

# 各種吸着等温式を用いた吸着モデルによる室内化学物質濃度分布予測

## CFD解析による室内の化学物質空気汚染の解明 第2報

### MODELING AND CFD PREDICTION FOR DIFFUSION AND ADSORPTION WITHIN ROOM WITH VARIOUS ADSORPTION ISOTHERM

#### CFD Analysis of Indoor Air Pollution by Chemical Compound - Part 2 -

加藤信介\*, 伊藤一秀\*\*, 村上周三\*\*\*, 朱 清宇\*\*\*\*

Shinsuke KATO, Kazuhide ITO, Shuzo MURAKAMI, Qingyu ZHU

This paper presents physical models that are used for analyzing numerically the transportation of volatile organic compounds (VOCs) from building materials in a room. The models are based on fundamental physicochemical principles of their diffusion and adsorption / desorption (hereafter simply sorption) both in building materials and in room air. The performance of the proposed physical models is examined numerically in a test room with a technique supported by computational fluid dynamics (CFD). Two building materials are used in this study. One is a VOC emission material for which the emission rate is mainly controlled by the internal diffusion of the material. The other is an adsorptive material that has no VOC source. It affects the room air concentration of VOCs with its sorption process. The floor is covered with an emission material made of SBR (polypropylene styrene-butadiene rubber). An adsorbent material made of coal-based activated carbon is spread over the sidewalls. The results of numerical prediction show that the physical models and their numerical simulations explain well the mechanism of the transportation of VOCs in a room.

**Keywords :** CFD, VOCs, Emission, Diffusion, Adsorption, Desorption, Adsorption Isotherm  
計算流体力学, 揮発性有機化合物, 放散, 拡散, 吸着, 脱着, 吸着等温式

## 1. 序

近年、住宅・オフィス・学校等において化学物質による空気汚染の問題が深刻化しており、各省庁や学会等で対策、研究が進められている<sup>1,2)</sup>。本研究は室内の化学物質の分布性状を汎用的な計算機シミュレーションにより詳細に解析・予測する方法の開発を最終目的としている。既報の第1報では、建材内の化学物質拡散速度が気中への放散速度を支配する内部拡散支配型の床建材を対象とし、化学物質の室内空気への放散、並びにその室内拡散を材料内拡散解析と CFD(計算流体力学)を連成して解析する方法に関して検討を行った<sup>3)</sup>。本報では、Henry 型、Langmuir 型および Polanyi DR 型の各種の吸着等温式を用いた簡易な吸着モデルを開発し、CFD への組み込みを行うとともに、2次元居室モデルを対象として、吸着モデルを適用した場合の室内化学物質濃度低減効果に関して報告する。

## 2. 化学物質拡散・輸送モデル

室内における VOCs(揮発性有機化合物)等の汚染分布予測を簡易に行うため、建材が、VOCs 等を相当量含有し専ら室内汚染源となるものと、吸脱着効果により室内濃度に影響を及ぼすものに分類し、それ

ぞれ個別にモデル化を行う。本報では、室内空気の汚染源として内部拡散支配型の建材を仮定し、建材内部の拡散方程式を解き、放散 flux を算出する<sup>3,4)</sup>。また、吸脱着効果のある建材に関しては内部拡散効果を無視し吸脱着性状が表面のみに存在するという簡易なモデル化を行っている。

### 2.1 空気中の VOCs 輸送

空気中に放散される VOCs は単一物質にモデル化する。このスカラ量である VOCs は室内気流により移流・拡散され吸込口より排出される。支配方程式を表 1(1)式に示す。本報では、境界層粘性底層の拡散現象を解明するため、低 Re 型  $k-\epsilon$  モデルに基づく気流解析を使用している<sup>5)</sup>。

### 2.2 建材中の VOCs 輸送

一般に多孔質建材は、図 1 に示すようにに実質部と空隙部分(pore)、および空隙を結ぶ毛細管(capillary)から構成されているとモデル化することが出来る。建材内の VOCs 輸送は、主に空隙中と空隙を繋ぐ毛細管内を拡散移動するものと仮定し、建材実質部における Knudsen 拡散は相対的に無視する。空隙中では気相の濃度勾配による拡散から、気相濃度  $C$  [ $\text{kg}_{\text{voc}}/\text{kg}_{\text{air}}$ ]を用いて表 1(2)式で表現する。実質部表面では

\* 東京大学生産技術研究所 教授・工博

\*\* 東京工芸大学工学部 講師・工博

\*\*\* 慶應義塾大学理工学部 教授・工博

\*\*\*\* 東京大学生産技術研究所(日本学術振興会外国人特別研究員) 工博

Prof., Institute of Industrial Science, Univ. of Tokyo, Dr. Eng.

Assistant Prof., Tokyo Institute of Polytechnics, Dr. Eng.

Prof., Keio Univ., Dr. Eng.

JSPS Postdoctoral Fellowship For Foreign Researchers, IIS, Univ. of Tokyo, Dr. Eng.

空隙との吸脱着現象を吸着相濃度(ここでは以降吸着量と呼ぶ) $C_{ad}$  [ $\text{kg}_{\text{voc}}/\text{kg}_{\text{(ps)}}$ ]を用いて表 1(3)式で表現する。ここで、表 1 の(2)式右辺第 2 項、及び(3)式右辺第 1 項の吸脱着項は吸着相と気相の界面のみで生ずる現象である。

### 2.3 吸着等温式

温度一定条件における吸着相と接する気相濃度  $C_{eq}$  [ $\text{kg}_{\text{voc}}/\text{kg}_{\text{air}}$ ]と吸着量  $C_{ad}$ との関係は吸着等温式(表 1(5)式)で表される。ここで、気相濃度  $C$ と、固体実質部表面の吸着相と接する気相濃度  $C_{eq}$ に対して局所平衡の仮定を用いることで、 $C=C_{eq}$ と見なすことが可能となる。建材中の微小空隙中では局所的に吸着平衡状態が成立している。

### 2.4 内部拡散支配型建材の簡易 VOCs 輸送モデル

表 1(2)(3)式に(5)式を適用し、簡略化した拡散輸送方程式(6)式により内部拡散支配型の VOCs 輸送性状を表現する<sup>3)</sup>。表 1(7)式に示す有効拡散係数  $D_c$ は建材からの VOCs 放散履歴より実験的に推定した値を使用する<sup>3)</sup>。

### 2.5 建材と室内空気との界面

表 1(8)式に示すように、建材表面から空気中への VOCs 輸送量と、建材内から建材表面への輸送量(flux 量)は保存される。内部拡散支配型の建材からの VOCs 等の放散過程は最終的に表 1(1)(6)(8)式により記述されることとなる。

## 3. 化学物質吸着モデル

### 3.1 吸脱着面に対する界面濃度輸送のモデル化

表 1(2)(3)式で示されるように、一般的な多孔質建材中では、建材表面のみならず、建材中においても VOCs 輸送は吸脱着効果を含んだ拡散方程式により支配される。

本研究では、建材内部における吸脱着効果を見出し建材の見かけの表面でのみ吸脱着が生ずる簡易モデルを考察する。吸脱着効果の大きい建材表面において、図 2 に示すように吸着材の見かけの微小表面要素  $dS$  を挟み、室内方向と吸着材内部方向に微小厚  $dh$  で構成される空気中と吸着材中の二つの  $C.V.$  (Control Volume)を考える。(2)(3)式をそれぞれの  $C.V.$  で体積積分を行う。ただし空気中の  $C.V.$  内の気相濃度の時間変化はないものと仮定する。ここでは、吸着材ごく表面の空気層中の  $C.V.$  を建材内の微小な空隙に近いものと考え、空気中の微小な  $C.V.$  内( $dh \ll 1$ )では拡散輸送に吸脱着が常に平衡し、気相濃度の時間変化は無視し得るものと仮定する。この時、内部拡散支配型建材中の気相中の VOCs 伝導率  $\lambda_c$  は空気中の VOCs 分子拡散係数  $\lambda_a$  に収束すると考えられる。これより(9)(10)式、更に整理して(11)式の簡易モデルを得る。ここで  $\rho'_{sol}[\text{kg}_{\text{(ps)}}/\text{m}^3]$  は  $\rho_{sol} \cdot dS/dV$  であり吸着材の面密度を表す。吸脱着効果の大きい建材表面での吸脱着現象の簡易モデルは (1)式、(11)式と(5)式により記述されることとなる。ここで、数値シミュレーションを行う際には、吸着材に接する最初の  $C.V.$  中の濃度は局所平衡濃度  $C_{eq}$  と一致するものと仮定する。

### 3.2 Henry 型吸着等温式

気中の吸着物質が希薄であるとき、表 1(5)式において吸着量  $C_{ad}$  と気中の気相濃度  $C$  に線型関係が成り立つ。これを特に Henry 型吸着等温式と呼び、(12)式で表現される。このとき(11)式の吸着速度  $ads$  は、(13)式のように表現される。

表 1 化学物質輸送の支配方程式

- [1] 空気中での移流・拡散方程式
- $$\rho_{air} \frac{\partial C}{\partial t} + \rho_{air} \frac{\partial(U_j C)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \left( \lambda_a + \frac{\rho_{air} v_t}{\sigma} \right) \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \quad (1)$$
- [2] 建材中の輸送方程式
- $$k \rho_{air} \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \lambda_c \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - adv \quad (2)$$
- $$\rho_{sol} \frac{\partial C_{ad}}{\partial t} = adv \quad (3)$$
- $$adv = -\alpha S (C_{eq} - C) \quad (4)$$
- [3] 等温過程時の吸着等温式
- $$C_{ad} = f(C_{eq}) \quad (5)$$
- [4] 内部拡散支配型建材に対する輸送方程式
- $$\rho_{air} \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho_{air} D_c \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \quad (6)$$
- $$D_c = \lambda_c / \left( k \rho_{air} + \rho_{sol} \frac{df}{dC} \right) \quad (7)$$
- [5] 内部拡散支配型建材表面と室内空気との界面濃度輸送
- $$-\rho_{air} D_c \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{B+} = -\lambda_a \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{B-} \quad (8)$$
- [6] 吸脱着効果の大きい建材に対する界面濃度輸送
- $$0 = \lambda_a \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{B-} - adv \cdot dV \quad (C.V. \text{ in the air}) \quad (9)$$
- $$\rho_{sol} \frac{\partial C_{ad}}{\partial t} dV = adv \cdot dV \quad (C.V. \text{ in the material}) \quad (10)$$
- $$-\lambda_a \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{B-} = -adv \cdot \frac{dV}{dS} = -ads$$
- $$= - \left( \rho_{sol} \frac{\partial C_{ad}}{\partial t} \right) \frac{dV}{dS} = -\rho'_{sol} \frac{\partial C_{ad}}{\partial t} \quad (11)$$
- [7] Henry 型吸着等温式
- $$C_{ad} = k_h \cdot C_{eq} = k_h \cdot C \Big|_{B-} \quad (12)$$
- $$ads = \rho'_{sol} \frac{\partial C_{ad}}{\partial t} = \rho'_{sol} k_h \frac{\partial C}{\partial t} \quad (13)$$
- [8] Langmuir 型吸着等温式
- $$C_{ad} = \frac{C_{ad0} k_l C}{1 + k_l C} \quad (14)$$
- $$ads = \rho'_{sol} \frac{\partial C_{ad}}{\partial t} = \frac{\rho'_{sol} C_{ad0} k_l}{(1 + k_l C)^2} \frac{\partial C \Big|_{B-}}{\partial t} \quad (15)$$
- [9] Polanyi DR 型吸着等温式
- $$C_{ad} = C_{ad0} \cdot \exp \left( -k_p \left( \frac{T}{V_m} \right)^2 \cdot \ln \left( \frac{C_{sat}}{C} \right)^2 \right) \quad (16)$$
- $$\lambda_a \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{B-} = ads = \frac{2 \cdot \rho'_{sol} \cdot k_p \cdot \left( \frac{T}{V_m} \right)^2 \cdot C_{ad0}}{C \Big|_{B-}} \cdot \ln \left( \frac{C_{sat}}{C \Big|_{B-}} \right) \cdot \exp \left( -k_p \left( \frac{T}{V_m} \right)^2 \cdot \ln \left( \frac{C_{sat}}{C \Big|_{B-}} \right)^2 \right) \cdot \frac{\partial C \Big|_{B-}}{\partial t} \quad (17)$$

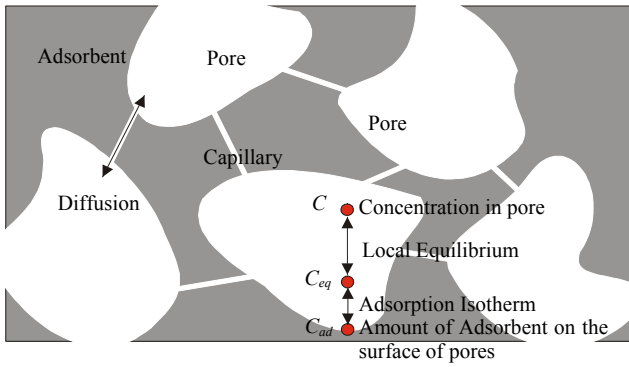


図1 多孔質建材内のモデル化

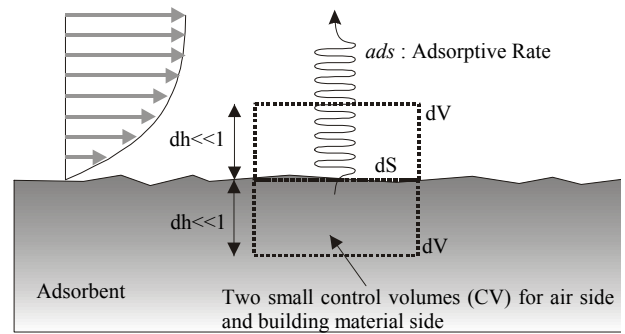


図2 吸着・脱着面のモデル化

### 3.3 Langmuir 型吸着等温式

吸着量は気相濃度が高くなるにつれて増加しなくなり、ある飽和吸着量  $C_{ad0}$  まで達すると吸着面近傍の気相濃度が上昇してもそれ以上吸着しなくなる。吸着物質が吸着面への単分子層を形成したときに飽和状態となり吸着しなくなるものとして導いたモデルが Langmuir 型吸着等温式である。Langmuir 型吸着等温式を表 1(14)式に示す。Langmuir 定数  $k_l$  は吸着と脱着の速度係数の比( $k_a/k_d$ )となる。このときの吸着速度  $ads$  は(11)式を用いて(15)式のように表現される。

### 3.4 Polanyi DR 型吸着等温式

多孔質固体上で起こる物理吸着現象を定式化したもので、吸着物質が吸着材表面の微小空間に充填される時吸着ポテンシャル理論による自由エネルギーが最小となるように振る舞うことをもとにモデル化されている。吸着材と吸着物質の関係はその種類にかかわらず特性曲線によって表現することが可能で、特に等温過程時では表 1(16)式で示される<sup>\*)6)</sup>。このときの吸着速度  $ads$  は、(17)式によって表すことができる。Polanyi DR 型吸着等温式には吸脱着現象の温度依存性が陽に組み込まれており、温度変化を考慮した吸脱着効果を組み込んだ室内空気質解析を行う上で好都合である。

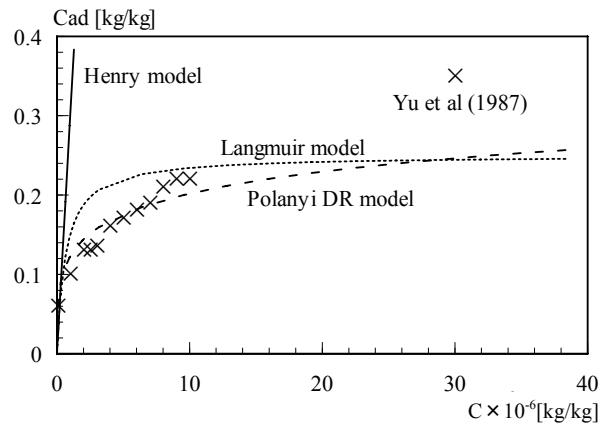
## 4. 吸着等温式で用いられる定数の推定

図3にYuらの行った実験を示す<sup>\*)7)</sup>。これは比較的低濃度の下でトルエンの活性炭への吸着量  $C_{ad}$  と気相濃度  $C$  との関係を示すものである。実験時の温度は 25°C である。この実験結果を基に  $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$  以下の濃度域において適合するように Henry 型、Langmuir 型および Polanyi DR 型吸着等温式で利用される定数を推定した。その結果を表2に示す。

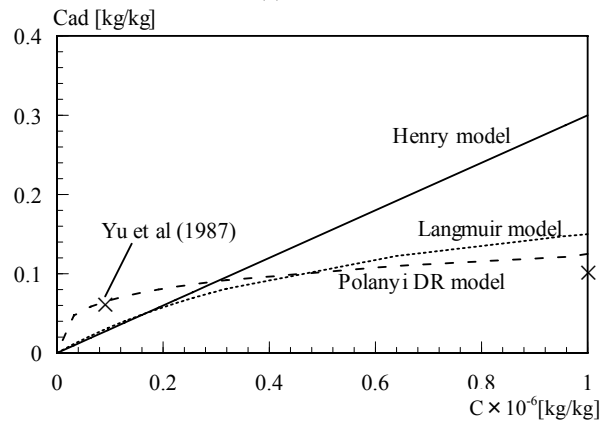
## 5. 数値解析空間および化学物質発生源・吸着源

### 5.1 解析対象空間 (2次元)

解析対象空間を図4に示す。吹出スロット幅を代表長さ( $L_0=0.06\text{m}$ )とし、 $(x) \times (z) = 75L_0 \times 50L_0 (=4.5\text{m} \times 3.0\text{m})$  の大きさとする。この解析対象は精密模型実験により詳細な風速データを得ている<sup>\*)8)</sup>。床面に内部拡散支配型 VOCs 放散建材(ここでは SBR : 合成ゴムの一種)を設置し、壁面に微量の吸着材(活性炭)を配置した2次元居室を対象に解析を行う。諸量は吹出・吸込口幅  $L_0$ 、及び代表風速  $U_0$  を用いて無次元化している。このときの室温は 25°C 一定としている。計算条件を表3に示す。



(1) 高濃度域



(2) 低濃度域

図3 気相濃度と吸着量の関係 (吸着等温式)

表2 吸着等温式のパラメータ同定

Case No.	Isotherm model	Applied Parameter
Case1 (基本ケース)	No sorptive material (Carpet only)	-
Case2	Henry model	$k_h [-] = 3.0 \times 10^5$
Case3	Langmuir model	$k_l [1/(\text{kg}/\text{kg})] = 1.5 \times 10^6$ $C_{ad0} [\text{kg}/\text{kg}] = 0.25$
Case4	Polanyi model	$k_p [(\text{cm}^3/\text{mol} \cdot \text{K})^2] = 1.3 \times 10^{-3}$ $C_{ad0} [\text{kg}/\text{kg}] = 0.43$ $C_{sat} [\text{kg}/\text{kg}] = 0.13$ $V_M [\text{cm}^3/\text{mol}] = 106$

## 5.2 床面 (汚染源)

内部拡散支配型建材である SBR(polypropylene Styrene Butadiene Rubber) 製の合成ゴム床を汚染源とする。合成ゴムの厚さは  $0.025L_0(1.5\text{mm})$  とし、合成ゴム中の VOCs に関しては均一に初期濃度  $C_0(=0.16[\text{kg}/\text{kg}])$  を与える<sup>3,9)</sup>。また、合成ゴムの側面と底面からの VOCs の移動は遮断されているものとする。

## 5.3 壁面 (吸着材)

吸着材は面密度や材料の特性によって吸着量が非常に異なる。ここでは、石炭を原料とした活性炭を対象とする。活性炭は一般に  $1[\text{kg}]$  あたり吸着に有効な表面積が  $10^6[\text{m}^2]$  ほどある。ここでは壁面の面積が壁面に設置した活性炭の総表面積に等しくなるよう吸着面の面密度  $\rho'_{sol}$  を  $1 \times 10^{-6}[\text{kg}/\text{m}^2]$  とおいた。これはきわめてわずかな量であり、実際の室内において吸着材を利用する場合は、もっと多量になるものと考えられる。吸着材のモデル化は表 1 に示すとおりである。また解析に使用したパラメータを表 2 に示す。

## 6. 解析ケース

### 6.1 流れ場の解析

吹出風速を  $1/10U_0(=0.1[\text{m}/\text{s}])$ 、換気回数  $1.6[\text{回}/\text{h}]$  とした場合の流れ場を低  $Re$  型  $k-\epsilon$  モデル(MKC model)を用いて解析する<sup>5)</sup>。流れ場の解析条件の詳細は表 3 に示す。

### 6.2 解析概要

解析ケースを表 2 に示す。壁面に吸着材がなく、拡散支配型 VOCs 放散建材を床面にのみもつ場合を基本ケースとする(case1)。建材中の初期濃度は  $C_0=0.16[\text{kg}/\text{kg}]$  で一様とし、有効拡散係数  $D_c=1.1 \times 10^{-14}[\text{m}^2/\text{s}]$  は実験値に基づき推定された値を用いる<sup>9)</sup>。表 2 に示すように Henry 型モデルを用いた場合を case2、Langmuir 型モデルを用いた場合を case3、Polanyi DR 型モデルを用いた場合を case4 とする。側壁面の吸着材密度はごく微量として  $\rho'_{sol}=1.0 \times 10^{-6}[\text{kg}/\text{m}^2]$  としている。計算は  $1.44 \times 10^6 T_0$  時間( $T_0=L_0/U_0$ 、実時間で 24 時間)行い、室内濃度履歴を解析する。

## 7. 解析結果

### 7.1 流れ場の解析結果

本解析では、床面近傍では粘性低層まで解析するため壁座標  $y^+=10$  以内に 3 メッシュ以上確保している。図 5(1)に流線図を示す。室内では壁面に沿った大循環流が形成され、床面隅角部において大循環流とは逆向きの 2 次渦が観察される。図 5(2),(3)に  $X=37.5L_0$  位置における風速  $U$  成分の鉛直分布、及び  $Z=25L_0$  位置における  $W$  成分の水平分布に関する解析結果と精密模型実験結果<sup>8)</sup>の比較を示す。低 Reynolds 数型  $k-\epsilon$  model による解析結果は精密模型実験結果と非常に良く一致し、十分な精度で流れ場を解析することを示している。

### 7.2 解析対象空間の VOCs 濃度履歴

室内濃度 0 の状態から、汚染源および吸着材を設置し、その直後から 24 時間後( $1.44 \times 10^6 T_0$ )までの室平均濃度履歴を図 6 に示す。値は建材中初期濃度  $C_0$  で無次元化している。吸着面の有無による気相濃度変化は大きくなく、計算開始から 6 時間後以降では、室平均濃度に対する吸脱着の影響はほとんど見られない。これは壁面に設置された吸着材の量がきわめて少ないことに起因する。24 時間後の無次元室平均濃度は  $C/C_0=0.22 \times 10^{-6}$  まで低下し、ほぼ定常となる。

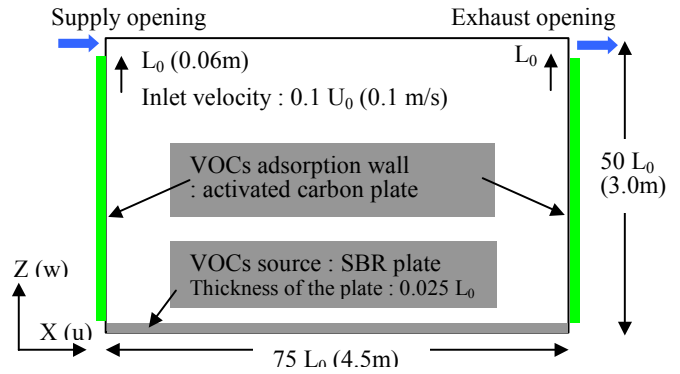
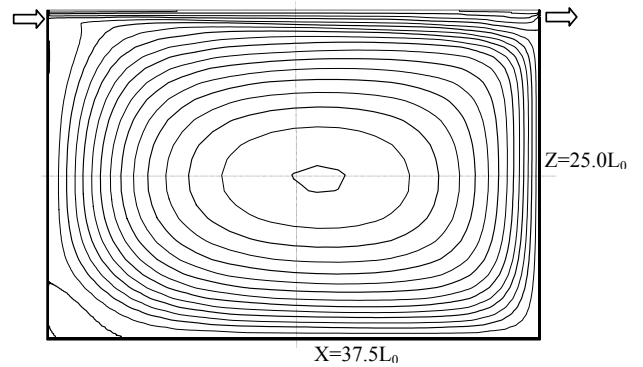


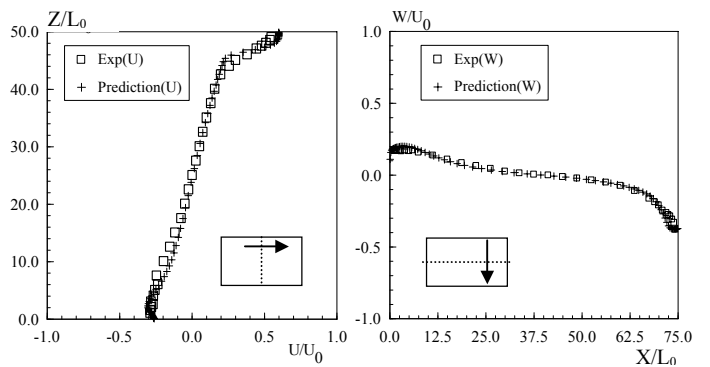
図 4 解析対象空間

表 3 数値解析方法および条件

Number of Grid points	Air region : $68(X) \times 64(Z)$ (= $4.5\text{m}(X) \times 3.0\text{m}(Z)$ )	
	Material region : $68(X) \times 41(Z)$ (= $4.5\text{m}(X) \times 1.5 \times 10^{-3}\text{m}(Z)$ )	
	Width of the mesh adjacent to the surface : $0.6 \times 10^{-9} [\text{mm}]$	
	Region of adsorptive surface for side walls : $55(Z) (= 2.94\text{m}(z))$	
Reynolds Number	$U_0 L_0 / \nu = 4.2 \times 10^3$	
Molecular diffusion coefficient of VOCs in air	$\lambda_{a0} / \rho_{air} = 5.9 \times 10^{-6} [\text{m}^2/\text{s}]$ ( $23^\circ\text{C}$ )	
Effective diffusion coefficient of VOCs in the material (Yang et. al.)	$D_c = 1.1 \times 10^{-14} [\text{m}^2/\text{s}]$ ( $23^\circ\text{C}$ )	
Initial Concentration in the material	$C_0 = 0.16 [\text{kg}/\text{kg}]$	
Inflow Velocity	$U_{in} = 0.1 U_0 (= 0.1 [\text{m}/\text{s}])$	
Air Density	$\rho_{air} = 1.20 \times 10^3 [\text{g}/\text{m}^3]$	
Atmospheric Pressure	$P = 1.01 \times 10^5 [\text{Pa}]$	
Temperature	$23 [^\circ\text{C}] (D_c), 25 [^\circ\text{C}] (\text{Adsorption Isotherm})$	
Plane density of sorptive material	$\rho'_{sol} = 1.0 \times 10^{-3} [\text{g}/\text{m}^2]$	



(1) 流線図



(2)  $U (X=37.5L_0)$  (3)  $W (Z=25L_0)$

図 5 流れ場の解析結果

吸着材のない case1 と比較し、吸着材を設置した case2 (Henry 型) および case3 (Langmuir 型) では解析初期の室平均濃度の最大値が低下しており、吸着面を設置することで室内の VOCs 濃度上昇が抑制されていることが分かる。今回の解析条件では、吸着材近傍の VOCs 濃度は大変希薄であるため、case2 および case3 ともに吸着等温式の吸着 flux 評価に大差なく、室平均濃度履歴に違いは見られない。図 3(2)より、希薄濃度域で吸着量を大きく評価している case4 (Polanyi DR 型) では、室平均濃度の最大値が大きく低下している。

### 7.3 室内濃度分布

解析開始から 1 時間後の case1 および case4 (Polanyi DR 型) の室内無次元濃度分布を図 7 に示す。Case2 (Henry 型) および case3 (Langmuir 型) の室内無次元濃度分布は case1 と大差ないため、本報では割愛する。吸着材が左右壁面に設置されることにより、床面から発生した高濃度の VOCs が室全体に拡散することが抑制されている。解析開始から 1 時間後では、気流性状の影響により左壁面近傍の汚染質濃度が右壁面近傍と比較し、4 倍程度高い。これに対応し、左壁面の吸着量は右壁面と比較しかなり大きく、吸着材は室全体の濃度分布との関係より最適配置があり得ることが分かる。定常状態に近づくにつれ、室内濃度分布に対する吸着材の影響は小さくなる<sup>注1)</sup>。

### 7.4 吸脱着面における吸着量履歴

左壁面に設置した吸着材への単位面積あたりの平均吸着量  $C_{ad}$  の時間履歴を図 8 に示す。平均吸着量  $C_{ad}$  は汚染源 SBR プレートの初期濃度  $C_0$  を利用した SBR プレート単位面積あたりの VOCs 初期吸着量  $C_{ad0}$  ( $= 2.88 \times 10^{-4}$  [kg/m<sup>2</sup>]) により無次元化している。吸着材への吸着量は汚染源濃度と比較し極めて小さく、 $10^{-4}$  のオーダーである。Case2 (Henry 型) は case3 (Langmuir 型) と比較し、解析開始後の高濃度領域で吸着量を大きく評価している。また case4 (Polanyi DR 型) では継続的に吸着量が大きく評価されている<sup>注2)</sup>。

## 8. 結論

- (1) 多孔質建材内部における化学物質の吸脱着を考慮した物質拡散方程式を導出するとともに、気相からの吸着を建材表面のみにおける吸脱着現象で代表した簡易吸脱着モデルを開発し、室内化学物質濃度計算への組み込みを行った。
- (2) 室内に内部拡散支配型放散の建材ならびに吸着材を設置した条件で、室内化学物質濃度分布および壁面吸着過程の CFD 解析を行った結果、吸着材を設置することで室内平均濃度の最大値が低下した。
- (3) 吸着等温式として Henry 型、Langmuir 型および Polanyi DR 型を用いて解析を行った結果、今回の解析条件では、Polanyi DR 型を用いた場合に、室平均濃度の最大値が最も低下した。さらに Polanyi DR 型は継続的に吸着量が大きく評価された。
- (4) 今度、吸着材の量を多くした場合の検討を行うとともに、対応する実験を行い、モデル性能の検証を行う予定である。

## 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 慶応義塾大学理工学部 教授)の活動の一環として実施したものである。また本研究を行うにあたり山本明氏(研究当時東京大学大学院)から多大なるご協力を得た。関係各位に深甚なる謝意を表す次第である。

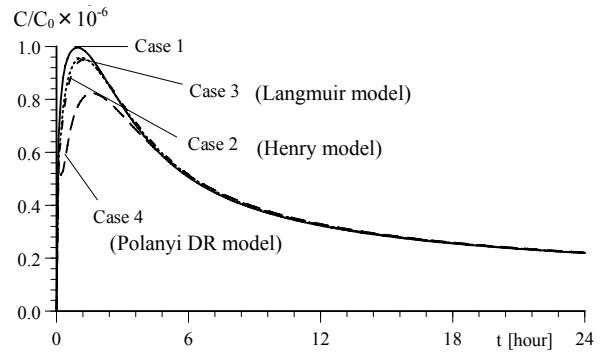


図 6 室内平均濃度の時間履歴 ( $C/C_0 \times 10^{-6}$ )

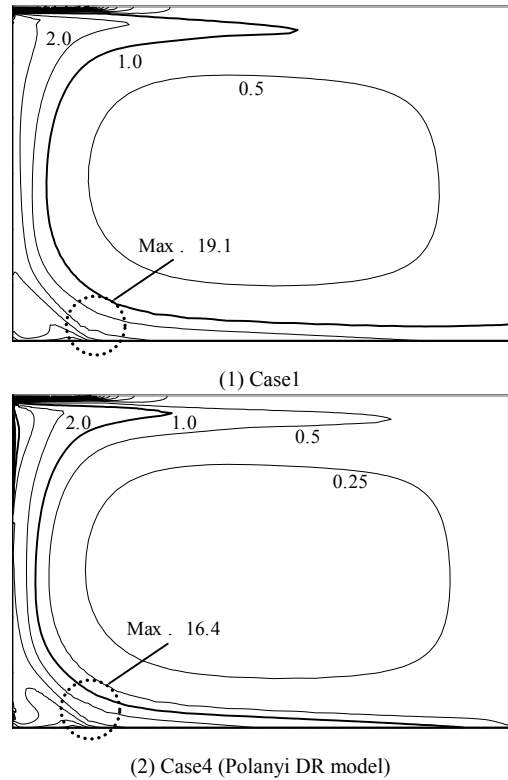


図 7 室内濃度分布 (計算開始後 1 時間,  $C/C_0 \times 10^{-6}$ )

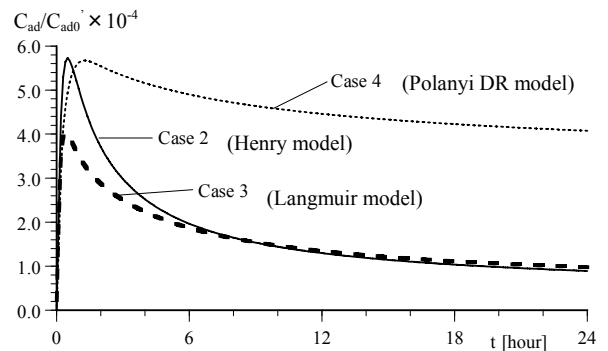


図 8 左壁面吸着材の面平均吸着量履歴

## 注

- [1] 本研究では、吸着等温式の相違に起因する室内濃度予測精度の違いを検証することに主眼がある。本解析では吸着等温式のモデルパラメータは Yu らの実験より推定しているが、計算結果と実現象との対応に関しては、Yu らの実験精度を含め、対応した実験を行い、検証を行う必要性がある。
- [2] Case3 (Langmuir model) および Case4 (Polanyi DR model) の吸着量評価の相違は、実験より推定したモデルパラメータ  $C_{ad0}$  (飽和吸着量) の差に大きく依存している。これは Yu らの実験が飽和状態までを対象としていないことに起因する。 $C_{ad0}$  の正確な評価を行うために、飽和状態までをターゲットとして新たに実験を行う必要性がある。

## 記号

$C$	: 気相濃度(建材内なら気相換算濃度)[kg <sub>(voc)</sub> /kg <sub>(air)</sub> ]
$\rho_{air}$	: 空気密度 [kg <sub>(air)</sub> /m <sup>3</sup> ]
$\lambda_a$	: 空气中 VOCs 分子拡散係数[kg <sub>(voc)</sub> /(ms kg <sub>(voc)</sub> /kg <sub>(air)</sub> )]
$\sigma$	: 乱流プラントル数 1.0
$\nu$	: 分子拡散係数 [m <sup>2</sup> /s]
$\nu_t$	: 乱流拡散係数 [m <sup>2</sup> /s]
$adv$	: 空隙内部の吸着表面に対する物質伝達量[kg <sub>(voc)</sub> /m <sup>3</sup> s]
$C_{ad}$	: 建材表面の吸着相濃度(あるいは吸着量) [kg <sub>(voc)</sub> /kg <sub>(ps)</sub> ]
$k$	: 建材内の空隙率[m <sup>3</sup> <sub>(pore)</sub> /m <sup>3</sup> ]
$\rho_{sol}$	: 建材の密度[kg <sub>(ps)</sub> /m <sup>3</sup> ]
$\lambda_c$	: 内部拡散支配型建材内の気相中 VOCs 伝導率[kg/(ms kg <sub>(voc)</sub> /kg <sub>(air)</sub> )]
$C_{eq}$	: 吸着相と平衡する気相濃度[kg <sub>(voc)</sub> /kg <sub>(air)</sub> ]
$f$	: 吸着等温式
$\alpha$	: 吸着相と空隙間の物質伝達率[kg/m <sup>2</sup> s kg <sub>(voc)</sub> /kg <sub>(air)</sub> ]
$S$	: 建材単位体積あたりの接触面積[m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ]
$D_C$	: 内部拡散支配型建材中の有効拡散係数 [m <sup>2</sup> /s]
$dV$	: C.V.の体積 [m <sup>3</sup> ]
$dS$	: 空气中と実質部の2つのC.V.の界面の面積 [m <sup>2</sup> ]
$ads$	: 吸着速度[kg <sub>(voc)</sub> /m <sup>2</sup> s] (吸着材へ向かう方向を正)
$\rho'_{so}$	: 吸着材の面密度(= $\rho_{sol}dV/dS$ ) [kg <sub>(ps)</sub> /m <sup>2</sup> ]
$l$	
$k_h$	: Henry 定数(=const)[-]
$k_l$	: Langmuir 定数(=const)[1/(kg <sub>(voc)</sub> /kg <sub>(air)</sub> )] (= $k_a / k_d$ )
$k_a$	: 吸着速度係数[kg/(m <sup>2</sup> s kg <sub>(voc)</sub> /kg <sub>(air)</sub> )]
$k_d$	: 脱着速度係数[kg/m <sup>2</sup> s]
$C_{ad0}$	: 飽和吸着量(=const)[kg <sub>(voc)</sub> /kg <sub>(ps)</sub> ]
$k_p$	: Polanyi DR 定数 [(cm <sup>3</sup> /mol·K) <sup>2</sup> ]
$V_M$	: モル容量 [cm <sup>3</sup> /mol]
$T$	: 絶対温度 [K]
$C_{sat}$	: 飽和蒸気圧比 [kg <sub>(voc)</sub> /kg <sub>(air)</sub> ]
$C_{ad0}'$	: SBR プレート単位面積当たりの初期吸着量 [kg <sub>(voc)</sub> /m <sup>2</sup> ]
$U$	: x 方向(水平)風速成分 [m/s]
$U_0$	: 代表風速 = 1m/s
$W$	: z 方向(垂直)風速成分 [m/s]
$L_0$	: 代表長さスケール = 0.06m

## 添字

$B+$	: 建材側建材表面
$B-$	: 室内空気側建材表面
$(voc)$	: VOC 等の化学物質
$(air)$	: 空気
$(ps)$	: 多孔質建材 (porous material)

## 参考文献

- [1] 日本建築学会、室内化学物質空気汚染調査研究委員会「化学物質による室内空気汚染の現状と対策」最終成果報告書、2001
- [2] 健康住宅研究会、設計・施工ガイドライン、ユーザーズマニュアル、1999
- [3] 村上周三、加藤信介、伊藤一秀：床材からの内部拡散支配型物質放散に対する材料温度の影響と換気除去効果 CFD 解析による室内の化学物質空気汚染の解明 第1報：日本建築学会計画系論文集、No. 523、pp 63-69、1999.9
- [4] 近藤靖史、村上周三、加藤信介、藤村淳一、伊藤一秀、山本明：多孔質固体内部における物質拡散のモデル化とマイクロマクロモデルによる室内濃度予測 揮発性有機化合物(VOCs)の吸脱着・放散現象のモデル化とその数値予測 第1報：日本建築学会計画系論文集、No. 535、pp 15-21、2000.9
- [5] Murakami, S., Kato, S., et al. : New low Reynolds-number k- $\epsilon$  model including damping effect due to buoyancy in a stratified flow field. Int. J. Heat Mass Transfer, **39**, pp3483-3496, 1996
- [6] Axley, J.W. : New mass transport elements and compounds for the NIST IAQ model. NIST GCR 95-676, 1995
- [7] Yu et al., Adsorption of trace organic contaminations in air, Royal Institute of Technology, 1987
- [8] 伊藤一秀、加藤信介、村上周三：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、pp 49-56、2000.8
- [9] X.Yang, Q. Chen, et al., Prediction of short-term and long-term VOC emissions from SBR bitumen-backed carpet under different temperatures, ASHRAE Transactions, 1998