times 10^7$	82.27	$7.79 \times 10^{-6}$
40	$8.79 \times 10^7$		$8.52 \times 10^{-6}$

表 3 toluene の濃度  $C_0$ 、蒸気圧  $P_w$ 、拡散係数  $D_a$  の計算

液面における toluene 初期濃度濃度  $C_0 (\mu\text{g}/\text{m}^3)$

$$C_0 = \rho_a \times P_w / P_a \quad (4)$$

液面における toluene 蒸気圧  $P_w$

$$\log_{10} P_w = A - B / (C + T) \quad (5)$$

空気中における toluene 拡散係数  $D_a (\text{m}^2/\text{sec})$

$$D_a = \frac{0.00067 \times T^{1.83}}{P_a} \left[ \left( \frac{T_c}{P_c} \right)_1^{1/3} + \left( \frac{T_c}{P_c} \right)_2^{1/3} \right]^3 \sqrt{\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}} \quad (6)$$

$P_w$ : 液面における toluene 蒸気圧(Pa);  $P_a$ : Desiccator における大気圧(Pa);  $p_c$ : 臨界圧力(pa);  $\rho_a$ : 空気中に toluene の密度; A,B,C: toluene 定数; T: 温度( $^\circ\text{C}$ );  $T_c$ : 臨界温度( $^\circ\text{C}$ );  $M_1, M_2$ : toluene, 空気分子量;  $D_a$ : 拡散係数  $\times 10^{-4} (\text{m}^2/\text{sec})$ 。<sup>注3)</sup>

表 4 計算及び解析条件<sup>注4)</sup>

	2次元層流解析 円筒座表系 (x, r)
メッシュ分割	$34(r) \times 63(x)$
差分スキーム	2次精度風上
流入境界	$V_{x,in} = 0.00191 \text{ m/s}$ $V_{r,in} = 0$
流出境界	Mass flow
壁面境界	No-slip
対称面	$\partial V_r / \partial r = 0$

表5 支配方程式

壁紙材内部での分子拡散による輸送

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_c \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial c}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) \quad (1)$$

C: 気相換算濃度 ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ );  $D_c (= \lambda / \rho_c)$  壁紙材中の toluene 拡散係数 ( $\text{m}^2/\text{s}$ );  
 $\lambda$ : 壁紙材中の toluene 伝達率 ( $\mu\text{g}/\text{m}\cdot\text{s}$ );  $\rho_c$ : 壁紙材中の toluene の密度 ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ );  
 壁紙材表面・空気境界面での輸送

$$-D_c \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{B+} = -D_a \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{B-} \quad (2)$$

B+: 建材側 B-: 空気側  
 空気中での移流・拡散による輸送

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

$D_a (= \lambda / \rho_a)$  空気中における拡散係数 ( $\text{m}^2/\text{s}$ );  
 $\lambda$ : 空気中の toluene 伝達率 ( $\mu\text{g}/\text{m}\cdot\text{s}$ );  $\rho_a$ : 空気中の toluene 密度 ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ );

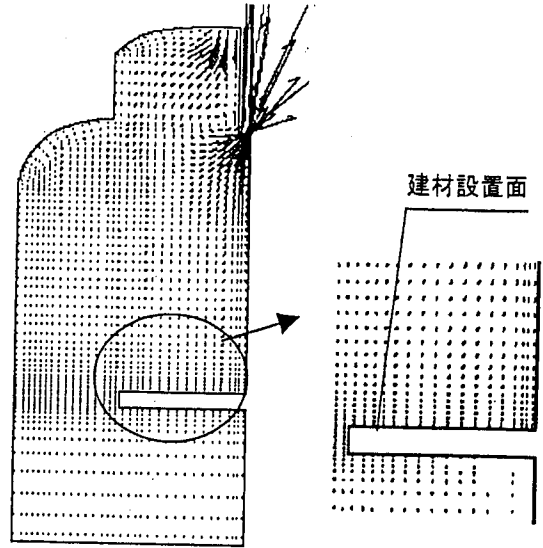
6 Toluene 濃度場の解析結果 蒸散初期段階では、Desiccator の中において、大きな濃度勾配が生じるため、初期量  $M_0$  の液体 toluene (表 2) は瞬時的に空中もしくは壁紙材に蒸散してしまう。その後は、空気中や壁紙材における toluene の輸送は分子拡散のみによる。初期量  $M_0$  の液体 toluene (表 2) は、壁紙材+toluene 場合 (23°C)、9 秒で壁紙材に蒸散してしまう。ほかのケースの場合、1 秒以内で全部蒸散してしまう。図 4 には、toluene のみの場合と壁紙材+toluene の場合についてそれぞれ、温度 23°C と 40°C の場合に関し、desiccator の排出口における toluene 濃度の時刻変化を示す。図 5 は、壁紙材+toluene の場合に関し、23°C と 40°C の場合の desiccator 内部平均 toluene 濃度分布を示す。空気温度、壁紙材温度を 23°C から 40°C に昇温すると、空気中や壁紙材内部における toluene 拡散が速くなるため、Desiccator の排出口により排出する toluene 量は多くなる。

7 結論 (1) toluene 液面における toluene 蒸気圧を一定に仮定し、蒸散支配型化学物質放散と蒸散支配型+内部拡散支配型の化学物質放散モデリングの CFD 解析を行った。(2) 蒸散支配型+内部拡散支配型の化学物質放散を改善するために、建材や空気温度の上昇により建材中の化学物質拡散係数や材料表面における化学物質の蒸気圧を増加させて、短期的に空中に放散する化学物質質量を増加させる。即ち、Bake-out 方法は有効であることを確認した。(3) 内部拡散型の拡散係数  $D_c$  を同定するため、対応する実験を行う予定である。

注 1) 壁紙材内部の拡散係数  $D_c$  は、同種の建材においても含有される可塑剤の量等によりその値は大きく変化すると考えられる。例えば、SBR に関して Q.Chen らの結果 ( $10^{-14} \text{m}^2/\text{s}$  のオーダー)、J.C. Little らの結果 ( $10^{-12} \text{m}^2/\text{s}$  のオーダー) 文 14)、H.N. Knudsen らの結果 ( $10^{-9} \text{m}^2/\text{s}$  のオーダー) 等、広範囲に渡る様々なデータが提供されている。本研究では  $10^{-9} \text{m}^2/\text{s}$  のオーダーの壁紙材内部の拡散係数  $D_c$  を使用している。また、各データの妥当性に関しては今後十分な検討が必要であると考えられる。2) 液体 toluene 初期量  $M_0$  は面積  $9.5 \times 10^{-2} \text{m}^2$ 、厚さ  $1 \times 10^{-3} \text{m}$  を仮定して計算する。3) toluene 定数  $A=6.07954, B=1344.8, C=219.482$ ;  $p_c$  臨界圧力、atm (toluene 41.6 空気 37.2);  $T_c$  臨界温度、°C (toluene 320.6 空気 -140.7);  $M$  分子量 (toluene 92.13 空気 28.97)。4) 本解析は商用コード Fluent 5.0 (Fluent Inc. ©) を用いている。

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。

参考文献 (1)Xudong, Y., Qingyan, C., Philomena M.B., (1998) Prediction of Short-Term and Long-Term VOC Emissions from SBR Bitumen-Backed Carpet Under Different Temperatures, ASHRAE. (2) 化学工学協会編: 化学工学便覧。



(1) 風速断面図 (2) 建材設置面近傍風速

図3 平均風速分布

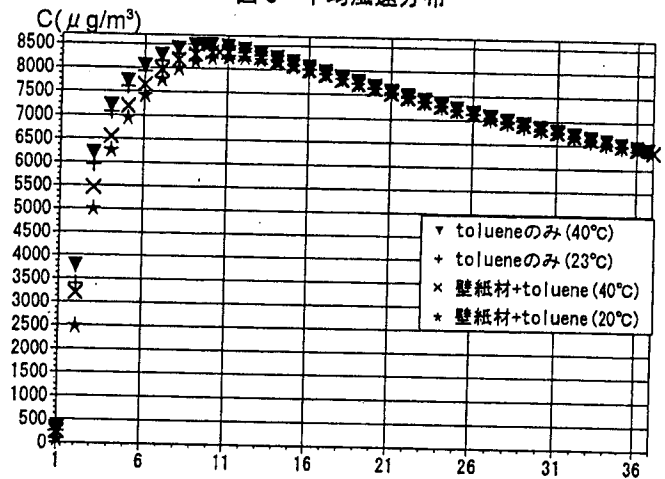
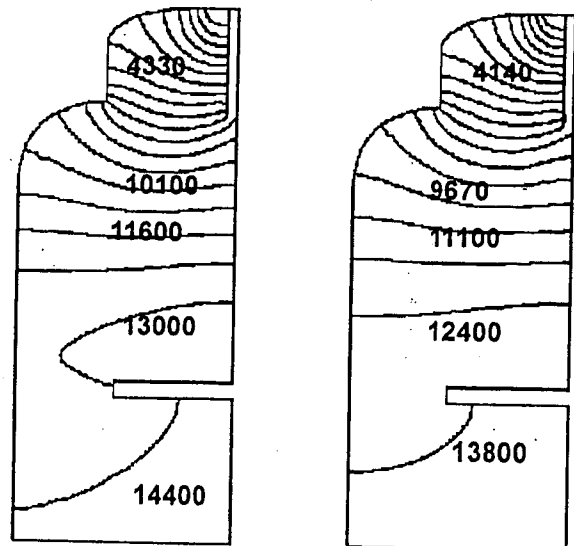


図4 Desiccator の排出口 toluene 濃度の時刻変化 (min)



(1) 壁紙材+toluene (23°C) (2) 壁紙材+toluene (40°C)

図5 平均 toluene 濃度分布 ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ ) t=10min