

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 23)  
**実大居室模型を対象とした化学物質放散・吸脱着の CFD 解析**

学生会員 ○朱 清宇 (東京大学 大学院)    正会員 加藤信介 (東大生産技術研究所)  
 正会員 村上周三 (東大生産技術研究所)    正会員 伊藤一秀 (東京工芸大学)  
 学生会員 太田直希 (東京大学 大学院)

**1. 序**

既報<sup>文1)</sup>では、建材内部での拡散、吸脱着現象の物理モデルを開発し、そのモデルを CFD に組み込み、2次元室内モデルを対象として化学物質濃度分布予測を行った結果を示した。また、汚染質の放散と吸脱着モデルに基づく数値解析検証用データを得る為、実大スケールの2次元室内模型を用いて化学物質濃度分布、及び活性炭の吸脱着効果の測定を行った<sup>文2)</sup>。本報では既報<sup>文2)</sup>で示した実大居室模型による化学物質放散・吸脱着に関する実験結果に対応する CFD 解析結果に関して報告する。

**2. 実験概要**

一般的な居室をモデル化した実大模型を用いて、床面に化学物質汚染源及び吸着材を設置した場合の室内濃度分布及び化学物質放散速度、吸脱着速度を詳細に測定する。

**2.1 実大居室模型** 実験に用いる模型の概略を図 1 に示す。模型は居室をモデル化したもので 1500<sup>x</sup> × 300<sup>y</sup> × 1000<sup>z</sup> mm の大きさを持つ。y 方向に均一な 2 次元の流れ場を形成することを意図しており、キャビティ幅(y 方向)のスロット状吹出口と同形状の吸込口を備える。吹出・吸込口は共に幅(z 方向)20mm である。この模型形状は別報で報告している精密室内気流模型<sup>文3)</sup>の working cavity を厳密に再現したものである。天井、床及び左右両壁面は sus 304 で構成し、その他はガラス製である。この模型は、化学物質フリーの環境を実現する恒温恒湿室内に設置され、一定温湿度(23°C、55%)に制御される。居室模型の吹出風速 U<sub>0</sub> は 3 m/s (換気回数 144 回/h) に制御している。

**2.2 流れ場** 既報<sup>文3)</sup>で報告している精密室内気流模型実験では LDV(レーザー流速計)を用いて測定した平均風速分布の他、各種乱流統計量のデータが蓄積されている。居室模型内の風速を測定し、精密室内気流模型内の流れ性状を厳密に再現することを確認している。本報で示す天井面に沿って吹出口、対向壁に吸込口を設置した場合には、模型内に時計回り的大循環流が生じ、床面隅角部に主流とは逆方向きの 2 次渦が観察された。

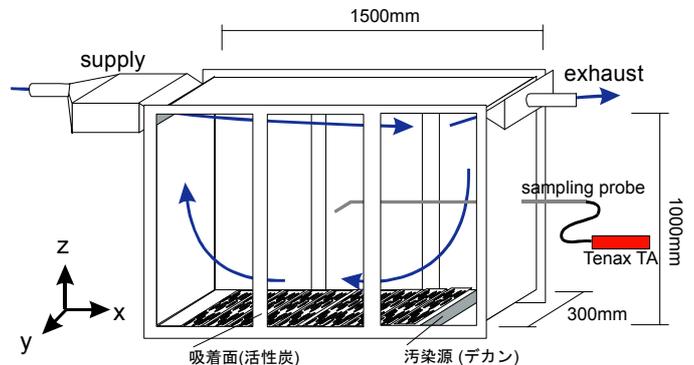


図 1 実大居室模型及びサンプリング方法

表 1 実大居室模型実験ケース

実験ケース	汚染源	吸着材
Case1	Decane 溶液 (100 <sup>x</sup> × 300 <sup>y</sup> × 5 <sup>z</sup> mm)の sus 製容器に設置	無し
Case2		粒状活性炭 (100 <sup>x</sup> × 300 <sup>y</sup> × 5 <sup>z</sup> mm)の sus 製容器を 10 個設置

表 2 GC/MS 分析条件

GC	HP6890
加熱脱着装置	Gestel TDS (Thermal Desorption System)
加熱脱着温度	20°C(5min)→60°C/min→280°C(2min)
CIS 温度	-100°C(0.01min)→12°C/sec→300°C(3min)
カラム	HP5 (60m × 0.25mm × 1 μm)
オープン温度	40°C(3min)→10°C/min→220°C(10min)
Split 比	100 : 1
検出器 (MS)	HP5973MSD

**2.3 吸着材** 本実験で用いた吸着材(活性炭)は黒色顆粒状で、4- 6mesh(粒径 3.36- 4.76mm)である。実験に用いる活性炭は前処理として、純水と共に 10 分程度沸騰させアッシュ(ash)を取り除き、その後、シリカゲルと共に真空乾燥器の中(0.1Torr 以下)で 3 時間以上 170°C 程度の環境に曝している。本報で使用する活性炭は重量法により decane の吸着量を調べており、100(μg/m<sup>3</sup>)近傍の濃度で最適近似した Henry 型の吸着等温式(C<sub>ad</sub> = k<sub>h</sub> · C)の Henry 定数 k<sub>h</sub> は 1.8 × 10<sup>-2</sup> (m<sup>3</sup>/g、25°C)であり、飽和吸着量 C<sub>ad0</sub> は 410 (mg/g)程度である<sup>文2)</sup>、注 1)。

**2.4 実験ケース** 模型実験ケースを表 1 に示す。床面に汚染源として蒸散支配型の建材をモデル化した decane 溶液のみを設置した case1 と、汚染源の

他、吸着材(活性炭)を設置した case2 の 2 ケース設定する。活性炭による吸着効果を期待するため、汚染源は床面の左側側に設置し、活性炭は汚染源の下流側に設置する。設置位置は図 2(1)、図 3(1)を参照。温湿度は両ケース共に 23°C、55%で一定である。

**2.5 化学物質サンプリング・分析法** 模型内には活性炭フィルタを通過した清浄空気を供給する。室内各点の化学物質濃度は模型内に挿入した sus 製のサンプリングチューブを介して、Tenax TA により吸着捕集(0.1L/min の速度で全 0.5L サンプリング)する。分析は加熱脱着の後、GC/MS で行う。GC/MS の分析条件を表 2 に示す。

### 3. 計算概要

実大居室模型実験と同条件で CFD 解析を行い、数値解析精度の検証を行う。

**3.1 流れ場** 模型内流れ場は、境界層粘性底層の拡散現象を解明するために低 Re 型 k-ε model (MKC model)<sup>x4)</sup>により解析する。吹出風速は 3 m/s (=U<sub>0</sub>、換気回数 144 回/h)である。解析は模型の中央断面(図 1 の X-Z 面)を対象とし 2 次元で行う。メッシュ数は 68(X)×64(Z)、移流項は 1 次風上、その他は中心差分を用いる。図は割愛するが、低 Re 型 k-ε model による解析結果は実験結果と十分な精度で一致することを確認している。

**3.2 汚染源及び吸着面のモデル化** 汚染源である液体 decane は、表面に decane 飽和蒸気圧から算出される飽和気相濃度(C<sub>s</sub>=10.0 g/m<sup>3</sup>、23°C)を与える。吸着材である活性炭は、汚染質発生量に対して十分に大量にあると仮定し、定常的に表面濃度 0 を与える<sup>注1)</sup>。

**3.3 拡散場** 空气中に放散された化学物質(decane)は室内気流により移流・拡散され、吸込口より室外に排出される。計算・解析条件を表 3 に示す。

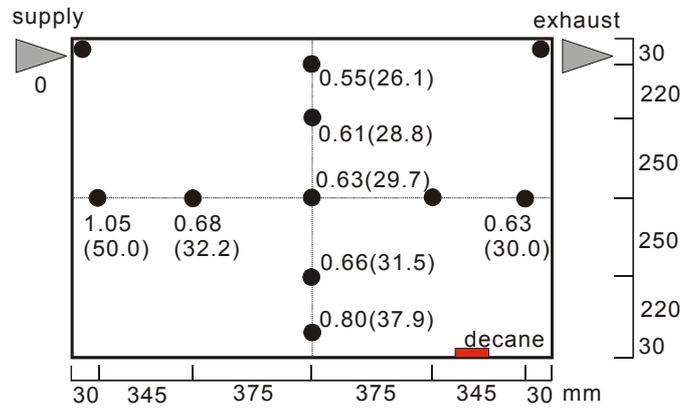
### 4. 模型実験結果

図 2(1)及び図 3(1)に模型実験による居室模型内の濃度分布測定結果を示す。図中の測定値は decane の放散速度と換気量より算出される完全混合濃度 C<sub>0</sub> で無次元化している(括弧内の値は測定値 mg/m<sup>3</sup>)。測定は模型内に decane 溶液を設置した時点より 5 時間経過した後に行っている。測定前に全実験系のブランクテストを行った結果、供給空気及び模型内での decane 濃度は GC/MS の検出限界以下であることを確認している。

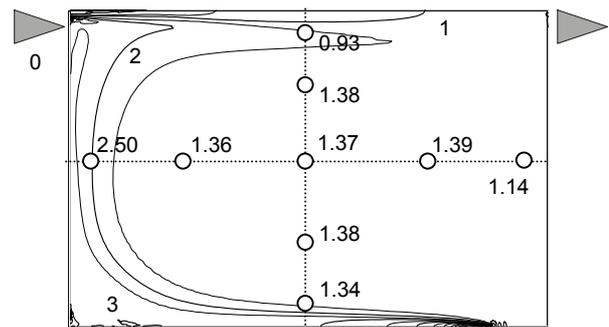
**4-1. 汚染源のみを設置したケース** 図 2(1)に模型内に汚染源のみを設置した case1 の室内濃度分布測定結果を示す。室内には時計回りの大循環流が生じている為、床面附近及び模型内左側領域(吹出口側)で相対的に高濃度となっている。表 4 に sus 製容器

表 3 計算及び解析条件

低 Re 型 k-ε model (MKC model)による 2 次元解析	
メッシュ数	68(X)×64(Z)
Reynolds 数	U <sub>0</sub> L <sub>0</sub> /ν=4200 (U <sub>0</sub> = 3m/s, L <sub>0</sub> = 0.02m)
汚染源(decane)	
飽和気相濃度	C <sub>s</sub> = 10.0 g/m <sup>3</sup> (23°C)
空气中拡散係数	D <sub>a</sub> = 4.80×10 <sup>-6</sup> m <sup>2</sup> /s (23°C)
吸着材(活性炭)	
表面濃度	C <sub>s</sub> = 0 (=const.)と仮定



(1) 実験結果 (括弧内の値は mg/m<sup>3</sup>)



(2) 数値解析結果 (完全混合濃度で無次元化) (図中○には実験の測定点に対応する位置の値を示す)

図 2 case1 (汚染源のみを設置したケース)

を用いて設置 decane の重量変化より直接算出した放散速度を示す。今回の測定条件では 1.1×10<sup>2</sup> (g/m<sup>2</sup>h)であった。

**4-2. 吸着材を併せて設置したケース** 図 3(1)に汚染源と吸着材を併せて設置した case2 の室内濃度分布測定結果を示す。汚染源のみの case1 と比較し、室内の decane 濃度は 30~50%程度低下している。特に、床面附近、左側壁面附近で濃度低下が著しく、室内の吸着材が汚染濃度低減に効果があることを示している。表 4 及び表 5 に decane 放散速度及び活性炭吸着速度を示す。吸着速度は吸着面一様、時間一定として算出している。decane 放散速度は吸着材を設置しない case1 と同様の値となった。また吸着速度(水蒸気等を含み decane のみとは限らない、g/m<sup>2</sup>h)は decane 放散速度と同オーダーであった。図 4

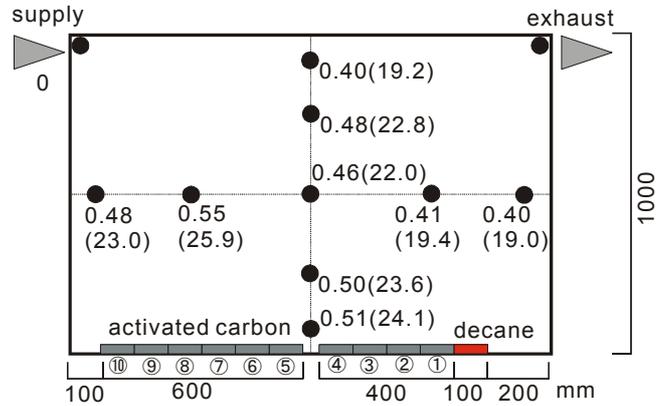
に容器毎に平均した活性炭の吸着速度分布を示す。Decane 発生源に近い位置で最も吸着速度が大きくなっている。容器①では5時間の実験時間で活性炭 1g 当たり 100mg の decane 及び水蒸気が吸着している。活性炭の吸着能力は活性炭 1g 当たり decane が 410 mg であり今回の実験条件では飽和に至っていない<sup>注1)</sup>。decane 発生源から離れるに従い(風下に向かい)、吸着量は減少するが、床面隅角部の逆流域(高濃度領域)に含まれる容器⑩の位置では吸着速度が大きくなっている。

### 5. 計算結果と考察

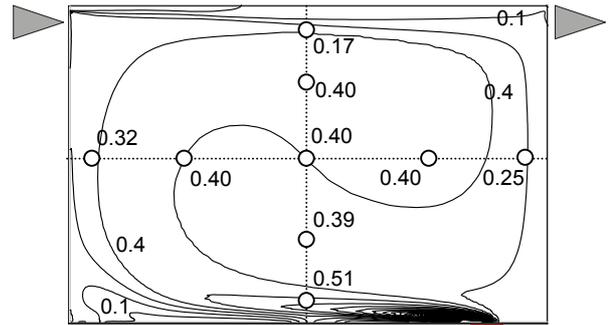
図 2(2)及び図 3(2)に数値解析による居室モデル内の濃度分布解析結果を示す。図中の値は case1 の decane 放散速度と換気量より算出される完全混合濃度で無次元化している。

**5-1. 汚染源のみを設置したケース** 図 2(2)に汚染源のみを設置した case1 の室内濃度分布解析結果を示す。図中の値は放散速度と吹出換気量より算出される完全混合濃度で無次元化している。実験結果(図 2(1))と同様に、室内には時計回りの大循環流が生じている為、床面附近及び模型内左側領域(吹出口側)で相対的に高濃度となっており、濃度分布性状は実験と計算で同様の傾向となっている。モデル室内各点の濃度値は数値解析結果が実験結果に比べ約 2 倍程度高く評価している。これは模型実験において、模型内壁への decane 吸着等により質量保存が完全には成立していない(decane の放散速度と換気量より算出される完全混合濃度と実際の排気濃度が同一の値となっていない)こと等が主な原因と推定される。

**5-2. 吸着材を併せて設置したケース** 図 3(2)に汚染源と吸着材を併せて設置した case2 の室内濃度分布解析結果を示す。図中の値は比較のため、case1 の放散速度と換気量より決定する完全混合濃度で無次元化している。モデル室内各点の濃度値を比較すると、計算結果は実験結果(図 3(1))を非常に良く再現している。汚染源のみの解析ケース case1 (図 2(2))と比較すると、吸着材を床面に設置することで排気口濃度レベルは 1/10 に低下し、室内中央部においても 1/5 以下に低下している。特に吸着材を設置した床面近傍では顕著な濃度低下が観察できる。表 4 及び表 5 に decane 放散速度及び活性炭吸着速度を示す。吸着速度は全吸着面の平均値として算出している。実験では、decane 放散速度は吸着材を設置しない case1 と活性炭を設置した case2 で同様の値であるが、数値解析においては活性炭を設置した case2 で放散速度が 1.3 倍となった。これは活性炭を設置することで室平均濃度が低下し、decane



(1) 実験結果 (括弧内の値は  $\text{mg}/\text{m}^3$ )



(2) 数値解析結果 (完全混合濃度で無次元化)  
図 3 case2 (吸着材を併せて設置したケース)

表 4 decane 放散速度 ( $\text{flux}/U_0C_0$ )

放散速度	実験	数値解析
Case1 (汚染源のみ)	$(1.1 \times 10^2 \text{ g}/\text{m}^2/\text{h})$ (3.1g/h) <sup>注3)</sup>	$(1.1 \times 10^2 \text{ g}/\text{m}^2/\text{h})$ (3.1g/h)
Case2 (吸着材あり)	$(1.1 \times 10^2 \text{ g}/\text{m}^2/\text{h})$ (3.1g/h)	$(1.3 \times 10^2 \text{ g}/\text{m}^2/\text{h})$ (4.0g/h)

放散速度は吹出風速  $U_0$  と case1 の放散速度と換気量より決定する完全混合濃度  $C_0$  で無次元化している。

表 5 活性炭吸着速度 ( $\text{flux}/U_0C_0$ )

吸着速度	実験	数値解析
Case2 (吸着材あり)	1.1 <sup>注2)</sup> $(1.2 \times 10^2 \text{ g}/\text{m}^2/\text{h})$ (36.0g/h) <sup>注3)</sup>	$1.1 \times 10^{-1}$ (12.3 $\text{g}/\text{m}^2/\text{h}$ ) (3.7g/h)

吸着速度は吹出風速  $U_0$  と case1 の放散速度と換気量より決定する完全混合濃度  $C_0$  で無次元化している。

発生源近傍で濃度勾配が大きく評価されたことが原因である。吸着速度に関して実験結果と数値解析結果を比較すると、単位面積あたりの吸着速度は数値解析結果が実験結果の  $10^{-1}$  のオーダーとなっている。これは実験結果が decane のみでなく、水蒸気等の吸着フラックスを含んでいることも原因と考えられる。また吸着材を設置した case2 の数値解析結果において、モデル室内全体での質量保存(マスバランス)より、本数値解析条件の下では、模型内に放散さ

れた全 decane 量に対し、活性炭による吸着分が 92%、排気口より室外に輸送される分が 8%の割合となった。

図 4 に活性炭の吸着速度分布を示す。数値解析では decane 放散源近傍で吸着速度が高く評価されており、汚染源から離れるに従い、値が小さくなる。計算結果と比較し、実験による吸着速度分布の変動が小さいのは、実験では幅 100mm の容器毎の平均値を算出していることが原因と考えられる。

## 6. 考察

本実験で算出される吸着速度には、decane の他、水蒸気、窒素等が含まれ、純粋に decane のみの吸着速度が定量できていない。そのため、吸着速度に関しては、吸着材表面で濃度 0 を仮定した数値解析の精度を詳しく評価することは困難である<sup>注 1)</sup>。今後、水蒸気吸着等の影響を考慮し、実験精度の向上を図ると共に吸脱着モデル(吸着等温式)を組み込んだ数値解析を行う必要がある。

## 7. 結論

- (1) 実大居室模型を制作し、吸着材として活性炭を設置した場合の室内化学物質濃度低減効果を検討した。
- (2) 模型実験では、床面に吸着材を設置することで室平均濃度は 30~50%程度低下し、吸着材による化学物質濃度低減効果を確認した。
- (3) 化学物質吸着現象を簡易にモデル化し、模型実験に対応する数値解析を行った結果、化学物質放散速度、室内濃度分布に関して比較的良く実験結果を再現した。
- (4) 今後はより厳密な吸脱着モデルを組み込んで数値解析を行う。

## 注

- (1) 重量法による吸着量測定システムを補図 1 左側に示す。吸着材(活性炭)をバネばかり(石英スパイラル)に設置し、真空装置内に設置する。吸着物質(本実験では decane)を少量真空装置内に投入し、吸着平衡に達したときのバネの伸びで吸着量の変化を測定する。真空装置内の decane 濃度を圧力計で測定することで decane 濃度(分圧)を計算し吸着等温線を作成する。補図 1 右側の吸着等温線の分布図より、吸着量  $C_{ad}$  が十分に小さい(0 に近い)場合、吸着等温式の勾配は十分に大きく、 $C_{ad}$  の多少の増加に関わらず吸着材表面気中濃度は低濃度に保たれる。よって、十分な量の活性炭が確保された場合、 $C_{ad}$  は低レベルに保たれ、結果として活性炭表面濃度を 0 と仮定することは十分な説得力を持つ。
- (2) 実験値は水蒸気吸着等を含むので、数値解析結果とは対応しない。
- (3) 放散量(g/h)は放散速度(g/m<sup>2</sup>h)に放散面積 0.03m<sup>2</sup> を乗じて算出した値である。また、吸着量(g/h)は吸着速度(g/m<sup>2</sup>h)に吸着面積 0.3m<sup>2</sup> を乗じて算出した値である。

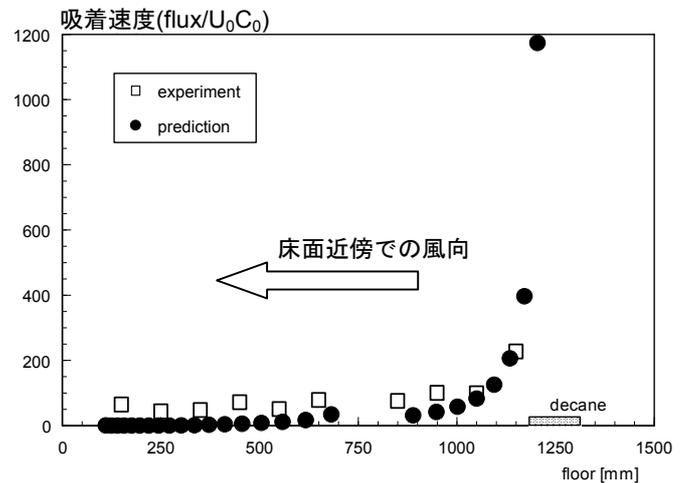
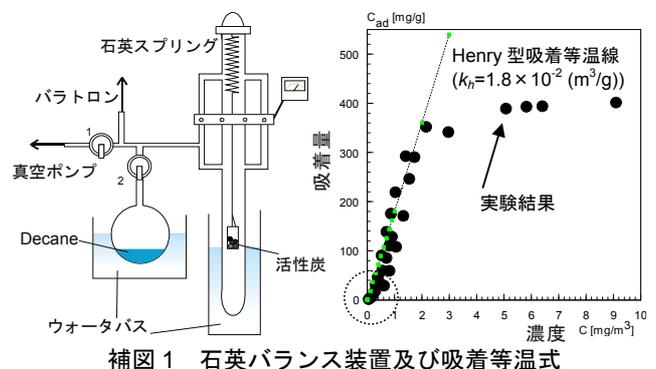


図 4 活性炭吸着速度分布

(縦軸の吸着フラックスは吹出風速  $U_0$  と case1(汚染源のみ)の完全混合濃度  $C_0$  により無次元化している。)



補図 1 石英バランス装置及び吸着等温式

## 参考文献

- (1) 加藤、村上、近藤ら：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 9) 多孔質建材内部における吸脱着を考慮した拡散現象のモデル化と各濃度ポテンシャルの関係：空気調和衛生工学会講演論文集、1999.9、II、pp 473-476
- (2) 山本、村上、加藤ら：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 20) 実大居室模型を用いた化学物質濃度分布・吸脱着効果の測定：日本建築学会年次大会、2000.9、投稿中
- (3) 伊藤、加藤、村上：換気効率指標の数値解析検証用の 2 次元室内気流実験 不完全混合室内の居住域換気効率の評価に関する研究：日本建築学会計画系論文集、No. 534、2000.8
- (4) Chikamoto, T., 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, 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 東大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。