Prise en compte de la qualité de l'air dans l'analyse de cycle de vie des bâtiments

Rachna BHOONAH*[1], Alice MICOLIER[2], Patrick SCHALBART[1], Bruno PEUPORTIER[1], Olivier JOLLIET[3]

[1] Mines ParisTech,
Université de Recherche PSL CES – Centre d'efficacité énergétique des systèmes,
5 rue Léon Blum, 91120 Palaiseau, France
[2] Octopus Lab
237 Rue du Ballon, 59110 La Madeleine
[3] Université du Michigan
500 S State St, Ann Arbor, MI 48109, États-Unis

rachna.bhoonah@minesparis.psl.eu

RESUME.

De nombreuses substances organiques toxiques peuvent être émises par les matériaux présents dans les bâtiments. La qualité de l'air (QAI) peut avoir des effets importants sur la santé des occupants d'un bâtiment et devrait être considérée lors de l'analyse de cycle de vie d'un bâtiment (ACV). Pour cela, il est nécessaire de quantifier les impacts de la QAI avec les mêmes unités que l'ACV, en tenant en compte des émissions, du devenir des substances dans l'environnement intérieur, de l'assimilation de ces substances par le corps humain et leurs effets sur la santé. Afin d'évaluer au mieux les émissions des matériaux, un modèle d'émission basé sur le bilan massique est calibré avec des données de mesure. Ce calibrage permet d'obtenir une solution optimale des deux paramètres principaux décrivant la dynamique d'émissions. Le modèle est ensuite validé sur d'autres points de mesure. Le ratio moyen entre les valeurs observées et prédites par le modèle pour les émissions d'une plaque de plâtre est de 1,15. La présence de ce matériau sur les murs d'un bureau représente un dommage de 5,87 x 10^{-6} DALY (année de vie perdue) sur ses occupants d'après la méthode USEtox®.

MOTS-CLÉS : qualité de l'air intérieur (QAI), analyse de cycle de vie (ACV), émissions des matériaux

ABSTRACT.

Materials present indoors emit a variety of toxic organic substances. Indoor air quality (IAQ) could thus have important effects on the occupants of a building and should be considered during its life cycle assessment (LCA). This requires the calculation of IAQ impacts with the same unit as LCA, by considering the emission of substances, their intake by occupants and their effect on health. In order to predict the emission of materials with more precision, an emission model based on mass-balance is calibrated with measured data. This calibration gives an optimal solution for the two main parameters that describe the emission dynamics. The model is then validated using other data points. The mean ratio between observed and predicted data for a gypsum board is of 1.15. According to the USEtox® method, the impacts on the occupants of an office with gypsum-covered walls is 5.87 x 10^{-6} DALY (Disability-Adjusted Life Years).

KEYWORDS: indoor air quality (IAQ), life cycle assessment (LCA), material emissions

1. INTRODUCTION

L'analyse de cycle de vie (ACV) est un outil d'aide à la conception dans un effort de réduction des impacts environnementaux des bâtiments. L'ACV permet de calculer ces impacts à toutes les étapes du cycle de vie : construction (de l'extraction des matières premières au chantier), utilisation, rénovation et fin de vie. L'impact environnemental lors de l'étape *utilisation* du bâtiment est particulièrement important étant donné qu'elle peut durer entre 50 et 200 ans. Le dommage sur la santé humaine, lié notamment à la consommation d'énergie, est quantifiable à l'aide de logiciels de simulation énergétique et de calculs d'impacts environnementaux, tels que Pléiades COMFIE et EQUER.

Toutefois, ces outils ne prennent pas en compte les impacts liés à la qualité de l'air (QAI). Or nous passons plus de 85 % de notre temps à l'intérieur et sommes directement exposés à des substances potentiellement toxiques qui ont été émises par les matériaux et n'ont pas été pas évacuées suffisamment rapidement par le système de ventilation. Jusqu'à 1100 années de vie seraient perdues pour chaque 100000 personnes à cause des polluants intérieurs, d'après une étude menée sur les foyers américains (Logue et al. 2012). L'étape *utilisation* devrait donc aussi considérer l'impact lié à l'assimilation par le corps humain de ces substances émises dans l'air intérieur.

Les différents matériaux (structure, revêtements, menuiseries et meubles), les activités (nettoyage, cuisine, désodorisants…) et les occupants eux-mêmes (vêtements, peau et respiration) sont des sources de polluants dans l'air intérieur tels que : le CO_2, l'ozone et les composés organiques volatils (COVs) ou semi-volatils (COSVs). Il existe des logiciels de simulation de la QAI, tels qu'INDALO®, qui permettent de calculer la concentration de plusieurs substances dans l'air émises par les revêtements et les menuiseries à un instant donné. Toutefois, en pratique, le taux d'émission d'un matériau évolue au cours du temps. La température et le renouvellement de l'air entre autres influencent la dynamique d'émission. De plus, chaque substance a un impact plus ou moins important sur la santé et une valeur de concentration ne suffit pas toujours comme aide à la décision. Cette communication propose une méthodologie de calcul d'émissions de COVs et COSVs par des matériaux en utilisant des données de mesure pour calibrer un modèle d'émission multicouches existant.

2. DEFINITIONS ET CADRE DE L'ETUDE

2.1. OBJECTIFS

L'objectif général est de réduire les impacts des bâtiments sur tout leur cycle de vie, en prenant en compte la qualité de l'air dans la méthode d'analyse de cycle de vie. Afin d'atteindre cet objectif général, il est nécessaire de calculer le dommage de la qualité de l'air sur la santé humaine avec le même indicateur que celui d'une ACV : le nombre d'années de vie perdues lié à des maladies ou des mortalités prématurées, selon l'indicateur DALYs (*Disability-Adjusted Life Years*) défini par l'Organisation Mondiale de la Santé (Stein 2019). Les taux d'émission de substances par différents matériaux doivent donc être modélisés afin de pouvoir calculer la quantité de substance assimilée par les occupants, tel que décrit en Figure 1.

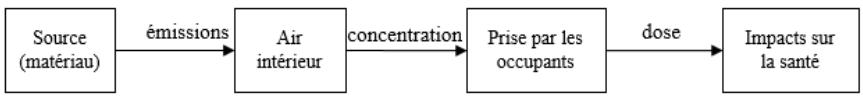


Figure 1 : Les étapes entre les émissions de substances par la source et les impacts

Le but de cet article est de proposer une méthodologie permettant de combiner un modèle de calcul d'émissions de substances présentes dans des matériaux (qui peuvent être multicouches) à des données obtenues expérimentalement afin de déterminer un couple de coefficients décrivant ces émissions : b et β décrits dans la section suivante.

2.2. OUTILS ET MODELES NUMERIQUES

Le modèle, développé par Yan, Zhang, and Wang (2009) et amélioré par Guo (2013), puis par Micolier (2019), est basé sur le bilan massique de la substance entre le matériau et l'air. Plusieurs paramètres influencent les émissions : la température, le taux de renouvellement de l'air, ainsi que les propriétés du matériau et de la substance émise. La prise de substances par les occupants agit aussi sur le bilan massique, mais cette quantité est négligeable.

Il y a deux principales propriétés qui décrivent les émissions et qui sont propres à chaque couple matériau-substance : la diffusion D_m (m²/s) de la substance dans le matériau et le coefficient de partition K_{ma} (-) entre le matériau et l'air. Ces valeurs sont données par les expressions ci-dessous :

$$D_m = 10^{6,39+\frac{\tau-3486}{T}-2,49log_{10}M_m+b} \quad (1)$$

$$K_{ma} = 10^{-0,38+0,63.log_{10}.K_{oa}+0,96\frac{1,37.\nabla H_v-14}{2,303.R}(\frac{1}{T}-\frac{1}{298,15})+\beta} \quad (2)$$

M_m (g/mol) représente la masse molaire, K_{oa}(-) le coefficient de partition octanol-air de la substance à 25 °C (qui caractérise son comportement entre l'air et d'autres compartiments), ∇H_v l'enthalpie de vaporisation (J/mol), T la température absolue (K). τ (K), b et β sont des coefficients obtenus de manière empirique (Huang et al. 2017; Huang and Jolliet 2019). Les coefficients b et β, propre à chaque matériau, contiennent des incertitudes de $\pm$ 2,30 et $\pm$ 1,22 respectivement.

Le matériau est divisé en plusieurs couches, représentées par des nœuds. L'air intérieur est représenté par un nœud et un bilan massique est réalisé à chaque nœud. On obtient une série d'équations différentielles, résolues de manière numérique. La concentration de la substance dans chaque couche dépend de sa concentration dans les couches adjacentes. Ainsi, pour initialiser le modèle, il est nécessaire d'indiquer la concentration initiale de la substance dans chaque couche de matériau C_{init} (kg/m³). Elle peut être estimée à l'aide de bases de données comme le PHAROS Project (www.pharosproject.net).

3. METHODOLOGIE

3.1. ETAPES

La méthodologie de couplage entre le modèle et des mesures sert à déterminer les paramètres les plus incertains (b et β), voir inconnus (C_{init}). Celle-ci est, par la suite, appliquée sur un cas d'étude. Les différentes étapes de la méthodologie sont résumées dans la Figure 2 et décrites dans les sections suivantes.

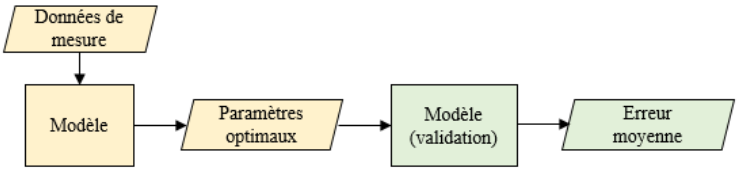


Figure 2 : Schéma représentant les étapes principales de la méthodologie développée

3.2. DESCRIPTION DE LA METHODOLOGIE

3.2.1. Données de mesure

Les mesures d'émission utilisées proviennent de la base de données PANDORA (Abadie and Blondeau 2011) ou des rapports d'émission des fabricants. Elles ont été réalisées dans des chambres de test à différents pas de temps. La chambre est constituée de matériaux inertes (sans émissions de COV). Le taux de renouvellement de l'air (TRA) dans la chambre est contrôlé lors de la prise de mesures. Les données utilisées pour le calibrage sont celles comprenant à la fois au moins deux mesures de concentration ou d'émission pour au moins deux substances émises, les dimensions du matériau et de la chambre de test et le TRA.

3.2.2. Sélection des substances

Dans un premier temps, les substances qui permettront par la suite de déterminer le paramétrage optimal de b et β sont sélectionnées. L'objectif est de sélectionner celles ayant des dynamiques d'émission différentes : au moins une substance principalement limitée par sa diffusion D_m,une par sa partition K_{ma} et une autre limitée par les deux, en fonction du critère de coupure défini par Huang et al. (2020) :

$$D_m^{0,61}.K_{ma} < 0,40 \qquad (3)$$

Ce choix se fait en fonction des valeurs de M_m et K_{oa}, les propriétés chimiques des substances qui décrivent D_m et K_{ma} respectivement. Si le critère de coupure est validé pour toutes les substances (elles sont toutes limitées par la diffusion), on choisit celles pour lesquelles la différence entre $D_m^{0.61}$et K_m est la plus grande et la plus petite.

3.2.3. Paramétrage optimal

Dans un second temps, nous faisons varier les coefficients b et β dans leur plage d'incertitude afin de déterminer les valeurs minimisant l'écart entre le modèle et les mesures. Pour chaque combinaison de b et β, la fraction massique de la substance initialement dans le matériau, mf_0, est calculée de sorte à obtenir une concentration égale à la première mesure. La déviation δ est exprimée en fonction de la deuxième mesure et de la prédiction correspondante. L'expression de la déviation est donnée par :

$$\delta = \frac{C_{j1,obs}/C_{j2,obs}}{C_{j1,pred}/C_{j2,pred}} \qquad (4)$$

C représente la concentration dans l'air et les indices $j1$ et $j2$ indiquent les nombres de jours au bout desquels on a effectué une mesure, avec $j2 > j1$. Les indices *obs* et *pred* indiquent, respectivement, une valeur observée dans des chambres de test ou prédite par le modèle.

A cette déviation est additionnée une pénalité d'écart à la valeur de référence de b et β. Les écarts sont pondérés par p_K pour K_{ma} et p_D pour D_m. p a été fixé à 10. L'expression pour cette pénalité θ est donnée ci-dessous :

$$\theta = \frac{Abs[log_{10}(\beta_{ref}/\beta_{mod})]}{p} + \frac{Abs[log_{10}(b_{ref}/b_{mod})]}{p} \qquad (5)$$

3.3. HYPOTHESES

Plusieurs hypothèses sont considérées lors des calculs et du développement du modèle :

1. La concentration est initialement uniforme dans tout le matériau.

2. Durant toute la modélisation, la concentration dans chaque couche est uniforme.
3. La concentration ayant une décroissance exponentielle, on ne considère pas les données de mesure de concentration $j2$ supérieures à la concentration à $j1$. Ces substances sont exclues de la recherche des paramètres optimaux et des calculs de déviation et d'erreur. Ce type de mesure provient soit de l'incertitude de l'appareil de mesure, du fait que les concentrations ne sont pas uniforme dans chaque couche ou qu'il y a un revêtement sur le matériau.

3.4. DESCRIPTION DU CAS D'ETUDE

Une plaque de plâtre est sélectionnée pour ce cas d'étude, avec des données de mesure collectées auprès du fabricant. Les données concernent 22 substances, parmi lesquelles 5 ont deux points de mesure. La chambre de test a un volume de 0,125 m^3, un TRA de 0,5 vol/h et les surfaces sont en verre. Le matériau a une surface de 0,125 m² et une épaisseur de 12,5 mm.

4. CAS D'ETUDE ET RESULTATS

4.1. SELECTION DES SUBSTANCES

La Figure 3 ci-dessous représente les substances émises par ce matériau. Les substances sélectionnées en fonction de D_m et K_{ma} (et donc M_m et K_{oa}) sont : hexanal, n-pentadécane et n-hexadécane. Selon l'hypothèse (3), le décanal est exclu de la sélection car la concentration à $j28$ est supérieure à celle à $j3$. Le nonanal sera utilisé pour une validation. Les valeurs de référence de b, β et τ sont de -5,77 et 1,28 et 1676 respectivement d'après la littérature.

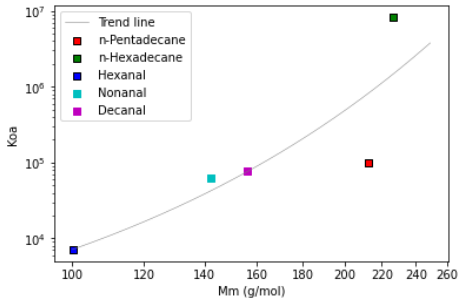
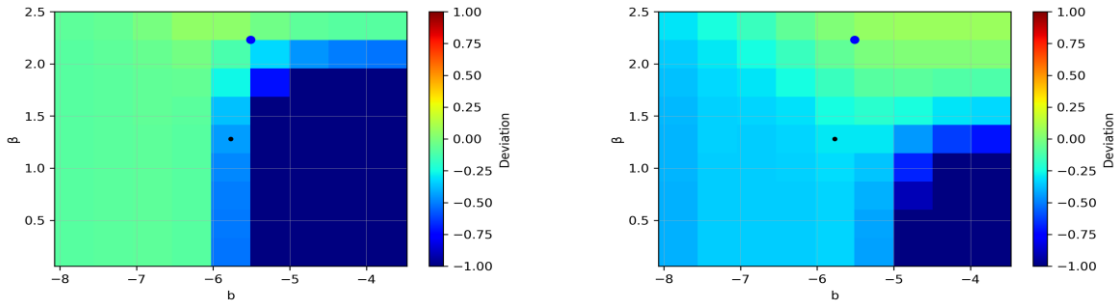


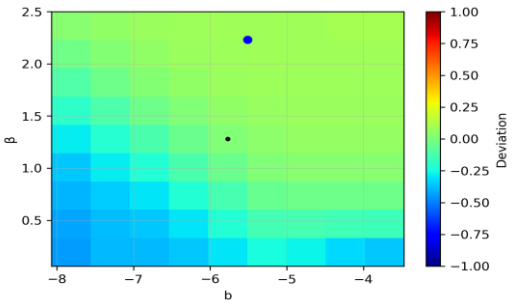
Figure 3 : Le coefficient de partition octanol-air est représenté en fonction de la masse molaire et une courbe de tendance est tracée en gris. Les substances sélectionnées sont entourées d'un trait noir.

4.2. PARAMETRAGE OPTIMAL

Les déviations totales sont représentées par des cartes thermiques en Figure 4. Les solutions optimales de b et β minimisant $\delta + \theta$ sont -5,51 et 2,23 respectivement.



(a) hexanal *(b) n-pentadécane*

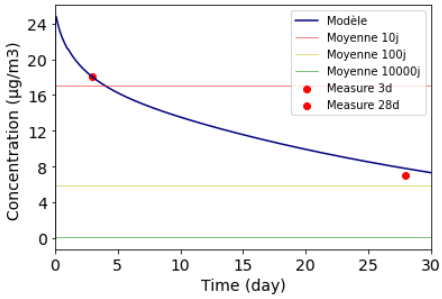


(c) n-hexadécane

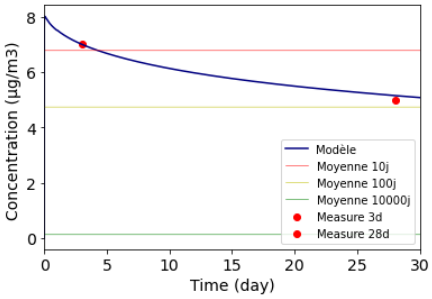
Figure 4 : Cartes thermiques représentant la déviation en fonction des couples b et β avec la valeur de référence représentée au centre avec un point noir et la solution avec un point bleu pour (a) hexanal, (b) n-pentadécane et (c) n-hexadécane

4.3. VALIDATION

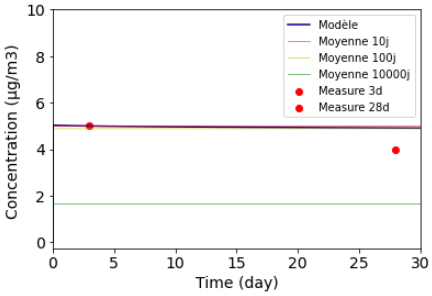
Les paramètres optimaux sont utilisés afin de calculer la concentration de chaque substance dans l'air au cours du temps et les courbes de concentration sont présentées dans la Figure 5, ainsi que les concentrations moyennes sur 10, 100 et 10000 jours. La courbe passe automatiquement par le premier point de mesure à 3jr étant donné que le modèle est calibré par rapport à ce point. Nous observons aussi une diminution importante des concentrations au bout d'une année, ce qui s'explique par le caractère très volatile des substances et des émissions assez faibles. Les valeurs de C_{init} que nous obtenons correspondent aux ordres de grandeur des valeurs référencées par le projet PHAROS.



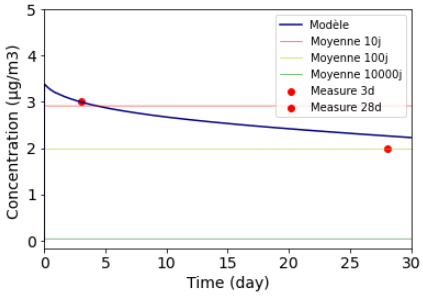
(a) hexanal



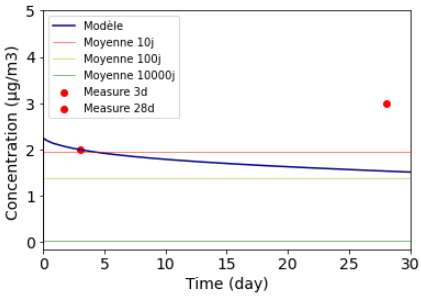
(b) n-pentadécane



(c) n-hexadécane



(d) nonanal



(e) décanal

Figure 5 : Courbes de concentration en fonction du temps, concentrations moyennes et points de mesure pour le (a) hexanal, (b) n-pentadécane, (c) n-hexadécane, (d) nonanal et (e) décanal

L'erreur moyenne absolue (EMA) représente l'écart global entre les mesures et les valeurs prédites par le modèle, calculée en prenant en compte les cinq substances pour lesquelles deux points de mesure sont disponibles.

$$EMA = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Abs(log_{10}(C_{obs,i}) - log_{10}(C_{pred,i})) \quad (6)$$

i représente la substance, *n* le nombre total de substances émises, C représente la concentration et les indices *obs* et *pred* indiquent la valeur mesurée et prédite par le modèle respectivement. Le Tableau 1 représente les ratios entre valeur prédite et observée, calculée par 10^{EMA}, et l'erreur quadratique moyenne (EQM) des substances émises par la plaque de plâtre.

	Toutes substances	Point de validation
10^{EMA}	1,14	1,15
EQM	0,67	0,30

Tableau 1 : EMA et EQM des valeurs prédites par le modèle pour la plaque de plâtre

4.4. IMPACTS SUR LA SANTE

Nous considérons un bureau carré de 36 m² avec une présence de trois occupants 8 heures par jour ouvré, un TRA de 1 vol/h et des murs d'un total de 60 m² revêtus de plaques de plâtre. Les données de toxicité (Fantke et al. 2021) sont disponibles pour uniquement 11 substances sur les 22 émises. La chaine d'impact est donc calculée uniquement pour elles avec les méthodes de prise de substance développée par Jolliet et al. (2015) et USEtox® (Fantke et al. (2021) sur 10, 100 et 10000 jours. Le Tableau 2 récapitule les résultats : une somme est réalisée sur les 11 substances. Pour le calcul des dommages, chaque substance est traitée séparément étant donné qu'elles ont chacune un facteur d'effet (DALY/kg) différent. La concentration moyenne décroissant exponentiellement en fonction du temps, les impacts n'augmentent pas de manière linéaire en fonction du temps.

	10 jours	100 jours	10000 jours
Concentration moyenne (µg/m^3)	26,09	8,31	0,21
Quantité assimilée (µg)	2,41	7,65	15,65
Dommages (DALYs)	2,50 x 10^{-6}	7,53 x 10^{-6}	7,73 x 10^{-6}

Tableau 2 : Concentration, assimilation et impacts pour ce cas d'étude

L'impact total du plâtre lié à la prise des substances émises sur 10000 jours (environ 25 ans) dans bureau occupé 8 heures par jour ouvré est de 7,73 x 10^{-6} DALY, soit 7,84 x 10^{-9} DALY/m²/an. A titre d'ordre de grandeur, le dommage sur la santé sur le cycle de vie d'un bureau varie entre 8 x 10^{-5} et 3 x 10^{-4} DALY/m^2/an (Wurtz and Peuportier 2021) et celui de l'exposition aux polluants intérieurs serait de 1,1 x 10^{-2} DALY/personne/an (Logue et al. 2012).

5. CONCLUSION

La méthodologie présentée dans cet article permet de calibrer un modèle d'émissions multicouches en utilisant des mesures. Ceci est particulièrement utile afin de trouver certains paramètres inconnus,

comme la concentration initiale de la substance dans le matériau, ou ajuster ceux ayant une plage d'incertitude importante, comme pour les coefficients de partition et de diffusion. Une source potentielle d'incertitude vient du fait que nous considérons une concentration initiale uniforme de la substance dans le matériau, alors que cette hypothèse n'est pas toujours vérifiée, comme par exemple pour les substances contenues dans les colles qui fixent les différentes couches d'un matériau. Nous avons néanmoins trouvé des résultats divergeant des mesures avec un ratio de 1,15 et une EQM de 0,66. Cette méthode nous a permis aussi de calculer à l'aide de la méthode USEtox® le dommage sur la santé des occupants lié à l'exposition aux plaques de plâtre durant 25 ans dans un bureau type, qui s'élève à 7,84 x 10^{-9} DALY/m²/an pour les 11 substances dont les données de toxicité sont connues.

6. BIBLIOGRAPHIE

Abadie, Marc O., and Patrice Blondeau. 2011. 'PANDORA Database: A Compilation of Indoor Air Pollutant Emissions'. *HVAC&R Research* 17 (4): 602–13. https://doi.org/10.1080/10789669.2011.579877.

Fantke, Peter, Weihsueh A. Chiu, Lesa Aylward, Richard Judson, Lei Huang, Suji Jang, Todd Gouin, et al. 2021. 'Exposure and Toxicity Characterization of Chemical Emissions and Chemicals in Products: Global Recommendations and Implementation in USEtox'. *The International Journal of Life Cycle Assessment* 26 (5): 899–915. https://doi.org/10.1007/s11367-021-01889-y.

Friar, John H., and Wendy D. Vittori. 2017. 'The Pharos Project: Solving the Building Materials Toxicity Challenge'. *Entrepreneurship Theory and Practice* 41 (1): 131–41. https://doi.org/10.1111/etap.12170.

Guo, Z. 2013. 'A Framework for Modelling Non-Steady-State Concentrations of Semivolatile Organic Compounds Indoors – I: Emissions from Diffusional Sources and Sorption by Interior Surfaces'. https://doi.org/10.1177/1420326X13488123.

Healthy Building Network. 2000. 'Pharos'. Pharos. 2000. https://pharosproject.net/.

Huang, Lei, P. Fantke, A. Ernstoff, and Olivier Jolliet. 2017. 'A Quantitative Property-Property Relationship for the Internal Diffusion Coefficients of Organic Compounds in Solid Materials'. *Indoor Air* 27 (6): 1128–40. https://doi.org/10.1111/ina.12395.

Huang, Lei, and Olivier Jolliet. 2019. 'A Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR) for Estimating Solid Material-Air Partition Coefficients of Organic Compounds'. *Indoor Air* 29 (1): 79–88. https://doi.org/10.1111/ina.12510.

Jolliet, Olivier, Alexi S. Ernstoff, Susan A. Csiszar, and Peter Fantke. 2015. 'Defining Product Intake Fraction to Quantify and Compare Exposure to Consumer Products'. *Environmental Science & Technology* 49 (15): 8924–31. https://doi.org/10.1021/acs.est.5b01083.

Logue, Jennifer M., Phillip N. Price, Max H. Sherman, and Brett C. Singer. 2012. 'A Method to Estimate the Chronic Health Impact of Air Pollutants in U.S. Residences'. *Environmental Health Perspectives* 120 (2): 216–22. https://doi.org/10.1289/ehp.1104035.

Micolier, Alice. 2019. 'Développement d'une méthodologie d'évaluation cohérente et intégrée de l'impact des choix de conception sur la qualité de l'air intérieur et les performances énergétiques et environnementales des bâtiments résidentiels'. Thèse de doctorat, Université de Bordeaux.

Stein, C. 2019. 'Global Burden of Disease (GBD) Approach and the Use of Disability-Adjusted Life Years (DALY) at the World Health Organization (WHO)☆'. In *Encyclopedia of Environmental Health (Second Edition)*, edited by Jerome Nriagu, 279–88. Oxford: Elsevier. https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409548-9.11699-9.

Wurtz, Aurore, and Bruno Peuportier. 2021. 'Application of the Life Cycle Assessment to a Building Sample for in Order to Helping in Projects Evaluation'. In *Climamed*. Lisbonne mais Distanciel, Portugal. https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03194021.

Yan, Wei, Yinping Zhang, and Xinke Wang. 2009. 'Simulation of VOC Emissions from Building Materials by Using the State-Space Method'. *Building and Environment* 44 (3): 471–78. https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2008.04.011.