

**DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT**

**(Arrêté du 25 mai 2016)**

Date de la soutenance : **25 janvier 2019**

Nom de famille et prénom de l’auteur : **Ana Rita COSTA DA CRUZ**

Titre de la thèse : *« Modélisation compositionnelle et cinétique des bio-huiles de pyrolyse rapide issues de la biomasse lignocellulosique »*

**Résumé**

La pyrolyse rapide est une des voies de conversion thermochimique qui permet la transformation de biomasse lignocellulosique en bio-huiles. Ces bio-huiles, différentes des coupes lourdes du pétrole, ne peuvent pas être directement incorporées dans des unités existantes de raffinage. En effet, en raison de leur forte teneur en oxygénés, les bio-huiles nécessitent une étape de pré-raffinage, telle que l’hydrotraitement, afin d’éliminer ces composés.

L’objectif de ce travail est de comprendre la structure, la composition et la réactivité de bio-huiles grâce à la modélisation de données expérimentales. Pour comprendre leur structure et leur composition, des techniques de reconstruction moléculaire basées sur des données analytiques ont été appliquées générant ainsi un mélange synthétique, dont les propriétés correspondent à celles de la bio-huile. Pour comprendre leur réactivité, l'hydrotraitement de molécules modèles a été étudié : gaïacol et furfural. Pour cela, un modèle déterministe et un modèle stochastique ont été créés pour chacun d’eux. L’approche déterministe visait à déterminer une gamme de paramètres cinétiques, qui ont ensuite été affinés par l’approche stochastique créant un nouveau modèle. Cette approche a permis de générer un réseau de réactions en définissant et en utilisant un nombre limité de familles et règles des réactions. Finalement, le mélange synthétique a été utilisé dans la simulation stochastique de l’hydrotraitement de la bio-huile, étayée par la cinétique des molécules modèles.

En conclusion, ce travail a permis de recréer la fraction légère de la bio-huile et de simuler leur l'hydrotraitement, via les paramètres cinétiques des composés modèles, qui prédisent de manière raisonnable les effluents de l'hydrotraitement de celles-ci.

Mots-Clés : Bio-huile, Biomasse lignocellulosique, Pyrolyse rapide, Composés oxygénés, Modélisation Compositionnelle, Modélisation Cinétique, Composés Modèles, Reconstruction Moléculaire, Simulation Stochastique..