

Amélioration de la justesse des modèles d'hygiène du travail utilisés pour estimer des expositions professionnelles à des vapeurs de solvants

Spéro Abattan
Stéphane Hallé
Daniel Drolet
Ali Bahloul
Patrick Eddy Ryan
Wejden Chouchene
Carlos Castro Ruiz
Jérôme Lavoué
Maximilien Debia

**RAPPORTS
SCIENTIFIQUES**

R-1077

NOS RECHERCHES travaillent pour vous !

Solidement implanté au Québec depuis 1980, l'Institut de recherche Robert-Sauvé en santé et en sécurité du travail (IRSST) est un organisme de recherche scientifique reconnu internationalement pour la qualité de ses travaux.

Mission

Contribuer, par la recherche, à la prévention des accidents du travail et des maladies professionnelles ainsi qu'à la réadaptation des travailleurs qui en sont victimes;

Assurer la diffusion des connaissances et jouer un rôle de référence scientifique et d'expertise;

Offrir les services de laboratoires et l'expertise nécessaires à l'action du réseau public de prévention en santé et en sécurité du travail.

Doté d'un conseil d'administration paritaire où siègent en nombre égal des représentants des employeurs et des travailleurs, l'IRSST est financé par la Commission des normes, de l'équité, de la santé et de la sécurité du travail.

Pour en savoir plus

Visitez notre site Web ! Vous y trouverez une information complète et à jour. De plus, toutes les publications éditées par l'IRSST peuvent être téléchargées gratuitement. www.irsst.qc.ca

Pour connaître l'actualité de la recherche menée ou financée par l'IRSST, abonnez-vous gratuitement :

- au magazine *Prévention au travail*, publié conjointement par l'Institut et la CNESST (preventionautravail.com)
- au bulletin électronique [InfoIRSST](#)

Dépôt légal

Bibliothèque et Archives nationales du Québec
2019
ISBN : 978-2-89797-092-5
ISSN : 0820-8395

IRSST - Direction des communications
et de la valorisation de la recherche
505, boul. De Maisonneuve Ouest
Montréal (Québec)
H3A 3C2
Téléphone : 514 288-1551
publications@irsst.qc.ca
www.irsst.qc.ca
© Institut de recherche Robert-Sauvé
en santé et en sécurité du travail,
novembre 2019

Amélioration de la justesse des modèles d'hygiène du travail utilisés pour estimer des expositions professionnelles à des vapeurs de solvants

Spéro Abattan¹, Stéphane Hallé², Daniel Drolet¹, Ali Bahloul³, Patrick Eddy Ryan¹, Wejden Chouchene², Carlos Castro Ruiz¹, Jérôme Lavoué¹, Maximilien Debia¹

¹ Département de santé environnementale et santé au travail, École de santé publique, Université de Montréal

² École de technologie supérieure

³ IRSST

RAPPORTS
SCIENTIFIQUES

R-1077



Avis de non-responsabilité

L'IRSST ne donne aucune garantie relative à l'exactitude, la fiabilité ou le caractère exhaustif de l'information contenue dans ce document.

En aucun cas l'IRSST ne saurait être tenu responsable pour tout dommage corporel, moral ou matériel résultant de l'utilisation de cette information.

Notez que les contenus des documents sont protégés par les législations canadiennes applicables en matière de propriété intellectuelle.

Cette publication est disponible en version PDF sur le site Web de l'IRSST.



ÉVALUATION PAR DES PAIRS

Conformément aux politiques de l'IRSST, les résultats des travaux de recherche publiés dans ce document ont fait l'objet d'une évaluation par des pairs.

REMERCIEMENTS

Les auteurs tiennent à remercier les personnes suivantes qui ont contribué, par leur expertise, à la réalisation de ce projet : Ross Thuot, Caroline Couture, Cyril Catto, Denis Begin et Michel Gérin.

SOMMAIRE

Chaque année, des travailleurs québécois subissent des effets sur leur santé après avoir été exposés à des substances chimiques, notamment à des solvants. La modélisation des expositions professionnelles occupe une place importante dans la prévention des risques. Cette recherche vise à étudier différents aspects de la modélisation pour estimer des expositions professionnelles à des vapeurs de solvants dans le but d'en améliorer la justesse de prédiction. Le travail de recherche a été effectué en deux volets. Grâce à la mise en œuvre de tests à petite échelle (volet I) et à échelle humaine (volet II), les travaux présentés dans cette recherche ont porté sur la détermination des taux d'émission pour les solvants purs et les mélanges ainsi que sur l'étude du comportement des vapeurs de solvants émises dans l'air et soumises à différentes conditions expérimentales de ventilation.

Dans le volet I, des taux d'émission (α) à décroissance exponentielle ont été déterminés expérimentalement en environnement contrôlé (température, humidité, vitesse de l'air) pour cinq solvants purs dans différentes conditions. Des analyses de régression linéaire multiple ont été effectuées afin d'évaluer l'influence des différents paramètres testés sur les valeurs de α . Des taux d'émission ont aussi été calculés pour des solvants purs et des mélanges, et des estimations de concentration de vapeurs dans une boîte de 0,085 m³ ont été réalisées en utilisant le modèle de pièce avec air uniformément mélangé et émission à décroissance exponentielle. Au total, 18 scénarios ont été réalisés avec différents solvants : 4 solvants purs, 12 mélanges aqueux (10 %, 5 % et 1 % de solvant dans l'eau) et 2 mélanges de solvants organiques. Les estimations de concentration supposaient aussi bien l'idéalité (utilisation des taux d'émission non corrigés) que la non-idéalité (utilisation des taux d'émission corrigés par les coefficients d'activité). Ces données estimées ont été comparées à des concentrations mesurées à l'aide d'un système de chromatographie en phase gazeuse couplé à un détecteur de conductivité thermique (TCD). Les concentrations ont été comparées graphiquement aux valeurs prédites par le modèle et des ratios entre les concentrations maximales mesurées et estimées ont été calculés.

Dans le volet II, dix-neuf situations expérimentales différentes, mises en scène dans une pièce à échelle humaine dont le volume était de 53,4 m³, ont été testées à trois reprises. La pièce était ventilée selon deux stratégies de ventilation (plancher/plafond) et pour différents débits (bas débit (B) à 0,8 changement d'air par heure (CAH) (12 l/s), haut débit (H) à 2,3 CAH (32 l/s) et très haut débit (TH) à 4,5 CAH (64 l/s)). Quatre scénarios ont été testés : 1) évaporation sur une table, 2) déversement sur le sol, 3) application de solvant au chiffon suivie de nettoyage manuel, 4) pulvérisation de solvant suivie d'un nettoyage manuel. Les tests d'évaporation et de déversement ont été réalisés à partir d'un verre de montre contenant 20 mL d'acétone disposé sur une balance analytique. Les tests de nettoyage ont été effectués par un opérateur qui simulait le nettoyage au chiffon d'une pièce d'aluminium. Les concentrations de vapeurs de solvants ont été mesurées à l'aide d'instruments à lecture directe placés dans la zone rapprochée (30 cm de la source, NF) et la zone éloignée (reste de la pièce, FF). Pour la zone rapprochée, deux instruments à photo-ionisation (PID) ont été utilisés pour mesurer les concentrations. Pour la zone éloignée, deux chromatographes de type micro GC Varian couplés à des TCD ont été utilisés. Pour chaque essai, une modélisation des concentrations dans les zones proche et éloignée a été effectuée à l'aide du modèle deux zones et ces concentrations ont été comparées aux valeurs mesurées. Les valeurs de rayon de la zone rapprochée ont été optimisées pour faire correspondre les concentrations mesurées et estimées. Des analyses

statistiques ont été réalisées pour déterminer l'existence de différences significatives entre les concentrations proches et éloignées. Des analyses de variance et de régression linéaire multiple ont aussi été effectuées afin d'évaluer l'influence de différentes variables des modèles. Une modélisation par dynamique des fluides (*computational fluid dynamics*, CFD) des mouvements d'air et de dispersion de contaminants gazeux a été accomplie pour certains scénarios. L'évaporation du solvant était considérée dans le code numérique par l'intermédiaire d'une condition frontière à la surface du verre de montre dans laquelle une masse prédéterminée de solvant était injectée dans l'air ambiant. Des comparaisons entre les valeurs estimées et mesurées ont donc été exécutées.

Pour le volet I, les variations observées des valeurs de coefficients α s'expliquent en grande partie par les variables tension de vapeur, ratio surface/volume et vitesse de l'air au-dessus du déversement. Les estimations de concentration dans la boîte considérant la non-idéalité dans le cas des mélanges, donc les estimations corrigées, étaient plus élevées que celles non corrigées et plus proches des valeurs mesurées. De plus, les temps nécessaires pour atteindre les pics de concentration des estimations corrigées permettaient d'estimer adéquatement les cinétiques d'émission.

Pour le volet II, l'analyse de variance a démontré que l'ensemble des variables avait un effet sur les concentrations de la zone rapprochée alors que seuls le débit et la position de l'entrée d'air avaient un effet sur la zone éloignée. L'augmentation des débits de ventilation avait pour effet d'abaisser significativement les concentrations dans les deux zones. Les rayons obtenus par l'optimisation des concentrations mesurées et estimées pour les scénarios d'évaporation et de déversement étaient très homogènes avec un rayon moyen de 0,72 m (écart type géométrique, ETG, de 1,3) et le coefficient β (débit d'air interzones) estimé moyen correspondant était de 3,9 m³/min (0,92-16,9). L'utilisation de ce rayon pour une géométrie de zone rapprochée permet donc une estimation adéquate de la concentration de vapeurs de solvants à une distance de 30 cm de la source. En revanche, pour les scénarios d'application au chiffon et de pulvérisation, les rayons optimisés étaient plus grands et variaient plus largement avec des rayons moyens respectifs de 1,1 m (ETG de 1,6) et 1,2 m (ETG de 1,9). La modélisation CFD a permis d'étudier le gradient de concentrations autour de la source pour des scénarios d'évaporation et de déversement. Le gradient de concentrations diminuait rapidement avec des concentrations passant de 1757 mg/m³ à 83 mg/m³ pour une zone rapprochée en forme de cube de 14 cm et de 64 cm de côté, respectivement. La modélisation CFD a aussi mis en évidence les déplacements du contaminant dus à la densité de vapeur relative à l'air sans qu'il soit nécessaire de faire appel à l'advection. Ce mécanisme de transport est d'autant plus significatif lorsque le débit de soufflage dans la pièce est faible.

Cette étude a ainsi montré l'importance de différentes variables utilisées pour estimer des taux d'émission lors de petits déversements, l'importance de considérer la non-idéalité en cas d'utilisation de mélange non idéal et l'importance de différents déterminants des concentrations dans les zones rapprochée et éloignée. Ces données améliorent la compréhension générale de la dispersion des vapeurs de solvants et de l'utilisation des modèles auxquels on recourt en hygiène du travail pour estimer des expositions professionnelles à ce type d'émanation.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS	i
SOMMAIRE	iii
LISTE DES TABLEAUX	vii
LISTE DES FIGURES	ix
LISTE DES ACRONYMES, SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xiii
1. INTRODUCTION	1
2. ÉTAT des connaissances	3
2.1 Modèles de dispersion	3
2.1.1 Modèle de pièce avec air uniformément mélangé	3
2.1.2 Le modèle à deux compartiments	5
2.1.3 Codes de calcul par dynamique des fluides	8
2.2 Modèles d'émission	9
2.2.1 Émission à décroissance exponentielle	9
2.2.2 Émission constante	10
2.2.3 Émission de mélanges de solvants	10
2.3 Validation des modèles	12
2.4 Limites des modèles	13
3. OBJECTIFS de recherche	15
3.1 Objectif général	15
3.2 Objectifs spécifiques	15
4. MÉTHODOLOGIE	17
4.1 Volet I – Tests de laboratoire à petite échelle	17
4.1.1 Détermination expérimentale des taux d'émission α	17
4.1.2 Intégration de la notion de non-idéalité dans le calcul du taux de génération pour les mélanges de solvants	18
4.1.3 Mesure des concentrations lors des tests à petite échelle	18
4.1.4 Modélisation des concentrations	19
4.1.5 Analyse des données pour les tests à petite échelle	20
4.2 Volet II – Tests de laboratoire dans une chambre à échelle humaine	20
4.2.1 Description du milieu et de l'instrumentation	20
4.2.2 Modélisation des concentrations par le modèle à deux compartiments avec émission à décroissance exponentielle ou à émission constante	23

4.2.3	Modélisation des concentrations en CFD	23
4.2.4	Analyse des données	25
5.	RÉSULTATS	27
5.1	Volet I – Tests de laboratoire à petite échelle.....	27
5.1.1	Détermination expérimentale des taux d'émission α	27
5.1.2	Mesures expérimentales des concentrations de vapeurs de solvants et comparaison avec les prédictions du modèle à un compartiment	31
5.2	Volet II – Tests à échelle humaine dans différentes situations de travail	40
5.2.1	Résultats expérimentaux	40
5.2.2	Estimation à l'aide du modèle à deux compartiments	49
5.2.3	Simulation en dynamique des fluides	56
6.	DISCUSSION	61
6.1	Volet I – Tests de laboratoire à petite échelle.....	61
6.1.1	Détermination expérimentale des taux d'émission à décroissance exponentielle α	61
6.1.2	Intégration de la notion de non-idéalité dans le calcul du taux de génération pour les mélanges de solvants.....	62
6.2	Volet II – Tests à échelle humaine dans différentes situations de travail	63
6.3	Portées et limites	66
7.	CONCLUSION.....	67
	BIBLIOGRAPHIE	69

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.	Caractéristiques du maillage retenu pour les simulations.....	25
Tableau 2.	Coefficients α (min^{-1}) mesurés avec verre de montre	27
Tableau 3.	Résumé des tests d'évaporation à petite échelle	39
Tableau 4.	Concentrations moyennes d'acétone (C_{98} , mg/m^3) mesurées durant les tests à échelle humaine dans la zone rapprochée	48
Tableau 5.	Concentrations moyennes d'acétone (C_{98} , mg/m^3) mesurées durant les tests à échelle humaine dans la zone éloignée	48
Tableau 6.	Vitesses de l'air mesurées à la frontière des deux zones selon les différents scénarios évalués	49
Tableau 7.	Paramètres estimés du rayon de la zone rapprochée et du coefficient β , selon la position de l'entrée d'air et le débit de ventilation (3 répétitions par situation)	50
Tableau 8.	Comparaison entre les vitesses mesurées et simulées à la frontière des deux zones	58

LISTE DES FIGURES

Figure 1.	Concept du modèle de la pièce avec air uniformément mélangé (adapté de (Reinke et Keil, 2009)).	4
Figure 2.	Schéma conceptuel du modèle à deux compartiments (adapté de (Jayjock, Logan, <i>et al.</i> , 2011)).	6
Figure 3.	Montage de la boîte vu de l'intérieur.	19
Figure 4.	Montage avec le GC, la pompe d'aspiration et la pompe de ventilation.	19
Figure 5.	Représentation schématique de la pièce modèle.	21
Figure 6.	Mesure des concentrations d'exposition dans la zone rapprochée.	22
Figure 7.	Deuxième point de mesure pour la zone éloignée.	22
Figure 8.	Premier point de mesure pour la zone éloignée.	22
Figure 9.	Pièce modèle.	24
Figure 10.	Discrétisation spatiale dans le plan <i>y-z</i> (<i>ventilation par le plancher</i>).	25
Figure 11.	Coefficients α en fonction des volumes d'évaporation.	28
Figure 12.	Moyennes des coefficients α et écarts types en fonction de la tension de vapeur des solvants pour des volumes de 3 mL et de 20 mL.	28
Figure 13.	Moyennes des coefficients α et écarts types en fonction de la ventilation pour des volumes de 1 mL.	29
Figure 14.	Moyennes des coefficients α et écarts types pour l'acétone en fonction des vitesses d'air au-dessus de la zone d'évaporation.	29
Figure 15.	Moyenne des coefficients α et écarts types pour l'acétone en fonction du volume et du support.	30
Figure 16.	Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation de 0,5 mL de toluène.	31
Figure 17.	Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation de 0,3 mL de méthanol.	31
Figure 18.	Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation de 0,5 mL d'acétone.	32
Figure 19.	Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation de 0,5 mL de MEK.	32
Figure 20.	Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation du mélange aqueux de MEK à 10 % (A), à 5 % (B) et à 1 % (C).	33
Figure 21.	Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation du mélange aqueux de IPA à 10 % (A), à 5 % (B) et à 1 % (C).	34
Figure 22.	Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation du mélange aqueux de méthanol à 10 % (A), à 5 % (B) et à 1 % (C).	35

Figure 23.	Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation du mélange aqueux d'acétone à 10 % (A), à 5 % (B) et à 1 % (C).	36
Figure 24.	Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation du mélange de MEK (A) et de toluène (B).	37
Figure 25.	Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation du mélange de IPA, de toluène et d'acétone.	38
Figure 26.	Exemples de profils de concentrations mesurées durant les tests d'évaporation à bas (A), à haut (B) et à très haut (C) débits de ventilation.	42
Figure 27.	Exemples de profils de concentrations durant les tests de déversement à bas (A), à haut (B) et à très haut (C) débits de ventilation.	43
Figure 28.	Exemples de profils de concentrations durant les tests d'application au chiffon suivie de nettoyage manuel à bas (A), à haut (B) et à très haut (C) débits de ventilation.	44
Figure 29.	Exemples de profils de concentrations durant les tests de pulvérisation d'acétone suivie de nettoyage manuel à bas (A) et à très haut (C) débits de ventilation.	45
Figure 30.	Exemples de profils de concentrations mesurées durant les tests d'évaporation (A), de déversement (B), de nettoyage (C) et de pulvérisation et de nettoyage (D) avec ventilation à bas débit au plancher (gauche) et au plafond (droite).	47
Figure 31.	Profils des concentrations dans la zone rapprochée mesurées et estimées par le modèle à deux compartiments, avec émission à décroissance exponentielle et à émission constante.	52
Figure 32.	Profils des concentrations de la zone éloignée mesurées et estimées par le modèle à deux compartiments, avec émission à décroissance exponentielle et à émission constante.	53
Figure 33.	Profils des concentrations mesurées et estimées par le modèle à deux compartiments avec émission à décroissance exponentielle.	54
Figure 34.	Profils des concentrations mesurées et estimées par le modèle à deux compartiments, avec émission à décroissance exponentielle.	55
Figure 35.	Profils des concentrations mesurées et estimées par le modèle à deux compartiments, avec émission à décroissance exponentielle.	55
Figure 36.	Profils des concentrations mesurées et estimées par le modèle à deux compartiments, avec émission à décroissance exponentielle.	56
Figure 37.	Profils des concentrations modélisées par la CFD et celles estimées par le modèle à un compartiment, avec émission à décroissance exponentielle; ventilation à bas débit (haut) et ventilation à haut débit (bas).	57
Figure 38.	Débits d'air interzones estimés par modélisation CFD pour deux positions d'entrée d'air (plancher ou plafond) et deux débits de ventilation (H : haut et B : bas).	58

Figure 39.	Comparaison entre les concentrations dans la zone rapprochée avec ventilation à haut débit, avec entrée d'air au plancher (gauche) et au plafond (droite).	60
Figure 40.	Influence de la taille de la zone rapprochée sur les concentrations (ventilation à haut débit avec entrée d'air au plancher).	60
Figure 41.	Estimation des coefficients α pour 69 solvants, selon deux méthodes de calcul.	62

LISTE DES ACRONYMES, SIGLES ET ABRÉVIATIONS

α	constante ou taux d'émission de premier ordre
β	débit d'air interzones
γ_i	coefficient d'activité
CAH	changement d'air par heure
CFD	<i>computational fluid dynamics</i> (calcul par dynamique des fluides)
ETG	écart type géométrique
FDS	<i>Fire Dynamics Simulator</i>
FF	<i>far field</i> (zone éloignée)
FSA	surface de la zone rapprochée
G	taux de génération ou d'émission
GC	chromatographe en phase gazeuse
ILD	instrument à lecture directe
NF	<i>near field</i> (zone rapprochée)
Q	taux de ventilation générale
PID	instrument à photo-ionisation
P_{vap}	tension de vapeur
S	vitesse moyenne d'écoulement d'air interzones
SST	santé et sécurité du travail
UNIFAC	UNIQUAC <i>functional activity coefficient</i>
VFF	volume de la zone éloignée (<i>far field</i>)
VNF	volume de la zone rapprochée (<i>near field</i>)
VLE	valeur limite d'exposition

1. INTRODUCTION

Au Québec, on estime que 9 % des travailleurs (soit environ 321 000 personnes) sont exposés à des vapeurs de solvants à l'occasion de leur emploi principal, soit 11 % des hommes et 6 % des femmes. Un travailleur manuel sur cinq déclare être exposé souvent ou tout le temps à des vapeurs de solvants (Vézina *et al.*, 2011). Chaque année, des travailleurs québécois subissent des effets sur leur santé en lien avec des expositions à des substances chimiques et notamment à des solvants. Les effets sur le système nerveux, les irritations des yeux et des muqueuses, les effets cancérigènes, les effets sur la reproduction et le développement du fœtus, les effets hépatiques et rénaux, les effets cardio-vasculaires, la sclérodémie, les effets hématotoxiques, l'intolérance acquise aux solvants, les dermatites de contact irritative, allergique et urticaire font partie de ces conséquences (Gérin, 2002a). Le système français d'indemnisation des lésions professionnelles associe plusieurs maladies à des expositions à des solvants, dont l'hypoplasie, les syndromes myélodysplasiques acquis, les leucémies, les syndromes myéloprolifératifs, les troubles gastro-intestinaux apyrétiques, les dermites aiguës et chroniques irritatives ou eczématiformes, les troubles cardiaques aigus à type d'hyperexcitabilité ventriculaire ou supraventriculaire, les hépatites aiguës cytolytiques, les néphropathies tubulaires et les polyneuropathies (INRS, 2013).

Plusieurs cas d'incendie et d'explosion liés à l'utilisation de solvants inflammables qui ont occasionné des blessures et des décès de travailleurs sont recensés. Selon l'Institut national de recherche et de sécurité pour la prévention des accidents du travail et des maladies professionnelles (INRS), il se produit, en France, plus d'une explosion par jour (INRS, 2003). Ces explosions ne sont pas toutes dues à des vapeurs de solvants, mais plusieurs le sont. Au Québec, l'accident survenu en novembre 2014 à l'usine Neptune Technologies est un exemple d'explosion associée à l'utilisation et au stockage de solvants. Le solvant incriminé dans cette explosion était l'acétone.

De nombreux travaux ont été entrepris ces dernières années au Québec sur la thématique de la substitution des solvants (Bégin, Debia et Gérin, 2008; Gérin, 2002b). Ils ont entre autres permis la mise en ligne du site web [Solub](#). Ce site propose notamment une démarche de substitution des solvants et permet de consulter des fiches de substitution pour 12 secteurs d'utilisation ou procédés. Ces fiches présentent la problématique de santé et de sécurité du travail (SST), les produits dangereux (les niveaux d'exposition et les effets), les pistes de solutions, les actions de prévention et des recommandations. Malgré ces nombreux travaux, l'exposition professionnelle aux solvants est toujours une préoccupation majeure des préventeurs et des autorités de la santé publique.

Devant le besoin grandissant de maîtriser et d'anticiper les multiples risques, la modélisation est devenue un outil incontournable dans de nombreux domaines comme la finance, la sécurité publique, les transports, la médecine et la pharmacologie. En hygiène du travail, la modélisation des expositions professionnelles occupe une place importante sur le plan de la prévention des risques professionnels. Ce mécanisme, au moyen duquel un modèle virtuel est créé pour effectuer des calculs et pour prédire le comportement des contaminants, propose une alternative souple et peu coûteuse pour estimer les concentrations. Selon l'INRS, la rapidité de mise en œuvre, l'optimisation des protocoles d'analyse, la possibilité de travailler de façon rétrospective et prospective, la limitation des biais de jugement et de l'incertitude sont autant

d'atouts que possèdent les techniques de modélisation des expositions (Bertrand et Vincent, 2010b).

L'utilisation des modèles d'exposition est aussi favorisée par l'évolution de différentes réglementations qui renforcent la surveillance des niveaux d'exposition aux agents chimiques et qui visent à diminuer les incertitudes liées aux évaluations de l'exposition. En Europe, le règlement REACH (*Registration, Evaluation and Authorization of Chemicals*) exige que, lors de l'évaluation de la sécurité chimique des produits, une évaluation de l'exposition, incluant la production de scénarios d'exposition et une estimation de l'exposition, soit effectuée (European Parliament and Council of the European Union, 30 December 2006). En Australie, la modélisation des expositions professionnelles est reconnue comme une méthode pouvant être utilisée dans certaines circonstances pour estimer des expositions dans une démarche générale d'évaluation des expositions professionnelles (Australia, 2012). Au Québec, dans un rapport publié par l'IRSST sur les [Stratégies de diagnostic de l'exposition des travailleurs aux substances chimiques](#), Drolet et coll. (Drolet *et al.*, 2010) indiquaient que les modèles d'estimation de l'exposition sont des outils appelés à être développés et que leur utilisation doit être encouragée.

Les modèles sont, par définition, des représentations de la réalité. Il existe différentes hypothèses qui sous-tendent le fonctionnement des modèles allant des plus simplistes au plus complexes, se basant sur les équations de la dynamique des fluides. Les intervenants vont chercher un équilibre entre la simplicité et la précision du modèle (Keil, Simmons et Anthony, 2009; Morency et Hallé, 2012).

Le présent projet vise à améliorer, à travers différentes expérimentations, la justesse des modèles d'hygiène du travail utilisés pour estimer des expositions professionnelles à des vapeurs de solvants.

2. ÉTAT DES CONNAISSANCES

Les modèles physiques (encore appelés modèles physico-chimiques) sont des modèles d'exposition qui prédisent l'exposition à l'aide d'équations mathématiques simulant l'émission et la dispersion des contaminants dans l'air (Bertrand et Vincent, 2010a; Bruzzi, 2007; Flynn, 2004; Nicas, 2003). Ces modèles supposent que le contaminant est généré dans un volume d'air défini par la géométrie de la pièce, dispersé dans l'environnement de la pièce durant une certaine période de temps, puis éliminé par la ventilation générale (Drolet *et al.*, 2010; Keil, 1998; Keil *et al.*, 2009). Le développement des modèles physico-chimiques est basé sur une combinaison des caractéristiques de l'émission des contaminants (modèles d'émission) et celles de leur dispersion dans l'environnement de travail (modèles de dispersion) (Reinke et Brosseau, 1997).

Plusieurs modèles mathématiques ont ainsi été élaborés afin de simuler des expositions professionnelles. La plupart des connaissances sur le sujet sont regroupées dans le manuel de l'American Industrial Hygiene Association (AIHA) intitulé *Mathematical Models for Estimating Occupational Exposure to Chemicals* (Keil *et al.*, 2009).

Le [logiciel IHMOD](#), dont le contenu scientifique se base sur le manuel de l'AIHA (Keil *et al.*, 2009), constitue l'un des principaux outils de modélisation du risque chimique utilisés en hygiène du travail. Il propose onze modèles d'évaluation de l'exposition selon différentes situations de travail qui incluent différents modèles de dispersion et de génération des polluants. Depuis le développement de IHMOD, plusieurs travaux d'ajustement et de validation des modèles ont été publiés (Arnold, Shao et Ramachandran, 2017b; Cherrie *et al.*, 2011; Fransman *et al.*, 2011; Nicas, 2016; Tielemans *et al.*, 2011; van Tongeren *et al.*, 2011; Williams et Mani, 2015; Zhang, Banerjee, Yang, Lungu et Ramachandran, 2009). Parmi les modèles de dispersion, le modèle de pièce avec air uniformément mélangé et celui à deux compartiments sont décrits dans ce rapport, alors que parmi les modèles d'émission, celui à génération constante et celui à émission à décroissance exponentielle sont présentés pour des solvants purs et pour des mélanges.

En plus des modèles mathématiques, les codes de calcul par dynamique des fluides (*Computational Fluid Dynamics, CFD*) peuvent être une solution de rechange aux méthodes de mesures. En effet, les codes de calcul CFD permettent de générer des simulations de dispersion de contaminants avec une grande précision lorsque les conditions de simulation sont bien définies. La CFD pourrait également servir comme outil de référence de validation pour les modèles mathématiques simples comme ceux du logiciel IHMOD (Keil *et al.*, 2009).

2.1 Modèles de dispersion

2.1.1 Modèle de pièce avec air uniformément mélangé

Le modèle de pièce avec air uniformément mélangé est un modèle simple permettant d'estimer une concentration uniforme des agents chimiques dans un milieu de travail. Il a été utilisé par plusieurs auteurs pour estimer des concentrations de contaminants dans des milieux de travail (Arnold, Shao et Ramachandran, 2017a; Arnold *et al.*, 2017b; Demou, Hellweg, Wilson, Hammond et McKone, 2009; Earnest et Corsi, 2013; Gaffney *et al.*, 2008; Keil et Murphy, 2006;

Keil et Nicas, 2003; Keil, 2000; Persoons, Maitre et Bicout, 2011). Avec ce modèle, toutes les personnes qui travaillent dans une pièce sont exposées aux mêmes concentrations. La dispersion des contaminants est déterminée par la ventilation générale de la pièce. Selon Nicas, le modèle permet d'estimer adéquatement l'exposition loin de la source d'émission ($d \geq 3$ m), mais il sous-estime généralement l'exposition à proximité de celle-ci (Nicas, 2009). Le schéma conceptuel du modèle est présenté à la figure 1.

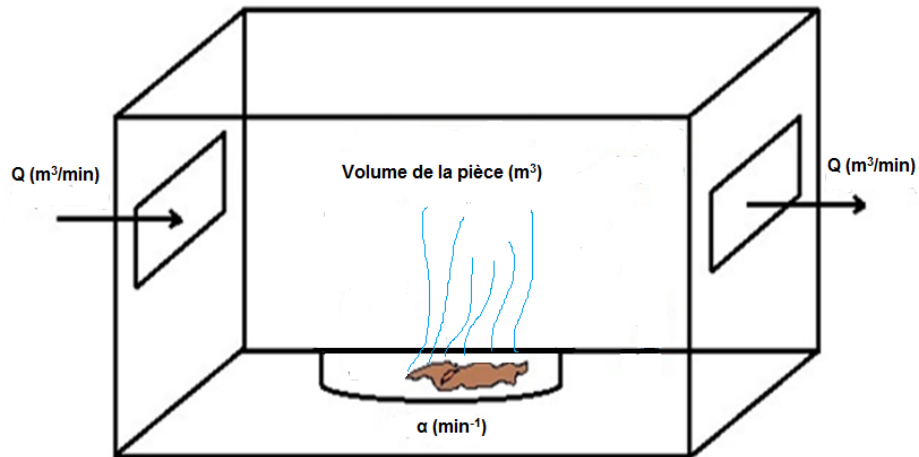


Figure 1. Concept du modèle de la pièce avec air uniformément mélangé (adapté de (Reinke et Keil, 2009)).

Arnold *et al.* ont utilisé le modèle de pièce avec air uniformément mélangé pour évaluer des expositions professionnelles selon quatre scénarios : récupération de solvant, confection de moules de sable dans une fonderie de fer, nettoyage des ongles dans un salon de manucure, nettoyage des lames et du couvercle d'un mixeur dans une salle blanche. Les solvants évalués étaient respectivement le chlorure de méthylène, le phénol et l'acétone dans les deux dernières situations. Le modèle a sous-estimé les concentrations d'exposition dans trois scénarios par des facteurs de 1,3, 1,45 et 37, et a surestimé l'exposition pour un des scénarios par un facteur de 19 (Arnold *et al.*, 2017b).

Persoons *et al.* ont étudié la performance de prédiction du modèle de pièce avec air uniformément mélangé dans le cadre de l'évaluation de l'exposition professionnelle au formaldéhyde et au toluène dans un laboratoire de pathologie d'un hôpital universitaire. Sur 22 évaluations faites (10 pour le formaldéhyde, 12 pour le toluène), aucun des profils temporels générés par le modèle n'était comparable à ceux obtenus lors des mesures des concentrations réalisées en temps réel à proximité des sources d'émission. Le modèle a, dans tous les cas, sous-estimé l'exposition, notamment en ce qui concerne les pics de concentration (Persoons *et al.*, 2011).

Dans l'étude de Demou *et al.*, le modèle de pièce avec air uniformément mélangé a été utilisé pour évaluer l'exposition de travailleurs à un produit volatil complexe (composé d'hexane, d'acétone, de toluène, de méthanol, de 2-butanone (MEK), de xylène, d'isopropanol) utilisé dans une industrie de réparation de véhicule. Trois scénarios d'exposition ont été évalués selon

différents débits de ventilation et taux de génération. Le modèle a sous-estimé les concentrations réelles mesurées dans la zone respiratoire des travailleurs par un facteur de 1,3 à 6,4 pour les scénarios évalués (Demou *et al.*, 2009).

Keil et Murphy ont évalué l'exposition professionnelle au chlorure de méthylène dans un laboratoire universitaire de chimie. Ils ont comparé les concentrations prédites par le modèle à celles mesurées pour deux scénarios d'exposition : 20 travailleurs réalisant des tâches d'extraction et de distillation participaient au premier tandis que 4 autres accomplissant les mêmes tâches prenaient part au deuxième. Les auteurs ont trouvé que le modèle de pièce avec air uniformément mélangé a sous-estimé l'exposition personnelle des travailleurs pour tous les scénarios dans un facteur de deux (les concentrations mesurées étaient 70 % à deux fois plus élevées que les concentrations prédites) (Keil et Murphy, 2006).

2.1.2 Le modèle à deux compartiments

Contrairement au modèle à un compartiment qui suppose une homogénéité des concentrations dans toute la pièce de travail, celui à deux compartiments prend en compte la variabilité spatiale de l'exposition en divisant la pièce de travail en deux zones : une zone rapprochée (NF pour *Near Field*) et une zone éloignée (FF pour *Far Field*) (Nicas, 1996). La théorie qui sous-tend ce modèle est que la personne qui travaille dans la zone rapprochée est exposée à des concentrations plus élevées que celle qui travaille dans la zone éloignée. Le modèle à deux compartiments offre l'avantage de corriger la sous-estimation de l'exposition que produit celui à un compartiment près de la source d'émission (Keil *et al.*, 2009).

Le modèle à deux compartiments est le principal modèle auquel recourent les évaluateurs de risque (Jayjock, Armstrong et Taylor, 2011). Il est utilisé dans différentes situations de travail telles que le nettoyage de pièces d'équipements (Nicas, Plisko et Spencer, 2006a), l'application de produits de nettoyage (Earnest et Corsi, 2013) et lors de déversements de solvants (Jayjock, Logan, *et al.*, 2011).

En plus du taux de génération ou d'émission des polluants (G), le modèle à deux compartiments utilise quatre paramètres pour estimer la dispersion des contaminants dans les zones rapprochée et éloignée : le volume de la zone éloignée (VFF pour *Volume Far Field*), le volume de la zone rapprochée (VNF pour *Volume Near Field*), le débit d'air interzones (β) et le débit de ventilation générale de la pièce (Q) (Nicas, Plisko et Spencer, 2006b).

Le schéma conceptuel du modèle est présenté à la figure 2.

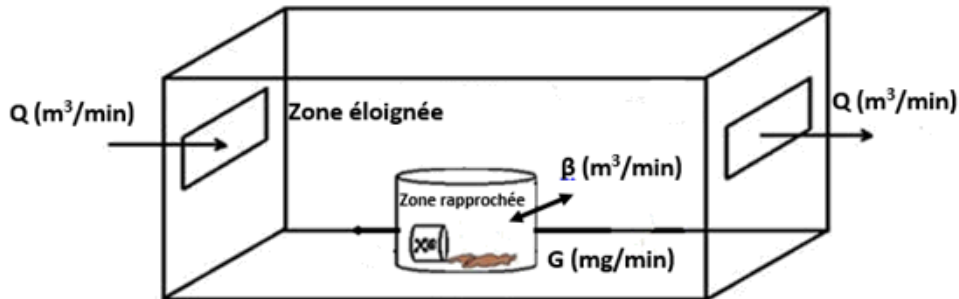


Figure 2. Schéma conceptuel du modèle à deux compartiments (adapté de (Jayjock, Logan, et al., 2011)).

Volume de la zone éloignée (VFF)

Le VFF se calcule en soustrayant le volume de la zone rapprochée (VNF) au volume total de la pièce. Les VFF rapportés dans la littérature vont de 11,79 m³ pour des scénarios d'évaporation de solvants dans une chambre expérimentale (Arnold *et al.*, 2017a) à des volumes de 6500 m³ pour des évaluations d'exposition effectuées dans des garages de réparation de voitures (Williams et Mani, 2015).

Volume de la zone rapprochée (VNF)

La zone rapprochée correspond à une zone virtuelle qui englobe la zone respiratoire d'un travailleur et la source d'émission des polluants. Le volume de la zone rapprochée est défini en fonction de l'expertise des auteurs et des scénarios d'exposition à l'étude.

Les formes géométriques utilisées sont l'hémisphère (Arnold *et al.*, 2017b; Demou *et al.*, 2009; Nicas, 2009; Persoons *et al.*, 2011; Persoons, Maitre et Bicout, 2012; Robbins, Krause, Atallah et Plisko, 2012; Williams et Mani, 2015), la boîte rectangulaire (Arnold *et al.*, 2017a; Nicas et Neuhaus, 2008; Nicas *et al.*, 2006a; Plisko et Spencer, 2008), le cube (Hofstetter, Spencer, Hiteshew, Coutu et Nealley, 2013; Nicas, 2016; von Grote, Hurlimann, Scheringer et Hungerbuhler, 2003, 2006) et le cylindre (Earnest et Corsi, 2013; Jayjock, Logan, *et al.*, 2011). Les volumes rapportés pour la zone rapprochée varient de 0,1 m³ (Arnold *et al.*, 2017b) à 100 m³ (von Grote *et al.*, 2003, 2006).

Dans les études de pulvérisation d'aérosols sur des carburateurs de voiture par des mécaniciens en mouvement, de pulvérisation de peinture sur une surface, de déversement d'un litre de solvant, de lavage de vêtements à l'aide de machines de grandes tailles, et de dégraissage de pièces métalliques dans des machines de grandes tailles, les volumes rapportés étaient respectivement de 7,4 m³ (Williams et Mani, 2015), 8 m³ (Hofstetter *et al.*, 2013), 25 m³ (Jayjock, Logan, *et al.*, 2011) et de 100 m³ (von Grote *et al.*, 2003, 2006). Les scénarios d'exposition correspondant à ces volumes exigeaient des sources d'émission larges et/ou mouvantes et la réalisation de tâches étendues (nécessitant des mouvements de la part des travailleurs).

Dans des études d'évaporation de solvants à partir d'une seringue de 30 ou de 50 mL, de nettoyage de petites pièces d'équipements sur une table de travail, de déversement de petites quantités de solvants dans un verre de montre, de nettoyage des ongles dans un salon de manucure, les volumes rapportés étaient respectivement de 0,1 m³ (Arnold *et al.*, 2017a), 0,5 m³ (Nicas, 2016), 0,26 m³ (Keil et Nicas, 2003) et 1 m³ (Arnold *et al.*, 2017b). Les scénarios d'exposition correspondant à ces volumes exigeaient des sources d'émission restreintes et/ou fixes et la réalisation de tâches localisées.

Le volume de la zone rapprochée dépend donc de la taille (restreinte ou large) et du caractère (fixe ou mobile) de la source d'émission, ainsi que de la nature (focale ou étendue) de la tâche réalisée. Plus la source est large et/ou mouvante et la tâche est étendue, plus grand est le volume de la zone rapprochée.

Débit d'air interzones (β)

Le débit d'air interzones (β) assure le transport des polluants entre la zone rapprochée et la zone éloignée. Ce débit est fonction de la vitesse d'écoulement d'air à la frontière zone rapprochée-zone éloignée. Nicas (1996) a proposé une méthode pour calculer le paramètre β en fonction de la surface libre de la zone rapprochée (FSA) et de la vitesse moyenne d'écoulement d'air à l'intersection des deux zones (S) selon l'équation :

$$\beta = \frac{1}{2} \text{FSA} \times S \quad (1)$$

avec S en m/min, FSA en m² et β en m³/min.

Cette méthode de calcul a par la suite été largement utilisée dans des études qui ont fait l'objet de publications scientifiques. Leurs auteurs ont mesuré les vitesses d'air en situation réelle (Arnold *et al.*, 2017b; Earnest et Corsi, 2013; Jayjock, Logan, *et al.*, 2011; Keil et Nicas, 2003; Persoons *et al.*, 2011) ou ont estimé ces vitesses à partir du jugement d'un expert et de données de la littérature (Demou *et al.*, 2009; Gaffney *et al.*, 2008; Nicas, 2016; Nicas *et al.*, 2006a; Plisko et Spencer, 2008; Robbins *et al.*, 2012; Williams et Mani, 2015). Les surfaces de la zone rapprochée ont été déterminées selon la description des volumes de la zone rapprochée et des calculs de surface correspondants. Les vitesses d'écoulement d'air à l'intersection des zones rapprochée et éloignée rapportées dans la littérature ont ainsi varié de 0,9 à 61 m/min alors que la majorité des publications rapportaient des vitesses supérieures à 3,6 m/min.

Finalement, les β rapportés ont varié de 0,1 à 191 m³/min avec 80 % de valeurs comprises entre 1 et 30 m³/min. À noter que le débit de 191 m³/min représente un milieu particulièrement bien ventilé que les auteurs décrivent comme un milieu de travail « semi-extérieur » (Spencer et Plisko, 2007).

Débit de ventilation générale de la pièce (Q)

Le débit de ventilation générale est le débit d'air permettant la dilution et l'extraction des contaminants dans une pièce. Les débits sont estimés à partir d'études de la décroissance des concentrations de gaz traceurs (Arnold, Ramachandran et Jayjock, 2009; Arnold *et al.*, 2017a; Hofstetter *et al.*, 2013; Nicas et Neuhaus, 2008; Persoons *et al.*, 2011; Robbins *et al.*, 2012), de jugement d'expert (Earnest et Corsi, 2013; Nicas *et al.*, 2006a; Persoons *et al.*, 2012; von Grote

et al., 2003, 2006) ou de la mesure de vitesse de l'air aux entrées et sorties d'air (Arnold *et al.*, 2017b; Keil et Nicas, 2003; Keil, 1998).

Les débits de ventilation générale (Q) rapportés dans la littérature ont varié de 0,04 (Arnold *et al.*, 2017a) à 3250 m³/min (Williams et Mani, 2015). En ce qui a trait au nombre de changements d'air par heure (CAH), ces débits variaient de 0,3 (Arnold *et al.*, 2017a) à 63 CAH (Nicas et Neuhaus, 2008). La valeur de 63 CAH a été mesurée dans un milieu particulièrement ouvert de type garage avec les portes et fenêtres ouvertes (Nicas et Neuhaus, 2008).

2.1.3 Codes de calcul par dynamique des fluides

La simulation numérique par les méthodes CFD est bien adaptée pour la simulation de l'exposition professionnelle. Plusieurs auteurs ont évalué cette méthode pour estimer des concentrations de gaz et de vapeurs (Chauhan, Chauhan, Joshi, Agarwal et Sapra, 2015; Hyun et Kleinstreuer, 2001). Bien que les méthodes CFD offrent une flexibilité de paramétrage, elles exigent des conditions aux limites définies avec précision, ce qui exige un certain degré d'idéalisation des conditions (Bennett, Feigley., Khan. et Hosni., 2000).

La dispersion d'un gaz traceur (hexafluorure de soufre, SF₆) dans une pièce ventilée selon 4 stratégies différentes a été étudiée au cours des travaux d'He, Yang et Srebric. Des mesures expérimentales et des modélisations numériques ont été effectuées. La dispersion du SF₆ causée par l'écoulement d'air et selon l'emplacement de la source a été étudiée par un modèle validé durant la même étude. Les auteurs prétendent qu'une relation étroite existe entre la dispersion du contaminant et le profil global de circulation de l'air. Ils affirment également que la position de la grille d'extraction est susceptible d'affecter le niveau d'exposition dans la pièce (He, Yang et Srebric, 2005).

Une étude de performance des systèmes de ventilation par déplacement dans une chambre environnementale de 63 m³, dotée de diffuseurs à effet tourbillon et de panneaux perforés, a été menée par Lau et Chen. Les résultats obtenus d'un code numérique ont été comparés à des mesures expérimentales réalisées dans la chambre. Les auteurs ont utilisé la CFD pour établir un lien entre plusieurs paramètres et la qualité de l'air intérieur. Les résultats numériques montrent que le taux de changement d'air, la vitesse et la température de l'air de soufflage ainsi que le nombre de diffuseurs utilisés ont tous un impact significatif sur la qualité de l'air intérieur (Lau et Chen, 2007).

On trouve dans l'industrie des semi-conducteurs des produits chimiques très toxiques. C'est dans ce contexte que l'exposition professionnelle à des vapeurs d'acide chlorhydrique (HCl) et l'efficacité des moyens de contrôle par l'ingénierie a été étudiée par Li et Zhou. Un code CFD a été utilisé pour estimer le champ de vitesse et la dispersion des vapeurs d'HCl après une fuite lors d'un procédé de décapage chimique. Une analyse quantitative de l'efficacité des moyens de contrôle est présentée. Cependant, étant donné la complexité géométrique de la salle modélisée, les auteurs ont fait appel à plusieurs hypothèses simplificatrices (Li et Zhou, 2015).

L'estimation de l'exposition professionnelle par les méthodes CFD ne se limite pas qu'aux espaces intérieurs. Dans un article publié récemment, Bayatian *et al.* ont fait appel à la CFD pour estimer la dispersion de vapeurs de benzène sur le site d'une raffinerie de pétrole d'une superficie de 4800 m². Les simulations réalisées avec un logiciel commercial ont permis de

déterminer la dose journalière d'exposition et d'associer ces doses à une estimation du risque de cancer au cours d'une vie (Bayatian *et al.*, 2018).

2.2 Modèles d'émission

Afin d'estimer la concentration de vapeurs de solvant dans l'air, il est nécessaire de connaître le taux de transfert de la phase liquide à la phase gazeuse. Le paramètre qui permet d'évaluer *a priori* l'évaporation d'un solvant pur est sa tension de vapeur (P_{vap}). Une substance avec une grande tension de vapeur est considérée comme une substance volatile. Plus la tension de vapeur sera faible, plus le composé s'évaporerait avec difficultés; il sera alors peu ou pas volatil. En Europe, un composé organique volatil se définit comme un composé ayant une tension de vapeur supérieure à 0,01 kPa à une température de 20 °C (Parlement européen et du conseil, 21 avril 2004).

Deux principaux types d'émission sont décrits lors de l'utilisation des modèles d'estimation des expositions : l'émission à décroissance exponentielle et l'émission constante.

2.2.1 Émission à décroissance exponentielle

Les modèles d'émission à décroissance exponentielle ont été décrits et utilisés pour estimer des concentrations de vapeurs de solvant en milieu de travail (Jayjock, Logan, *et al.*, 2011). Il s'agit, entre autres, de situations de « dégazage » de contaminants adsorbés par des surfaces (Nicas, 2016; Reinke, Jayjock et Nicas, 2009) ou de situations de petits déversements de solvant (Keil et Nicas, 2003). Lors de ces situations, le taux d'émission n'est pas considéré comme constant. L'émission tend à être plus élevée en début d'émission puis décroît progressivement au fil du temps du fait de l'effet cumulé du refroidissement du liquide déversé et de la réduction progressive de la surface initialement couverte par le liquide. Le refroidissement diminue la tension de vapeur du solvant, qui entraîne à son tour une diminution de la capacité à passer à l'état de vapeur (Keil et Nicas, 2003; Reinke *et al.*, 2009).

Le taux d'émission des polluants peut être calculé par l'équation suivante (Keil et Nicas, 2003; Reinke *et al.*, 2009) :

$$G_t = \alpha M_0 e^{-\alpha t} \quad (2)$$

avec G_t le taux d'émission en mg/min, α la constante ou le taux d'émission de premier ordre en min^{-1} et M_0 la masse initiale de contaminant présente dans le liquide (mg).

Keil et Nicas (2003) ont proposé, à partir de données expérimentales, une équation pour déterminer le paramètre α en fonction de la tension de vapeur et du ratio surface du déversement sur volume du déversement (Keil et Nicas, 2003). L'équation 3 présente cette relation :

$$\alpha = 0,000524 \times P_{vap} + 0,0108 \times S/Vol \quad (3)$$

où P_{vap} = tension de vapeur saturante du solvant en mmHg à 20 °C; S = surface initiale du déversement du liquide (cm^2), Vol = volume du liquide déversé en cm^3 .

2.2.2 Émission constante

Les modèles à émission constante estiment un taux de génération fixe pour la durée de l'émission. Le taux de génération représente la quantité de contaminant générée par unité de temps (mg/min). Ces taux d'émission peuvent être estimés simplement à partir du rapport de la quantité totale de contaminant émise durant une période de temps déterminée ou encore à partir du temps que met le solvant à s'évaporer entièrement.

Pour estimer le taux de génération, différentes équations prédictives ont été proposées. À partir de données expérimentales, l'INRS a établi une équation permettant d'estimer un taux d'émission dans le cas d'un liquide répandu sur une surface ou contenu dans un récipient ouvert et soumis à un flux d'air.

$$G = 22,01 \times S \times V \times MM^{0,4} \times \frac{P_{vap}}{P_{atm}} \quad (4)$$

avec G le taux d'émission (g/s), S la surface d'évaporation en m², V la vitesse de l'air au niveau de la surface (m/s), MM la masse moléculaire (kg/mol), P_{vap} la tension de vapeur du liquide en Pa et P_{atm} la pression atmosphérique en Pa.

Cette équation permet de ne jamais sous-estimer les vitesses d'évaporation et les auteurs associent une incertitude de 33 % à ces estimations (Triolet et Sallé, 2009). Les auteurs ajoutent que cette équation s'applique uniquement dans les cas où le niveau du liquide se trouve proche des bords du contenant et lorsqu'il n'y a pas de « bouchon de vapeur » qui se forme au-dessus du liquide. Ce « bouchon » aurait pour effet de diminuer fortement la vitesse d'évaporation.

Porpendorf propose aussi une équation afin de déterminer les taux d'émission d'un déversement de solvant organique (Popendorf, 2006a) :

$$G = 0,0706 \times MM \times A \times V^{0,625} \times P_{vap} \quad (5)$$

avec G le taux d'émission (mg/min), A la surface d'évaporation en pi², V la vitesse de l'air au niveau de la surface (pi/min), MM la masse moléculaire (g/mol) et P_{vap} la tension de vapeur du liquide en mmHg.

En conclusion, plusieurs facteurs peuvent influencer la volatilité d'une substance. En se basant sur les équations 4 et 5 présentées, la température du liquide et la tension de vapeur correspondante, la vitesse de l'air au niveau de la surface et la taille de la source d'émission apparaissent comme des paramètres importants.

2.2.3 Émission de mélanges de solvants

L'utilisation de mélanges n'est pas une exception dans le domaine des solvants industriels. Il est donc nécessaire d'évaluer le taux d'émission de chaque constituant d'un mélange pour pouvoir estimer les différentes concentrations dans les milieux de travail. L'émission en situation d'exposition aux mélanges de solvants peut être estimée de différentes façons.

La loi de Raoult (conditions idéales), la loi de Raoult modifiée (conditions non idéales) et la loi de Henry (mélanges aqueux ou mélanges avec dilution infinie) sont différentes approches pouvant être utilisées pour calculer des pressions partielles dans le cas de mélange (Popendorf, 2006b). Ces pressions partielles pourront alors être mises en œuvre pour estimer les différents taux de génération de chaque composante à la place des tensions de vapeur des substances pures.

Si les conditions sont idéales c.-à-d. si les solvants sont similaires dans le mélange (présence de faibles interactions intermoléculaires), la loi de Raoult est applicable :

$$P_{vapeur,i} = X_i P_{vapeur} \quad (6)$$

$P_{vapeur,i}$ = tension de vapeur du composant i dans le mélange

X_i = fraction molaire du composant i dans le mélange

P_{vapeur} = tension de vapeur du composant i à l'état pur

La non-idéalité est le phénomène physico-chimique par lequel certains solvants, lorsqu'ils sont mélangés, deviennent la plupart du temps plus volatils que ne le prévoit la loi de Raoult du fait de l'effet de leur coefficient d'activité. Ces mélanges sont dits « non idéaux ». L'utilisation des coefficients d'activité (γ_i) se traduit par des changements dans les cinétiques d'évaporation et donc des modifications du profil d'exposition des travailleurs (Debia, Bégin et Gérin, 2009; Popendorf, 2006b). Popendorf rapporte que les déviations par rapport à l'idéalité peuvent être très importantes, atteignant 10^6 lorsque des solvants peu hydrosolubles, comme le n-hexane, sont dilués dans de l'eau (Popendorf, 2006b). Cela signifie que la pression partielle du n-hexane et donc sa capacité théorique à s'évaporer est 10^6 fois plus importante que lorsqu'il se trouve à l'état pur ou faiblement dilué.

En cas de non-idéalité, il faut donc corriger la loi de Raoult en utilisant les coefficients d'activité (γ_i) des composants du mélange en ayant recours à la loi de Raoult modifiée :

$$P_{vapeur,i} = \gamma_i X_i P_{vapeur} \quad (7)$$

où $P_{vapeur,i}$ = tension de vapeur du composant i dans le mélange

γ_i = coefficient d'activité du composant i dans le mélange

X_i = fraction molaire du composant i dans le mélange

P_{vapeur} = tension de vapeur du composant i à l'état pur

Pour calculer le coefficient d'activité, il est possible d'utiliser la méthode de la contribution par groupement fonctionnel appelé UNIFAC (Popendorf, 2006b). Le but de cette méthode est de pouvoir prédire l'équilibre des phases du système même si aucune donnée expérimentale n'est disponible. Le modèle UNIFAC se base sur deux composantes dans le calcul de γ , soit une partie nommée combinatoire, γ_c , qui tient compte des différences entre la taille et la forme de chaque molécule dans le mélange et une partie nommée résiduelle, γ_R , qui tient compte de l'énergie d'interaction.

La loi de Henry assume que la pression partielle de la substance i dans le mélange est fonction d'un coefficient unique appelé constante d'Henry (H_i) et de la fraction molaire. Cette loi

s'applique pour les mélanges aqueux à dilution infinie, donc lorsque le coefficient d'activité décrit précédemment devient une constante (Popendorf, 2006b). La loi de Henry s'écrit tel que :

$$P_{vapeur,i} = H_i \times X_i. \quad (8)$$

- où $P_{vapeur,i}$ = tension de vapeur du composant i dans le mélange
 H_i = constante de Henry
 X_i = fraction molaire du composant i dans le mélange

2.3 Validation des modèles

Plusieurs auteurs ont comparé des données expérimentales et des données estimées dans le but de valider l'utilisation des modèles pour mesurer des expositions professionnelles. Le calcul d'un ratio entre les concentrations prédites et mesurées est rapporté dans plusieurs études ((Arnold *et al.*, 2017b; Hofstetter *et al.*, 2013; Nicas, 2016; Plisko et Spencer, 2008; Spencer et Plisko, 2007). Dans ces études, les ratios prédictions/mesures varient de 0,03 à 8,26.

La méthode ASTM D5157-97 compare les prédictions aux mesures en se basant sur cinq critères : i) le coefficient de corrélation (r), ii) la pente de la droite de régression (b), iii) l'intercepte ou l'ordonnée à l'origine de la droite de régression (a), iv) l'erreur quadratique moyenne normalisée, v) le biais normalisé. La performance du modèle est jugée adéquate lorsque les cinq conditions suivantes sont simultanément réunies : i) coefficient de corrélation $r \geq 0,9$; ii) pente de la droite de régression $0,75 \leq b \leq 1,25$; iii) intercepte ou ordonnée à l'origine $a \leq (0,25 \times \text{moyenne des concentrations prédites})$; iv) erreur quadratique moyenne normalisée $\leq 0,25$; v) biais normalisé $\leq 0,25$ (Arnold *et al.*, 2017a; ASTM, 1997).

Arnold *et al.* ont utilisé cette méthode pour évaluer la performance de prédiction du modèle à deux compartiments pour 324 paires de concentrations prédites et mesurées (n = 81 paires pour la zone rapprochée, n = 243 paires pour la zone éloignée) provenant des tests réalisés avec trois solvants. La performance a été jugée adéquate (validation des cinq critères à la fois) dans 11 % (acétone), 19 % (2-butanone) et 33 % (toluène) des évaluations réalisées pour la zone rapprochée et dans 69 % (toluène), 91 % (2-butanone) et 96 % (acétone) des évaluations faites pour la zone éloignée. Keil et Nicas, 2003 ont aussi utilisé cette méthode et rapporté que la performance était adéquate (validation des cinq critères à la fois) seulement pour l'évaluation faite pour la zone éloignée.

De plus, Arnold *et al.* ont validé l'utilisation des modèles en utilisant les catégories de contrôle de l'exposition de l'AIHA (Arnold *et al.*, 2009; Arnold *et al.*, 2017a). Ces catégories sont : i) catégorie 1 pour les expositions hautement contrôlées (95^{e} percentile $\leq 0,10 \times$ valeur limite d'exposition (VLE)); ii) catégorie 2 pour les expositions bien contrôlées ($0,10 \times$ VLE $\leq 95^{\text{e}}$ percentile $\leq 0,50 \times$ VLE); iii) catégorie 3 pour les expositions contrôlées ($0,50 \times$ VLE $\leq 95^{\text{e}}$ percentile \leq VLE); iv) catégorie 4 pour les expositions faiblement contrôlées (VLE $\leq 95^{\text{e}}$ percentile). La validation consiste à vérifier si les concentrations prédites et mesurées se classent dans les mêmes catégories.

Dans l'étude d'Arnold *et al.*, 27 évaluations ont été réalisées. Pour la zone rapprochée, le modèle prédisait correctement les catégories dans plus de 74 % des situations. Pour la zone

éloignée, le modèle prédisait correctement les catégories dans 96 % des cas (Arnold *et al.*, 2017a).

Dans une autre étude d'Arnold *et al.*, huit évaluations de courte durée (15 minutes) ont été réalisées, soit quatre tests pour la zone rapprochée et quatre pour la zone éloignée. Le modèle prédisait correctement les catégories dans 75 % des évaluations effectuées pour l'une ou l'autre des deux zones (Arnold *et al.*, 2017b).

2.4 Limites des modèles

Les modèles physico-chimiques présentent l'avantage d'être souples et rapides. Ils permettent aussi de comprendre les relations qui existent entre l'émission des polluants, les mouvements d'air dans la pièce et les concentrations d'exposition qui en résultent (Bertrand et Vincent, 2010a; Persoons *et al.*, 2011). En contrepartie, leur principale limite réside dans le caractère simplificateur des modèles et dans le déficit potentiel de connaissance associé à l'estimation de certains des paramètres d'entrée de ces modèles (Keil, 2000).

En effet, les modèles physico-chimiques fréquemment utilisés en hygiène du travail (modèle à un et à deux compartiments) n'intègrent pas certains paramètres capables d'influencer les concentrations d'exposition comme, par exemple, la position du système de ventilation par rapport à la source d'émission, la géométrie de la source d'émission, la présence du travailleur et les mouvements qu'il exécute, la chaleur corporelle (Earnest et Corsi, 2013; Persoons *et al.*, 2011; Plisko et Spencer, 2008; Spencer et Plisko, 2007).

De plus, l'estimation de certains paramètres d'entrée des modèles est difficile. C'est le cas, par exemple, de la détermination du débit d'air interzones β qui est le paramètre décrit comme le plus critique pour le modèle à deux compartiments (Earnest et Corsi, 2013; Keil et Murphy, 2006; Keil, 2000; Persoons *et al.*, 2011). L'estimation du taux de génération des polluants est aussi identifiée comme un facteur clé des modèles physico-chimiques (Persoons *et al.*, 2011, 2012). Ces taux d'émission peuvent s'avérer particulièrement complexes à estimer, notamment dans les situations d'émission à décroissance exponentielle ou pour les mélanges de solvants (Popendorf, 2006b). Persoons *et al.* remarquent ainsi que la performance des différents modèles est limitée par le manque de données disponibles sur les sources d'émission et que les données expérimentales sont encore insuffisantes (Persoons *et al.*, 2012).

3. OBJECTIFS DE RECHERCHE

3.1 Objectif général

Le projet proposé a pour but d'améliorer la justesse des modèles d'hygiène du travail utilisés pour estimer des expositions professionnelles à des vapeurs de solvants.

3.2 Objectifs spécifiques

Les objectifs spécifiques du projet visent à :

- Proposer une méthode pour estimer le taux de génération lors de petits déversements;
- Intégrer et valider la notion de non-idéalité dans le calcul du taux de génération pour les mélanges de solvants;
- Évaluer les paramètres de ventilation du modèle deux zones dans différentes situations de travail.

4. MÉTHODOLOGIE

La méthodologie s'articule autour de deux sections qui seront appelées tests de laboratoire à petite échelle et tests de laboratoire à échelle humaine. Le premier volet vise à proposer une méthode améliorée pour estimer le taux de génération lors de petits déversements et à intégrer la notion de non-idéalité dans le calcul du taux d'émission pour les mélanges de solvants. Le deuxième volet vise à évaluer les paramètres de ventilation du modèle deux zones dans différentes situations de travail.

4.1 Volet I – Tests de laboratoire à petite échelle

4.1.1 Détermination expérimentale des taux d'émission α

4.1.1.1 Matériel

Cinq solvants couvrant une large gamme de tensions de vapeur ont été utilisés dans différentes conditions expérimentales. Ces solvants sont l'acétone, l'hexane, le 2-butanone (MEK), le 2-propanol (IPA) et le toluène.

Une balance analytique scientifique de marque Sartorius CPA423S connectée à un ordinateur a été utilisée pour la mesure gravimétrique de la perte de masse liée à l'évaporation des solvants. Un instrument de marque VelociCalc Plus TSI a été utilisé pour la mesure des paramètres environnementaux tels que la température ambiante, l'humidité relative et la vitesse d'écoulement d'air autour de la source d'émission.

4.1.1.2 Expérimentation

L'expérimentation consistait à faire des tests d'évaporation de solvants en environnement contrôlé (température, humidité, vitesse de l'air). L'expérimentation a été faite en deux étapes. À la première étape, les tests ont été réalisés sur une paillasse de laboratoire alors qu'à la deuxième étape, les tests ont été effectués sous une hotte de laboratoire afin d'évaluer l'effet de la vitesse d'écoulement de l'air sur les taux d'émission.

Pour déterminer les taux d'émission, des scénarios de petits déversements ont été simulés avec différents volumes de solvants (1 mL, 3 mL, 6 mL, 10 mL, 20 mL) et dans différents supports de déversement (verres de montre de 12,4 cm de diamètre et plaques de pétri de 10 cm de diamètre).

Les supports étaient préalablement disposés sur la balance analytique pour enregistrer automatiquement, à chaque 15 secondes, la masse de solvant restante. Les tests ont été menés jusqu'à évaporation complète des solvants. Pour chacun des tests, le diamètre de la zone de déversement a été mesuré afin de calculer la surface de déversement. Les tests ont été effectués à trois reprises afin de vérifier la reproductibilité des résultats. Les masses enregistrées étaient directement importées dans un fichier Excel, à partir duquel la détermination des taux d'émission a été faite selon la méthodologie utilisée par Keil et Nicas (2003). Cette méthode consiste à calculer la pente de la courbe de décroissance des masses

établie en fonction du temps (t) et en fonction du logarithme népérien du rapport de la masse restante sur la masse initiale.

Les tests de laboratoire ont été faits à température et à pression relativement constantes (22 à 24 °C), avec une humidité relative comprise entre 20 et 40 %.

4.1.2 Intégration de la notion de non-idéalité dans le calcul du taux de génération pour les mélanges de solvants

Les solvants utilisés dans ce volet sont le toluène, le butan-2-one (MEK), le propan-2-ol (IPA), le méthanol et l'acétone. Ces solvants sont choisis, car ils couvrent une large plage de tensions de vapeur et parce qu'ils se retrouvent dans des mélanges commerciaux identifiés dans la littérature, incluant des nettoyants aqueux. Des taux d'émission ont tout d'abord été déterminés pour les solvants purs selon la méthode présentée au point 4.1.1. Puis différents scénarios de mélanges ont été établis. Des mélanges aqueux, comprenant des pourcentages de solvant en fraction molaire de 1 %, 5 % et 10 % ont été retenus avec les 5 solvants.

Les coefficients d'activité de chaque composante des mélanges ont été déterminés en utilisant un logiciel calculateur *UNIFAC Activity coefficient* dans lequel on introduit des données comme la dénomination des composantes des mélanges à l'étude, leur fraction molaire et la température. Ce logiciel est conçu sur le principe du modèle UNIFAC (UNIQUAC Functional Activity Coefficient) (Choy et Reible, 1996). Les fractions molaires des composantes *i* dans le mélange ont alors été calculées par :

$$\alpha_m = \alpha_{\text{exp}} \times X_i \quad (9)$$

avec α_m le coefficient α de la substance *i* dans le mélange, α_{exp} le coefficient α de la substance pure et X_i la fraction molaire de la substance *i* dans le mélange.

Pour tenir compte de la non-idéalité, les coefficients γ_i ont été introduits dans l'équation 9, tel que :

$$\alpha_{m,\text{corr}} = \alpha_{\text{exp}} \times X_i \times \gamma_i \quad (10)$$

4.1.3 Mesure des concentrations lors des tests à petite échelle

Un système de chromatographie en phase gazeuse, couplé à un détecteur de conductivité thermique (TCD), soit le GC Variant CP2003-P avec un gaz vecteur (hélium), un injecteur et une colonne ayant une phase stationnaire de diméthylpolysiloxane (CP-Sil-5), a été utilisé pour mesurer les concentrations de solvant dans une boîte construite pour le projet. Des méthodes analytiques ont été développées pour chaque solvant et pour chaque mélange afin d'optimiser les paramètres de détection.

Les tests de déversement ont été réalisés au centre d'une boîte de dimension 42 cm x 44 cm x 46 cm. Un conduit en Tygon®, branché à une pompe (0,04 l/min), venait prélever l'air à 20 cm au-dessus de la zone de déversement (figure 3). Une deuxième pompe, avec un débit de 2,5 l/min, servait d'extraction pour la ventilation de la boîte, soit l'équivalent de deux changements d'air par heure (figure 4).

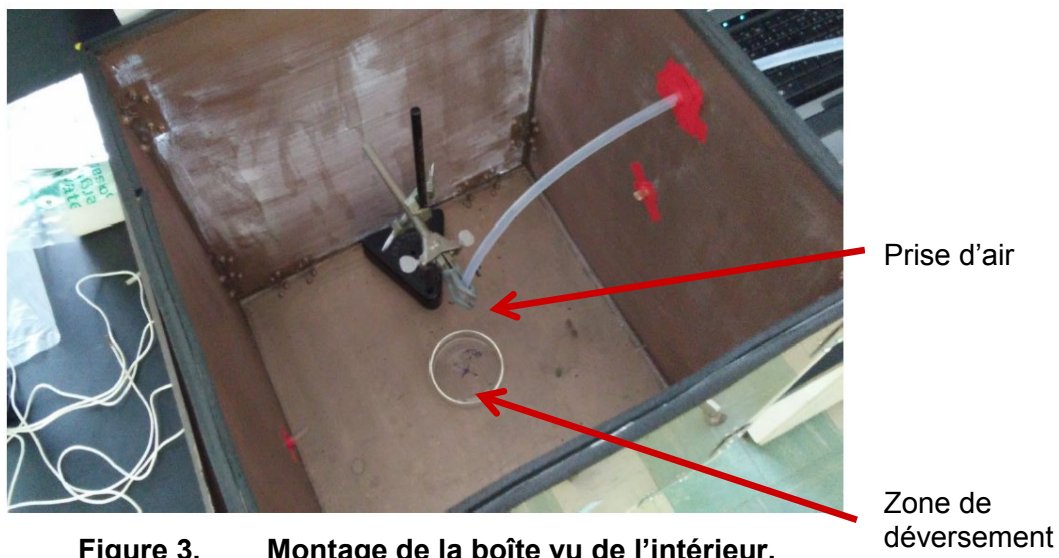


Figure 3. Montage de la boîte vu de l'intérieur.

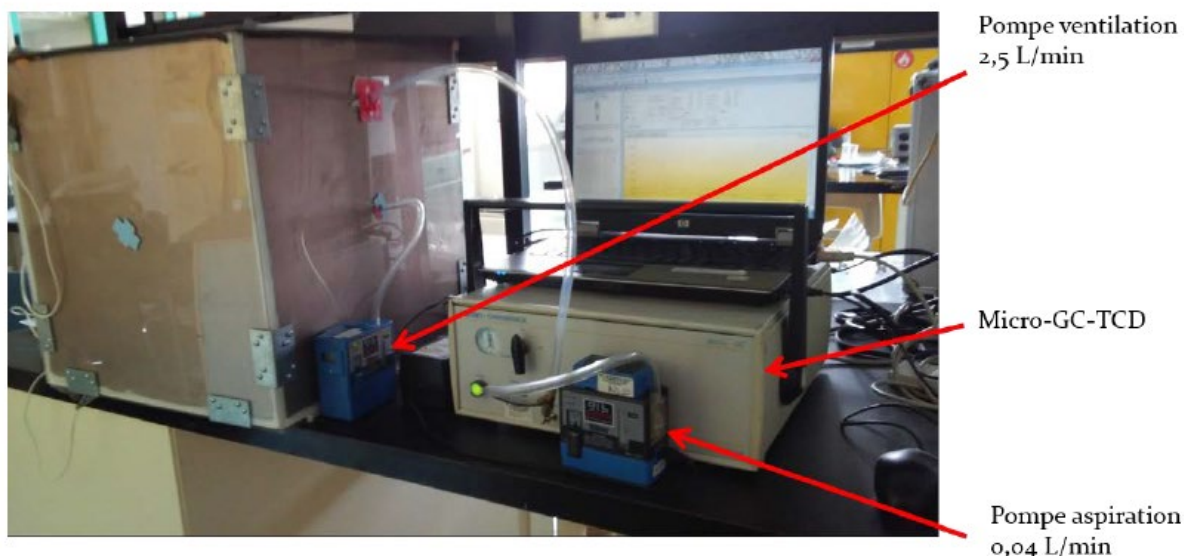


Figure 4. Montage avec le GC, la pompe d'aspiration et la pompe de ventilation.

Au total, 18 scénarios ont été effectués : 4 pour des solvants purs, 12 pour des mélanges aqueux (10 %, 5 % et 1 %) et 2 pour des mélanges de solvants organiques.

4.1.4 Modélisation des concentrations

Pour prédire les concentrations, le logiciel IHMOD et le modèle de pièce avec air uniformément mélangé et émission à décroissance exponentielle ont été utilisés en supposant aussi bien l'idéalité (utilisation des taux d'émission non corrigés) que la non-idéalité (utilisation des taux d'émission corrigés par les coefficients d'activité). Les paramètres d'entrée du modèle étaient le volume de la boîte ($0,085 \text{ m}^3$), le taux de ventilation Q ($0,15 \text{ m}^3/\text{h}$), la masse initiale M_0 du

solvant et le coefficient α (mesuré ou estimé en utilisant les fractions molaires et les coefficients d'activité).

4.1.5 Analyse des données pour les tests à petite échelle

Les concentrations mesurées ont été comparées graphiquement aux valeurs prédites par le modèle. Les paramètres du profil de concentration correspondant au pic de concentration (C_{\max}) et au temps nécessaire pour l'atteindre (T_{\max}) ont été consignés pour chacun des tests et pour chaque concentration. Des ratios entre les concentrations maximales mesurées et celles estimées ont alors été calculés.

Des analyses de régression linéaire multiple ont été effectuées afin d'évaluer l'influence de différentes variables explicatives sur les valeurs de α . Le seuil de signification des tests a été fixé à 5 % et les analyses ont été effectuées à l'aide du logiciel SPSS.

4.2 Volet II – Tests de laboratoire dans une chambre à échelle humaine

Il s'agit, à cette phase du projet, d'évaluer certains déterminants susceptibles d'influencer les concentrations de vapeurs de solvants dans différentes conditions expérimentales à échelle humaine. Les concentrations mesurées ont été comparées à des concentrations modélisées avec l'aide du modèle à deux compartiments.

4.2.1 Description du milieu et de l'instrumentation

L'évaluation a été réalisée dans une pièce à échelle humaine dont le volume est de 53,4 m³ (Figure 5). La pièce pouvait être soumise à deux stratégies de ventilation. La première consiste à souffler l'air par le plancher par un diffuseur tourbillon de 20,3 cm de diamètre. Le système de ventilation par le plancher peut fournir un débit maximum équivalent à 2,8 changements d'air par heure (CAH). La 2^e stratégie de ventilation est basée sur le soufflage d'air par le plafond. Ce système peut souffler l'air à un débit maximum de 5,2 m³/min soit 6 CAH. Dans les deux cas, le contrôle du débit d'air est assuré par un entraînement à fréquence variable relié aux ventilateurs. La grille de retour de 0,6 m x 0,12 m est située au plafond de la pièce.

Différents essais ont été simulés en variant :

- le scénario, selon quatre configurations : 1) évaporation sur une table, 2) déversement sur le sol, 3) application de solvant au chiffon suivie de nettoyage manuel, 4) pulvérisation de solvant suivie d'un nettoyage manuel;
- le débit de ventilation selon trois scénarios : bas débit (B) : 0,8 CAH (12 l/s), haut débit (H) : 2,3 CAH (32 l/s) et très haut débit (TH) : 4,5 CAH (64 l/s);
- la position de la bouche d'aération (plancher par rapport à plafond).

Avec trois répétitions par essai, un total de 57 simulations ont été effectuées, selon 19 combinaisons différentes (seule la combinaison « pulvérisation – ventilation à haut débit – entrée d'air au plancher » n'a pu être effectuée).

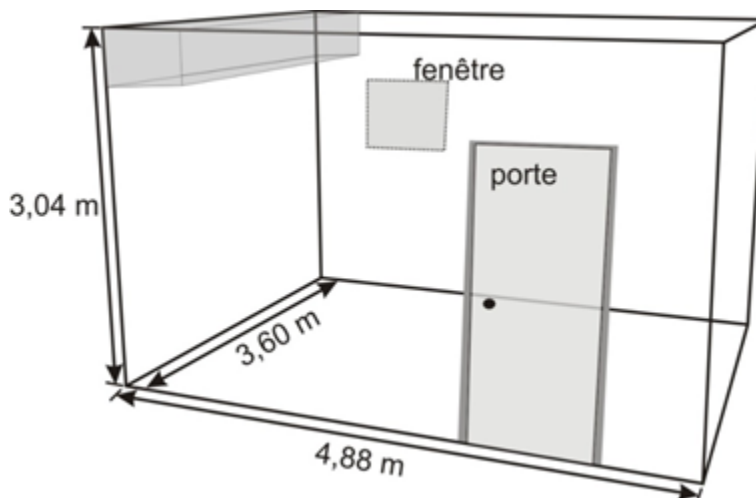


Figure 5. Représentation schématique de la pièce modèle.

Les tests d'évaporation et de déversement ont été réalisés à partir d'un verre de montre contenant 20 mL d'acétone disposé sur une balance analytique. La mesure gravimétrique de la perte de masse de 20 mL d'acétone a permis de déterminer les taux d'émission à décroissance exponentielle des contaminants dans l'air de la pièce selon la méthode de Keil et Nicas (2003) (voir méthodologie, sous-section 4.1.1) et le taux d'émission constant en déterminant le temps nécessaire à l'évaporation de 75 % de la masse initiale du solvant. Les tests de nettoyage ont été effectués avec la présence d'un opérateur qui simulait le nettoyage au chiffon d'une pièce d'aluminium. Environ 2 mL d'acétone ont été ajoutés (manuellement ou par pulvérisation), toutes les 10 minutes, pour un total de 20 mL par test. Les taux d'émission des tests avec application et pulvérisation manuelle n'ont pu être calculés par gravimétrie, mais des estimations ont été effectuées à partir de la quantité de solvants et de la durée des tests pour G et à partir des résultats des tests d'évaporation pour α .

Les débits de ventilation à l'entrée d'air ont été mesurés à l'aide d'un balomètre (TSI). Les vitesses d'air de la frontière virtuelle interzones ont été mesurées avec un anémomètre à fil chaud (VelociCalc 9545, TSI) à une distance d'environ 50 cm de la source dans deux directions opposées. Les tests ont été faits à température et pression relativement constantes (24 °C; 769 mmHg), avec une humidité relative moyenne de 40 %.

Les concentrations de vapeurs de solvants ont été mesurées à l'aide d'instruments à lecture directe (ILD) placés dans la zone rapprochée (30 cm de la source, NF) ou la zone éloignée (reste de la pièce, FF).

Pour la zone rapprochée, deux instruments à photo-ionisation (PID) (MiniRae, Rae Systems, Sunnyvale, CA) ont été utilisés pour mesurer les concentrations (figure 6).

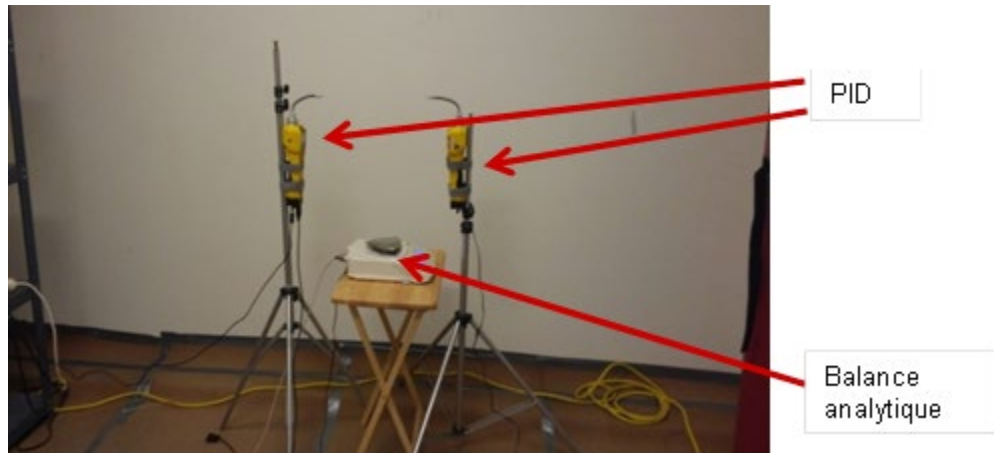


Figure 6. Mesure des concentrations d'exposition dans la zone rapprochée.

Pour la zone éloignée, deux chromatographes de type micro GC Varian (CP 2003 et CP 490), couplés à des détecteurs à conductivité thermique (*thermo conductivity detector*, TCD), ont été utilisés pour mesurer les concentrations à différentes distances de la source d'émission. Le premier point de mesure était situé à 1,2 m de la source, à proximité d'un mur de la pièce (figure 7), alors que le deuxième point était situé à 3 m de la source, à proximité de la bouche de sortie d'air (figure 8). Préalablement à l'étude, des calibrations et des mesures comparatives ont été effectuées avec les ILD afin de s'assurer de l'homogénéité de réponses des différents instruments.



Figure 8. Premier point de mesure pour la zone éloignée.

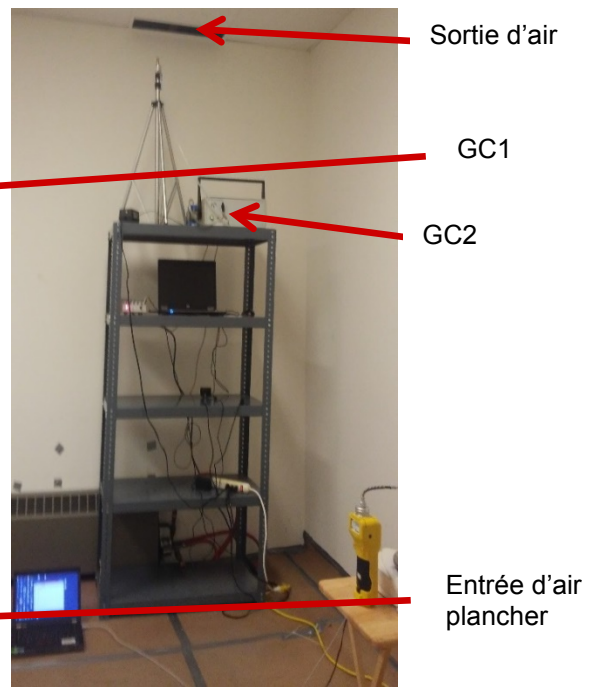


Figure 7. Deuxième point de mesure pour la zone éloignée.

Des comparaisons ont été effectuées à des concentrations de 200 ppm et de 1000 ppm. Les concentrations rapportées par la méthode GC à ces deux concentrations donnaient des concentrations supérieures de 7 % et 16 %, respectivement, par rapport aux concentrations indiquées par les méthodes par photo-ionisation.

4.2.2 Modélisation des concentrations par le modèle à deux compartiments avec émission à décroissance exponentielle ou à émission constante

Pour chaque essai, des modélisations des concentrations dans les zones rapprochée et éloignée ont été effectuées à l'aide du logiciel IHMOD. Les paramètres d'entrée des modèles étaient les masses initiales M_0 d'acétone soit 20 mL ou 15,8 g, les taux d'émission α (min^{-1}) ou les taux d'émission G (mg/min) calculés par les mesures gravimétriques ou estimés, le volume de la pièce ($53,4 \text{ m}^3$), la géométrie et le volume du NF, la vitesse d'air à la frontière interzones déterminée expérimentalement (S), et le débit de ventilation générale (Q) déterminé par la mesure du débit à l'entrée d'air. La géométrie de la zone rapprochée retenue dans cette étude est une demi-sphère.

4.2.3 Modélisation des concentrations en CFD

La modélisation des mouvements d'air et la dispersion du contaminant gazeux ont été effectuées à l'aide du logiciel Fire Dynamics Simulator (FDS, version 6.6). Le logiciel, développé par le National Institute of Standards and Technology (McGrattan *et al.*, 2017b), est basé sur la méthode de simulation des grandes échelles (*large eddy simulation*). Les équations de conservation résolues dans FDS incluent les équations de Navier-Stokes modifiées pour les écoulements à faible vitesse et thermiquement induits, couplées à une équation de transport d'un scalaire passif pour les contaminants gazeux. Cette équation de transport s'écrit (McGrattan *et al.*, 2017a):

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho Z)}_{\text{terme transitoire}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho Z \vec{U})}_{\text{convection}} = \underbrace{\nabla \cdot (\rho D \nabla Z)}_{\text{diffusion}} + \underbrace{\dot{m}'''}_{\text{ajout de masse}} \quad (11)$$

où Z représente la fraction massique du contaminant gazeux dans l'air exprimé en kg/kg d'air, \vec{U} est le vecteur vitesse de l'écoulement d'air et la masse volumique de l'air est représentée par ρ . Le coefficient de diffusion du contaminant (D) est la somme du coefficient de diffusion brownien et du coefficient de diffusion turbulent divisée par le nombre de Schmidt turbulent qui est fixé à 0,7 pour toutes les simulations. Le terme de droite \dot{m}''' est un terme source représentant l'ajout de masse dans le domaine de calcul à la suite de l'évaporation de gouttelettes. Toutefois ce terme n'est pas considéré dans les simulations numériques puisque l'évaporation du solvant se fait par l'intermédiaire d'une condition frontière.

La pièce, modélisée dans FDS, est représentée schématiquement à la figure 9. Les conditions aux frontières imposées dans le code numérique incluent la condition d'adhérence (vitesse d'écoulement nulle) sur toutes les parois solides des pièces. Notons que toutes les simulations ont été effectuées dans des conditions isothermes. Ainsi les murs, le plancher et le plafond sont considérés comme adiabatiques et la température de soufflage de l'air est supposée identique à celle de l'air dans la pièce. Cette approximation est justifiée par le fait que la différence de

température entre l'air de soufflage et l'air de la pièce était inférieure à 2 °C pour tous les essais expérimentaux.

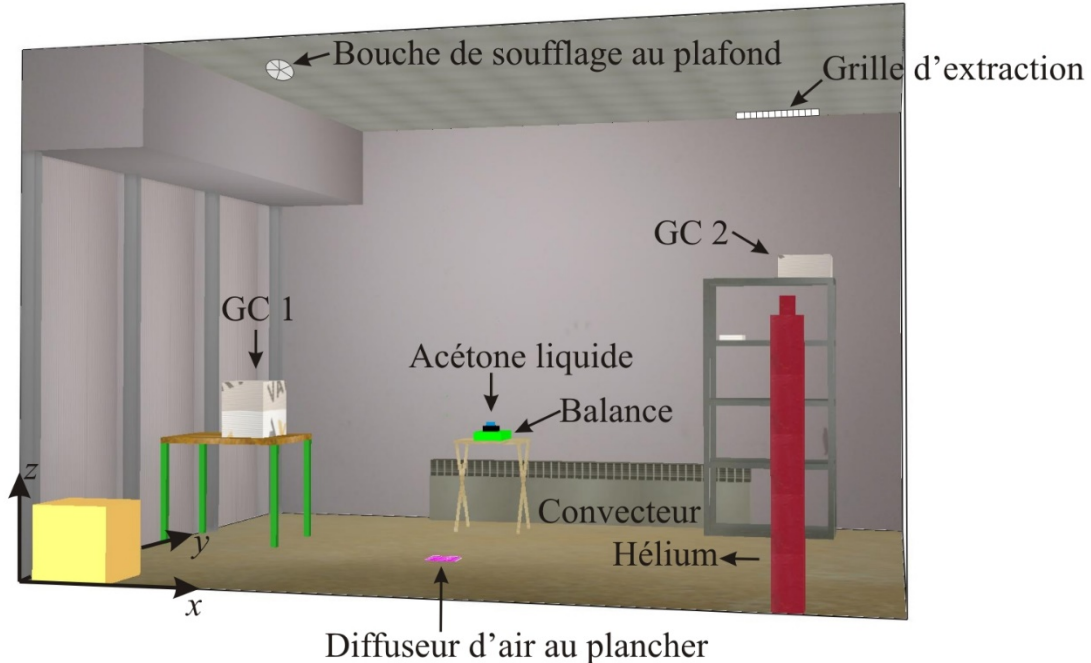


Figure 9. Pièce modèle.

L'évaporation du solvant est considérée dans le code numérique par l'intermédiaire d'une condition frontière à la surface du verre de montre, dans laquelle une masse prédéterminée de solvant exprimée en $\text{kg}/(\text{m}^2 \times \text{s})$ est injectée dans l'air ambiant. Ce flux massique d'évaporation fut déterminé expérimentalement pour chaque scénario testé à partir de la variation de masse du solvant en fonction du temps mesuré. Puisque le taux d'émission diminue avec le temps, un coefficient adimensionnel qui varie dans le temps ($0 \leq f(t) \leq 1,0$) multiplie le flux massique initial de façon à tenir compte de cette diminution.

Les simulations numériques ont été réalisées sur un poste de travail doté de 2 processeurs Xeon E5-2643 (Intel, CA, USA). Le temps de calcul nécessaire pour modéliser la dispersion d'acétone pendant une heure s'établit entre 40 et 60 heures selon le débit de soufflage considéré. Par conséquent, il est important de choisir une densité de mailles « optimale » afin d'obtenir des résultats d'une précision acceptable dans un délai de temps raisonnable. Cependant, il a été nécessaire de raffiner la densité du maillage des grilles de soufflage et du verre de montre de façon à les représenter dans l'espace le plus fidèlement possible. Les caractéristiques du maillage retenu pour les simulations sont présentées au tableau 1.

La figure 10 montre le maillage utilisé dans le plan vertical (y - z) pour la stratégie de ventilation par le plancher. On note sur cette figure que la densité de mailles est plus importante dans la partie inférieure de la pièce, car c'est dans cette région que les gradients de concentration et de vitesse sont les plus importants.

Tableau 1. Caractéristiques du maillage retenu pour les simulations

	Volume d'un élément en m ³ (minimum / maximum)	Nombre de nœuds dans le domaine de calcul
Pièce étudiée	8,0×10 ⁻⁶ / 6,4 ×10 ⁻⁵	1 384 094



Figure 10. Discrétisation spatiale dans le plan y-z (ventilation par le plancher).

4.2.4 Analyse des données

Pour l'ensemble des expérimentations dans la pièce à échelle humaine, des concentrations moyennes ont été calculées sur une période de temps correspondant à l'évaporation de 98 % de la masse de solvant à partir des données expérimentales de PID et des GC, mais aussi à partir des estimations fournies par le modèle à deux compartiments. Pour les scénarios d'application au chiffon et de pulvérisation, les temps de calcul correspondaient au temps de la dernière application auquel on ajoutait 10 minutes. Ces concentrations ont aussi été appelées concentrations C_{98} .

Le rayon de la zone rapprochée (demi-sphère) a été adapté pour obtenir des estimations des concentrations (C_{98}) le plus proche possible de la moyenne des deux concentrations mesurées dans la zone rapprochée pour chacun des tests. Cette étape a aussi permis de déterminer, en utilisant les vitesses d'air expérimentales, la valeur du coefficient β correspondante selon l'équation 1. Une feuille de calcul Excel a été développée sur la base du modèle à deux compartiments pour permettre à l'utilisateur de faire cette optimisation du rayon.

Des analyses statistiques ont été réalisées pour déterminer l'existence de différences significatives entre les concentrations proches et éloignées. Des analyses de variance et de régression linéaire multiple ont aussi été effectuées afin d'évaluer différentes variables des modèles. Le seuil de signification des tests a été fixé à 5 % et les analyses ont été effectuées à l'aide du logiciel SPSS.

5. RÉSULTATS

5.1 Volet I – Tests de laboratoire à petite échelle

5.1.1 Détermination expérimentale des taux d'émission α

Le tableau 2 présente les coefficients α calculés (moyenne des trois essais) pour les cinq solvants et pour les cinq volumes testés. Les coefficients les plus élevés ont été mesurés pour le n-hexane et les plus faibles pour le toluène. Les coefficients varient de $0,0032 \text{ min}^{-1}$ à $0,1553 \text{ min}^{-1}$. La figure 11 présente les mêmes concentrations en fonction des volumes de déversement. Les coefficients α diminuent lorsque les volumes augmentent, selon une décroissance exponentielle.

Tableau 2. Coefficients α (min^{-1}) mesurés avec verre de montre

	P_{vap} (mmHg)	Volume				
		1 mL	3 mL	6 mL	10 mL	20 mL
Acétone	185	0,1423	0,0681	0,0394	0,0256	0,0177
n-Hexane	124	0,1553	0,0746	0,0458	0,0327	0,0258
MEK	78	0,0656	0,0331	0,0203	0,0152	0,0099
2-Propanol	33	0,0303	0,0160	0,0094	0,0065	0,0041
Toluène	21	0,0267	0,0131	0,0080	0,0059	0,0032

La figure 12 présente les relations entre les valeurs des coefficients α et les tensions de vapeur pour les volumes de 3 mL et de 20 mL. Les deux corrélations sont significatives avec des coefficients de détermination de plus de 60 %. Les deux relations sont toutefois différentes avec une pente 4 fois plus grande pour les déversements de 3 mL.

La figure 13 illustre les coefficients α calculés avec et sans ventilation pour des volumes de déversement de 1 mL. Les vitesses en absence de ventilation étaient de 0,01 à 0,03 m/s alors que les vitesses avec ventilation étaient de 0,2 à 0,25 m/s. Les coefficients α étaient de 65 à 100 % plus élevés avec ventilation. La figure 14 présente les coefficients α calculés avec différentes vitesses d'air (0,05 à 2 m/s) pour des volumes de déversement d'acétone de 10 mL et de 20 mL. Une augmentation significative des coefficients α est obtenue faisant passer les coefficients de $0,02 \text{ min}^{-1}$ (0,05 m/s) à $0,13 \text{ min}^{-1}$ (2 m/s) pour les déversements de 20 mL.

La figure 15 présente les coefficients α pour l'acétone, calculés en fonction des volumes de déversement et selon le support utilisé soit le verre de montre ou la boîte de Petri. On note une bonne correspondance entre les coefficients, peu importe le support. Seuls les coefficients α calculés pour un déversement de 1 mL diffèrent.

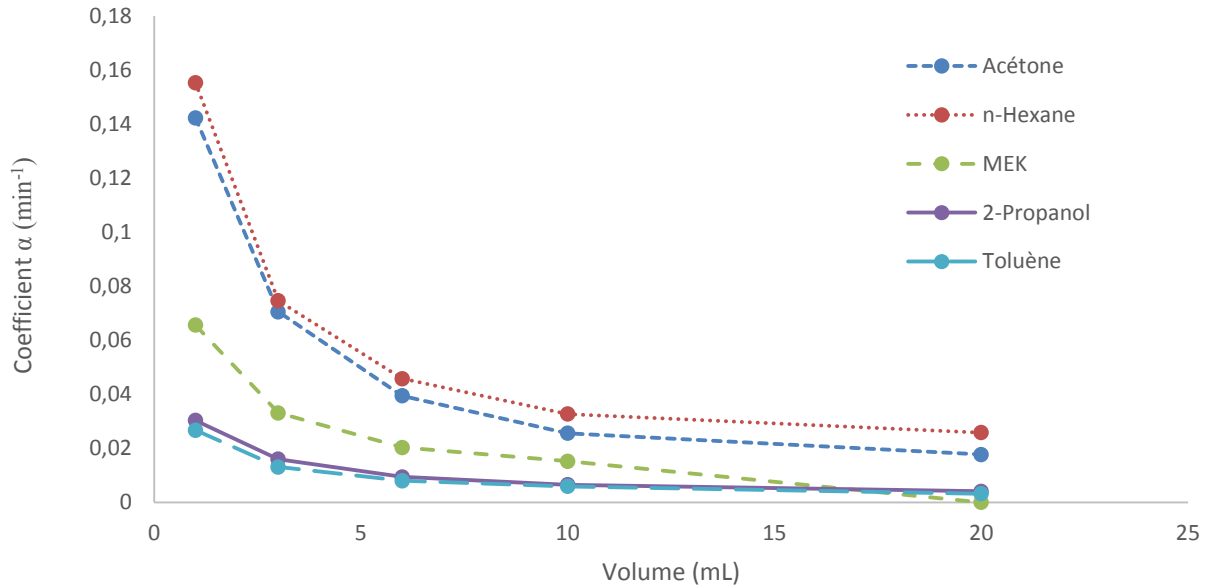


Figure 11. Coefficients α en fonction des volumes d'évaporation.

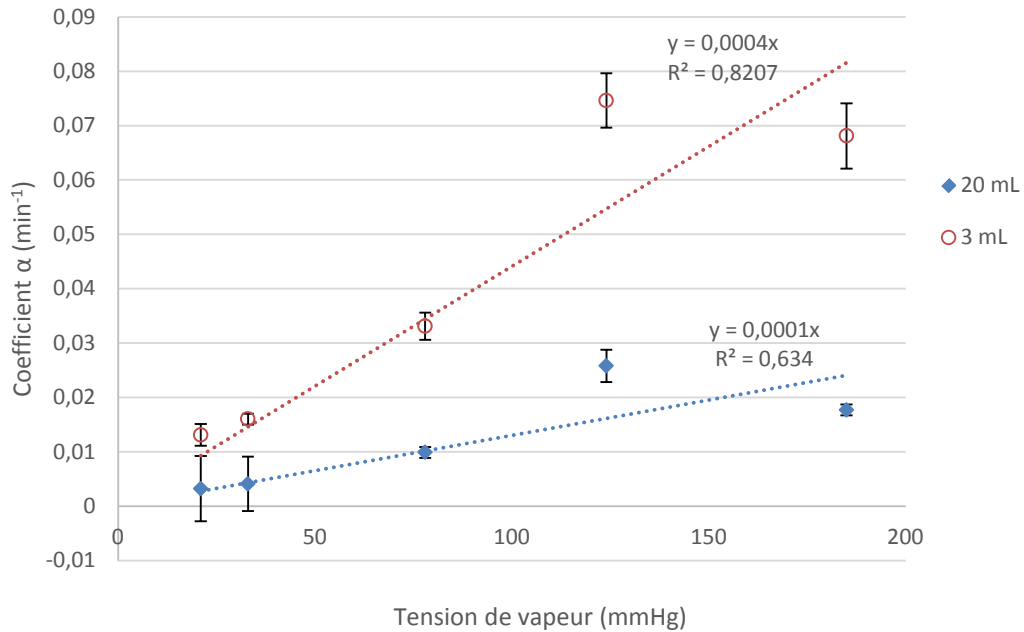


Figure 12. Moyennes des coefficients α et écarts types en fonction de la tension de vapeur des solvants pour des volumes de 3 mL et de 20 mL.

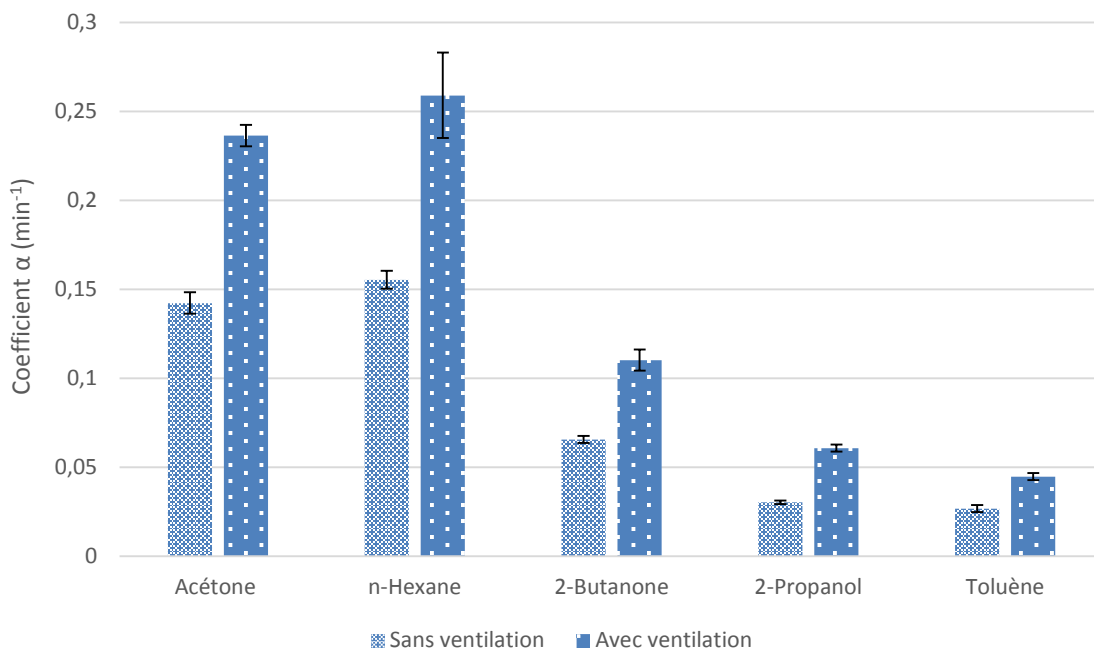


Figure 13. Moyennes des coefficients α et écarts types en fonction de la ventilation pour des volumes de 1 mL.

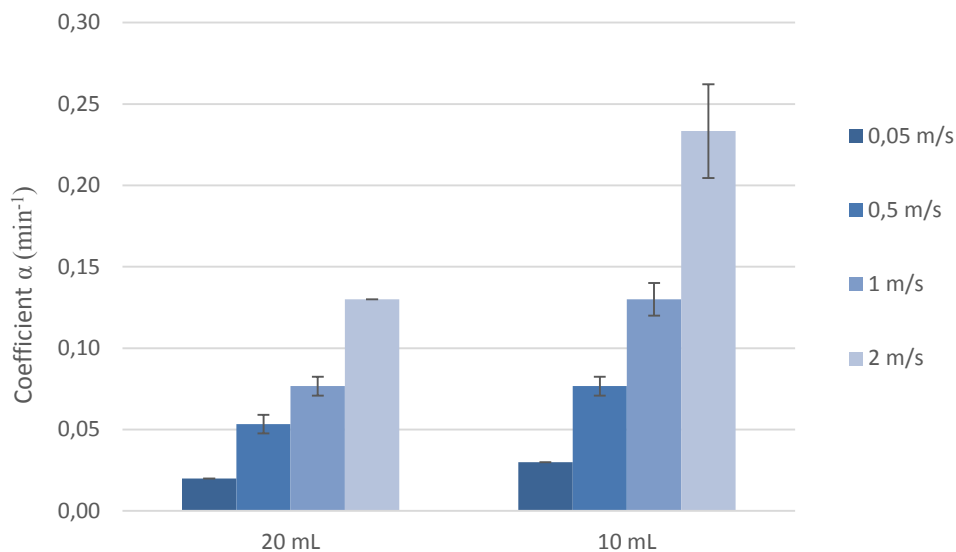


Figure 14. Moyennes des coefficients α et écarts types pour l'acétone en fonction des vitesses d'air au-dessus de la zone d'évaporation.

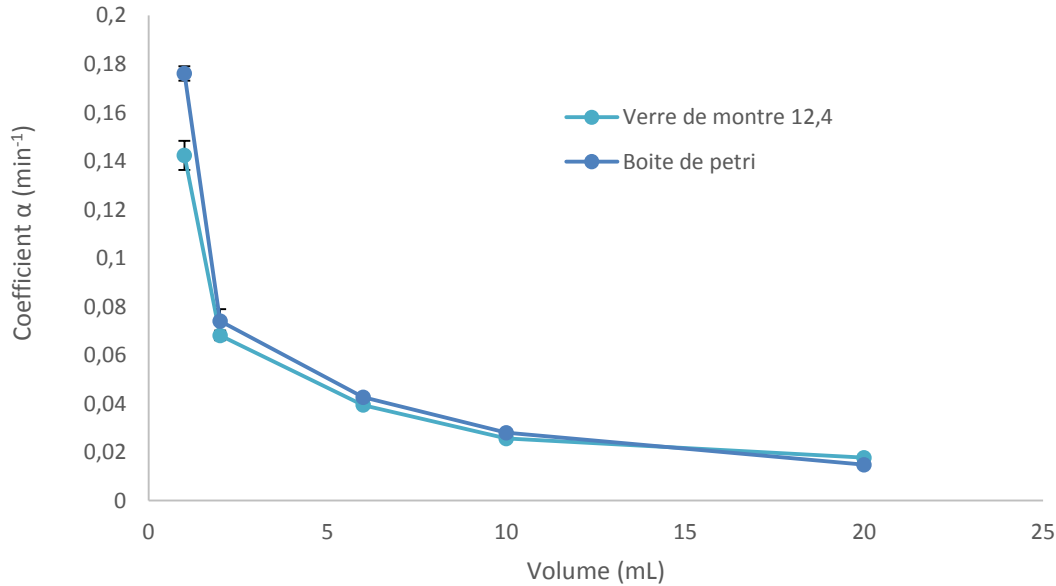


Figure 15. Moyenne des coefficients α et écarts types pour l'acétone en fonction du volume et du support.

Des analyses de régression pas à pas ont été effectuées à partir des données du tableau 2 avec les variables tension de vapeur et ratio surface/volume. La variable surface/volume a été utilisée par Keil et Nicas pour prédire les paramètres α .

L'équation 12 présente les paramètres de l'équation du modèle de régression en fonction de la variable tension de vapeur (P_{vap}). Le coefficient de détermination de ce modèle indique que 68 % de la variabilité des valeurs des coefficients α est expliquée par la tension de vapeur.

$$1000 \times \alpha = 0,387 \times P_{vap} \quad (12)$$

avec P_{vap} en mmHg.

L'équation 13 présente les paramètres de l'équation du modèle de régression en fonction des variables tension de vapeur (P_{vap}) et ratio surface/volume ($Surf/Vol$). Le coefficient de détermination multiple de cette relation indique que 75 % de la variabilité des valeurs des coefficients α est expliquée par les variables et que l'ajout de cette variable améliore significativement le modèle.

$$1000 \times \alpha = 0,188 \times P_{vap} + 3,861 \times \left(\frac{Surf}{Vol}\right) \quad (13)$$

avec α en min^{-1} , P_{vap} en mmHg, Surf en cm^2 , Vol en mL.

5.1.2 Mesures expérimentales des concentrations de vapeurs de solvants et comparaison avec les prédictions du modèle à un compartiment

Solvants purs

Les figures 16, 17, 18 et 19 montrent les profils de concentrations mesurées lors de tests à petite échelle ainsi que les profils de concentrations estimées par la modélisation avec le modèle à un compartiment avec émission à décroissance exponentielle. Dans les quatre tests, une bonne relation est constatée entre les deux profils temporels de concentration. Notons toutefois une sous-estimation des pics de concentration dans le cas du méthanol et du MEK (figures 17 et 19).

Les concentrations maximales atteintes durant les tests variaient entre 1400 et 2600 ppm. Les 4 pics de concentration de vapeurs de solvants mesurés (T_{max} correspondant indiqué entre parenthèses) étaient respectivement de 2527 ppm (34 min), de 2122 ppm (13 min), de 1554 ppm (20 min), de 1622 ppm (21 min) pour les solvants toluène, méthanol, acétone et MEK. Les pics correspondants estimés par le modèle à un compartiment étaient respectivement de 2383 ppm (28 min), de 1430 ppm (12 min), de 1550 ppm (12 min) et de 1153 ppm (16 min).

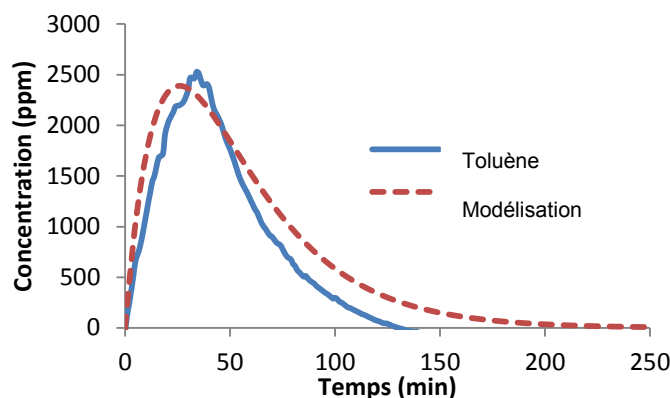


Figure 16. Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation de 0,5 mL de toluène.

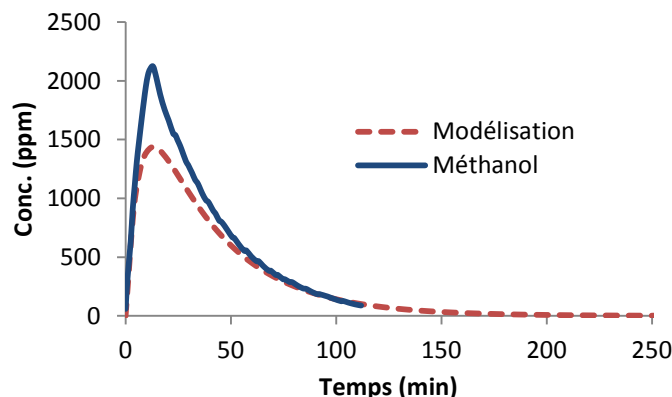


Figure 17. Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation de 0,3 mL de méthanol.

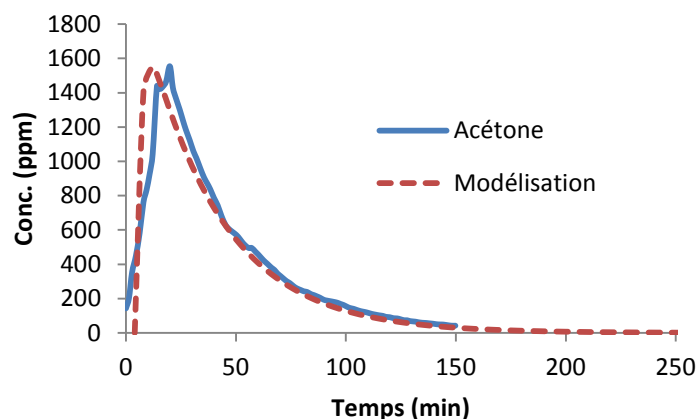


Figure 18. Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation de 0,5 mL d'acétone.

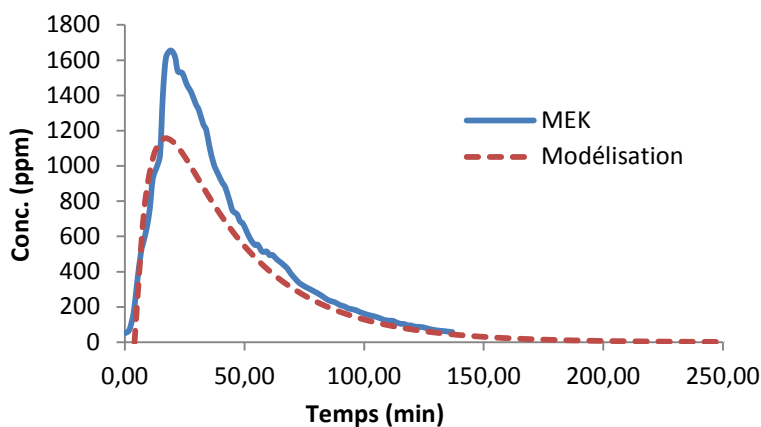


Figure 19. Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation de 0,5 mL de MEK.

Mélanges aqueux

MEK

La figure 20 illustre les profils de concentrations mesurées de MEK ainsi que les profils de concentrations estimées par la modélisation du modèle à un compartiment avec émission à décroissance exponentielle en considérant un taux d'émission corrigé par le coefficient d'activité et un taux d'émission non corrigé. Des coefficients d'activité de 8,5, de 10 et de 20 ont été respectivement utilisés pour les modélisations des mélanges à 10 %, à 5% et à 1 %.

Les concentrations modélisées avec la correction par les coefficients d'activité étaient plus proches des mesures expérimentales que celles non corrigées. Les concentrations maximales mesurées (T_{max}) étaient de 1209 ppm (20 min), de 1076 ppm (18 min) et de 676 ppm (47 min). Les concentrations estimées par la modélisation tenant compte de la correction étaient de 1012 ppm (11 min), de 879 ppm (20 min) et de 587 ppm (32 min), respectivement, pour les mélanges à 10 %, à 5 % et à 1 %. Les concentrations estimées par la modélisation ne tenant

pas compte de la correction étaient de 415 ppm (44 min), de 264 ppm (56 min) et 73 ppm (105 min), respectivement, pour les mélanges à 10 %, à 5 % et à 1 %.

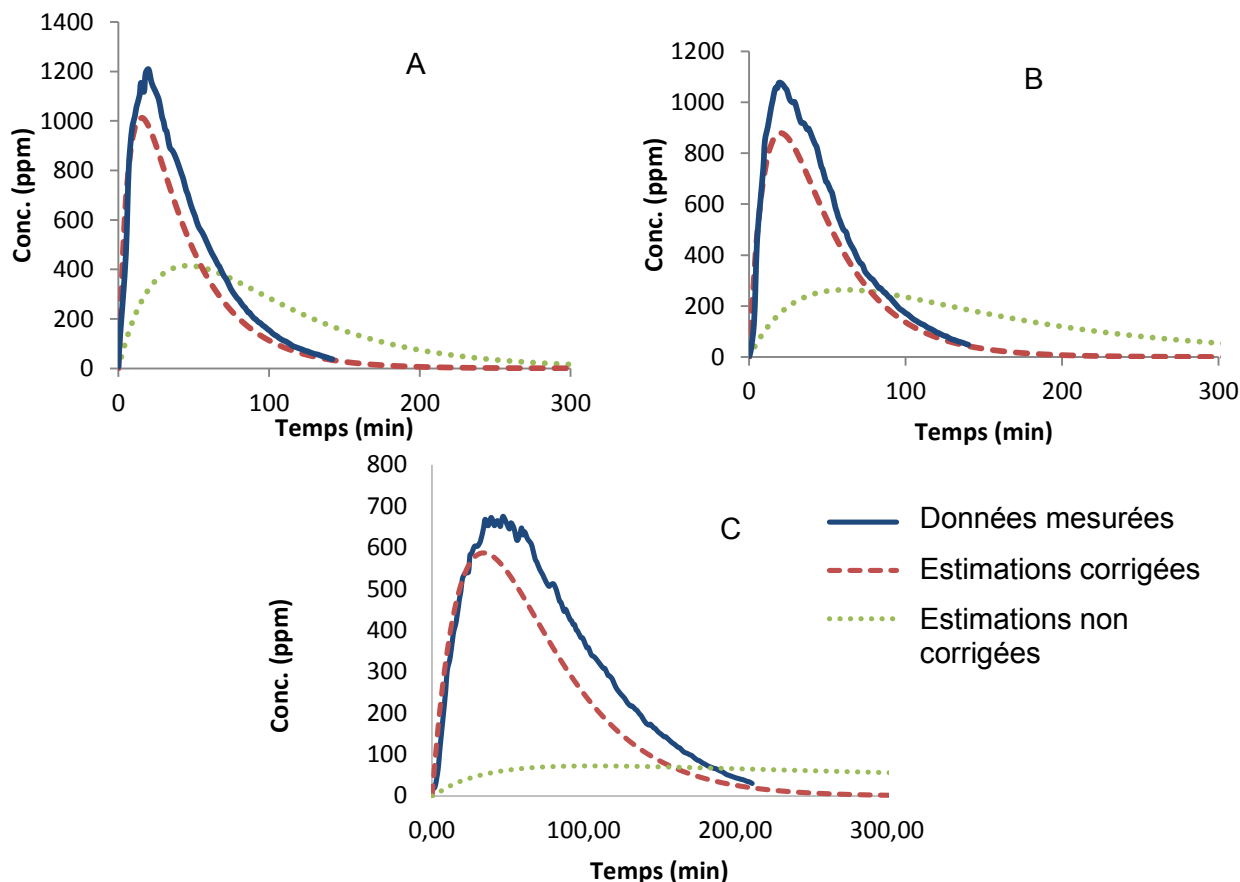


Figure 20. Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation du mélange aqueux de MEK à 10 % (A), à 5 % (B) et à 1 % (C).

Isopropanol (IPA)

La figure 21 montre les profils de concentrations de IPA ainsi que les profils de concentrations estimées par la modélisation du modèle à un compartiment avec émission à décroissance exponentielle en considérant un taux d'émission corrigé par le coefficient d'activité et un taux d'émission non corrigé. Des coefficients d'activité de 7,2, de 9,4 et de 20 ont été respectivement utilisés pour les modélisations des mélanges à 10 %, à 5 % et à 1 %.

Les concentrations modélisées avec la correction par les coefficients d'activité étaient plus proches des mesures expérimentales que celles non corrigées. Les concentrations maximales mesurées (T_{max}) étaient de 832 ppm (44 min), de 602 ppm (61 min) et de 311 ppm (67 min). Les concentrations estimées par la modélisation tenant compte de la correction étaient de 697 ppm (24 min), de 543 ppm (52 min) et de 274 ppm (66 min), respectivement, pour les mélanges à 10 %, à 5 % et à 1 %. Les concentrations estimées par la modélisation ne tenant pas compte de la correction étaient de 194 ppm (80 min), de 105 ppm (96 min) et de 26 ppm (160 min), respectivement, pour les mélanges à 10 %, à 5 % et à 1 %.

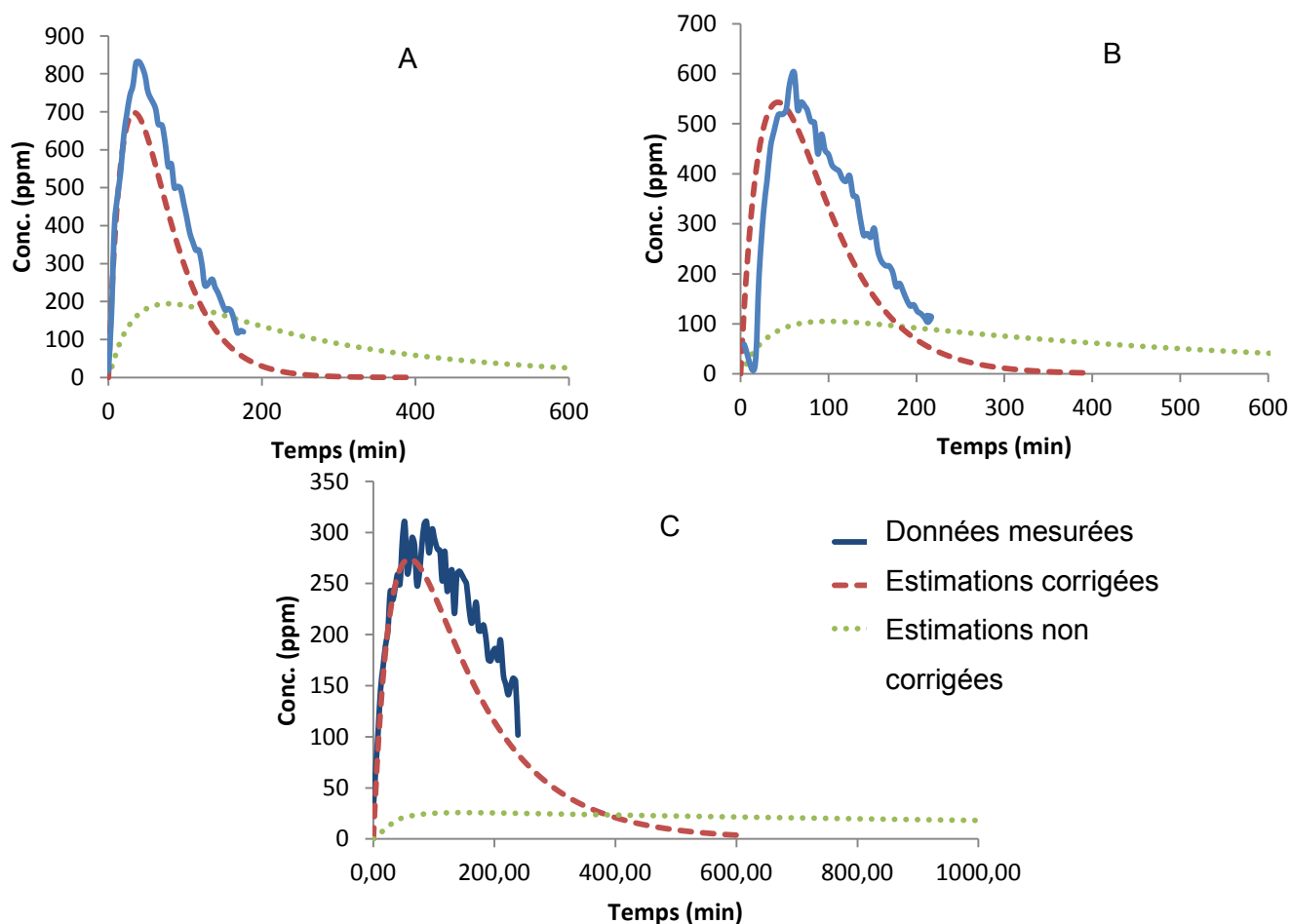


Figure 21. Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation du mélange aqueux de IPA à 10 % (A), à 5 % (B) et à 1 % (C).

Méthanol

La figure 22 représente les profils de concentrations de méthanol ainsi que les profils de concentrations estimées par la modélisation du modèle à un compartiment avec émission à décroissance exponentielle en considérant un taux d'émission corrigé par le coefficient d'activité et un taux d'émission non corrigé. Des coefficients d'activité de 1,7, de 1,9 et de 2,2 ont été respectivement utilisés pour les modélisations des mélanges à 10 %, à 5 % et à 1 %.

Les concentrations modélisées avec la correction par les coefficients d'activité étaient plus proches des mesures expérimentales que celles non corrigées. Les concentrations maximales mesurées (T_{max}) étaient de 811 ppm (34 min), de 618 ppm (44 min) et de 250 ppm (52 min). Les concentrations estimées par la modélisation tenant compte de la correction étaient de 806 ppm (32 min), de 615 ppm (44 min) et de 234 ppm (65 min), respectivement, pour les mélanges à 10 %, à 5 % et à 1 %. Les concentrations estimées par la modélisation ne tenant pas compte de la correction étaient de 612 ppm (40 min), de 413 ppm (56 min) et de 125 ppm (88 min), respectivement, pour les mélanges à 10 %, à 5 % et à 1 %.

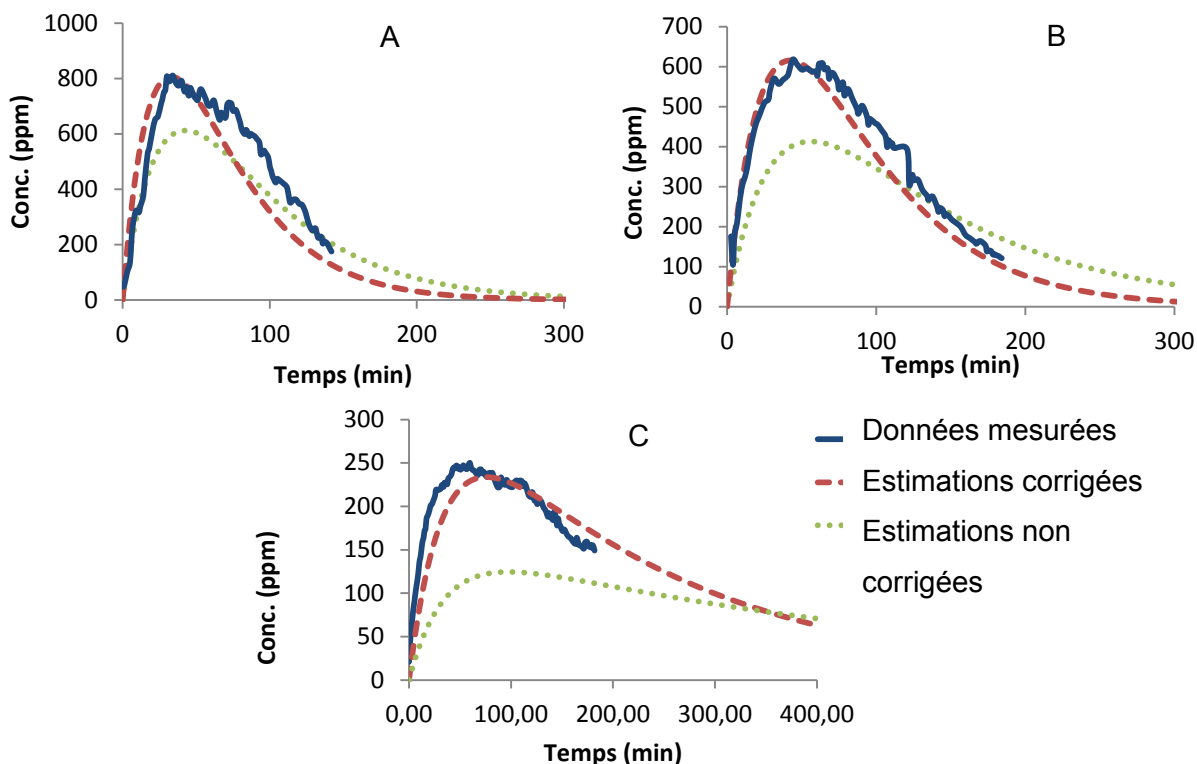


Figure 22. Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation du mélange aqueux de méthanol à 10 % (A), à 5 % (B) et à 1 % (C).

Acétone

La figure 23 présente les profils de concentrations d'acétone ainsi que les profils de concentrations estimées par la modélisation du modèle à un compartiment avec émission à décroissance exponentielle en considérant un taux d'émission corrigé par le coefficient d'activité et un taux d'émission non corrigé. Des coefficients d'activité de 5, de 7,2 et de 10,3 ont été respectivement utilisés pour les modélisations des mélanges à 10 %, à 5 % et à 1 %.

Les concentrations modélisées avec la correction par les coefficients d'activité étaient plus proches des mesures expérimentales que celles non corrigées. Les concentrations maximales mesurées (T_{max}) étaient de 1126 ppm (20 min), de 1011 ppm (24 min) et de 760 ppm (40 min). Les concentrations estimées par la modélisation tenant compte de la correction étaient de 1355 ppm (4 min), de 1311 ppm (8 min) et de 891 ppm (20 min), respectivement, pour les mélanges à 10 %, à 5 % et à 1 %. Les concentrations estimées par la modélisation ne tenant pas compte de la correction étaient de 846 ppm (28 min), de 619 ppm (33 min) et de 219 ppm (72 min), respectivement, pour les mélanges à 10 %, à 5 % et à 1 %.

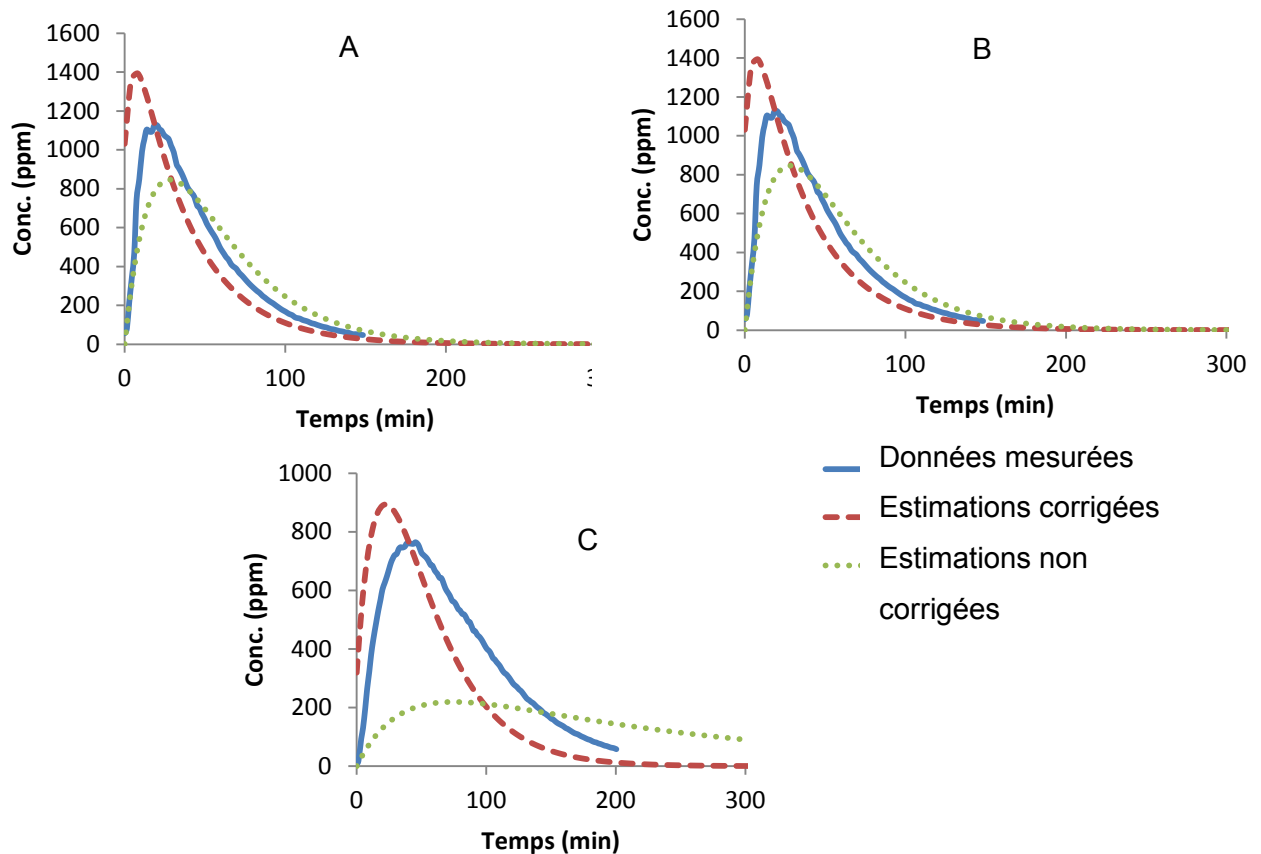


Figure 23. Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation du mélange aqueux d'acétone à 10 % (A), à 5 % (B) et à 1 % (C).

Mélange binaire de MEK et de toluène

La figure 24 présente les concentrations de chacun des solvants évaluées simultanément. Il s'agit d'un mélange idéal donc les deux coefficients d'activité correspondants sont de 1.

Les concentrations maximales atteintes durant les tests varient entre 500 et 1200 ppm. Les pics de concentration de vapeurs de solvants mesurés (T_{max}) étaient de 1122 ppm (19 min) et de 581 ppm (40 min) pour les solvants MEK et toluène. Les pics correspondants estimés par le modèle à un compartiment étaient de 879 ppm (20 min) et de 459 ppm (36 min).

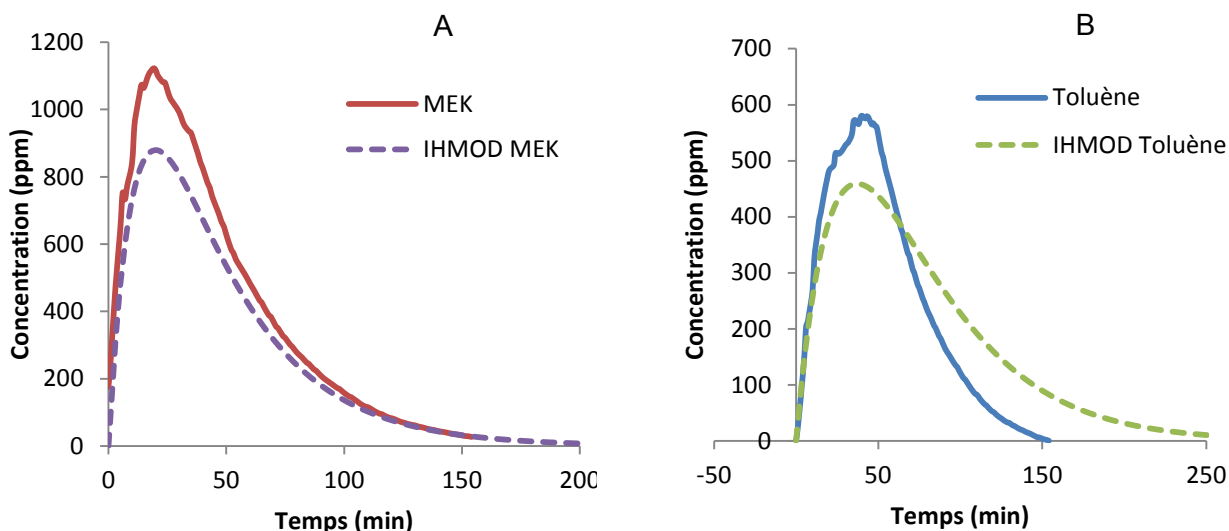


Figure 24. Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation du mélange de MEK (A) et de toluène (B).

Mélange tertiaire de toluène, d'acétone et de IPA

La figure 25 représente les profils de concentrations des solvants ainsi que les profils de concentrations estimées par la modélisation du modèle à un compartiment avec émission à décroissance exponentielle en considérant un taux d'émission corrigé par le coefficient d'activité et un taux d'émission non corrigé. Des coefficients d'activité de 1,78, de 1,46 et de 1,1 ont été respectivement utilisés pour corriger la pression partielle et pour effectuer les modélisations des solvants IPA, toluène et acétone.

Les fractions molaires du mélange tertiaire étaient de 22 % de IPA, de 32 % de toluène et de 46 % d'acétone.

Les concentrations modélisées avec la correction par les coefficients d'activité étaient plus proches des mesures expérimentales que celles non corrigées. Les concentrations maximales mesurées (T_{max}) étaient respectivement de 902 ppm (63 min), de 1425 ppm (62 min) et 1918 ppm (27 min) pour les solvants IPA, toluène et acétone. Les concentrations estimées par la modélisation tenant compte de la correction étaient respectivement de 548 ppm (36 min), de 645 ppm (56 min) et de 1764 ppm (16 min). Les concentrations estimées par la modélisation ne tenant pas compte de la correction étaient respectivement de 466 ppm (36 min), de 442 ppm (56 min) et de 1425 ppm (28 min). Notons que le profil du toluène est particulier et ne suit pas une courbe classique de décroissance exponentielle.

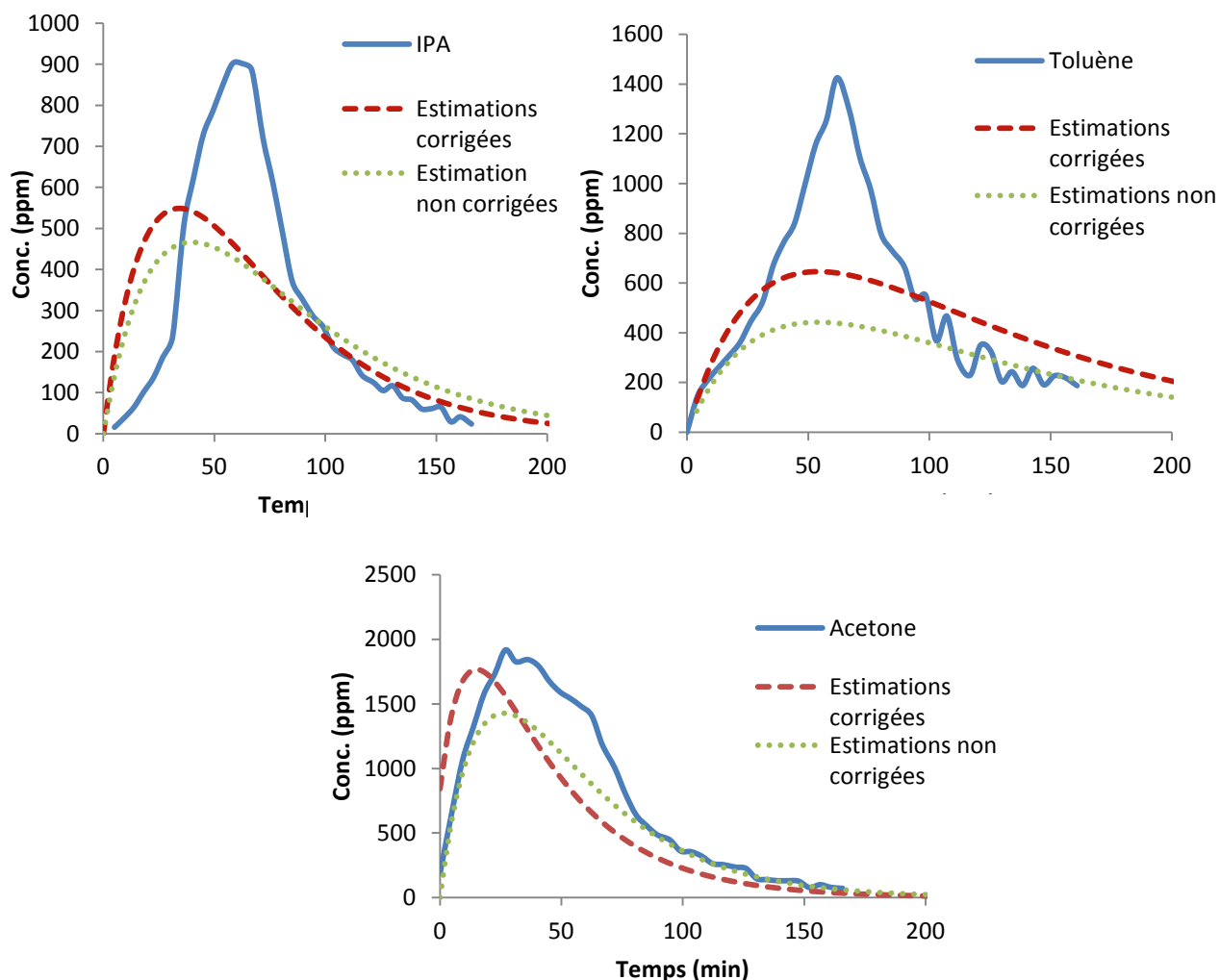


Figure 25. Profils de concentrations expérimentales et modélisées lors de l'évaporation du mélange de IPA, de toluène et d'acétone.

Résumé des résultats

Le tableau 3 est un résumé des résultats des tests d'évaporation à petite échelle ainsi que les pourcentages de concordance entre les concentrations expérimentales et les concentrations modélisées. Les temps T_{\max} sont aussi présentés pour chaque test avec les délais entre le temps du pic de concentration mesuré et celui estimé par le modèle. Pour les solvants purs, les quatre modélisations présentent une bonne concordance avec des estimations qui ne diffèrent pas d'un facteur de plus de 2 (entre 50 % et 200 %) avec un délai maximal de 8 minutes entre la concentration maximale mesurée et la simulation pour l'acétone. Pour les mélanges aqueux, toutes les simulations corrigées (en prenant en compte les coefficients d'activité) estiment adéquatement les concentrations (dans un facteur de 2) alors que les estimations non corrigées n'estiment adéquatement les concentrations que dans 5 cas sur 15. Les T_{\max} diffèrent d'un maximum de 20 minutes lorsque les estimations sont corrigées alors que des délais de plus de 30 minutes ont été observés dans 5 des 15 tests effectués allant jusqu'à 93 minutes pour le test avec mélange aqueux IPA à 1 %.

Tableau 3. Résumé des tests d'évaporation à petite échelle

Solvant	Expérimentale		Modélisation non corrigée			Modélisation corrigée		
	C_{\max}	T_{\max}	C_{\max}	T_{\max}	Concordance	C_{\max}	T_{\max}	Concordance
	ppm	min	ppm	min	% (min)	ppm	min	% (min)
Toluène	2527	34	2383	28	94 (-6)	-	-	-
Méthanol	2122	13	1430	12	67 (-1)	-	-	-
Acétone	1554	20	1550	12	100 (-8)	-	-	-
MEK	1622	21	1153	16	71 (-5)	-	-	-
MEK- (H2O 10%)	1209	20	415	44	34 (+24)	1012	11	84 (-9)
MEK- (H2O 5%)	1076	18	264	56	25 (+28)	879	20	82 (+2)
MEK- (H2O 1%)	676	47	73	105	16 (+58)	587	32	87 (-15)
IPA- (H2O 10%)	832	44	194	80	23 (+36)	697	24	84 (-20)
IPA- (H2O 5%)	602	61	105	96	17 (+35)	543	52	90 (-9)
IPA- (H2O 1%)	311	67	26	160	8 (+93)	274	66	88 (-1)
Méthanol- (H2O 10%)	811	34	612	40	75 (+6)	806	32	99 (-2)
Méthanol- H2O 5%)	618	44	413	56	67 (+12)	615	44	99 (0)
Méthanol- H2O 1%)	250	52	125	88	50 (+36)	234	65	94 (+12)
Acétone- (H2O 10%)	1126	20	845	28	75 (+8)	1355	4	120 (-16)
Acétone- (H2O 5%)	1011	24	619	33	61 (+9)	1311	8	130 (-16)
Acétone- (H2O 1%)	760	40	219	72	29 (+32)	891	20	117 (-20)
MEK (toluène)	1122	19	879	20	78 (+1)	-	-	-
Toluène (MEK)	581	40	459	36	79 (-4)	-	-	-
IPA (toluène, acétone)	902	63	466	36	52 (-27))	548	36	61 (-27)
Toluène (IPA, acétone)	1425	62	442	56	31 (-6)	645	56	45 (-6)
Acétone (IPA, toluène)	1918	27	1425	28	74 (+1)	1764	16	92 (-11)

C_{\max} : concentration maximale de solvant (pic de concentration)

T_{\max} : temps nécessaire pour atteindre le pic de concentration

5.2 Volet II – Tests à échelle humaine dans différentes situations de travail

5.2.1 Résultats expérimentaux

Les figures 26, 27, 28 et 29 montrent des exemples de profils de concentrations de vapeurs d'acétone mesurées durant les différents tests à échelle humaine.

La figure 26 illustre plus spécifiquement les concentrations mesurées durant les tests d'évaporation d'acétone sur une table avec une ventilation par le haut de la pièce à bas débit (A), à haut débit (B) ou à très haut débit (C). Les concentrations de la zone éloignée sont plus faibles lorsque le débit de ventilation de la pièce augmente, avec des concentrations qui atteignent 200 mg/m³ à bas débit (A), 140 mg/m³ à haut débit (B) et 70 mg/m³ à très haut débit (C). Pour les concentrations dans la zone rapprochée, une variation marquée des concentrations est aussi notée en fonction des changements de débit de ventilation. Les concentrations oscillent entre 150 et 250 mg/m³ à bas débit (A), entre 100 et 200 mg/m³ à haut débit (B) et entre 80 et 140 mg/m³ à très haut débit (C). Les variations dans la zone rapprochée cessent après 1 h 30 à 1 h 45 du début du test pour les trois débits étudiés.

La figure 27 présente plus spécifiquement les concentrations mesurées durant les tests de déversement d'acétone au sol avec une ventilation par le haut de la pièce à bas débit (A), à haut débit (B) ou à très haut débit (C). Les concentrations de la zone éloignée sont plus faibles lorsque le débit de ventilation de la pièce augmente, avec des concentrations qui atteignent 170 mg/m³ à bas débit (A), 125 mg/m³ à haut débit (B) et 80 mg/m³ à très haut débit (C). Pour les concentrations dans la zone rapprochée, une variation marquée des concentrations est aussi notée en fonction des changements de débit de ventilation. Les concentrations oscillent entre 150 et 300 mg/m³ à bas débit (A), entre 70 et 125 mg/m³ à haut débit (B) et entre 50 et 60 mg/m³ à très haut débit (C). Notons qu'à très haut débit, les concentrations de la zone éloignée sont plus élevées que celles de la zone rapprochée. On constate également que les variations dans la zone rapprochée cessent après 1 h 30 à 1 h 45 du début du test pour les trois débits étudiés.

La figure 28 montre plus spécifiquement les concentrations mesurées durant les tests d'application d'acétone au chiffon suivie d'un nettoyage manuel d'une pièce d'aluminium sur une table avec une ventilation par le haut de la pièce à bas débit (A), à haut débit (B) ou à très haut débit (C). Les concentrations de la zone éloignée sont plus faibles lorsque le débit de ventilation de la pièce augmente, avec des concentrations qui atteignent 200 mg/m³ à bas débit (A), 100 mg/m³ à haut débit (B) et 80 mg/m³ à très haut débit (C). Pour les concentrations dans la zone rapprochée, de grands pics de concentration sont observés dans les premiers instants de la pulvérisation et du nettoyage, les pics semblent de même intensité indépendamment du débit de ventilation utilisé. Notons qu'à bas débit et en dehors des pics en lien avec la pulvérisation, les concentrations de la zone éloignée sont plus élevées que celles de la zone rapprochée.

La figure 29 montre plus spécifiquement les concentrations mesurées durant les tests de pulvérisation d'acétone suivie d'un nettoyage manuel d'une pièce d'aluminium sur une table avec une ventilation par le haut de la pièce à bas débit (A) ou à très haut débit (C). Les résultats sont très similaires à ceux de la figure 28, obtenus sans pulvérisation. L'intensité des pics semble toutefois être légèrement plus constante en comparaison de ceux de la figure 28. Les

concentrations de la zone éloignée sont plus faibles lorsque le débit de ventilation de la pièce augmente avec des concentrations qui atteignent 200 mg/m³ à bas débit (A) et 80 mg/m³ à très haut débit (C). Pour les concentrations dans la zone rapprochée, de grands pics de concentration sont observés dans les premiers instants de la pulvérisation et du nettoyage, les pics semblent de même intensité indépendamment du débit de ventilation utilisé. Notons qu'à bas débit et en dehors des pics en lien avec la pulvérisation, les concentrations de la zone éloignée sont plus élevées que celles de la zone rapprochée.

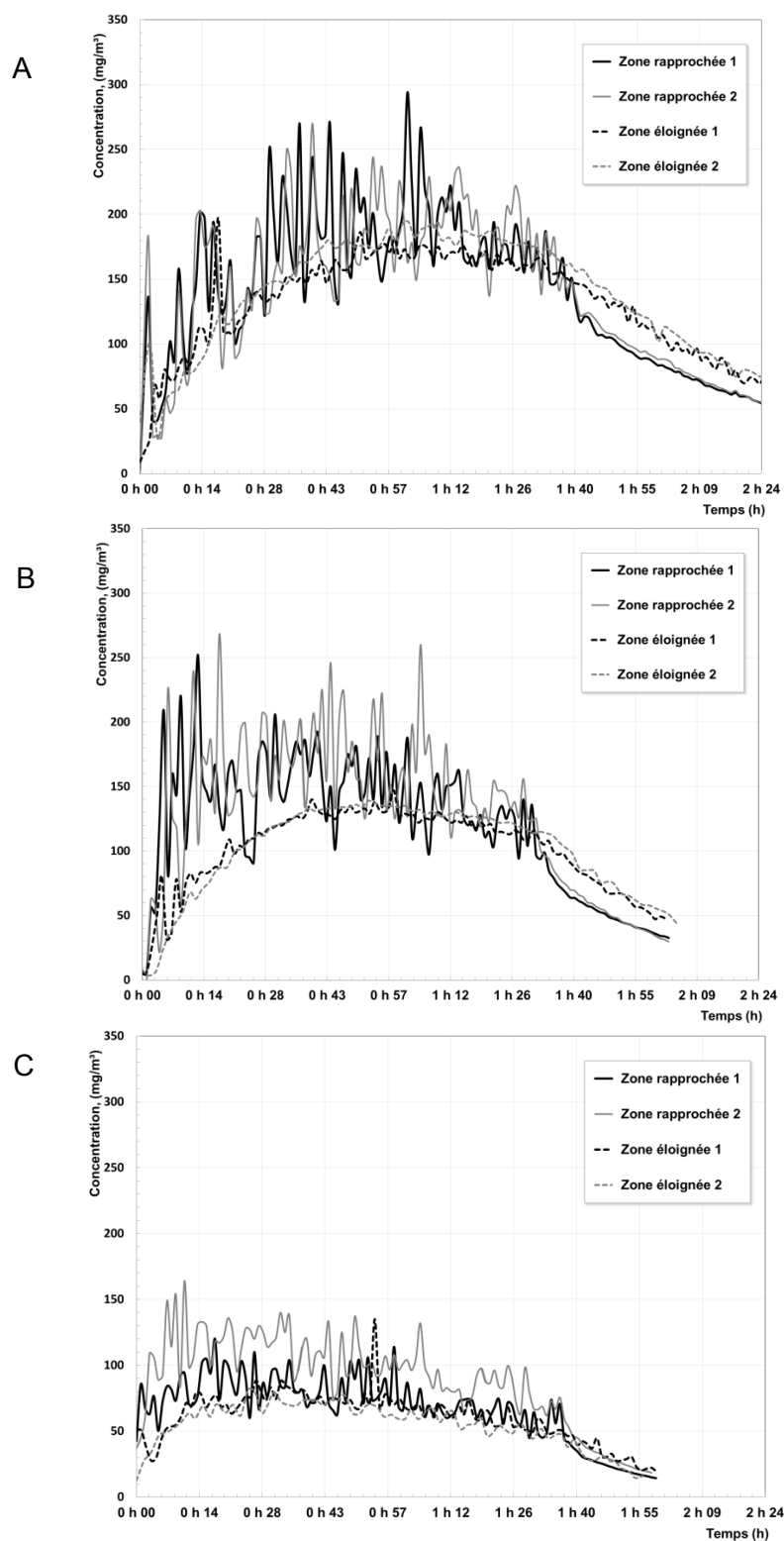


Figure 26. Exemples de profils de concentrations mesurées durant les tests d'évaporation à bas (A), à haut (B) et à très haut (C) débits de ventilation.

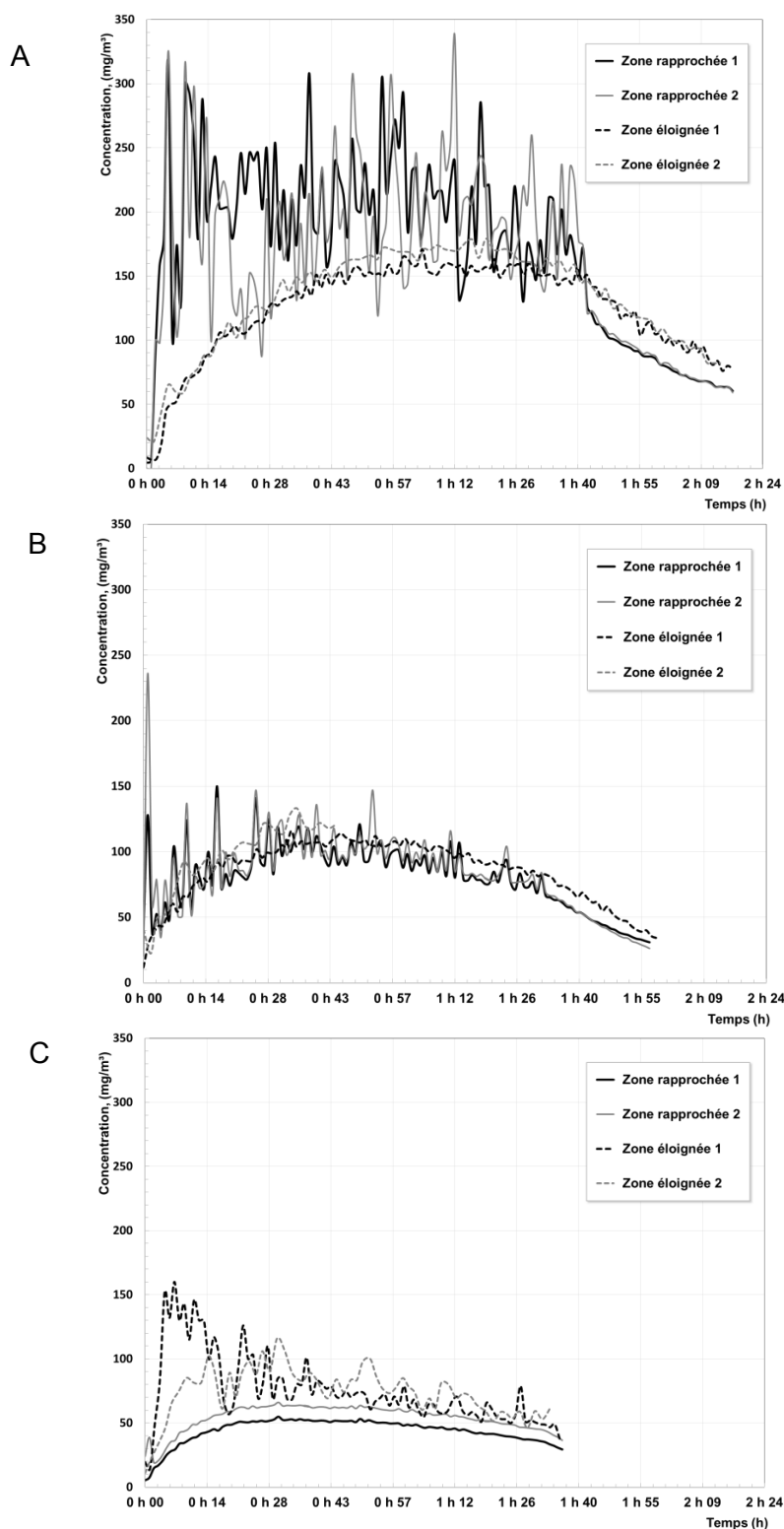


Figure 27. Exemples de profils de concentrations durant les tests de déversement à bas (A), à haut (B) et à très haut (C) débits de ventilation.

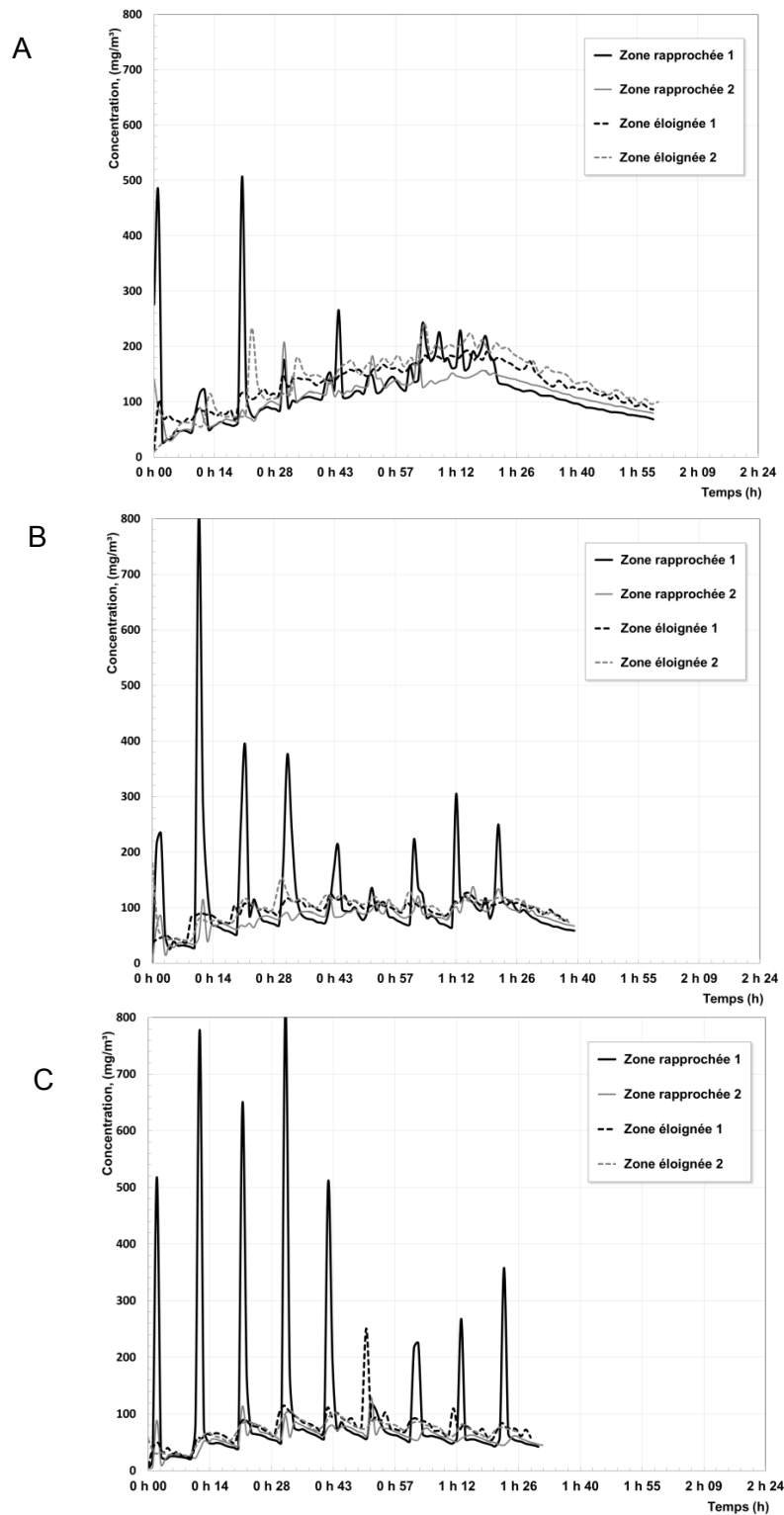


Figure 28. Exemples de profils de concentrations durant les tests d'application au chiffon suivie de nettoyage manuel à bas (A), à haut (B) et à très haut (C) débits de ventilation.

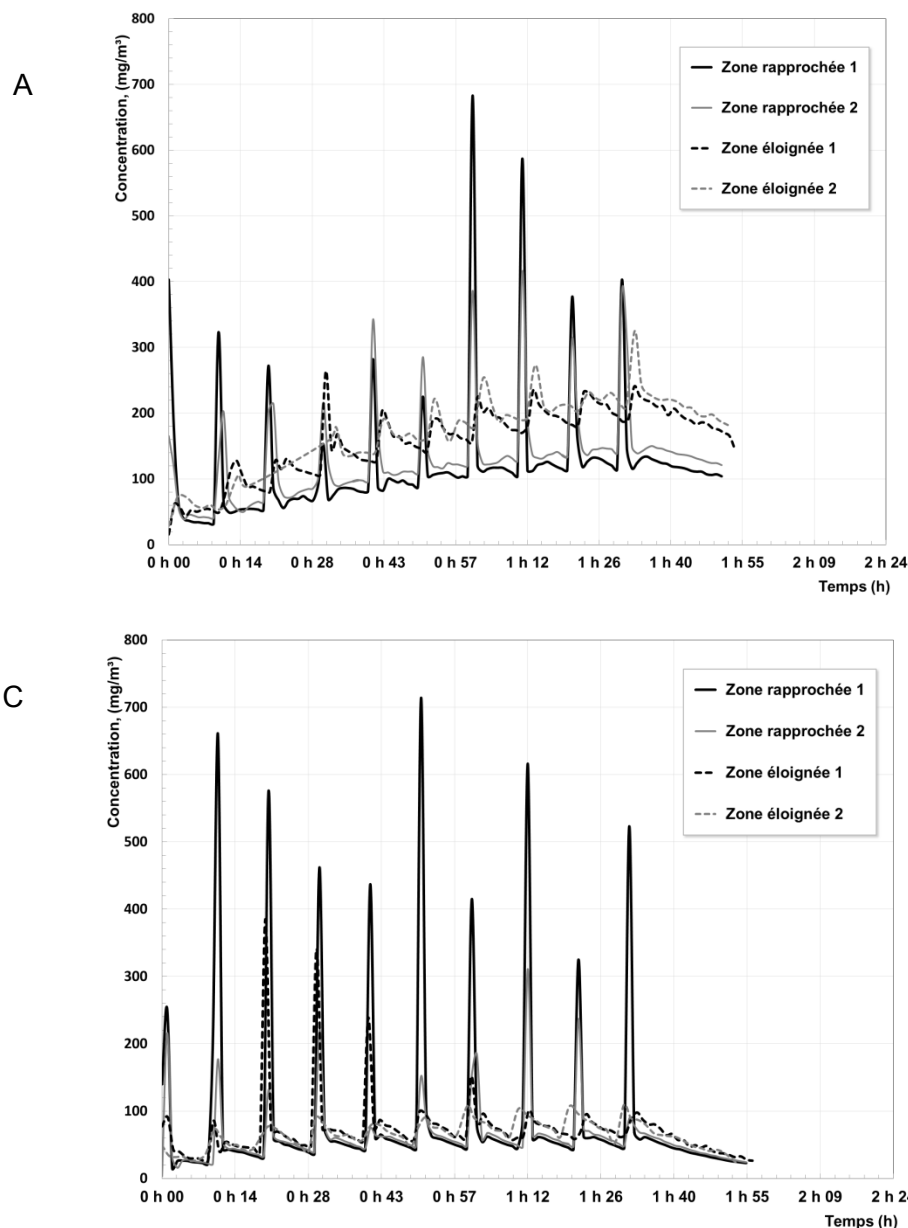


Figure 29. Exemples de profils de concentrations durant les tests de pulvérisation d'acétone suivie de nettoyage manuel à bas (A) et à très haut (C) débits de ventilation.

La figure 30 illustre différents tests effectués dans les mêmes conditions de débit de ventilation (bas débit), mais avec une ventilation par le plancher (colonne de gauche) ou par le plafond (colonne de droite). La figure 30A montre ainsi les deux situations obtenues lors des tests d'évaporation, la figure 30B lors des tests de déversement, la figure 30C lors des tests d'application de l'acétone au chiffon suivie d'un nettoyage manuel et la figure 30D lors des tests de pulvérisation d'acétone suivie d'un nettoyage manuel.

Les profils de concentrations sont assez semblables, mais il est possible de noter que les concentrations avec ventilation au plafond sont généralement plus basses et les pics de concentration moins élevés en comparaison des tests réalisés dans les mêmes conditions, mais avec ventilation au plancher.

Des différences plus marquées sont aussi constatées entre les mesures prises dans une même zone : proche ou éloignée. Par exemple, dans la figure 30B avec ventilation au plancher, les deux courbes de concentration dans la zone rapprochées se distinguent facilement.

Les tableaux 4 et 5 montrent les concentrations moyennes (C_{98}) mesurées durant l'évaporation de l'acétone dans la zone rapprochée et la zone éloignée, respectivement. Notons, comme observé dans les figures 26 à 30, l'effet d'une augmentation du débit de ventilation sur les concentrations, ainsi que les différences entre les concentrations des deux zones. Pour les tests d'évaporation ou de déversement, les concentrations dans la zone rapprochée sont significativement plus élevées que celles dans la zone éloignée ($p < 0,01$), alors que ce n'est pas le cas pour les tests d'application au chiffon ou de pulvérisation suivie de nettoyage manuel. Ainsi, les concentrations dans la zone rapprochée sont 23 % et 18 % plus élevées que celles dans la zone éloignée pour les procédés d'évaporation ou de déversement, respectivement. Au contraire, les concentrations dans la zone rapprochée sont 3 % et 13 % plus faibles que celles dans la zone éloignée pour les procédés d'application au chiffon ou de pulvérisation. À noter aussi que pour le scénario de déversement à très haut débit par le plafond, les concentrations dans la zone rapprochée sont inférieures à celles dans la zone éloignée, soit 49 mg/m³ par rapport à 70 mg/m³.

La comparaison des C_{98} mesurées par chacun des instruments dans chaque zone renseigne sur la symétrie des concentrations et l'homogénéité des zones. Des différences moyennes de 10 % [0,7 – 40 %] dans la zone éloignée et de 21 % [0,1 – 60 %] dans la zone rapprochée ont été calculées entre les deux points de mesure (GC1/GC2 et PID1/PID2 respectivement). Ces données sont le signe d'une bonne homogénéité dans chacune des zones.

Des analyses de variance (ANOVA) par le modèle de régression linéaire multiple ont été effectuées afin de déterminer les paramètres qui contribuent à expliquer significativement la variabilité des concentrations (C_{98}) dans les zones rapprochée et éloignée (valeurs log transformées). Les paramètres évalués étaient : *scénario* (évaporation, déversement, application au chiffon et nettoyage manuel, pulvérisation et nettoyage manuel), *débit d'air* (bas, haut et très haut) et *position de l'entrée d'air* (plancher et plafond).

Les paramètres ayant des effets significatifs sur les concentrations en zone rapprochée sont le *débit d'air*, la *position de l'entrée d'air* et le *scénario* ($p < 0,01$). Les paramètres ayant des effets significatifs sur les concentrations mesurées dans la zone éloignée sont le débit d'air et la *position de l'entrée d'air* ($p < 0,01$). Le *scénario* ne constitue donc pas une variable contribuant à améliorer significativement le modèle pour les concentrations dans la zone éloignée ($p = 0,18$).

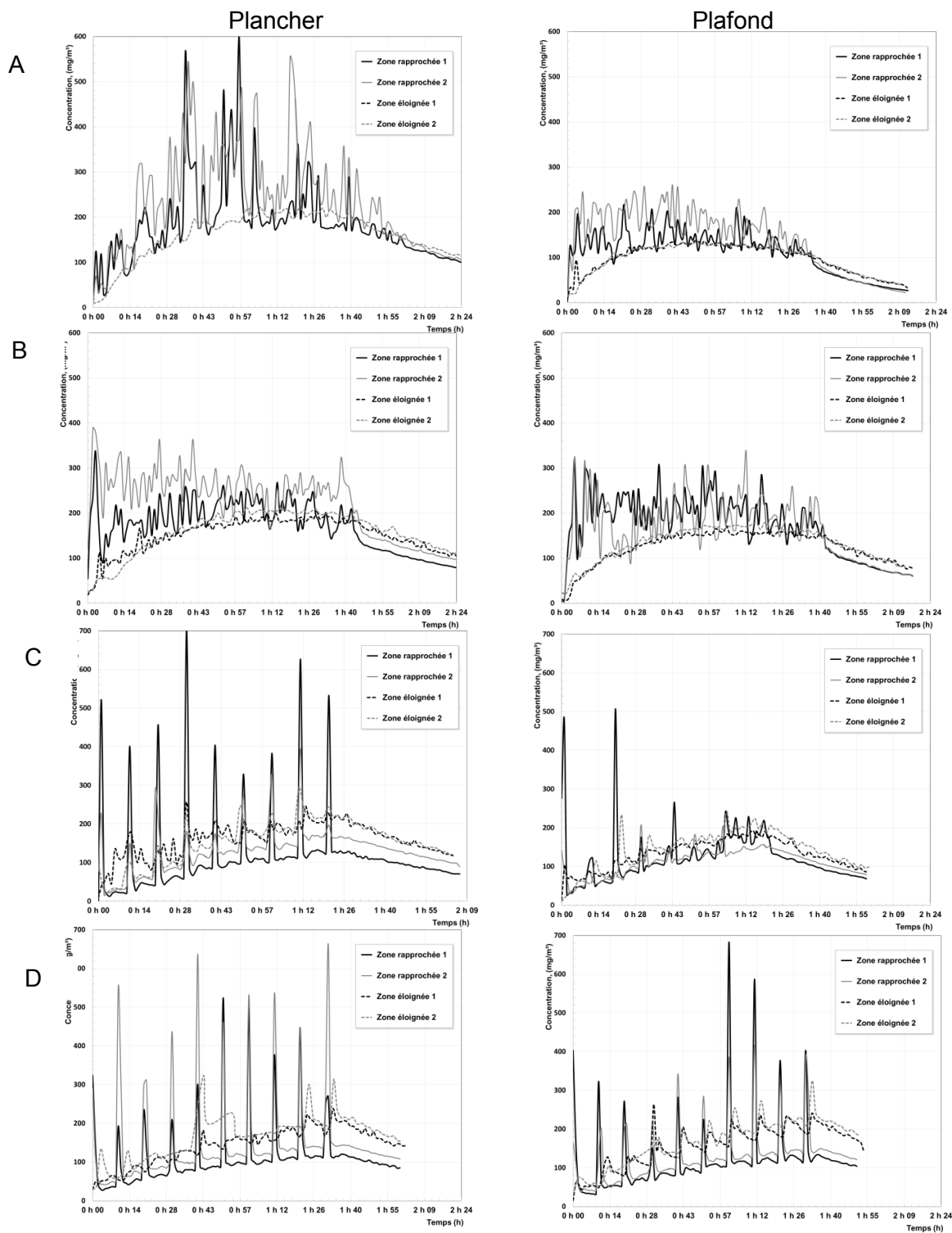


Figure 30. Exemples de profils de concentrations mesurées durant les tests d'évaporation (A), de déversement (B), de nettoyage (C) et de pulvérisation et de nettoyage (D) avec ventilation à bas débit au plancher (gauche) et au plafond (droite).

Tableau 4. Concentrations moyennes d'acétone (C_{98} , mg/m³) mesurées durant les tests à échelle humaine dans la zone rapprochée

Entrée d'air	Évaporation					Déversement					Application chiffon et nettoyage manuel					Pulvérisation et nettoyage manuel				
	Plancher		Plafond			Plancher		Plafond			Plancher		Plafond			Plancher		Plafond		
Débit de ventilation	B	H	B	H	TH	B	H	B	H	TH	B	H	B	H	TH	B	H	B	H	TH
Concentration moyenne par essai	261	97	197	156	100	262	181	175	91	55	131	110	114	84	59	154	105	137	-	66
	202	93	173	143	81	198	151	122	88	44	125	100	121	115	101	115	90	112	-	96
	234	111	216	177	101	228	182	189	79	57	125	146	114	96	56	119	87	92	-	72
	179	111	164	137	76	153	159	183	76	46	117	112	131	148	93	116	93	82	-	79
	249	103	165	153	103	259	142	188	93	52	106	141	113	87	56	129	85	131	-	55
172	93	167	141	83	180	133	202	88	41	126	92	166	144	101	123	-	122	-	63	
Moyenne	216	101	180	151	91	213	158	177	86	49	122	117	127	112	78	126	92	113		72
Moyenne procédé	148					137					111					101				
Moyenne zone rapprochée	125																			

Débit : bas (B), haut (H), très haut (TH)

Tableau 5. Concentrations moyennes d'acétone (C_{98} , mg/m³) mesurées durant les tests à échelle humaine dans la zone éloignée

Entrée d'air	Évaporation					Déversement					Application chiffon et nettoyage manuel					Pulvérisation et nettoyage manuel				
	Plancher		Plafond			Plancher		Plafond			Plancher		Plafond			Plancher		Plafond		
Débit de ventilation	B	H	B	H	TH	B	H	B	H	TH	B	H	B	H	TH	B	H	B	H	TH
Concentration moyenne par essai	165	104	163	99	66	160	114	150	72	75	154	127	142	101	70	159	121	159	-	68
	168	105	159	101	68	155	108	148	95	78	163	98	123	96	74	139	118	144	-	76
	175	-	150	109	60	157	136	144	97	71	159	118	145	112	69	133	119	114	-	61
	-	-	148	110	67	154	113	136	88	62	144	84	136	104	68	126	105	107	-	58
	-	-	152	108	64	164	127	139	96	74	147	116	152	116	71	158	111	173	-	60
-	-	143	111	71	157	-	129	91	59	132	91	130	115	71	133	122	154	-	60	
Moyenne	169	105	153	106	66	158	120	141	90	70	150	106	138	107	71	141	116	142		64
Moyenne procédé	120					116					114					116				
Moyenne zone éloignée	116																			

Débit : bas (B), haut (H), très haut (TH)

5.2.2 Estimation à l'aide du modèle à deux compartiments

La modélisation par le modèle à deux compartiments a été effectuée en considérant, à partir des données expérimentales, un modèle d'émission à décroissance exponentielle et un modèle à génération constante.

Le tableau 6 fournit les vitesses d'air mesurées à 50 cm de la source à deux points de mesure pour les différents scénarios. Les vitesses variaient de 0,01 à 0,08 m/s pour les scénarios qui se trouvent sur la table soit évaporation, application au chiffon et pulvérisation alors que les vitesses vont de 0,01 à 0,25 m/s pour le scénario déversement (au sol). Ces vitesses d'air ont été utilisées dans le calcul des coefficients β , selon l'équation 1.

Les taux d'émission calculés avec la balance pour les scénarios évaporation et déversement étaient en moyenne de 155 mg/min [122 – 178 mg/min] et les coefficients α étaient en moyenne de 0,022 min⁻¹ [0,20 – 0,25 min⁻¹]. Pour les scénarios d'application au chiffon et de pulvérisation, les taux d'émission ont été soit 1) calculés pour le modèle à émission constante (en divisant la masse de solvant par le temps d'utilisation du T₉₈, soit la dernière application + 10 minutes), 2) soit déterminés en utilisant le coefficient moyen de 0,022 min⁻¹ pour le modèle avec émission à décroissance exponentielle.

Tableau 6. Vitesses de l'air mesurées à la frontière des deux zones selon les différents scénarios évalués

Entrée d'air	Évaporation / application au chiffon* / pulvérisation*)					Déversement				
	Plancher		Plafond			Plancher		Plafond		
Débit de ventilation	B	H	B	H	TH	B	H	B	H	TH
Vitesse (m/s)	0,01	0,02	0,01	0,04	0,06	0,01	0,01	0,01	0,06	0,30
	0,01	0,03	0,01	0,05	0,1	0,01	0,03	0,02	0,07	0,20
Vitesse moyenne (m/s)	0,01	0,025	0,01	0,045	0,08	0,01	0,02	0,015	0,065	0,25

*Estimation à partir du modèle d'évaporation;
Débit : bas (B), haut (H), très haut (TH)

Le rayon de la zone rapprochée (demi-sphère) a été adapté pour obtenir des estimations des concentrations (C₉₈) (modèle d'émission à décroissance exponentielle) le plus proche possible des concentrations moyennes mesurées dans la zone rapprochée. Le tableau 7 expose les estimations des paramètres du rayon de l'hémisphère et du coefficient β ainsi obtenues pour chacun des 57 tests (3 répétitions par situation comprenant un scénario, une position d'entrée d'air et un débit de ventilation).

Les moyennes géométriques des coefficients β estimés sont respectivement de 2,3, de 3,8, de 5,4 et de 5 m³/min pour les scénarios évaporation, déversement, application au chiffon et pulvérisation. Les moyennes géométriques des coefficients β estimés sont respectivement de 2,8 et de 4,8 m³/min pour les scénarios de ventilation au plancher et au plafond. Les moyennes

géométriques des coefficients β estimés sont respectivement de 3,7, de 3 et de 6,5 m³/min pour les scénarios avec un débit de ventilation bas (B), haut (H) et très haut (TH).

Tableau 7. Paramètres estimés du rayon de la zone rapprochée et du coefficient β , selon la position de l'entrée d'air et le débit de ventilation (3 répétitions par situation)

	Rayon (m)			β (m ³ /min)		
Scénario : Évaporation						
Plancher / B	0,8	0,8	0,7	1,21	1,21	0,92
Plancher / H	0,9	0,8	0,8	3,82	3,02	3,02
Plafond / B	1,2	1	1,1	2,72	1,88	2,28
Plafond / H	0,5	0,5	0,5	2,12	2,12	2,12
Plafond / TH	0,4	0,5	0,4	2,42	3,77	2,42
Scénario : Déversement						
Plancher / B	0,8	0,8	0,8	1,21	1,21	1,21
Plancher / H	0,9	0,7	0,7	3,05	1,85	1,85
Plafond / B	0,8	0,9	1,2	1,81	2,29	4,07
Plafond / H	0,7	0,8	0,7	6,01	7,84	6,01
Plafond / TH	0,6	0,6	0,6	16,9	16,9	16,9
Scénario : Application au chiffon et nettoyage manuel						
Plancher / B	2,2	2,2	1,8	9,12	9,12	6,12
Plancher / H	0,8	0,7	0,9	3,02	2,31	3,82
Plafond / B	1,6	2	2,3	4,83	7,53	9,96
Plafond / H	0,8	0,8	1	3,02	3,02	4,71
Plafond / TH	0,7	0,7	0,7	7,78	7,78	7,78
Scénario : Pulvérisation et nettoyage manuel						
Plancher / B	1,8	2	1,5	6,12	7,53	4,23
Plancher / H	0,8	0,8	0,8	2,31	2,31	2,31
Plafond / B	1,5	2,9	2,5	4,23	15,84	11,79
Plafond / TH	0,7	0,5	0,5	7,78	3,96	3,96

B : bas débit, H : haut débit, TH : très haut débit

Lorsque le débit de ventilation est haut (H) ou très haut (TH), les rayons qui permettent d'estimer adéquatement les concentrations mesurées dans la zone rapprochée sont compris entre 0,5 et 1 mètre, peu importe le scénario choisi. Pour les scénarios évaporation ou déversement, les coefficients β sont plus élevés lorsque le débit est haut ou très haut, atteignant 16,9 m³/min pour le déversement avec ventilation à très haut débit au plafond. Cette situation est celle pour laquelle les concentrations dans la zone rapprochée sont les plus

faibles, pour l'ensemble des 19 situations évaluées et aussi celle avec les vitesses d'air mesurées les plus élevées soit 0,25 m/s. Au regard des scénarios d'application au chiffon et de pulvérisation, des coefficients β élevés ont été estimés indépendamment du débit de ventilation. Afin d'obtenir un coefficient β élevé pour les situations avec des vitesses d'air faibles, il est nécessaire d'utiliser un rayon plus important, conformément à l'équation 1. Ce rayon varie ainsi de 1,5 à 2,9 m pour les tests à bas débit de ces deux scénarios.

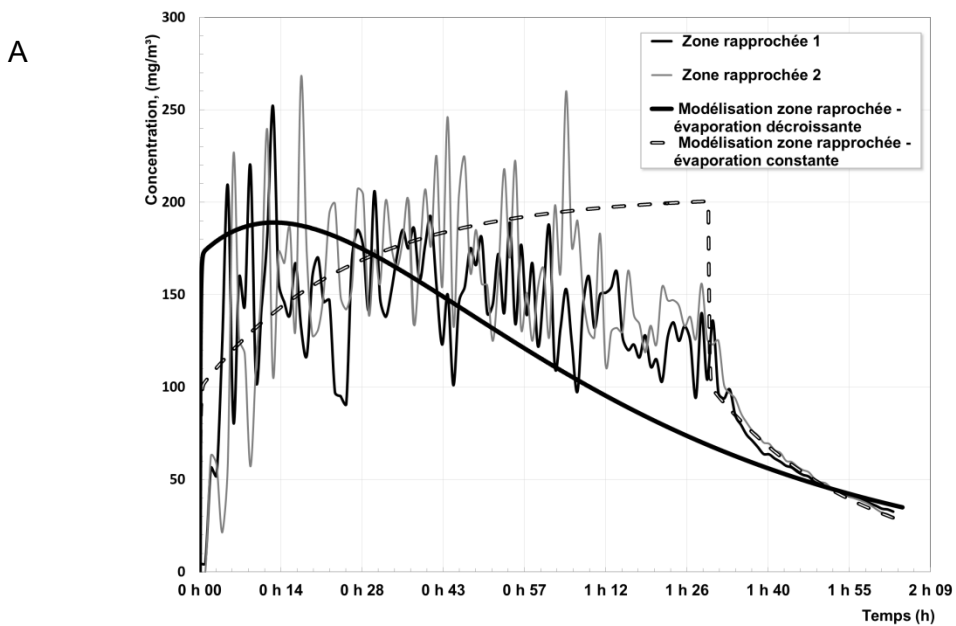
La figure 31 illustre des profils de concentration dans la zone rapprochée à haut débit de ventilation (A) ou à bas débit de ventilation (B) avec, pour chaque cas, deux estimations obtenues, l'une avec émission à décroissance exponentielle et l'autre à émission constante. La figure 32 présente les concentrations dans la zone éloignée. Les conditions expérimentales des tests sont rapportées dans les figures 31 et 32 et le diamètre de la zone rapprochée utilisé était de 0,5 m pour le cas A et de 0,9 m pour le cas B.

De façon générale, les deux modèles de génération correspondent bien aux observations. Pour le modèle avec émission à décroissance exponentielle, une bonne concordance est notée dans les premiers temps de la simulation, les concentrations de ce modèle augmentant plus rapidement. À l'inverse, pour le modèle avec émission à génération constante, une bonne concordance est observée dans la deuxième moitié des tests, notamment au moment de l'arrêt de l'émission, avec une diminution marquée des concentrations.

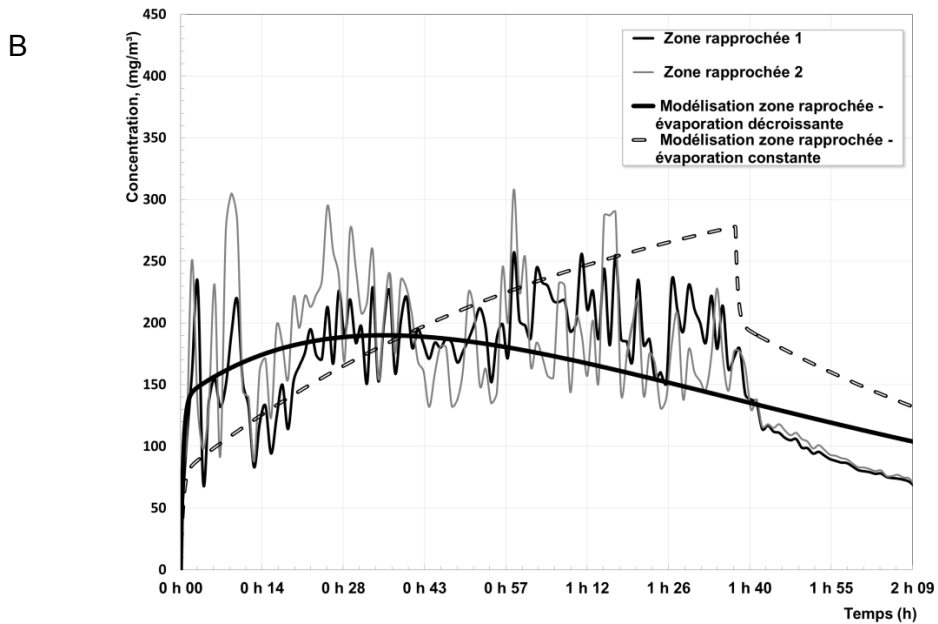
Les concentrations (C_{98}) de la figure 31A sont de 153 mg/m³ et de 141 mg/m³ pour les deux mesures expérimentales, de 174 mg/m³ pour les données estimées par le modèle avec émission constante et de 139 mg/m³ pour les données estimées par le modèle avec émission à décroissance exponentielle. Les concentrations (C_{98}) de la figure 31B sont de 189 mg/m³ et de 183 mg/m³ pour les deux mesures expérimentales, de 203 mg/m³ pour le modèle avec émission constante et de 174 mg/m³ pour celui avec émission à décroissance exponentielle.

Les concentrations (C_{98}) de la figure 32A sont de 108 mg/m³ et de 111 mg/m³ pour les deux mesures expérimentales, de 74 mg/m³ pour le modèle avec émission constante et de 65 mg/m³ pour celui avec émission à décroissance exponentielle. Les concentrations (C_{98}) de la figure 32B sont de 144 mg/m³ et de 135 mg/m³ pour les mesures expérimentales, de 119 mg/m³ pour le modèle avec émission constante et de 111 mg/m³ pour celui avec émission à décroissance exponentielle.

La figure 33 présente un profil de concentration des zones rapprochée et éloignée lors d'un scénario de déversement avec les estimations obtenues avec le modèle avec émission à décroissance exponentielle. Les concentrations dans la zone rapprochée sont alors inférieures aux mesures prises dans la zone éloignée. La modélisation donne des estimations très proches pour les deux zones. Le coefficient β de cette expérience est le plus élevé de tous les tests effectués soit 16,9 m³/min. Ce facteur a été déterminé en considérant une vitesse d'écoulement d'air à la frontière interzones de 0,25 m/s avec un diamètre de la zone rapprochée (hémisphère) de 0,6 m.

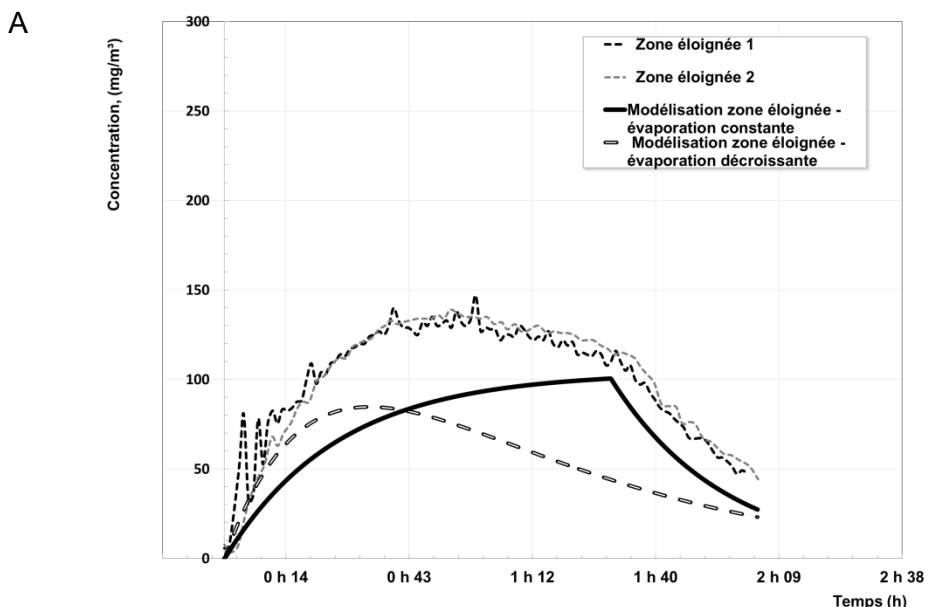


Conditions de tests : scénario d'évaporation avec ventilation à haut débit au plafond
Rayon de la zone rapprochée : 0,5 m, vitesse interzones = 0,045 m/s et $\beta = 2,12 \text{ m}^3/\text{min}$

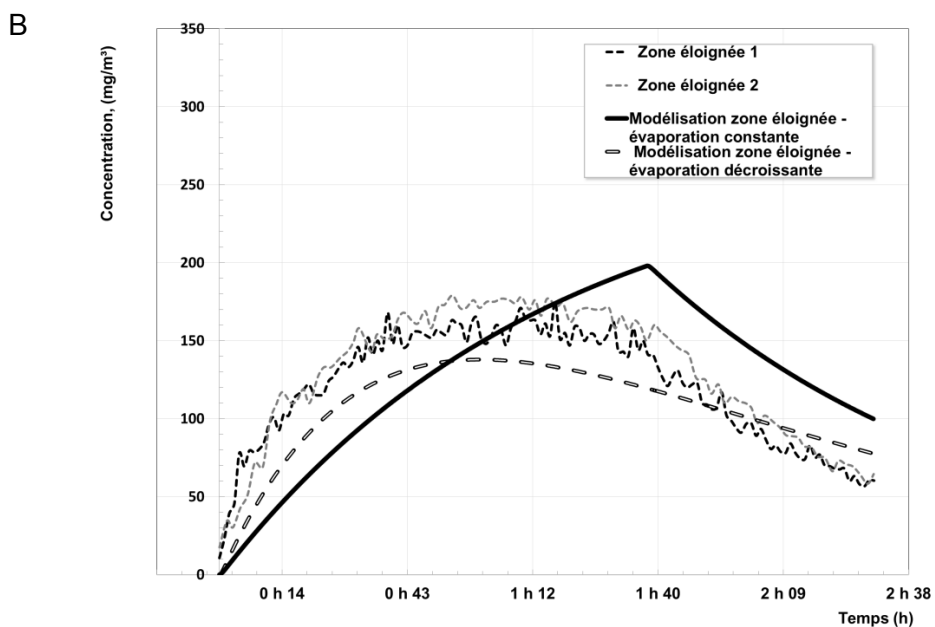


Conditions de tests : scénario de déversement avec ventilation à bas débit au plafond
Rayon de la zone rapprochée : 0,9 m, vitesse interzones = 0,015 m/s et $\beta = 2,29 \text{ m}^3/\text{min}$

Figure 31. Profils des concentrations dans la zone rapprochée mesurées et estimées par le modèle à deux compartiments, avec émission à décroissance exponentielle et à émission constante.

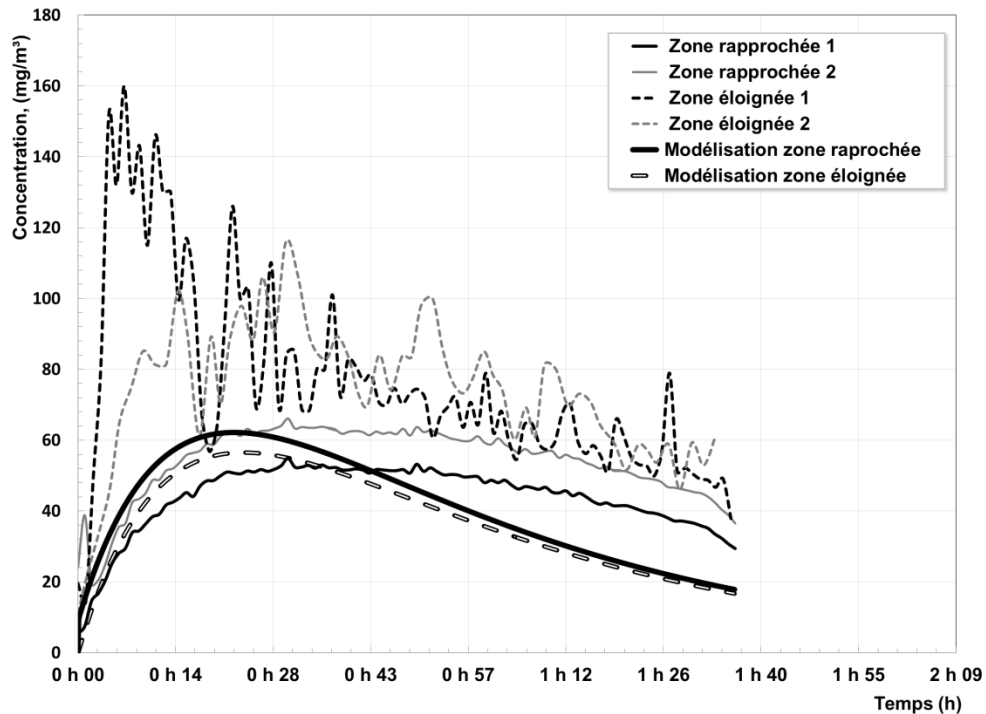


Conditions de tests : scénario d'évaporation avec ventilation à haut débit au plafond
 Rayon de la zone rapprochée : 0,5 m, vitesse interzones = 0,045 m/s et $\beta = 2,12 \text{ m}^3/\text{min}$



Conditions de tests : scénario de déversement avec ventilation à bas débit au plafond
 Rayon de la zone rapprochée : 0,9 m, vitesse interzones = 0,015 m/s et $\beta = 2,29 \text{ m}^3/\text{min}$

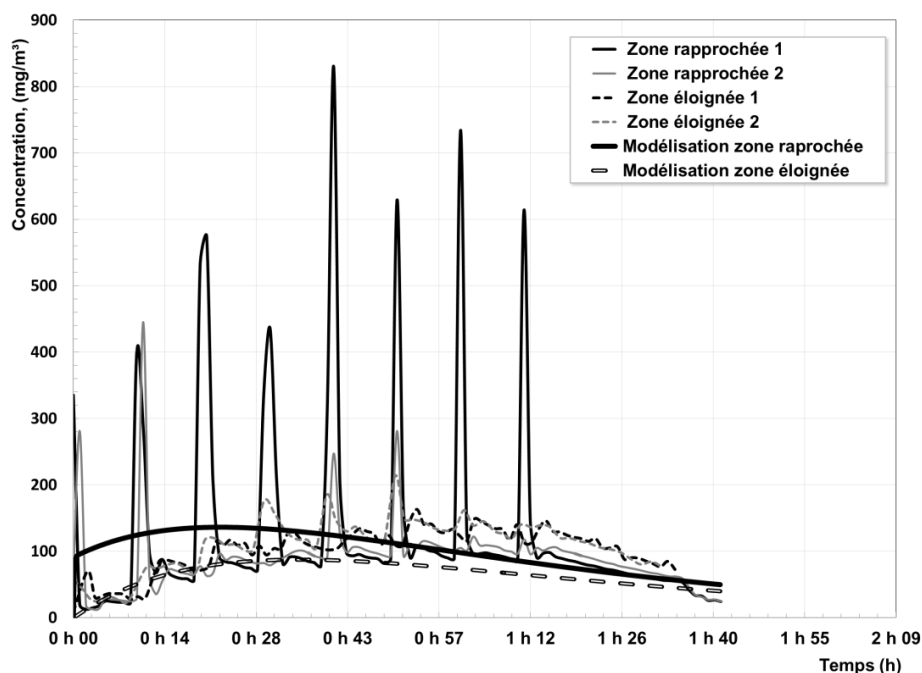
Figure 32. Profils des concentrations de la zone éloignée mesurées et estimées par le modèle à deux compartiments, avec émission à décroissance exponentielle et à émission constante.



Conditions de tests : scénario de déversement avec ventilation à très haut débit au plafond
Rayon de la zone rapprochée : 0,6 m, vitesse interzones = 0,25 m/s et $\beta = 16,9 \text{ m}^3/\text{min}$

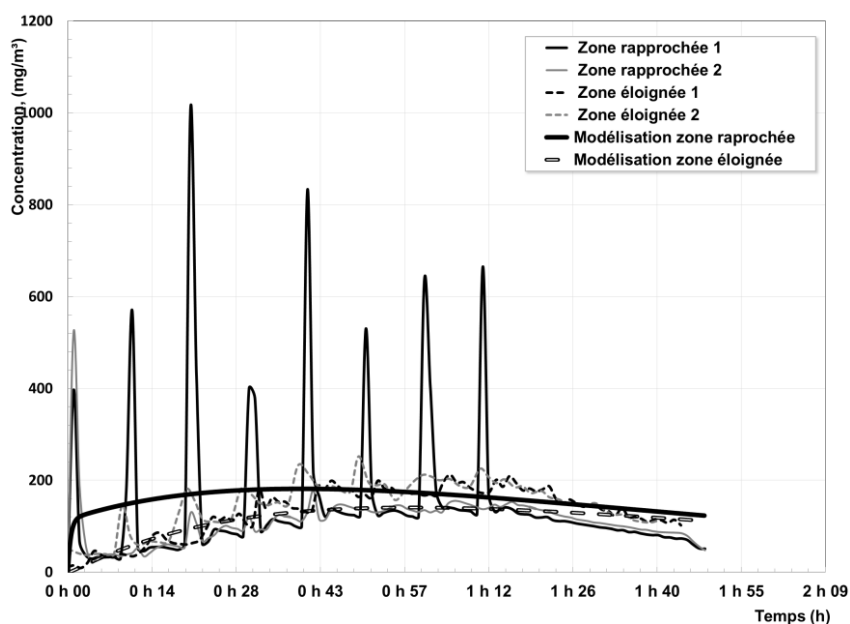
Figure 33. Profils des concentrations mesurées et estimées par le modèle à deux compartiments avec émission à décroissance exponentielle.

La figure 34 présente des profils de concentrations des zones rapprochée et éloignée lors de l'application au chiffon suivie du nettoyage manuel avec les estimations obtenues avec le modèle avec émission à décroissance exponentielle. La modélisation par le modèle à deux compartiments ne considère pas l'application toutes les 10 minutes de 2 mL d'acétone. Les concentrations (C_{98}) moyennes mesurées sont de 108 mg/m^3 pour les mesures expérimentales dans la zone éloignée et de 121 mg/m^3 pour les mesures expérimentales dans la zone rapprochée. Les concentrations estimées par le modèle sont de 115 mg/m^3 dans la zone éloignée et de 70 mg/m^3 dans la zone rapprochée. En dehors des pics de concentration, les mesures dans la zone rapprochée sont plus basses que celles dans la zone éloignée. Cette différence est aussi visible à la fin de la génération, après 1 h 12. Des résultats similaires ont été obtenus pour les concentrations à bas débit (figure 35) et pour le scénario de pulvérisation (figure 36). Dans certains cas, les concentrations moyennes dans la zone rapprochée étaient plus basses que celles dans la zone éloignée, malgré la présence de pics de concentration (figures 35 et 36). La modélisation ne permet pas d'estimer une concentration plus basse dans la zone rapprochée par rapport à celle dans la zone éloignée.



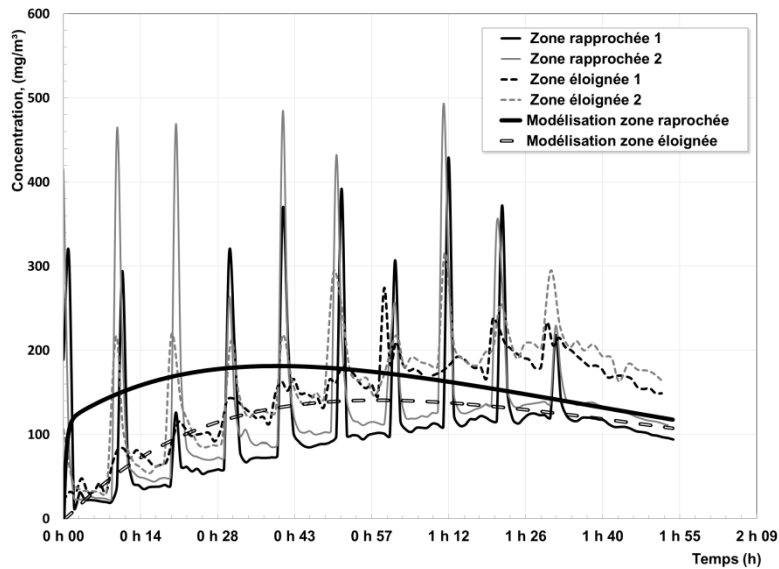
Conditions de tests : scénario d'application au chiffon suivie de nettoyage manuel avec ventilation à haut débit au plafond
 Rayon de la zone rapprochée : 0,6 m, vitesse interzones = 0,05 m/s et $\beta = 3,6 \text{ m}^3/\text{min}$

Figure 34. Profils des concentrations mesurées et estimées par le modèle à deux compartiments, avec émission à décroissance exponentielle.



Conditions de tests : scénario d'application au chiffon suivie de nettoyage manuel avec ventilation à bas débit au plafond
 Rayon de la zone rapprochée : 1,6 m, vitesse interzones = 0,01 m/s et $\beta = 4,8 \text{ m}^3/\text{min}$

Figure 35. Profils des concentrations mesurées et estimées par le modèle à deux compartiments, avec émission à décroissance exponentielle.



Conditions de tests : scénario de pulvérisation suivie de nettoyage manuel avec ventilation à haut débit au plafond
Rayon de la zone rapprochée : 0,5 m, vitesse interzones = 0,08 m/s et $\beta = 4 \text{ m}^3/\text{min}$

Figure 36. Profils des concentrations mesurées et estimées par le modèle à deux compartiments, avec émission à décroissance exponentielle.

5.2.3 Simulation en dynamique des fluides

Les simulations CFD se sont concentrées sur quatre scénarios représentatifs de l'ensemble des tests réalisés dans la pièce à échelle humaine. Les deux premiers correspondent aux tests d'évaporation d'acétone sur une table avec une ventilation par le plancher à bas débit et à haut débit. Les scénarios 3 et 4 correspondent aux tests d'évaporation sur une table avec une ventilation par le plafond à bas débit et à haut débit.

La figure 37 expose les concentrations CFD obtenues aux profils de concentrations du modèle à un compartiment avec émission à décroissance exponentielle. Bien que les profils de concentrations soient comparables, la concentration augmente plus rapidement avec le modèle à un compartiment. Les pics de concentration sont également atteints un peu plus rapidement que pour la modélisation CFD. Les concentrations moyennes sur l'intervalle de temps des simulations restent néanmoins très proches. L'écart le plus important est obtenu pour le scénario de ventilation par le plafond à haut débit, où la concentration moyenne est de $53,9 \text{ mg}/\text{m}^3$ pour le modèle à un compartiment comparativement à $50,5 \text{ mg}/\text{m}^3$ pour la modélisation CFD. Pour les deux modèles et les deux positions de l'entrée d'air (plancher et plafond), les concentrations avec une ventilation à haut débit sont environ deux fois inférieures à celles obtenues avec une ventilation à bas débit.

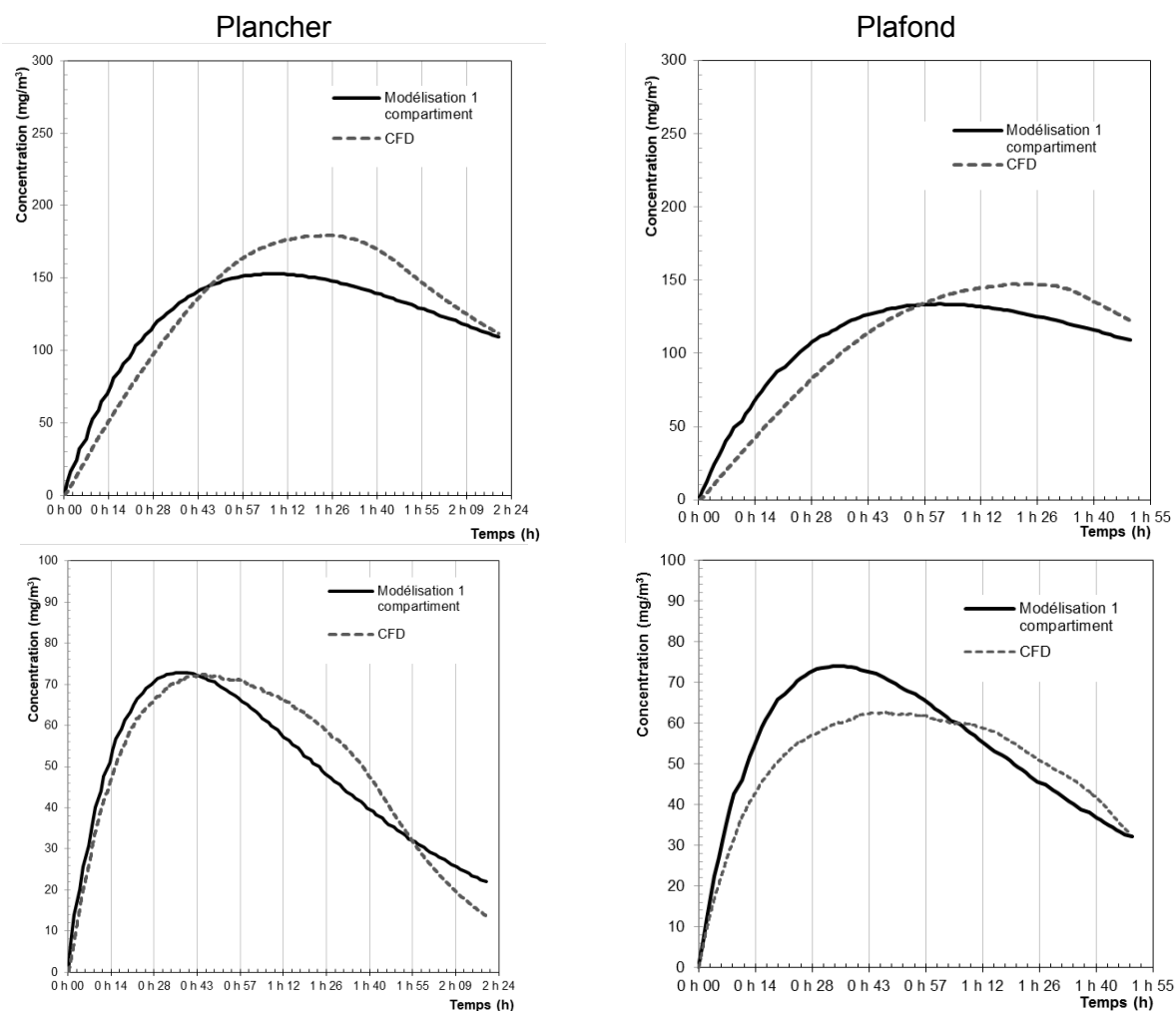


Figure 37. Profils des concentrations modélisées par la CFD et celles estimées par le modèle à un compartiment, avec émission à décroissance exponentielle; ventilation à bas débit (haut) et ventilation à haut débit (bas).

La comparaison des concentrations du modèle CFD avec les résultats du modèle à deux compartiments nécessite l'estimation du débit d'air interzones (β). Le tableau 7 de la section précédente montre les estimations du coefficient β obtenues pour l'ensemble des tests effectués dans la pièce à échelle humaine. Ces coefficients sont basés sur l'hypothèse que la zone rapprochée a la forme d'une demi-sphère. Il est toutefois très complexe d'estimer des concentrations dans un volume demi-sphérique avec le code numérique utilisé dans la présente étude. Par conséquent, la zone rapprochée a été définie comme étant un cube de 40 cm de côté et les coefficients β ont été déterminés à partir des vitesses moyennes d'écoulement d'air à l'intersection des deux zones obtenues par simulation CFD.

Le tableau 8 compare les vitesses d'air mesurées à la frontière des zones rapprochée et éloignée, aux vitesses obtenues par la CFD. Les résultats numériques ont été déterminés en effectuant la moyenne arithmétique des vitesses à 10 positions, toutes localisées à l'intersection des zones rapprochée et éloignée. Cette distance est inférieure à celle utilisée pour les

mesures expérimentales (50 cm de la source). Cependant, les résultats numériques et expérimentaux montrent que la vitesse d'écoulement est relativement constante dans l'environnement immédiat de la source, peu importe la position et le débit de ventilation utilisés. Les vitesses modélisées en fonction du temps correspondent à une distribution normale autour d'une valeur moyenne, l'écart type de la vitesse pour chaque scénario est également présenté au tableau 8.

Tableau 8. Comparaison entre les vitesses mesurées et simulées à la frontière des deux zones

Position de l'entrée d'air	Plancher		Plafond	
	B	H	B	H
Débit de ventilation				
Vitesses moyennes mesurées (m/min)	0,6	1,5	0,6	2,7
Vitesses simulées par CFD et écart type (m/min)	0,5 (0,1)	1,6 (0,2)	0,4 (0,1)	1,8 (0,3)

B : bas ; H : haut

Les concentrations obtenues par modélisation CFD dans la zone rapprochée ont été comparées aux résultats du modèle à deux compartiments avec émission à décroissance exponentielle. La surface de la zone rapprochée (FSA) a été fixée à 0,84 m². Cette valeur correspond à la surface du champ rapproché (cube de 40 cm de côté) à laquelle une surface de 0,12 m² a été retranchée pour tenir compte de la table où se produit l'évaporation. En utilisant l'équation 1 et la vitesse moyenne d'écoulement d'air à l'intersection des deux zones (S) déterminée numériquement (tableau 8), un débit d'air interzones β a été estimé pour les scénarios modélisés. La figure 38 présente les coefficients β obtenus et les écarts types associés pour les cas de ventilation par le plancher et par le plafond. On remarque que la ventilation à haut débit augmente les coefficients β d'un facteur d'à peu près 4 comparativement à la ventilation à bas débit. En tenant compte des écarts types associés aux débits d'air interzones, les valeurs sont relativement indépendantes de la position de l'entrée d'air.

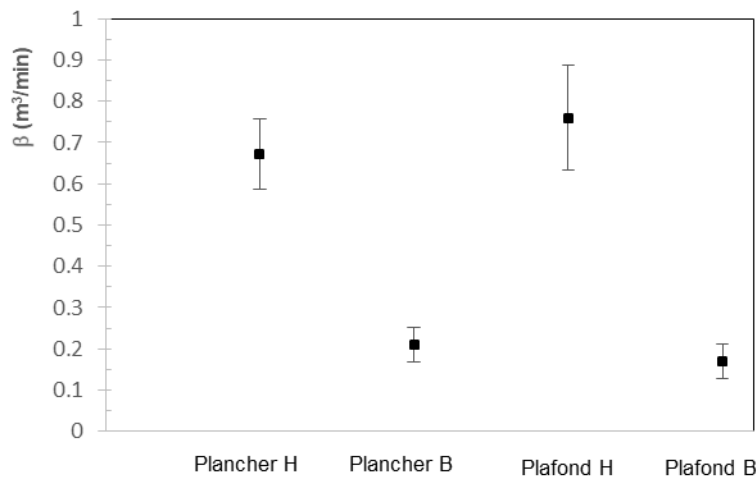


Figure 38. Débits d'air interzones estimés par modélisation CFD pour deux positions d'entrée d'air (plancher ou plafond) et deux débits de ventilation (H : haut et B : bas).

La figure 39 compare les profils de concentrations dans la zone rapprochée obtenus du modèle à deux compartiments aux résultats du modèle CFD. Les résultats du modèle à deux compartiments sont présentés sur 3 courbes distinctes. Les profils de concentrations estimés avec les débits d'air interzones β de la figure 38 sont représentés par les courbes noires et continues. Les profils représentés par les courbes continues grises représentent l'impact de l'écart type des coefficients β sur les profils de concentrations. Ces courbes ont été obtenues du modèle à deux compartiments avec $\beta - \sigma$ (courbe inférieure) et $\beta + \sigma$ (courbe supérieure). Dans les 30 premières minutes de simulation, les profils de concentrations CFD ont été nettement inférieurs aux résultats du modèle à deux compartiments. Par la suite, les résultats issus des deux modèles sont semblables, notamment dans la phase de décroissance des concentrations obtenues par modélisation CFD. La ventilation par le plancher donne une concentration moyenne (C_{98}) de 228 mg/m^3 pour le modèle à deux compartiments comparativement à 181 mg/m^3 pour le modèle CFD. La ventilation par le plafond présente des écarts similaires avec $C_{98} = 240 \text{ mg/m}^3$ et 172 mg/m^3 pour les modèles à deux compartiments et CFD respectivement.

Les résultats de la figure 39 ont été obtenus pour un volume de la zone rapprochée équivalent à un cube de 40 cm de côté ($0,064 \text{ m}^3$) autour de la source d'émission. Dans le modèle à deux compartiments, la taille de ce volume influence directement la concentration dans la zone rapprochée puisque celle-ci dépend du coefficient β , qui est directement proportionnel à la surface de la zone rapprochée (FSA). Contrairement au modèle à deux compartiments, qui ne présente que deux valeurs de concentration (zones rapprochée et éloignée), les modélisations CFD montrent que les concentrations atteignent les niveaux les plus élevés dans l'environnement immédiat de la source, mais qu'il n'est pas possible d'établir une « frontière » entre les zones rapprochée et éloignée. Les concentrations varient à la fois dans le temps et dans l'espace; ces variations étant plus prononcées pour une ventilation à haut débit.

La figure 40 expose les estimations de concentrations moyennes dans la zone rapprochée pour le cas de ventilation par le plancher à haut débit en fonction de la taille de cette zone. Les concentrations sont présentées pour 5 tailles dans la zone rapprochée, correspondant à un cube de 14 cm, de 26 cm, de 40 cm, de 52 cm et de 64 cm de côté, respectivement (zone rapprochée 1, 2, 3, 4 et 5). Plus le volume de la zone rapprochée est petit, plus les concentrations sont élevées. L'écart est très important entre les zones 1 et 2, où les concentrations moyennes, estimées dans la première heure, sont 1757 mg/m^3 et 466 mg/m^3 , respectivement. Les concentrations moyennes dans la première heure pour les zones rapprochées 3, 4 et 5 présentent des différences moins marquées avec 180, 108 et 83 mg/m^3 respectivement. Notons également que les fluctuations instantanées de concentrations sont plus faibles lorsque la taille de la zone rapprochée augmente.

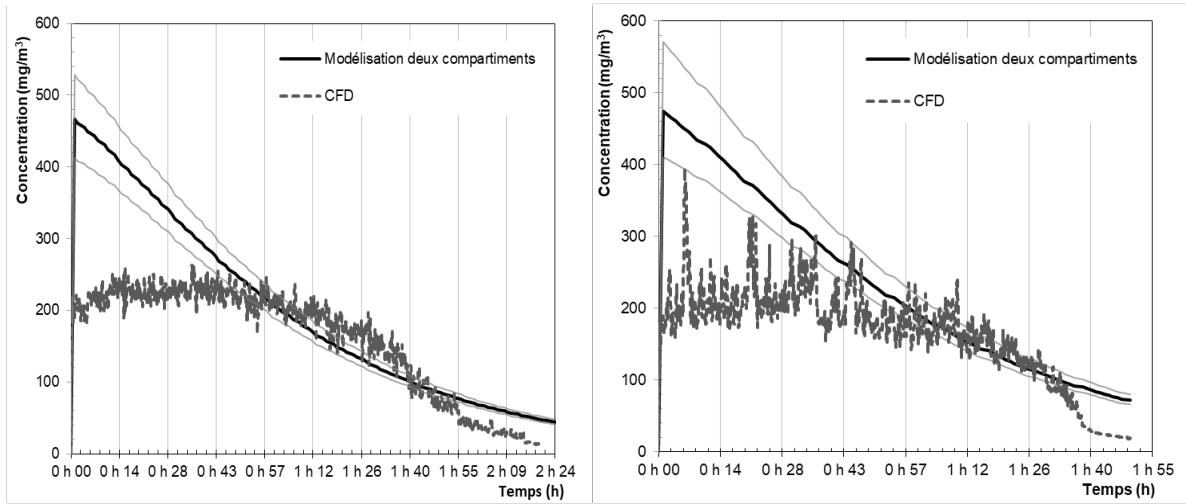


Figure 39. Comparaison entre les concentrations dans la zone rapprochée avec ventilation à haut débit, avec entrée d'air au plancher (gauche) et au plafond (droite).

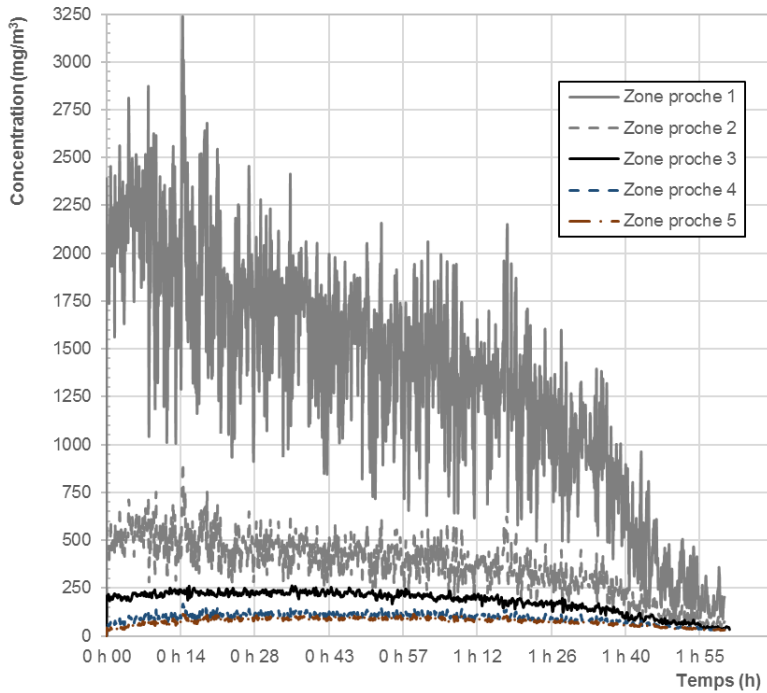


Figure 40. Influence de la taille de la zone rapprochée sur les concentrations (ventilation à haut débit avec entrée d'air au plancher).

6. DISCUSSION

Cette recherche a permis d'approfondir différents aspects de la modélisation pour estimer des expositions professionnelles à des vapeurs de solvants dans le but d'améliorer la justesse de certains modèles. En mettant en œuvre différents tests à petite échelle et à échelle humaine, les travaux présentés dans cette recherche ont porté sur la détermination des taux d'émission pour les solvants purs et les mélanges de solvants, ainsi que sur l'étude du comportement des vapeurs de solvants émises dans l'air et soumises à différentes conditions expérimentales de ventilation.

6.1 Volet I – Tests de laboratoire à petite échelle

6.1.1 Détermination expérimentale des taux d'émission à décroissance exponentielle α

Les taux d'émission ont été déterminés selon l'approche développée par Keil et Nicas (2003). L'approche indique que le modèle avec émission à décroissance exponentielle estime bien les concentrations de vapeurs de solvants pour des petits déversements. Les calculs de α effectués durant cette étude sont dans le même ordre de grandeur que ceux rapportés par Keil et Nicas, mais ils diffèrent toutefois. Ainsi, les valeurs mesurées lors du présent projet sont plus faibles. Pour un déversement de 3 mL d'acétone dans un verre de montre, le paramètre α moyen de cette étude était de $0,0681 \text{ min}^{-1}$ alors que pour Keil et Nicas il était de $0,16 \text{ min}^{-1}$. Les conditions environnementales durant lesquelles les tests ont été effectués peuvent expliquer certaines variations. Keil et Nicas, rapportent des températures de 21 à 25 °C alors que les tests de la présente étude ont été effectués à des températures qui étaient plutôt de 20 à 22 °C. Keil et Nicas considèrent toutefois que les variations entre les extrêmes de conditions de température et de pression de leur étude n'entraînaient pas de variations plus élevées que 3 %. Aussi, Keil et Nicas rapportent une moyenne géométrique de vitesse de déplacement d'air au-dessus de la zone d'évaporation de 0,057 m/s. Les vitesses d'air durant les tests effectués sans ventilation étaient plus faibles lors du présent projet, soit moins de 0,01 m/s. Lorsque la ventilation a été utilisée pour la détermination des coefficients α (voir figures 13 et 14), ceux-ci variaient selon une relation linéaire avec les vitesses d'air. La vitesse d'air est donc un paramètre explicatif important des valeurs de α . Dernier point pouvant expliquer de possibles variations, la géométrie du verre de montre utilisé peut influencer la surface de déversement et donc le coefficient α . Toutefois, les tests effectués au cours de la présente étude en comparant les déversements dans un verre de montre et dans une plaque de Petri montrent des variations notables seulement à des volumes déversés de 1 mL. Pour démontrer aussi l'influence des conditions environnementales, les coefficients α rapportés dans la sous-section 6.2.1 (tests à échelle humaine) pour l'acétone (20 mL) montrent que les coefficients α mesurés, exactement selon la même méthodologie que lors des tests à petite échelle, étaient en moyenne de $0,022 \text{ min}^{-1}$ [$0,20 - 0,25 \text{ min}^{-1}$] alors qu'ils étaient de $0,017 \text{ min}^{-1}$ et de $0,02 \text{ min}^{-1}$ durant les tests à petite échelle avec des vitesses d'air de 0,01 m/s et 0,5 m/s, respectivement. Les conditions de température et d'humidité relative étaient différentes entre les deux tests (21 °C et 20 % d'humidité relative lors des tests à petite échelle par rapport à 24 °C et 40 % d'humidité relative lors des tests à échelle humaine).

Ces variations observées et les nombreux paramètres influençant l'émission lors des petits déversements montrent la difficulté de déterminer des taux d'émission avec précision.

La figure 41 montre des concentrations de paramètres α estimés pour un déversement de 10 mL pour 69 solvants selon l'équation de Keil et Nicas, et selon les équations 12 et 13 obtenues à partir des données expérimentales. La troisième méthode de calcul du paramètre α consistait à considérer une ventilation de 0,5 m/s en multipliant le résultat de l'équation 13 (sans ventilation) par un facteur de 2,55 (facteur lié à la ventilation, obtenu de la figure 14 en divisant la valeur de α à 0,5 m/s par celle à 0,05 m/s pour un volume de 10 mL). Une linéarité dans les estimations par rapport à celles de Keil et Nicas est notée peu importe l'équation utilisée. De plus, les estimations avec ventilation sont très proches de celles de Keil et Nicas (ligne 1 :1).

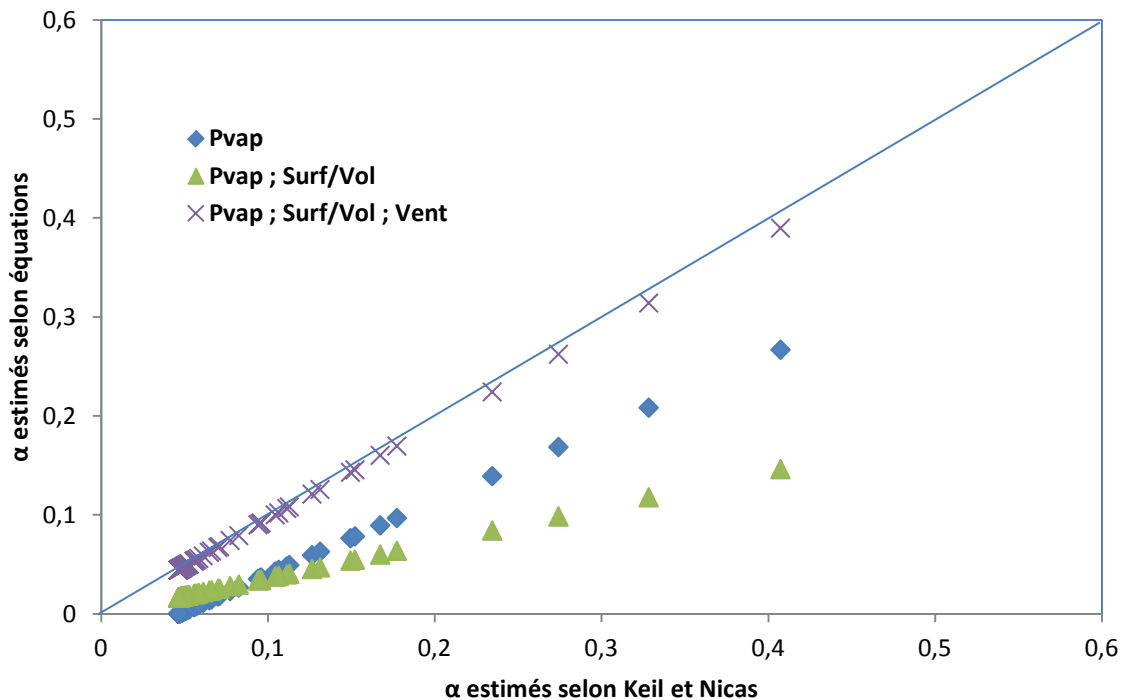


Figure 41. Estimation des coefficients α pour 69 solvants, selon deux méthodes de calcul.

Un utilisateur cherchant à estimer un coefficient α pourrait ainsi utiliser les équations présentées dans ce rapport en tenant compte ou pas de la ventilation. Il existe une certaine linéarité entre la ventilation et les valeurs α mesurées avec 10 mL et 20 mL d'acétone. Il serait possible de compléter des tests avec les mêmes paramètres de ventilation pour plusieurs solvants et à différents volumes pour obtenir une base de données plus complète qui permettrait d'introduire la notion de vitesse de l'air au-dessus de la source dans un modèle de régression linéaire multiple. Le modèle proposé constitue toutefois une amélioration des connaissances pour l'estimation des taux d'émission dans le cas de petits déversements.

6.1.2 Intégration de la notion de non-idéalité dans le calcul du taux de génération pour les mélanges de solvants

Les tests effectués en laboratoire à petite échelle ont permis de mesurer des concentrations de vapeurs de solvants dans une boîte de 0,083 m³ et de comparer les mesures à des estimations

obtenues en utilisant la modélisation par le modèle de boîte uniformément mélangée avec taux d'émission à décroissance exponentielle. Des concentrations pour des solvants purs, des solvants aqueux et des mélanges de solvants organiques ont été déterminées.

Les estimations considérant la non-idéalité, donc les estimations corrigées, étaient largement plus élevées que celles non corrigées. Par exemple, pour le MEK-H₂O à 10 %, une concentration maximale corrigée de 1012 ppm a été calculée alors que le C_{max} non corrigé était de 415 ppm pour une concentration mesurée de 1209 ppm. Cela démontre l'importance de considérer le coefficient d'activité γ lors des calculs de modélisation pour les mélanges non idéaux. En cas de non-considération de la non-idéalité, les estimations de concentrations seront inexactes et cela se traduira par une sous-estimation des pics de concentration et par une surestimation des temps pour atteindre le maximum de concentration.

Aucune référence d'évaluation par des modèles physico-chimiques pour des mélanges non idéaux n'a été trouvée dans la littérature. Les données présentées dans cette étude sont donc originales. Ces données valident notamment l'utilité du modèle UNIFAC pour estimer les coefficients γ . La considération de la non-idéalité dans les estimations de α constitue donc une amélioration de la justesse des modèles utilisés pour estimer les expositions professionnelles.

6.2 Volet II – Tests à échelle humaine dans différentes situations de travail

Dix-neuf différentes situations à échelle humaine ont été testées à 3 reprises selon 4 scénarios (évaporation, déversement, application au chiffon et nettoyage manuel, pulvérisation et nettoyage manuel), pour 3 débits d'air (bas, haut, très haut) et à deux positions d'entrée d'air (plancher, plafond). Les concentrations ont été mesurées dans la zone rapprochée et la zone éloignée à deux endroits différents dans chacune des zones.

De façon générale, l'analyse de variance a démontré que l'ensemble des variables avait un effet sur les concentrations dans la zone rapprochée alors que seuls le débit et la position de l'entrée d'air avaient un effet dans la zone éloignée. L'augmentation des débits de ventilation avait pour effet d'abaisser significativement les concentrations dans les deux zones. Dans les cas des très forts débits de ventilation et les cas d'application au chiffon ou de pulvérisation, il arrivait que les concentrations C₉₈ de la zone rapprochée soient plus faibles que celles de la zone éloignée. On remarque aussi que lorsque les générations cessaient, entre 1 h 30 et 1 h 45 après le début des tests (voir figures 26, 27, 28 et 29), les concentrations dans la zone rapprochée devenaient inférieures à celles dans la zone éloignée. La figure 33 illustre un cas d'inversement important caractérisé par des concentrations plus faibles dans la zone rapprochée que celles mesurées dans la zone éloignée. Dans cette situation, la ventilation est effectuée par le plafond et les vitesses d'air mesurées à 50 cm de la source étaient de 0,25 m/s, soit une vitesse largement supérieure à celles obtenues lors des autres tests. L'hypothèse avancée est que l'air frais (non contaminé par les vapeurs d'acétone) est propulsé directement en direction du sol puis passe par la zone de déversement dans la zone rapprochée. Il n'est pas possible actuellement de tenir compte de ce phénomène d'arrivée d'air frais non contaminé dans la zone rapprochée avec le modèle à deux zones; il est donc surprenant d'obtenir des concentrations dans la zone rapprochée qui soient plus faibles que les concentrations dans la zone éloignée, peu importe les paramètres du modèle utilisés. Même en simulant une pièce parfaitement mélangée, les concentrations dans la zone rapprochée seraient au mieux égales à celles dans la zone éloignée. L'équipe de recherche n'a pu identifier dans la littérature des études qui rapportent ce phénomène de concentration plus faible dans la zone rapprochée. Les

données expérimentales présentées sont donc originales et des études pourraient être entreprises afin de valider la possibilité d'intégrer ce phénomène dans les modèles numériques existants.

Le phénomène d'arrivée d'air frais peut aussi expliquer la différence constante d'environ 10 mg/m³ mesurée durant toute la durée du test de la figure 33, les concentrations le plus proches de l'entrée d'air étant inférieures à celles de la même zone, mais de l'autre côté de la source. Les deux mesures de PID nous renseignent notamment sur la symétrie et l'homogénéité de la zone rapprochée, alors que les deux GC dans la zone éloignée, étant placés chacun aux extrémités de la pièce, nous renseignent sur l'homogénéité de la ventilation de la pièce. Les concentrations mesurées présentent toutefois une bonne similitude dans chacune des zones avec des différences moyennes de 10 % [0,7 – 40 %] dans la zone éloignée et de 21 % [0,1 – 60 %] dans la zone rapprochée entre les deux points de mesure (PID1/PID2 et GC1/GC2). Une des hypothèses du modèle à deux compartiments est que les concentrations dans les zones rapprochée et éloignée sont homogènes. Cette hypothèse d'homogénéité des deux zones est ainsi en partie validée dans le montage expérimental de la présente étude. Earnest et Corsi ont aussi rapporté des concentrations dans la zone rapprochée prises à différents emplacements. Les auteurs rapportent une bonne homogénéité avec des concentrations mesurées qui variaient de moins de 10 % durant la moitié du temps (Earnest et Corsi, 2013). Tous les auteurs ne rapportent toutefois pas une telle homogénéité. Keil et Zhao ont obtenu des variations de mesure de concentrations dans la zone rapprochée pouvant atteindre 400 % entre deux points de mesure et seulement 25 % de leurs tests indiquaient des concentrations dans cette zone qui variaient d'un facteur de moins de 2 (Keil et Zhao, 2017). Keil rapporte aussi une certaine asymétrie des concentrations dans la zone rapprochée en lien avec les déplacements d'air dans cette zone. Keil démontre que lorsque l'on simule des mouvements d'air dans cette zone, la symétrie des concentrations augmente (Keil, 2015). Il demeure cependant difficile de comparer différentes études entre elles puisque la taille des pièces, les débits et vitesses d'air, les hypothèses sous-jacentes à la géométrie et à la taille de la zone rapprochée peuvent varier.

La modélisation a été effectuée dans le but d'évaluer les paramètres d'entrée du modèle, notamment la détermination du paramètre β et du rayon de l'hémisphère de la zone rapprochée. Une optimisation de ces paramètres a ainsi été effectuée afin d'obtenir une concentration estimée similaire aux concentrations mesurées. En utilisant le modèle à deux compartiments avec émission à décroissance exponentielle, le coefficient β estimé moyen était de 3,9 m³/min [0,92 – 16,9 m³/min]. Une approche similaire, visant à optimiser des paramètres entrants du modèle afin d'obtenir des concentrations mesurées, a été utilisée par Keil et Zhao (2017). Les auteurs rapportent ainsi des coefficients β optimisés de 4,8 m³/min [0,4 – 18,7 m³/min]. lors de 74 expérimentations dans différents locaux (Keil et Zhao, 2017).

Alors que les coefficients β varient en fonction des concentrations mesurées, les rayons obtenus par l'optimisation des concentrations mesurées et estimées pour les scénarios d'évaporation et de déversement sont très homogènes avec une moyenne géométrique de 0,72 m (ETG de 1,3). L'utilisation de ce rayon pour une géométrie de zone rapprochée permet donc une estimation adéquate de la concentration de vapeurs de solvants à une distance de 30 cm de la source. En revanche, pour les scénarios d'application au chiffon et de pulvérisation, les rayons optimisés sont plus grands et varient plus largement avec des rayons moyens respectifs (MG) de 1,1 m (ETG de 1,6) et de 1,2 m (ETG de 1,9). Les volumes de la zone rapprochée sont donc plus grands dans ces scénarios. Ces résultats correspondent aux

données de la littérature qui indiquent que plus la source est large et/ou mouvante et la tâche est étendue, plus grand sera le volume de la zone rapprochée (von Grote *et al.*, 2003, 2006).

Les profils de concentrations par simulation CFD ont été comparés aux résultats du modèle à un compartiment à décroissance exponentielle. Bien que les profils soient similaires, des différences sont observables sur le plan de l'évolution temporelle des concentrations et des valeurs maximales atteintes pour un scénario de ventilation donné. Dans le code CFD, la diminution du taux d'émission en fonction du temps est considérée par un coefficient adimensionnel. Cela implique que le taux d'émission est approximé par une série de droites de pente variable. Par contre, les modèles à 1 et à 2 compartiments tiennent compte implicitement de la décroissance exponentielle du taux d'émission. Il en résulte une différence entre le transfert de masse du contaminant dans l'air du modèle CFD comparativement au modèle à décroissance exponentielle.

La comparaison entre les profils de concentrations dans le champ rapproché obtenus du modèle à deux compartiments et les résultats du modèle CFD a montré des différences significatives dans les 30 premières minutes d'émission du contaminant. Les résultats à bas débit n'ont pas été présentés, mais les écarts entre les 2 modèles sont encore plus importants. Le modèle à deux compartiments est basé sur l'hypothèse que le transport du contaminant se fait uniquement par advection, c.-à-d. par la vitesse de l'air ambiant. Cette hypothèse est valable lorsque les vitesses d'air à l'interface entre les champs rapproché et éloigné sont suffisamment élevées pour faire en sorte que l'advection soit le mécanisme dominant. D'autres mécanismes tels que la diffusion moléculaire, causée par des gradients de concentration, et la diffusion turbulente, causée par les mouvements tourbillonnaires et les fluctuations aléatoires de l'écoulement, contribuent au transport entre les deux zones. Cependant, c'est la masse volumique du contaminant qui semble le plus affecter les résultats. Avec une densité de vapeur relative à l'air de 2, les vapeurs d'acétone ont tendance à se concentrer sur la table de travail pour ensuite se diriger vers le plancher de la pièce. Une partie du contaminant est ainsi transportée dans le champ éloigné sans qu'il soit nécessaire de faire appel à l'advection. Ce mécanisme de transport est d'autant plus significatif lorsque le débit de ventilation dans la pièce est faible. Des simulations CFD effectuées sans débit de ventilation ont montré que le contaminant est effectivement transporté dans le champ éloigné sans qu'un mouvement d'air soit nécessaire.

La modélisation CFD permet de documenter le gradient de concentrations autour de la source pour des scénarios d'évaporation et de déversement (voir figure 40). On constate un gradient de concentrations qui a tendance à diminuer rapidement, les concentrations passant de 1757 à 83 mg/m³. Alors que pour les estimations avec le modèle à deux zones, les vitesses étaient fixes et fonction des mesures expérimentales, avec la simulation CFD, les vitesses interzones peuvent être adaptées à la grandeur de la zone choisie. La modélisation dans une zone rapprochée définie par un cube de 52 cm de côté donne une concentration moyenne de 108 mg/m³; cette concentration est très proche des concentrations expérimentales pour ce test (moyenne de 101 mg/m³). Ce test correspond à un β de 1,2 m³/min. Ce coefficient est relativement bas en comparaison des β calculés précédemment soit des coefficients de 3,82, de 3,02 et de 3,02 m³/min. Cela résulte en partie du fait que la simulation est la moyenne de l'ensemble des concentrations de la zone rapprochée avec la CFD alors que les mesures expérimentales ont été prises à une distance de 30 cm de la source. Les coefficients ne sont donc pas directement comparables.

6.3 Portées et limites

Comme mentionné en introduction, la modélisation des expositions professionnelles occupe une place importante en prévention des risques professionnels. La modélisation est une alternative souple et peu coûteuse pour estimer des concentrations. Toutefois, les utilisateurs doivent comprendre que par définition, les modèles sont des représentations de la réalité et que différentes hypothèses sous-tendent leur fonctionnement.

Plusieurs hypothèses ont donc été formulées dans cette étude, notamment pour le modèle deux zones. Alors que les paramètres d'entrée du modèle étaient assez bien contrôlés pour les scénarios de déversement et d'évaporation (vitesse d'air interzones, taux d'émission, débit de ventilation et vitesse d'air), deux variables ont été estimées pour les scénarios d'application au chiffon et de pulvérisation, soit la vitesse d'air interzones et le taux d'émission. Il demeure ainsi difficile d'évaluer chacune des variables indépendamment et de conclure sur l'optimisation du paramètre β avec un taux d'émission estimé.

Afin d'évaluer les paramètres du modèle à deux zones, plusieurs hypothèses ont été retenues. Une géométrie de zone rapprochée correspondant à un hémisphère ou à un cube a été choisie; l'équipe de recherche a aussi convenu que la mesure représentative de la zone respiratoire se trouvait à 30 cm au-dessus de la source; elle a également estimé des taux d'émission pour les modèles de scénarios d'application au chiffon et de pulvérisation. Les résultats présentés sont donc fonction de ces hypothèses et tout utilisateur de modèle devra émettre ses propres hypothèses en fonction de ses besoins. Ces hypothèses peuvent aussi expliquer des différences dans les résultats de plusieurs études.

Les résultats présentés dans ce rapport démontrent que la modélisation demeure une méthode d'estimation valide des concentrations des substances chimiques en milieu de travail. Son utilisation devrait être encouragée pour l'estimation des expositions professionnelles. Toutefois, la modélisation n'est pas destinée à vérifier la conformité à une norme d'exposition, encore moins à établir un profil d'exposition de travailleurs.

L'approche par modélisation devrait éventuellement intégrer une prise en compte de la variabilité ou de l'incertitude de certains paramètres d'entrée pour informer l'utilisateur sur la probabilité des concentrations attendues lors de l'utilisation de ces modèles. Il est d'ailleurs à signaler que depuis 2018, une nouvelle version de l'outil IHMOD 2.0¹ a été publiée et que cette version intègre un module de simulation probabiliste.

¹ <https://ihmod.org/>

7. CONCLUSION

Le projet proposé avait pour but d'améliorer la justesse des modèles d'hygiène du travail utilisés pour estimer des expositions professionnelles à des vapeurs de solvants. Grâce à la mise en œuvre de différents tests à petite échelle et à échelle humaine, les travaux ont porté spécifiquement sur la détermination des taux d'émission pour les solvants purs et les mélanges ainsi que sur l'étude du comportement des vapeurs de solvants émises dans l'air et soumises à différentes conditions expérimentales de ventilation.

Les taux d'émission ont été déterminés selon l'approche développée par Keil et Nicas (2003). Les variations observées des valeurs de coefficients α s'expliquent en grande partie par les variables tension de vapeur, ratio surface/volume et vitesse d'air au-dessus du déversement. Un utilisateur cherchant à estimer un coefficient α pourrait ainsi utiliser les équations présentées dans ce rapport en tenant compte ou pas de la ventilation. Le modèle proposé constitue une amélioration des connaissances pour l'estimation des taux d'émission dans le cas de petits déversements.

Les tests effectués en laboratoire à petite échelle ont permis de mesurer des concentrations de vapeurs pour des solvants purs et des mélanges, et de confronter ces mesures aux estimations fournies par le modèle de pièce uniformément mélangée avec taux d'émission à décroissance exponentielle. Les estimations considérant la non-idéalité, donc les estimations corrigées, étaient largement plus élevées que celles non corrigées et les temps T_{\max} des pics de concentration permettaient d'estimer adéquatement la cinétique des émissions. Cela démontre l'importance de considérer le coefficient d'activité γ lors des calculs de modélisation pour les mélanges non idéaux. En cas de non-considération de la non-idéalité, les estimations de concentrations seront inexactes et cela se traduira par une sous-estimation des pics de concentration et par une surestimation des temps pour atteindre le maximum de concentration. La considération de la non-idéalité dans les estimations de α constitue donc une amélioration de la justesse des modèles utilisés pour estimer les expositions professionnelles à des mélanges de solvants.

Dix-neuf situations à échelle humaine différentes ont été testées. De façon générale, l'analyse de variance a démontré que l'ensemble des variables avait un effet sur les concentrations dans la zone rapprochée alors que seuls le débit et la position d'entrée d'air avaient un effet dans la zone éloignée. L'augmentation du débit de ventilation avait pour effet d'abaisser significativement les concentrations dans les deux zones. Dans les cas de très forts débits de ventilation et dans les cas d'application au chiffon ou de pulvérisation, les concentrations C_{98} dans la zone rapprochée pouvaient être plus faibles que celles dans la zone éloignée. L'hypothèse avancée est que l'air frais (non contaminé par les vapeurs d'acétone) est propulsé directement en direction du sol puis passe par la zone de déversement dans la zone rapprochée. Les rayons obtenus par l'optimisation des concentrations mesurées et estimées pour les scénarios d'évaporation et de déversement étaient très homogènes avec un rayon moyen de 0,72 m (ETG de 1,3) et le coefficient β estimé moyen correspondant était de 3,9 m³/min [0,92 – 16,9 m³/min]. L'utilisation de ce rayon pour une géométrie de zone rapprochée permet donc une estimation adéquate de la concentration de vapeurs de solvants à une distance de 30 cm de la source. En revanche, pour les scénarios d'application au chiffon et de pulvérisation, les rayons optimisés étaient plus grands et variaient plus largement avec des rayons moyens respectifs de 1,1 m (ETG de 1,6) et de 1,2 m (ETG de 1,9). L'analyse des

différentes variables, dont certaines non considérées dans le modèle à deux compartiments, constitue un résultat original de cette recherche.

La modélisation CFD a permis de préciser le gradient de concentrations autour de la source pour des scénarios d'évaporation et de déversement. Le gradient de concentrations diminue rapidement avec des concentrations passant de 1757 à 83 mg/m³ pour une zone rapprochée de forme cubique de 14 cm et de 64 cm, respectivement. La modélisation CFD a aussi mis en évidence les déplacements du contaminant dus à la densité de vapeur relative à l'air, sans qu'il soit nécessaire de faire appel à l'advection. Ce mécanisme de transport est d'autant plus significatif lorsque le débit de ventilation dans la pièce est faible. L'analyse des données des modélisations CFD améliore la compréhension des mécanismes de dispersion des contaminants.

Cette étude a ainsi montré l'importance d'utiliser différentes variables pour estimer des taux d'émission lors de petits déversements, de considérer la non-idéalité en cas d'utilisation de mélange non idéal et d'explorer différents déterminants des concentrations dans les zones rapprochée et éloignée. Ces données améliorent la compréhension générale de la dispersion des vapeurs de solvants et de l'utilisation des modèles auxquels on recourt en hygiène du travail pour estimer des expositions professionnelles à des vapeurs de solvants.

BIBLIOGRAPHIE

- Arnold, S., Ramachandran, G. et Jayjock, M. (2009). Model selection. Dans C. Keil, C. Simmons et T. Anthony (Édit.), *Mathematical models for estimating occupational exposure to chemicals* (2^e éd., p. 99-103). Fairfax, VA: American Industrial Hygiene Association.
- Arnold, S. F., Shao, Y. et Ramachandran, G. (2017a). Evaluating well-mixed room and near-field-far-field model performance under highly controlled conditions. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 14(6), 427-437. doi: 10.1080/15459624.2017.1285492
- Arnold, S. F., Shao, Y. et Ramachandran, G. (2017b). Evaluation of the well mixed room and near-field far-field models in occupational settings. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 14(9), 694-702. doi: 10.1080/15459624.2017.1321843
- ASTM. (1997). *Standard guide for statistical evaluation of indoor air quality models*. Norme ASTM D5157-97. Conshohocken, PA: ASTM.
- Australia, S. W. (2012). *Guidance on the interpretation of workplace exposure standards for airborne contaminants*. Canberra, Australie: Safe Work Australia.
- Bégin, D., Debia, M. et Gérin, M. (2008). *Recension des outils de comparaison des solvants* (Rapport n° R-567). Montréal, QC: IRSST.
- Bennett, J. S., Feigley, C. E., Khan, J. et Hosni, M. H. (2000). Comparison of mathematical models for exposure assessment with computational fluid dynamic simulation. *Applied Industrial Hygiene*, 15(1), 131-144. doi: 10.1080/104732200301953
- Bertrand, N. et Vincent, R. (2010a). Modélisation des expositions professionnelles aux agents chimiques : bilan et perspectives. *Hygiène et sécurité du travail*, 220, 21-33. Tiré de www.inrs.fr/accueil/dms/inrs/CataloguePapier/ND/TI-ND-2333/nd2333.pdf
- Bertrand, N. et Vincent, R. (2010b). Modélisation des expositions professionnelles aux agents chimiques : bilan et perspectives. *Hygiène et sécurité du travail*, 220(10), 21-33.
- Bruzzi, R. (2007). *New developments and applications in modelling occupational exposure to airborne contaminants*. (Thèse de doctorat, Université de Lausanne, Lausanne, Suisse).
- Chauhan, N., Chauhan, R. P., Joshi, M., Agarwal, T. K. et Sapra, B. K. (2015). Measurements and CFD modeling of indoor thoron distribution. *Atmospheric Environment*, 105, 7-13. doi: 10.1016/j.atmosenv.2015.01.029
- Cherrie, J. W., Maccalman, L., Fransman, W., Tielemans, E., Tischer, M. et van Tongeren, M.. (2011). Revisiting the effect of room size and general ventilation on the relationship between near - and far-field air concentrations. *Annals of Occupational Hygiene*, 55(9), 1006-1015. doi: 10.1093/annhyg/mer092
- Choy, B. et Reible, D. (1996). UNIFAC Calculator [Logiciel]. Sydney, Australie: The University of Sidney.
- Debia, M., Bégin, D. et Gérin, M. (2009). Comparative evaluation of overexposure potential indices used in solvent substitution. *Annals of Occupational Hygiene*, 53(4), 391-401.
- Demou, E., Hellweg, S., Wilson, M. P., Hammond, S. K. et McKone, T. E. (2009). Evaluating indoor exposure modeling alternatives for LCA: A case study in the vehicle repair industry. *Environmental Science and Technology*, 43(15), 5804-5810.
- Drolet, D., Goyer, N., Roberge, B., Lavoue, J., Coulombe, M. et Dufresne, A. (2010). *Stratégies de diagnostic de l'exposition des travailleurs aux substances chimiques* (Rapport n° R-665). Montréal, QC: IRSST.

- Earnest, C. M. et Corsi, R. L. (2013). Inhalation exposure to cleaning products: Application of a two-zone model. *Journal of Occupational Environmental Hygiene*, 10(6), 328-335. doi: 10.1080/15459624.2013.782198
- European Parliament and Council of the European Union. (30 December 2006). Regulation (EC) No 1907/2006 of the European Parliament and of the Council of 18 December 2006 concerning the Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (REACH), establishing a European Chemicals Agency, amending Directive 1999/45/EC and repealing Council Regulation (EEC) No 793/93 and Commission Regulation (EC) No 1488/94 as well as Council Directive 76/769/EEC and Commission Directives 91/155/EEC, 93/67/EEC, 93/105/EC and 2000/21/EC. *Official Journal of the European Union L*, 396 1-849.
- Flynn, M. R. (2004). A stochastic differential equation for exposure yields a beta distribution. *Annals of Occupational Hygiene*, 48(5), 491-497. 10.1093/annhyg/meh032
- Fransman, W., Van Tongeren, M., Cherrie, J. W., Tischer, M., Schneider, T., Schinkel, J., . . . Tielemans, E. (2011). Advanced reach tool (ART): Development of the mechanistic model. *Annals of Occupational Hygiene*, 55(9), 957-979. doi: 10.1093/annhyg/mer083
- Gaffney, S., Moody, E., McKinley, M., Knutsen, J., Madl, A. et Paustenbach, D. (2008). Worker exposure to methanol vapors during cleaning of semiconductor wafers in a manufacturing setting. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 5(5), 313-324. doi: 10.1080/15459620801988014
- Gérin, M. (2002a). Solvants et prévention : nouvelles perspectives. Dans M. Gérin (Édit.), *Solvants industriels : santé, sécurité, substitution* (p. 1-12). Paris, France: Masson.
- Gérin, M. (2002b). *Solvants industriels : santé, sécurité, substitution*. Paris, France: Masson.
- He, G., Yang, X. et Srebric, J. (2005). Removal of contaminants released from room surfaces by displacement and mixing ventilation: modeling and validation. *Indoor Air*, 15(5), 367-380. doi: 10.1111/j.1600-0668.2005.00383.x
- Hofstetter, E., Spencer, J. W., Hiteshew, K., Coutu, M. et Nealley, M. (2012). Evaluation of recommended REACH exposure modeling tools and near-field, far-field model in assessing occupational exposure to toluene from spray paint. *Annals of Occupational Hygiene*, 57(2), 210-220. doi: 10.1093/annhyg/mes062
- Hyun, S. et Kleinstreuer, C. (2001). Numerical simulation of mixed convection heat and mass transfer in a human inhalation test chamber. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44(12), 2247-2260. doi: 10.1016/S0017-9310(00)00268-4
- INRS. (2003). *Explosion et lieu de travail (ED 5001)*. Paris, France: INRS.
- INRS. (2013). *Tableau des maladies professionnelles : guide d'accès et commentaires*. Tiré de <http://www.inrs-mp.fr/mp/cgi-bin/mppage.pl>
- Jayjock, M., Logan, P., Mader, B., Owens, J., Eldrige, J, Costello, M., . . . Lieder, P. (2011). Modeled comparisons of health risks posed by fluorinated solvents in a workplace spill scenario. *Annals of Occupational Hygiene*, 55(2), 202-213. doi: 10.1093/annhyg/meq062
- Jayjock, M. A., Armstrong, T. et Taylor, M. (2011). The Daubert standard as applied to exposure assessment modeling using the two-zone (NF/FF): Model estimation of indoor air breathing zone: Concentration as an example. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 8(11), D114-D122. doi: 10.1080/15459624.2011.624387
- Keil, C. et Murphy, R. (2006). An application of exposure modeling in exposure assessments for a university chemistry teaching laboratory. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 3(2), 99-106. doi: 10.1080/15459620500498109
- Keil, C. et Nicas, M. (2003). Predicting room vapor concentrations due to spills of organic solvents. *AIHA Journal*, 64(4), 445-454. doi: 10.1080/15428110308984838

- Keil, C. et Zhao, Y. (2017). Interzonal airflow rates for use in near-field far-field workplace concentration modeling. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 14(10), 793-800. doi: 10.1080/15459624.2017.1334903
- Keil, C. B. (1998). The development and evaluation of an emission factor for a toluene parts-Washing process. *American Industrial Hygiene Association Journal*, 59(1), 14-19. doi: 10.1080/15428119891010280
- Keil, C. B. (2000). A tiered approach to deterministic models for indoor air exposures. *Applied Occupational and Environmental Hygiene*, 15(1), 145-151. doi: 10.1080/104732200301962
- Keil, C. B. (2015). Experimental measurements of near-source exposure modeling parameters. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 12(10), 692-698. doi: 10.1080/15459624.2015.1029619
- Keil, C. B., Simmons, C. E. et Anthony, T. R. (Édit.). (2009). *Mathematical models for estimating occupational exposure to chemicals* (2^e éd.). Fairfax, VA: American Industrial Hygiene Association.
- Lau, J. et Chen, Q. (2007). Floor-supply displacement ventilation for workshops. *Building and Environment*, 42(4), 1718-1730. doi: 10.1016/j.buildenv.2006.01.016
- McGrattan, K., Hostikka, S., McDermott, R., Floyd, J., Weinschenk, C. et Overholt, K. (2017a). *Fire dynamics simulator technical reference guide volume 1: Mathematical model* (6^e éd.). Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology.
- McGrattan, K., Hostikka, S., McDermott, R. et al. (2017b). *Fire dynamics simulator : User's guide* (6^e éd.). Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology.
- Morency, F. et Hallé, S. (2012). A simplified approach for modelling airborne nanoparticles transport and diffusion. *International Journal of Computational Methods and Experimental Measurements*, 1(1), 55-71.
- Nicas, M. (1996). Estimating exposure intensity in an imperfectly mixed room. *American Industrial Hygiene Association Journal*, 57(6), 542-550. doi: 10.1080/15428119691014756
- Nicas, M. (2003). Using mathematical models to estimate exposure to workplace air contaminants. *Chemical Health and Safety*, 10 (1), 14-21.
- Nicas, M. (2009). The near field/far field (two-box) model with a constant contaminant emission rate. Dans C. Keil, C. Simmons et T. Anthony (Édit.), *Mathematical models for estimating occupational exposure to chemicals* (2^e éd., p. 47-52). Fairfax, VA: American Industrial Hygiene Association.
- Nicas, M. (2016). The near field/far field model with constant application of chemical mass and exponentially decreasing emission of the mass applied. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 13(7), 519-528. doi: 10.1080/15459624.2016.1148268
- Nicas, M. et Neuhaus, J. (2008). Predicting benzene vapor concentrations with a near field/far field model. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 5(9), 599-608. doi: 10.1080/15459620802282375
- Nicas, M., Plisko, M. J. et Spencer, J. W. (2006a). Estimating benzene exposure at a solvent parts washer. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 3(5), 284-291. doi: 10.1080/15459620600637390
- Nicas, M., Plisko, M. J. et Spencer, J. W. (2006b). Estimating benzene exposure at a solvent parts washer. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 3(5), 284-291. doi: 10.1080/15459620600637390

- Parlement européen et du conseil. (21 avril 2004). *DIRECTIVE 2004/42/CE DU PARLEMENT EUROPÉEN ET DU CONSEIL du 21 avril 2004, relative à la réduction des émissions de composés organiques volatils dues à l'utilisation de solvants organiques dans certains vernis et peintures et dans les produits de retouche de véhicules, et modifiant la directive 1999/13/CE (2004)*.
- Persoons, R., Maitre, A. et Bicout, D. J. (2011). Modelling the time profiles of organic solvent concentrations for occupational exposure assessment purposes. *Annals of Occupational Hygiene*, 55(4), 421-435. doi: 10.1093/annhyg/meq090
- Persoons, R., Maitre, A. et Bicout, D. J. (2012). Modelling occupational inhalation exposure to concentration peaks of chemicals and associated health risk assessment. *Annals of Occupational Hygiene*, 56(8), 934-947. doi: 10.1093/annhyg/mes021
- Plisko, J. et Spencer, J. W. (2008). Evaluation of a mathematical model for estimating solvent exposures in the workplace. *Journal of Chemical Health & Safety*, 15(3), 14-21.
- Popendorf, W. (2006a). Vapor generation and behavior. Dans W. Popendorf (Édit.), *Industrial hygiene control of airborne chemical hazards* (p. 109-140). Boca Raton, FL: Taylor & Francis Group.
- Popendorf, W. (2006b). Vapor pressure in mixtures. Dans W. Popendorf (Édit.), *Industrial hygiene control of airborne chemical hazards* (p. 141-171). Boca Raton, FL: Taylor & Francis Group.
- Reinke, P., Jayjock, M. et Nicas, M. (2009). Well mixed rooms with changing conditions. Dans C. Keil, C. Simmons et T. Anthony (Édit.), *Mathematical models for estimating occupational exposure to chemicals* (2^e éd., p. 33-45). Fairfax, VA: American Industrial Hygiene Association.
- Reinke, P. et Keil, C. (2009). Well-mixed box model. Dans C. Keil, C. Simmons et T. Anthony (Édit.), *Mathematical models for estimating occupational exposure to chemicals* (2^e éd., p. 23-31). Fairfax, VA: American Industrial Hygiene Association.
- Reinke, P. H. et Brosseau, L. M. (1997). Development of a model to predict air contaminant concentrations following indoor spills of volatile liquids. *Annals of Occupational Hygiene*, 41(4), 415-435. doi: 10.1016/S0003-4878(96)00048-8
- Robbins, C. A., Krause, M. W., Atallah, R. H. et Plisko, M. J. (2012). Comparison of exposure measurements to near field-far field modeled results for benzene and base solvents during a cleaning process using plain or 0.1% benzene spiked toluene and xylene. *Journal of Chemical Health and Safety*, 19(6), 3-11.
- Spencer, J. W. et Plisko, M. J. (2007). A comparison study using a mathematical model and actual exposure monitoring for estimating solvent exposures during the disassembly of metal parts. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 4(4), 253-259. doi: 10.1080/15459620701205253
- Tielemans, E., Warren, N., Fransman, W. et van Tongeren, M. (2011). Advanced REACH tool (ART): Overview of version 1.0 and research needs. *Annals of Occupational Hygiene*, 55(9), 949-956. doi: 10.1093/annhyg/mer094
- Triolet, J. et Sallé, B. (2009). *Évaluation de la vitesse d'évaporation et de la concentration d'un composé organique volatil dans l'Atmosphère d'un local de travail* (Aide mémoire technique n° ED 6058). Paris, France: INRS.
- van Tongeren, M., Fransman, W., Spankie, S., Tischer, M., Brower, D., Schinkel, J., . . . Tielemans, E. (2011). Advanced REACH tool: Development and application of the substance emission potential modifying factor. *Annals of Occupational Hygiene*, 55(9), 980-988. doi: 10.1093/annhyg/mer093

- Vézina, M., Cloutier, E., Stock, S. *et al.* (2011). *Enquête québécoise sur des conditions de travail, d'emploi, et de santé et de sécurité du travail (EQCOTESST)* (Rapport n° R-691). Montréal, QC: IRSST.
- Von Grote, J., Hürlimann, C., Scheringer, M. et Hungerbühler, K. (2003). Reduction of occupational exposure to perchloroethylene and trichloroethylene in metal degreasing over the last 30 years: Influences of technology innovation and legislation. *Journal of Exposure Science and Environmental Epidemiology*, 13(5), 325. doi: 10.1038/sj.jea.7500288
- von Grote, J., Hürlimann, C., Scheringer, M. et Hungerbühler, K. (2006). Assessing occupational exposure to perchloroethylene in dry cleaning. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 3(11), 606-619. doi: 10.1080/15459620600912173
- Williams, P. R. et Mani, A. (2015). Benzene exposures and risk potential for vehicle mechanics from gasoline and petroleum-derived products. *Journal of Toxicology and Environmental Health*, 18(7-8), 371-399. doi: 10.1080/10937404.2015.1088810
- Zhang, Y., Banerjee, S., Yang, R., Lungu, C. ET Ramachandran, G. (2009). Bayesian modeling of exposure and airflow using two-zone models. *Annals of Occupational Hygiene*, 53(4), 409-424. doi: 10.1093/annhyg/mep017