

# Avis de Soutenance

Alexandre PERRET

Sciences - STS

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

*Etude des propriétés de transport du CO<sub>2</sub> et de l'éthanol en solution hydroalcoolique par dynamique moléculaire classique: Application aux vins de Champagne.*

Soutenance prévue le **jeudi 11 décembre 2014** à 14h00

Lieu : Université Reims Champagne-Ardenne UFR Sciences Exactes et Naturelles Campus Moulin de la Housse 51687 REIMS salle Amphithéâtre 3

## Composition du jury proposé

M. Alexander ALIJAH	Université Reims Champagne Ardenne	Directeur de thèse
M. Gérard LIGER-BELAIR	Université Reims Champagne Ardenne	CoDirecteur de thèse
M. Régis GOUGEON	Université de Bourgogne - Institut Universitaire de la Vigne et du Vin - Jules Guyot	Rapporteur
M. Roland STOTE	Institut de Génétique et de Biologie Moléculaire et Cellulaire (IGBMC)	Rapporteur
M. Nicolas FLOQUET	Université de Montpellier - Institut des Biomolécules Max Mousseron (IBMM UMR5247)	Examineur
M. David BONHOMMEAU	Université de Reims Champagne-Ardenne	Co-encadrant de thèse
M. Jean-Marc NUZILLARD	Université de Reims Champagne-Ardenne	Examineur
M. Stéphane PRALET	BULL SAS	Examineur

**Mots-clés** : dynamique moléculaire classique, diffusion moléculaire, dioxyde de carbone, RMN, taux de grossissement, performance de GROMACS

## Résumé :

Les travaux présentés dans ce manuscrit sont consacrés à l'étude de la diffusion du dioxyde de carbone dissous et de l'éthanol dans une solution hydroalcoolique modèle représentant le champagne. La première partie de ce travail aborde les différents formalismes de la diffusion moléculaire, ainsi que les méthodes théoriques et expérimentales utilisées pour rendre compte de ce phénomène de transport. Une attention particulière est apportée à la dynamique moléculaire en champ de forces classiques qui est utilisé dans ce travail avec le logiciel GROMACS. Cette méthode théorique procure un point de vue novateur dans la recherche sur le champagne et plus particulièrement sur le rôle de chaque espèce majoritaire dans la diffusion du CO<sub>2</sub>. La spectroscopie RMN, ainsi qu'une méthode expérimentale basée sur l'étude du taux de grossissement des bulles, ont également été utilisées. Dans la deuxième partie, les résultats théoriques et expérimentaux sont présentés et comparés entre eux afin de valider le protocole des simulations de dynamique moléculaire. Les viscosités de la solution modèle et du champagne, ainsi que les rayons hydrodynamiques du CO<sub>2</sub> et de l'éthanol sont également étudiés. La dernière partie du manuscrit concerne le partenariat avec l'entreprise Bull et l'étude des performances du logiciel GROMACS. L'expertise des équipes de Bull, ainsi que les outils développés par l'entreprise, permettent d'étudier le passage à l'échelle (ou "scalabilité") et le comportement parallèle de GROMACS pour la modélisation du champagne.