

Introduction

Depuis la révolution industrielle et l'utilisation systématique de combustibles fossiles comme sources énergétiques, la qualité de l'air n'a cessé de se dégrader. La fréquence des épisodes de smog photochimique s'est accrue touchant de plus en plus de grandes agglomérations; Los Angeles, Mexico, Athènes, Milan mais aussi de grandes villes françaises; Paris, Toulouse, Lyon ou Strasbourg. De plus, des atteintes à la santé publique, liées aux fortes teneurs en photo-oxydants en zones urbaines et périurbaines, ont attiré l'attention des scientifiques et des pouvoirs publics. Ainsi en France, une loi dite « loi sur l'air » a été votée le 30 décembre 1996 et des discussions se sont engagées à l'occasion des Plans Régionaux de Qualité de l'Air (PRQA). Cette réflexion se poursuit au niveau européen dans le cadre de la directive-cadre sur la qualité de l'air ambiant qui demande aux Etats Membres d'évaluer la qualité de l'air ambiant par des mesures de concentrations et par des modélisations photochimiques.

La qualité de l'air d'un lieu dépend à la fois des conditions météorologiques, de la situation géographique et des situations d'émissions de polluants. Tous ces paramètres et notamment toutes les sources de polluants, anthropiques et biogènes, doivent être pris en compte pour permettre une bonne description de la chimie de la basse atmosphère. Du fait de la relation étroite, mais non linéaire, entre les phénomènes de pollution et les émissions de composés chimiques, il est réaliste d'envisager une décroissance de la fréquence des épisodes de pollution en réduisant les quantités ou en modifiant la nature (réactivité) des polluants atmosphériques émis.

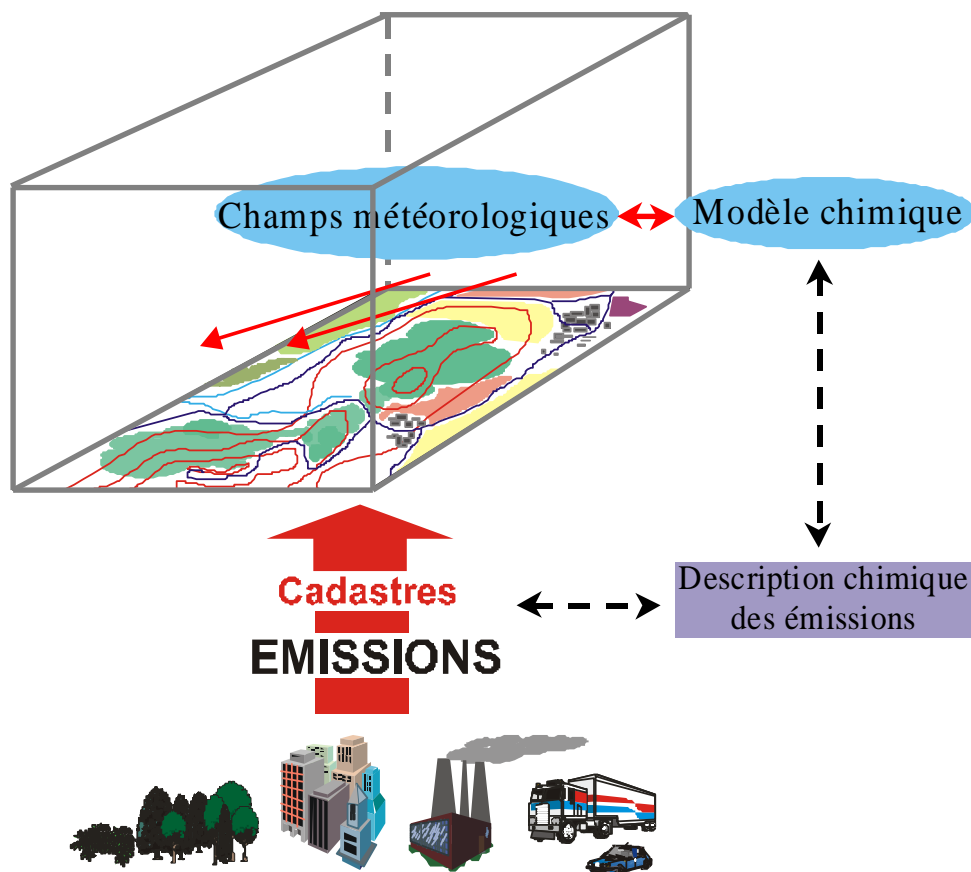
A ce titre, la modélisation de la qualité de l'air est devenue un outil nécessaire pour la gestion de notre environnement atmosphérique. Elle permet de réaliser des investigations descriptives et prospectives pour une meilleure compréhension des phénomènes de pollution. Il est ainsi envisageable de déterminer a priori les moyens d'action à mettre en œuvre pour améliorer globalement la qualité de l'air et aussi pour réduire la fréquence et l'intensité des épisodes de pollution.

Parmi les sources d'émissions anthropiques, le trafic routier constitue l'une des principales causes de pollution à étudier. Deux voies d'actions principales sont envisageables pour limiter les émissions dues au trafic routier. La première possibilité est l'amélioration des caractéristiques techniques des moteurs en vue notamment d'augmenter leur rendement et ainsi de réduire les émissions dues à la combustion incomplète des carburants. Cependant, le parc de véhicules ne pouvant se renouveler que lentement (5 à 10 ans au minimum), la mise en application des résultats d'une telle mesure serait longue. L'autre possibilité concerne les carburants utilisés. Ainsi, la reformulation de la composition des carburants, avec notamment la réduction des

teneurs en aromatiques et l'adjonction d'additifs oxygénés tel que l'Ethyl Tertio Butyl Ether (ETBE), permettent de modifier la composition des émissions et de réduire de façon notable les émissions de certains des polluants les plus réactifs notamment parmi les composés aromatiques.

Au vu des résultats existants dans la bibliographie sur les effets de l'utilisation des carburants alternatifs, il est apparu nécessaire – et c'est l'objectif de cette thèse - d'étudier les impacts éventuels de tels carburants sur la qualité de l'air dans un contexte européen et ce, à l'échelle locale (Strasbourg) et régionale (vallée du Rhin supérieur). Ainsi, dans le cadre du programme français AGRICE (AGRIculture pour la Chimie et l'Energie) du CNRS, les effets de l'utilisation des carburants reformulés et additivés de composés oxygénés sur la qualité de l'air ont été évalués. L'étude a d'abord été réalisée sur l'agglomération strasbourgeoise ($24 \times 32 \text{ km}^2$) avec une résolution spatiale kilométrique afin d'appréhender l'ensemble des processus physico-chimiques liés à l'échelle locale. Puis, pour une meilleure appréciation du transport des panaches urbains et de l'effet de la modification de la composition de ces panaches par l'utilisation de ces nouveaux carburants, des études à l'échelle régionale de la vallée du Rhin supérieur ont été menées sur un domaine d'extension $144 \times 216 \text{ km}^2$ et une résolution spatiale de $4 \times 4 \text{ km}^2$.

L'évaluation de ces impacts possibles a été réalisée par simulation numérique à l'aide de modèles de qualité de l'air. L'esprit du plan de cette thèse peut se résumer à travers cette figure:



Simuler la qualité de l'air d'un lieu revient à décrire les transformations physiques et chimiques d'un certain volume d'atmosphère en contact avec le sol (le parallélogramme gris). Il faut dans un premier temps déterminer les conditions météorologiques régnant en tout point de cette partie de l'atmosphère: champs de vent, champs de température, etc. Ces informations serviront à calculer le transport (sous l'action des vents) et la transformation chimique (en fonction notamment de la température) des polluants. Puis, il faut évaluer les quantités de polluants émises à la surface du

sol et injectées dans les basses couches du volume d'atmosphère modélisé. Ces émissions vont alimenter les mécanismes chimiques et ainsi participer à la transformation des espèces chimiques contenues dans l'atmosphère. La dernière étape consiste à intégrer les paramètres météorologiques et les émissions de polluants afin de calculer les variations horaires des champs de concentration des espèces chimiques en couplant les phénomènes de transport, de diffusion et de réactivité chimique.

Ainsi, après un premier chapitre consacré à une brève description des processus physico-chimiques ayant lieu dans la troposphère, à l'évaluation de la qualité de l'air et des voies possibles d'amélioration de celle-ci, les différentes étapes de simulation nécessaires à l'évaluation des impacts éventuels de l'utilisation des carburants alternatifs seront exposées. Au cours du deuxième chapitre, les caractéristiques des zones d'étude (Strasbourg et vallée du Rhin supérieur) et des périodes correspondant à des épisodes de pollution photochimique à l'ozone (16 septembre 1992 et 9-14 mai 1998) seront détaillées ainsi que les principaux résultats des modélisations météorologiques. Le troisième chapitre est consacré à une brève présentation des inventaires d'émissions ayant servi de base à cette étude et à la mise en place des nouveaux cadastres d'émissions tenant compte de la reformulation et de l'oxygénation des carburants. Dans le quatrième chapitre, les résultats de la modélisation de la qualité de l'air pour la période du 9 au 14 mai 1998 et la journée du 16 septembre 1992 seront présentés.

Cette thèse se clôturera par les principaux résultats des études d'impacts. Les résultats des effets sur la qualité de l'air de l'utilisation des carburants reformulés et oxygénés seront présentés dans le cinquième chapitre. Le sixième chapitre, quant à lui, regroupe les résultats d'autres études d'impacts basées sur la mise en place de futures réglementations régionales et européennes en terme d'émissions de polluants atmosphériques. Cette dernière étude a été réalisée à l'occasion de la préparation du Plan Régional de la Qualité de l'Air en Alsace.