



Université Claude Bernard



# DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **17 décembre 2021**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Monsieur LEDEZMA LOPEZ Gabriel Alejandro**

Titre de la thèse : « Représentation de structures poreuses d'alumine gamma par modélisation numérique »

## Résumé

Les matériaux poreux sont largement utilisés en génie chimique. A l'échelle mésoporeuse, les effets de confinement influencent la thermodynamique et les conditions de transport. En effet, l'architecture du matériau poreux peut augmenter les limitations de transfert de masse à l'intérieur du catalyseur. Par conséquent, comprendre non seulement les propriétés texturales mais aussi la topologie du solide est importante pour améliorer les performances du catalyseur et la précision des différents modèles permettant de concevoir et d'évaluer les performances des réacteurs hétérogènes. L'alumine gamma est un matériau poreux désordonné à tortuosité élevée très souvent utilisé dans le raffinage du pétrole et la pétrochimie, dont la topologie n'est pas encore totalement comprise. Des articles de recherche récents suggèrent que ce matériau a différents domaines de pores, chacun caractérisé par sa propre distribution de taille de pores et sa propre fraction de vide. L'interaction entre ces différents niveaux joue clairement un rôle dans une diffusion efficace. En créant des jumeaux numériques d'échantillons réels d'alumine, il est possible de mieux comprendre comment les propriétés texturales et la topologie du réseau influencent la diffusion à travers le réseau à un niveau fondamental. Dans ce travail, un modèle de réseau de pores rapide et flexible est créé. Ensuite, différents algorithmes pour caractériser le réseau de pores numériques sont développés. Ces algorithmes simulent la porosimétrie à l'azote, la porosimétrie au mercure, la cryoporométrie et la résonance magnétique nucléaire à gradient de champ d'impulsion (PFG-RMN). Un jumeau numérique d'alumine gamma est finalement créé en optimisant les paramètres d'entrée du modèle de réseau de pores pour s'adapter à une véritable isotherme de sorption. En utilisant des simulations de diffusion sur le modèle de réseau de pores ajusté aux courbes de sorption d'azote, un facteur de tortuosité a été calculé qui diffère de moins de 20 % du facteur de tortuosité mesuré par PFG-RMN. Cela illustre comment un jumeau numérique permet de fournir une estimation raisonnable du facteur de tortuosité à partir d'expériences de porosité à l'azote facilement disponibles.

Mots-clés en français

**Supports d'alumine gamma, Modèles de réseau de pores, Caractérisation numérique, Diffusion en milieux poreux, Jumeau numérique**

Mots-clés en anglais

**Gamma Alumina Supports, Pore Network Models, Computational Characterization, Diffusion in Porous Media, Digital Twin**

