

技術論文

数値流体解析を通じた光触媒性能最適化技術

Optimization Technology of Photocatalytic Performance through Computational Fluid Dynamics



技術開発センター
事業化開発室 係長
博士(工学) 山本 清司
Kiyoshi Yamamoto

技術開発センター
事業化開発室 主任
高畠 伽央里
Kaori Takabatake

技術開発センター
事業化開発室 室長
樋口 友彦
Tomohiko Higuchi

技術開発センター
センター長
博士(工学) 永吉 英昭
Hideaki Nagayoshi

要旨

本研究を含む一連の研究は、室内環境中のガス状汚染物質濃度をパッシブに制御する技術として光触媒反応に着目し、酸化チタン(TiO_2)を担持させた建築材料の性能評価法を確立すると共に、室内汚染物質濃度の低減性能を数値的に精度良く定量評価するための数値モデル開発に取り組むものである。本報では、既報^{1,2)}で報告した照度効果をモデルパラメータとして組み込んだ修正 Langmuir-Hinshelwood 型光触媒反応モデル(L-H 型モデル)を3次元の実大スケールモデルを対象とした数値解析に適用した場合の濃度低減予測・評価に与える影響を検討した。特に、20Lの小形チャンバーを用いた実験を基に修正 L-H 型モデルのパラメータ同定した結果を、実大スケールにスケールアップして適用した場合の濃度予測結果に与える影響、光触媒反応効果を組み込んだ建材の設置位置を変化させた場合の検討、更には面積効果の検討結果を報告する。

Synopsis:

In the previous reports, kinetic studies were carried out on the photocatalytic oxidation of toluene in the gas phase over photocatalyst bound building material with a small 20L test chamber, and computational fluid dynamics (CFD) simulations were also carried out on the same boundary conditions that were used in the experiments. In this study, building materials in the form of ceramic tiles with bound TiO_2 as photocatalyst were prepared with the thermal spraying technique without using any binder and used as photocatalytic building materials. The kinetic equation for toluene photo-oxidation over TiO_2 coated building material could be expressed by the Langmuir-Hinshelwood type kinetics. The kinetic parameters for the surface reaction were first determined by using experimental results and then optimized by using the corresponding CFD simulations for considering non-uniformity distributions of toluene on photocatalyst bound building materials. These kinetic parameters were identified as a function of the illumination intensity. Also, a CFD based numerical simulation method integrated with a Langmuir-Hinshelwood type model was applied to the analysis of toluene concentration distributions in a real-scale room model. The reduction performance of toluene concentration in the PCO process was parametrically analyzed as a function of the layout of the TiO_2 coated building materials.

1. 序論

光触媒反応によるガス状汚染物質の酸化分解効果に関する研究は非常に多くの蓄積を有しており、既に一部は実用化レベルにある^{3,4)}。通常の光触媒反応は紫外

線より短波長の光で励起するが、近年、ルチル型の結晶構造を有する酸化チタン(TiO_2)を採用することで可視光範囲での応答を担保する建材も市場流通しており、特に室内空気環境中における汚染物質濃度のパッシブ

制御に関する一手法として期待されている⁵⁾。

本報を含む一連の研究は、光触媒反応を期待して酸化チタン(TiO₂)を担持させた建築材料の実験的な性能評価法を確立すると共に、トルエンを対象とした室内濃度の低減性能を数値的に定量評価するための普遍的な数理モデル開発に取り組むものである。既報では実験精度を担保するために小形の20Lチャンバーを用いて実施した濃度低減性能実験結果ならびに対応する数値解析結果を報告している^{1,2)}。特に、建材表面照度を段階的に変化させた基礎実験を行うことで、光触媒建材による濃度低減性能と建材表面照度の関係を定量的に評価すると共に、Langmuir-Hinshelwood型光触媒反応モデル(L-Hモデル)に照度パラメータを組み込んだ修正モデルを提案し、そのモデルパラメータ同定を実施した結果までを報告した²⁾。一般に、小形チャンバーを用いた実験によるモデルパラメータ同定では、建材表面に形成される濃度境界層の影響を陽に考慮することが出来ず、完全混合系などの大胆な仮定を導入してマスバランス式より概算する手法がとられる。既報の特徴は、このパラメータ同定の際に実験結果に加えてCFD解析を併用することで、境界層の形成を加味した上で普遍的なモデルパラメータを同定した点にある。

本報では、修正L-Hモデル、ならびに小形チャンバー実験とCFD解析を併用して同定したモデルパラメータを用い、解析対象空間をスケールアップし、実大スケールモデルでの濃度低減性能予測を実施する。対象空間をスケールアップし、現実的な建材設置条件にて修正L-Hモデルによる濃度場予測を行うことで、本研究で対象とした光触媒担持建材を実際の建物空間に適用した場合に期待される濃度低減効果や設計上の最適配置問題に関して、基礎的な検討を行う。

2. 照度効果を組み込んだ光触媒反応モデル

筆者らの研究グループは酸化チタンを担持させた建築材料表面での酸化分解反応、所謂、光触媒反応の数理モデルとして、L-Hモデルを採用し、照度の影響を考慮した修正L-Hモデルを提案した上で、実験と計算を併用したパラメータ同定手法を併せて提案してきた^{1,2)}。本報では除染対象汚染物質として室内空気中のガス状トルエンに着目し、建材表面での物理吸着と光触媒反応の分離の導入によりL-Hモデルを更に修正・汎用化する。

本節では既往研究^{1,2)}で述べた物理吸着と照度変化を考慮した修正L-H型光触媒反応モデルの概要を示す。

一般に、Langmuir-Hinshelwood型モデルで記述した光触媒反応モデルは式(1)で示される。

$$r = \frac{kKC}{1+KC} \quad (1)$$

ここで、 r は単位面積当たりの反応速度 [kg/m²s]、 k は単位面積当たりの反応速度定数[kg/m²s]、 K は吸着平衡定数[m³/kg]、 C は室内の汚染物質濃度(本報ではトル

エンを対象)[kg/m³]を示す。

ここで建材表面での物理吸着と光触媒反応を分離したモデル化を行うため、その第一段階として照度0 lxを仮定することで光触媒反応現象の存在しない単純な物理吸着現象のみに着目したモデル化を行う。照度0 lxの条件下における、建材表面に対するトルエンの物理吸着現象に関して、光触媒反応は存在せず、物理吸着のみが支配現象となる。本研究における光触媒建材は、多孔質体であるため、建材内部への濃度拡散の影響を受けており、建材表面において瞬時に吸着平衡になることなく、一定量の物理吸着現象が続くことが実験的に示されている。このため、建材表面への吸着フラックスと建材内部への拡散抵抗フラックスが平衡状態にあると仮定すると、物理吸着についても、Langmuir型吸着等温式で記述すれば、式(1)の反応速度定数 k ならびに吸着平衡定数 K とは異なる吸着平衡定数 K_1 を用いて式(2)が導出される。

$$r_{ads} = \frac{bK_1C}{1+K_1C} \quad (2)$$

ここで、 b は物理吸着成分のみに着目した反応速度定数[kg/m²s]を示す。

更に、D.F.Ollisらの先行研究⁶⁾を参考に、式(1)中の反応速度定数 k を照度変化(即ち光量子束密度の変化)に伴う光触媒反応と直接関連するパラメータと見なせば、反応速度定数 k と光量子束密度 I (light intensity or photon flux density)の線形関係が仮定でき、光量子束密度 I をモデルパラメータとして組み込んだ修正L-H型光触媒反応モデルが式(3)として導出できる。また、1983年にはThimijanらは蛍光灯を対象とした場合に光量子束密度と照度の間に良い線形成が確認できることを報告しているが⁷⁾、本報を含む一連の小型チャンバー実験で使用した光源(本研究では蛍光灯を使用)の分光スペクトル分布を詳細に計測した結果においても、光量子束密度(380nmから413nmの波長域帯)と照度に良好な線形関係が確認されている²⁾。そのため、照度 E をパラメータとしたモデル化も式(3)として示す^{注1)}。

$$r_{pco} = a_1 I \frac{K_2C}{1+K_2C} = aE \frac{K_2C}{1+K_2C} \quad (3)$$

ここで、 a_1 は比例定数[kg/photons]、 I は光量子束密度[photons/m²s]、 a は単位照度あたりの反応速度定数[kg/m²s lx]、 E は照度[lx]、吸着平衡定数 K_2 [m³/kg]を示す。

さらに光触媒建材表面では物理吸着と光触媒反応が同時に作用すると想定した上で、両者の反応速度が線形和で表現できると仮定すると式(4)が導出される。

$$r = aE \frac{K_2C}{1+K_2C} + b \frac{K_1C}{1+K_1C} \quad (4)$$

式(4)では光触媒反応項(右辺第一項)と物理吸着項(右辺第二項)で同じ参照濃度 C を用いているが、これは第一次近似として物理吸着と光触媒反応が同時に生じるとの仮定を導入したことによる。更に建材の表面吸着性能をマクロスコピックに表現すれば、光触媒反

応の有無における吸着平衡定数 K_1 と K_2 は単純に複合建材表面での物理吸着性能を示す同一値 K として扱うことに一定の合理性があり²⁾、結果として修正型反応モデルとして式(5)が導かれる。

$$r = (aE + b) \frac{KC}{1 + KC} \quad (5)$$

これらのパラメータは既報で報告^{1,2)}されており、本報でも $a = 2.46 \times 10^{-13}$ [kg/m² s lx], $b = 2.99 \times 10^{-11}$ [kg/m² s], $K = 1.16 \times 10^6$ [m³/kg]を採用している。

また、本研究では数値流体解析に光触媒反応を組み込む手法として、この式(5)で表される光触媒反応モデルを建材表面にのみ与え、トルエン濃度の移流・拡散方程式の壁面境界条件として組み込むことで計算を実施している。

空間のある点におけるトルエン濃度を C とすると、トルエン濃度の移流・拡散方程式は式(6)で示される。

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial U_j \bar{C}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(D + \frac{\nu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} \right) + S_{PCO} \quad (6)$$

$$S_{PCO} = \frac{\partial}{\partial n} (-r) = -(a'E + b') \frac{K\bar{C}}{1 + K\bar{C}} \Big|_{n=\Delta y_1} \quad (7)$$

式(6)は RANS モデルによる解析を前提とし、アンサンブル平均された方程式系を示す。ここで、オーバーバー($\bar{\quad}$)はアンサンブル平均値を、 D はトルエンの分子拡散係数[m²/s]、 U_j は風速[m/s]を、 ν_t は渦動粘性係数[m²/s]、 σ_t は乱流シュミット数[-]、 S_{PCO} は物理吸着と光触媒反応によるトルエン濃度の低減効果を再現する Source Term [kg/m³ s]を示す。 n は建材表面の法線方向成分を示す。

この時、本研究では壁面に接する第一セル(ここでは低 Re 型モデルによる解析を前提として粘性底層内を想定)に Source Term S_{PCO} を光触媒反応によるトルエン濃度低減量を表す項として与えることで光触媒反応をモデル化する。モデル化の概要図を Fig. 1 に示す。

式(7)は、修正 L-H 型モデルである式(5)を Source Term として、表面反応と粘性底層内の仮想空間($y^+ < 1$)での体積反応としてモデル化しており、 a' は単位体積当たりの反応速度定数[kg/m³ s lx]を示し、 $a' = a / y_1$ (y_1 は壁面第一セルの法線方向高さ:0.0002 [m])、 b' は単位体積当たりの反応速度定数[kg/m³ s]を示し $b' = b / y_1$ である。

3. 実大スケールモデルの数値解析概要

6 畳程度の一般的な実大スケールモデルを想定した上で、光触媒建材の設置位置を変化させた条件で数値解析を実施する。解析対象空間は 3.50m×3.29m×2.40m の 3 次元空間であるが、一部隣室との窓面を想定している。流れ場は定常を仮定するため、建材設置位置を変化させることは建材表面の流れ場性状を相対的に変化させることを意味し、面積効果の検討も含む。

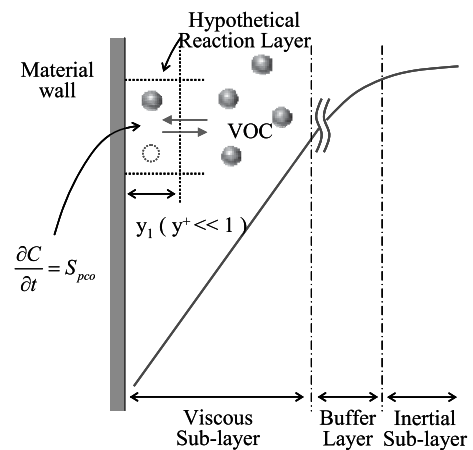


Fig. 1 Conceptual diagram of photocatalytic reaction modeling in CFD

Table 1 Illuminance simulation

Algorithm	Radiosity method
Meshes	928 (32×29)
Material Properties	Pyrex glass (Transmittance : 100%) SUS304 (Reflectance : 90%) Target PCO material (Reflectance : 30%)

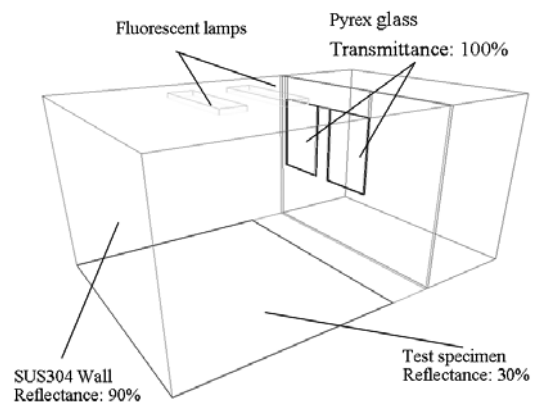


Fig. 2 Outline drawing of illuminance simulation in Case 3

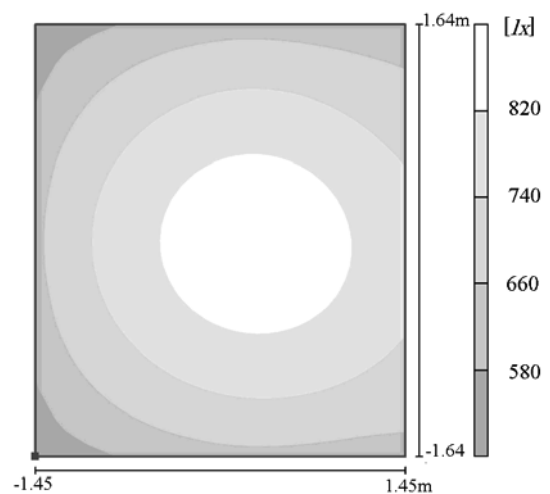


Fig. 3 Result on the floor surface of illuminance simulation in Case 3

3.1 照度分布解析の概要

修正 L-H 型光触媒反応モデルは、建材表面照度 E をパラメータとして陽にモデル化しており、入力条件として建材表面上の照度分布を把握する必要がある。そのため、Radiosity 法をベースとした照度分布解析ソフト(DIALux ver4.12)を用いて天井面に蛍光灯が設定された条件で、実大スケールモデルを対象とした光触媒建材表面の照度分布の計算を行った。Fig. 2 に照度分布解析のためにモデル化した解析空間の概要を示す。

本報での実大スケールモデルは実在する大形チャンバーを想定しており、光源はチャンバー内の天井面に設置された蛍光灯のみである。大形チャンバーは室内に設置されており、加えてチャンバー外部からの光については遮光を行っているため、チャンバー内には影響がないように配慮されている。しかしながら、チャンバー内と前室の間にはガラス面で仕切られた部分もあり、この影響を再現するために、照度解析の場合のみ、ガラス面を介した隣接空間も再現した。反射率及び透過率などの壁面境界条件は、Table 1 に纏めて示している。

ガラス面については、透過率 100%を想定し、チャンバー内のステンレス面については反射率90%を設定した。対して、光触媒建材については光の吸収等を考慮して反射率を 30%として計算を実施した。

照度分布解析は 3 次元的に実施しており、全ての壁

面表面上の照度分布を解析しているが、ここでは結果の一例として、後述 Case 3 に相当する床面に光触媒建材を設置し、その他の壁面はステンレスとした境界条件で解析した場合の床面上の照度分布解析結果を Fig. 3 に示す。この時、床面上では最大照度 871 lx、最小照度 516 lx となり、平均照度は 729 lx となった。

3.2 流れ場ならびに濃度場解析の概要

CFD 解析における実大スケールモデルの概要を Fig. 4 に示す。CFD 解析ケースでは隣室は再現していない。流れ場解析の他、光触媒建材の設置位置を変化させた場合の濃度場解析を実施する。本報での実大スケールモデルは実在する大形チャンバーを想定したため、給気口が壁面中央付近に、排気口が対向壁の床面に沿って設置されており、多少、一般的な居室とは流れ場条件が異なるものである。

本解析では、定常・等温を仮定し、湿度は考慮していない。乱流モデルとして低レイノルズ数型 $k-\epsilon$ モデル (Abe-Kondoh-Nagano model)を用いることで、壁面上に形成される境界層粘性底層までを解像する⁸⁾。計算条件ならびに境界条件を Table 2 に纏めて示す。解析空間は非構造格子(壁面近傍は 3 層以上のプリズムメッシュ、その他室空間はテトラメッシュを配置)にて分割し、約 25m³ の容積に対して総メッシュ数は約 160 万に設定した。

対象汚染物質として、トルエンを対象とする。不均一濃度場の形成を意図して、床面での定常的なポイント発生を想定した。

解析結果は給気口及びトルエンの発生面が含まれる $y=1.37$ の $z-x$ 平面:Plane (b)、サンプリング箇所の濃度比較が可能な $x=1.75$ の $y-z$ 断面:Plane (a)及び $z=0.60$ の $x-y$ 平面:Plane (c)の 3 断面で表示する(Fig. 4 参照)。また、トルエンの発生量は完全混合濃度が 260 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ となるよう設定した。

3.3 解析ケース

本報では、20L 小形チャンバー実験で同定したモデルパラメータを用いて 3 次元の実大スケールモデルでの濃度低減性能予測を行い、実際の環境設計への貢献を意図した光触媒建材の最適配置に関して基礎的な検討を行う。

Table 2 CFD simulation condition

Geometry	3.50m(x) × 3.29 m(y) × 2.40m(z)
Meshes	1,613,799 (tetra & prism)
Turbulence Model	Low Re type $k-\epsilon$ model (Abe-Kondoh-Nagano Model)
Scheme	Convection term: QUICK
Inflow Boundary	Area: $\phi_r = 0.07$ m $U_{in, Ave.} = 1.07$ m/s
Outflow Boundary	$TI=10\%$, $l_{in}=0.07/7$ m, $C_{\mu}=0.09$, $k_{in}=3/2 \times (U_{in} \times 0.1)^2$, $\epsilon_{in}=C_{\mu}^{3/4} \times k_{in}^{3/2} / l_{in}$
Wall Treatment	Area: 0.50 m(y) × 0.66 m(z) $U_{out}, k_{out}, \epsilon_{out}$: Gradient zero
Contaminant	Velocity: No slip Contaminant concentration: $\partial C / \partial x = 0$
	Passive contaminant

Table 3 Concentration analysis results of basic case (Case 1~Case 3)

Case	C_p [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	C_a [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	C_b [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	C_c [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	C_d [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	C_v [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	η [-]
1	260	260	520	325	227	274	0.00
2	260	256	515	319	223	269	0.02
3	260	236	490	289	205	247	0.09

そのため、光触媒建材を設置せず、床面のポイントソースよりトルエンが定常発生する基本条件：Case 1 を設定した上で、床面のみ建材を設置して(光触媒効果を組み込まず)、物理吸着効果のみを再現した条件：Case 2、物理吸着に加えて光触媒反応を修正 L-H 型モデルで再現した条件：Case 3 を設定した。光触媒建材の設置面以外の壁面は濃度の勾配ゼロ条件を課し、吸着等を無視した。

4. 数値解析結果

4.1 流れ場解析結果

定常流れ場解析結果を Fig. 5 に示す。壁面中央に設置された給気口から供給された噴流がそのまま直進し、対向壁まで到達する様子が確認できる。吹出噴流の到達域で相対的に高い風速となるものの、その他大部分の領域は 0.1 m/s 以下の低風速となった。対向壁に衝突

した噴流が壁面に沿ってチャンバー内を循環する様子も確認できる。また、汚染源付近では風速が 0.05 m/s 以下となる。

4.2 基本ケースの濃度場解析結果と濃度低減性能

基本ケース Case 1 から Case 3 の濃度分布解析結果を Fig. 5 に示す。Fig. 5 の結果は Case 1 の完全混合濃度 C_p で無次元化でしている。また、室内の代表的な 4 点におけるトルエン濃度の解析結果を Table 3 に示す。Point (A) は排気口付近 $(x, y, z) = (0m, 0.43m, 0.60m)$ 、Point (B) は汚染源付近 $(x, y, z) = (1.75m, 0.43m, 0.60m)$ 、Point (C) は室下部 $(x, y, z) = (1.75m, 2.50m, 0.60m)$ 、Point (D) は室上部 $(x, y, z) = (1.75m, 2.50m, 1.5m)$ であり、Fig. 4 にその位置を示しており、各点における濃度を C_a 、 C_b 、 C_c 、 C_d で示す。 C_v は空間平均濃度であり、チャンバー内全体の平均濃度を示している。

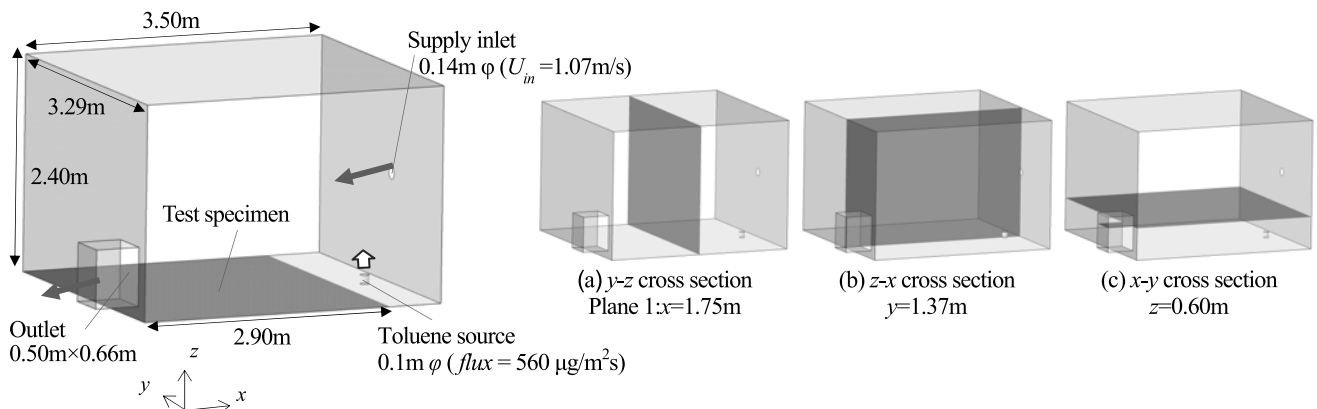


Fig. 4 Outline of real scale model for CFD and display section of analysis result

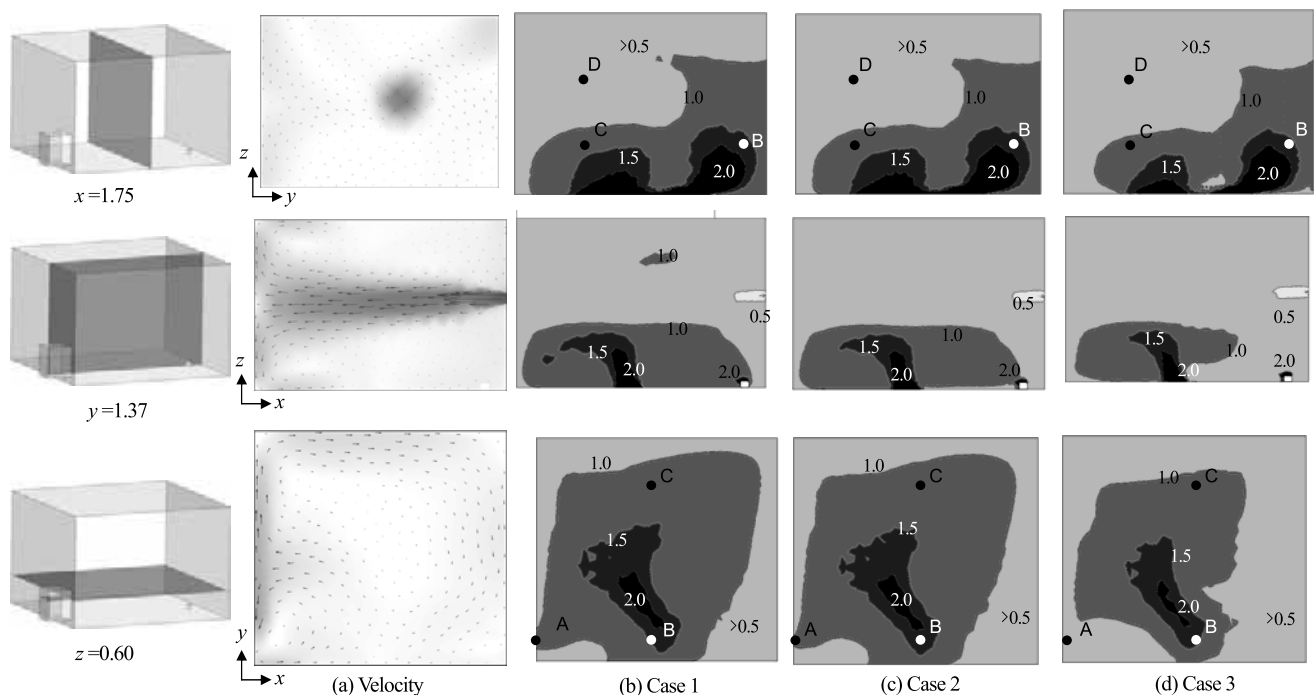


Fig. 5 Results of flow field analysis and results of analysis of dimensionless toluene concentration distribution in each cross section (Case 1 ~ Case 3)

トルエン濃度低減率 η [-] の算出には以下の式(8)を用いた。

$$\eta = \frac{C_p - C_a}{C_p} \quad (8)$$

ここで、 C_p は完全混合濃度 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]、 C_a は排気濃度 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] を示す。

建材を設置しない Case 1 において、排気濃度 C_a は $260 \mu\text{g}/\text{m}^3$ となり完全混合濃度と一致しており、数値解析上の質量バランスは正しく担保されている。床面に建材を設置して(光照射せず)物理吸着性能のみを再現した Case 2 では、 C_a が $256 \mu\text{g}/\text{m}^3$ となり濃度低減がほとんど見られない結果となった。モデル内の照度分布解析を実施し、床面照度情報を修正 L-H 型モデルに組み込んで光触媒反応効果を再現した Case 3 では排気濃度が $236 \mu\text{g}/\text{m}^3$ となり、基本ケースである Case 1 と比較した場合の濃度低減率 η は 0.09 となった。各 Point における濃度に関しては、全ての解析ケースにおいて (B) > (C) > (A) > (D) となり、汚染源に近い位置ほど濃度が高い結果となった。また、実大スケールモデルの空間平均濃度 C_p に着目すれば、Case 1 では完全混合濃度よりも高い濃度となっており、換気効率の悪い流れ場が形成されている結果が示された。また、Case 1 から Case 3 では空間平均濃度に一定の差違が確認できる。

しかしながら、Fig. 5 の無次元濃度分布解析結果に着目すれば、 $x=1.75$ 断面および $y=1.37$ 断面の濃度分布を見ても、Case 1 から Case 3 の濃度分布解析結果に有意な差違は見られず、対象建材の物理吸着性能ならびに光触媒反応効果は非常に限定的であることが分かる。本解析条件は、汚染源であるトルエン発生源の近傍である床面に濃度低減性能を有する建材を設置するという条件であるにもかかわらず、モデル内に複雑な流れ場が形成されており、対応して濃度分布も複雑となり、発生トルエンが効率的に建材表面に輸送されていないことも、濃度低減性能が非常に低く評価された一因と云える。

20L 小形チャンパー実験では、建材負荷率 $L=2.2$ (照度 600 lx) の条件で光触媒反応による濃度低減率 η が 0.50 から 0.90 程度と非常に高い性能を示していたが²⁾、対象空間スケールを変更し、建材負荷率を $L=0.35$ に変更した条件では、室内トルエン濃度の低減効果は微小な結果となった。

4.3 建材設置位置を変化させたパラメトリック解析

その上で、光触媒建材の設置位置が濃度低減性能に与える影響を検討する目的で、Fig. 6 に示す Case 4 から Case 6 の条件を設定した。Case 1 から Case 6 の全ケースで同一の定常流れ場を用いており、トルエン発生位置も同一条件である。なお、建材反応面積に関しては 9.5265m^2 とし、全てのケースで統一している。Case 3 から Case 6 の建材負荷率は $L=0.35 [\text{m}^2/\text{m}^3]$ である。

Table 4 Analysis results of surface illuminance of building materials in each case [lx]

Case	Maximum	Minimum	Average
3	871	516	729
4	787	489	664
5	796	381	646
6	659	441	601

また、光触媒建材の設置面積を増やした条件として、Case 3、Case 4 ならびに Case 6 の建材設置面積を組み合わせた Case 7 も設定した。この場合、Case 7 の建材負荷率は $L=1.05 [\text{m}^2/\text{m}^3]$ となる。

Case 3~Case 6 の光触媒建材表面の照度分布解析結果を Table 4 に示す。天井面に光源となる蛍光灯が設置されているため、その対向面となる床に建材設置を仮定した Case 3 では平均照度 729 lx と、他の解析ケースと比べ相対的に高い値を示した。Case 4、Case 5 はともに側面に建材を設置した解析ケースであり、平均照度はそれぞれ 664 lx、646 lx とほぼ等しい値を示した。しかしながら Case 5 における最小値は 381 lx となり、Case 4 の最小値 489 lx と比べて 100 lx 程度の差が見られ、建材表面における照度分布の大きい解析ケースとなった。Case 6 は光源と同一平面上に建材を設置した解析ケースであるが、床面(この場合はステンレス)からの反射の影響もあり、平均照度は 601 lx となった。

Case 3~Case 6 の代表点におけるトルエン濃度の測定結果を Table 5 に示す(Case 3 の結果は Table 3 にも示しているが比較のために再掲した)。側面下部に建材を設置した Case 4 では排気濃度が $244 \mu\text{g}/\text{m}^3$ となり濃度低減率 η は 0.06 となった。また側面上部に建材を設置した Case 5 は排気濃度が $245 \mu\text{g}/\text{m}^3$ となり濃度低減率 η は 0.06、天井に建材を設置した Case 6 は排気濃度が $245 \mu\text{g}/\text{m}^3$ となり濃度低減率 η は 0.05 となった。これらを比較すれば、汚染源に近い位置に建材を設置した条件ほど、濃度低減効果が相対的に高く評価される結果となったが、前述したとおり、本解析での建材負荷率 L が $0.35 [\text{m}^2/\text{m}^3]$ と小さく、各解析ケース間での濃度低減率 η の差違が最大でも 0.04 と、有意な差とは云えない結論となった。

Case 1 の完全混合濃度で無次元化したトルエン濃度分布解析結果を Fig. 7 に示す。各解析ケースにおいて特に特徴的な差違は確認できないが、例えば、 $x=1.75$ 断面で比較すると、右側面において Case 4 および Case 5 では無次元濃度 1 以下になる部分が見られる他、 $y=1.37$ 断面で比較すると、Case 3 では床面に建材を設置している影響もあり、下方に存在する無次元濃度 1 以上の領域が他のケースに比べて多少減少する傾向が見られる。

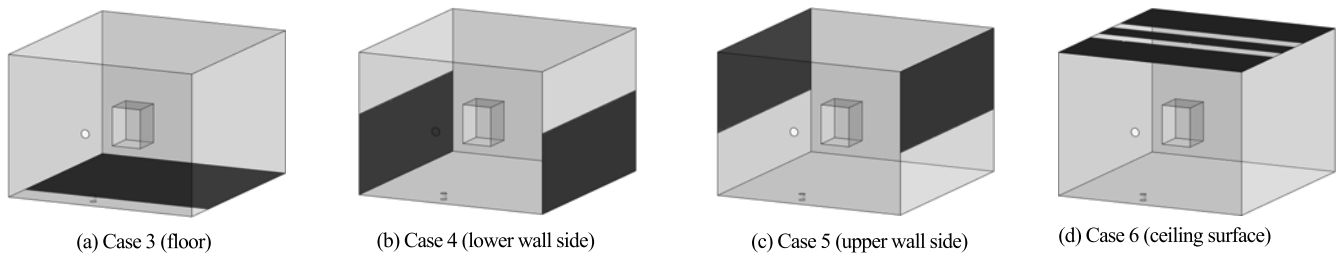


Fig. 6 Installation of building materials for each case in parametric analysis

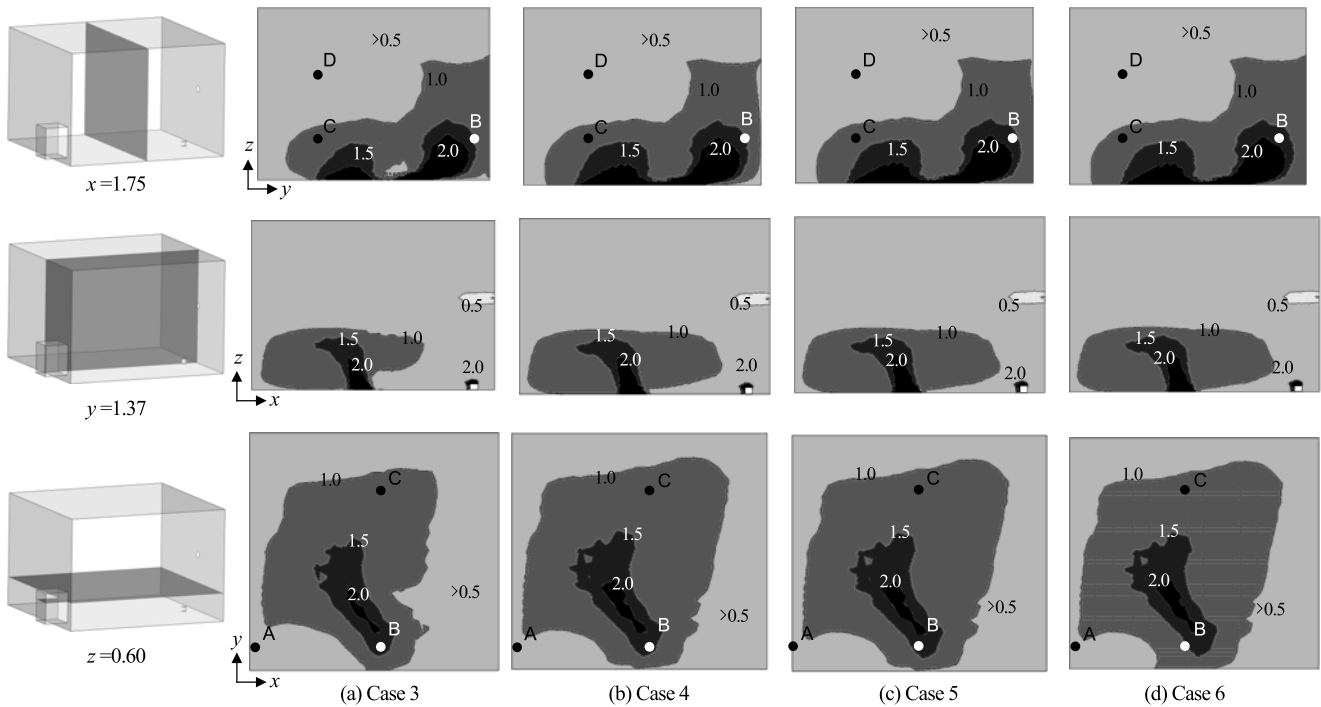


Fig. 7 Results of analysis of dimensionless toluene concentration distribution in each cross section (Case 3~Case 6)

Table 5 Concentration analysis results of changing installation position of building materials (Case 3~Case 7)

Case	C_p [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	C_a [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	C_b [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	C_c [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	C_d [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	C_v [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	η [-]
3	260	236	490	289	205	247	0.09
4	260	244	501	307	209	255	0.06
5	260	245	503	308	208	256	0.06
6	260	246	503	308	205	256	0.05
7	260	230	480	281	190	235	0.12

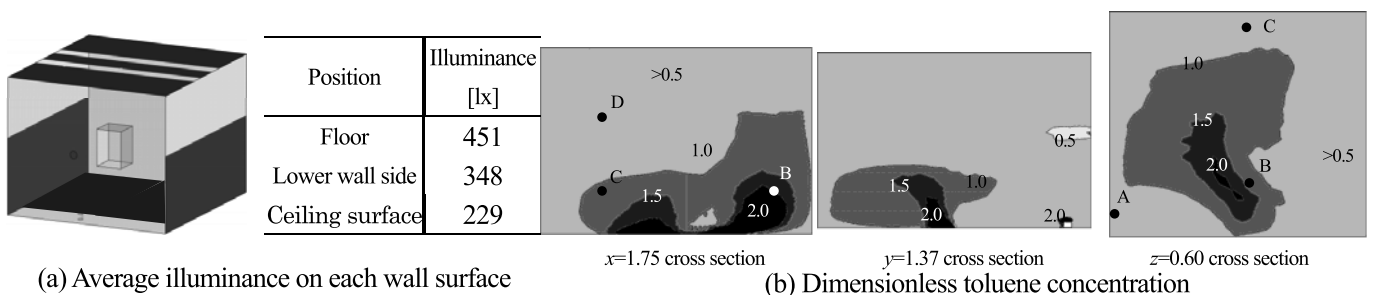


Fig. 8 Analysis results of Case 7

4.4 建材設置面積を増加した場合の濃度場解析結果と濃度低減性能

光触媒建材を床面、側面下部、天井面に設置し建材設置面積を増加させ、建材負荷率 $L=1.05$ としたCase 7の濃度分布解析結果をFig. 8(b)に示し、室内各点の濃度値とトルエン濃度低減率を整理してTable 5に合わせて示す。例えばCase 4(Fig. 6)と比較して、Case 7では建材負荷率が単純に3倍になっているが濃度低減率 η は2倍にしか増加していない。この主因は建材表面の照度分布にある。Fig. 8(a)に各壁面に光触媒建材を設置した場合の各壁面の平均照度分布解析結果を示す。本解析では光触媒建材の反射率を30%に設定したため、ステンレス面(反射率90%)が減少すると光源から見た形態係数が小さい壁面で照度が低く評価される。この結果は、例えばCase 6で天井面のみに光触媒を設置した場合の対象壁面の照度解析結果(Table 4)と比較すれば、平均照度の値が2倍以上異なる。そのため、照度 E の減少に伴い、式(4)で記述される修正L-H型モデルで計算される反応量が小さくなり、建材負荷率の増加分ほど全体の濃度低減効果が上昇しないとの結果になっている。

5. まとめ

大形チャンバーでは建材負荷率が $L=0.35$ と相対的に小さい条件となり、濃度低減性能が非常に小さく評価され、床面に建材を設置した条件での建材の物理吸着及び光触媒反応による濃度低減率は0.09であった。また、建材設置面積を増加させ、建材負荷率を $L=1.05$ にした場合、低減率は0.12であった。光触媒建材が増加したことにより光の反射が抑えられ、建材表面の照度が低くなった影響が、建材表面での反応量を低下させ、建材負荷率の増加分ほど濃度低減効果が増加しない結果を示した。

6. 今後の展望

実環境において十分な低減性能が発揮できる光触媒製品の開発を行うことが、高精度のモデリングを行う上でも重要である。また、本研究ではトルエンを対象とした反応モデルを導出したが、温度パラメータの組み込みや他のガス種に適用可能な光触媒反応モデルへ改良することにより適用範囲の拡張が可能である。加えて既往研究で実施された試験系を基に反応モデルパラメータの同定が可能であり、CFD解析を活用することで高精度に実空間への適応が期待できる。

謝辞

本報は著者の学位論文の一部を引用したものであり、九州大学の伊藤一秀教授を始め研究にご支援頂いた方々に感謝を致します。

注

1) 蛍光灯を使用した場合、光量子束密度と照度の間に良い線形性を示すものの、光源にLED等を用いた場合は光量子束密度と照度の関係性も変化すると考えられ、光量子束密度と照度の間に線形関係を仮定した導出した(5)式の適用範囲は限定的である。

参考文献

- 1) Eunsu Lim, 山本清司, 住吉栄作, 山口貴大, 伊藤一秀: 光触媒反応の数理モデル化と室内汚染物質濃度低減性能の数値予測 第1報 光触媒反応モデルの提案と20Lチャンバーによる基礎実験: 空気調和衛生工学会論文集, No.224, pp19-27, 2015.11
- 2) 住吉栄作, 山口貴大, 山本清司, Eunsu Lim, 伊藤一秀: 光触媒反応による室内汚染物質濃度低減性能の数理モデル化と数値予測 第2報 照度を変化させた基礎実験と修正Langmuir-Hinshelwood型光酸化分解反応モデルの提案: 空気調和衛生工学会論文集, No.229, pp.35-45, 2016.4
- 3) Hashimoto, K. Irie, H. and Fujishima, A.: TiO₂ Photocatalysis A Historical Overview and Future Prospects, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 44, No. 12, pp. 8269-8285, 2005.8
- 4) Yang, R. et al.: A mass transfer based method for measuring the reaction coefficients of a photocatalyst, Atmospheric Environment, Vol.41, pp. 1221-1229, 2007.2
- 5) Einaga, H. Tokura, J. Teraoka, Y. Ito, K. Kinetic Analysis for TiO₂-Catalyzed Heterogeneous Photocatalytic Oxidation Processes for Ethylene using Computational Fluid Dynamics, Chemical Engineering Journal, 263, pp325-335, 2015
- 6) Ollis, D. E.: Kinetics of liquid phase photocatalyzed reactions: An illuminating approach, Journal of Physical Chemistry, B, 109, pp.2439-2444, 2005.1
- 7) Thimijan, R.W. Heins, R.D.: Photometric, radiometric, and quantum light units of measure: a review of procedures for interconversion, HortScience, Vol. 18, No.6, pp.818-822, 1983
- 8) Abe K., Kondoh T., and Nagano Y., A new turbulence model for predicting fluid flow and heat transfer in separating and reattaching flows-I. Flow field calculations, Int. J. Heat Mass. Tran., 37 (1), 139-151, 1994