

Modélisation hybride (Machine Learning & modèle phénoménologique) de la polymérisation radicalaire du styrène en présence de particules de pneus recyclés

Cindy Trinh¹, Bahia Lamari¹, Dimitrios Meimaroglou¹, Sandrine Hoppe¹

¹ Laboratoire Réactions et Génie des Procédés, Université de Lorraine, CNRS UMR7274, LRGP, F-54000 Nancy, France

cindy.trinh@univ-lorraine.fr

Résumé

La polymérisation radicalaire du styrène en présence de particules de pneus recyclés, appelées GTR (Ground Tire Rubber), présente deux intérêts industriels. Elle permet à la fois de recycler des pneus usagés et d'obtenir par le greffage Polystyrène-GTR des nouveaux matériaux composites aux propriétés mécaniques améliorées. Le but de la modélisation de ce système est de comprendre le lien entre les paramètres procédés (i.e. température de la réaction, quantité initiale des réactifs) et la qualité du produit obtenu (i.e. taux de conversion du styrène, efficacité de greffage). Cependant, le système est difficile à modéliser avec des équations physico-chimiques car beaucoup de réactions et de phénomènes non-linéaires interviennent simultanément et leur mécanisme n'est pas toujours complètement connu [1]. Il s'agit principalement du mécanisme de greffage mais aussi des phénomènes de diffusion (gel, glass and cage effect). De plus, le GTR commercial provient de pneus divers, avec des compositions différentes et inconnues qui ont un effet d'accélération ou d'inhibition sur la polymérisation. Les modèles phénoménologiques, basés sur les lois physico-chimiques, sont donc assez longs à développer et pas tout à fait précis. En revanche, les méthodes de Machine Learning (ML), qui sont des méthodes basées uniquement sur les données, ont déjà montré leur puissance à résoudre des problèmes complexes dans d'autres domaines. Ainsi, une approche hybride est envisagée ici afin de combiner les forces de chacun, à savoir l'explicabilité des modèles phénoménologiques et la précision des méthodes de ML. En particulier, le ML sera utilisé pour prédire la déviation due à la présence de GTR qu'il est difficile de formaliser. **Cet exposé abordera les approches hybrides envisagées pour la modélisation de ce système mais surtout la stratégie expérimentale établie pour générer suffisamment de données de bonne qualité, celles-ci étant primordiales pour toute approche ML.**

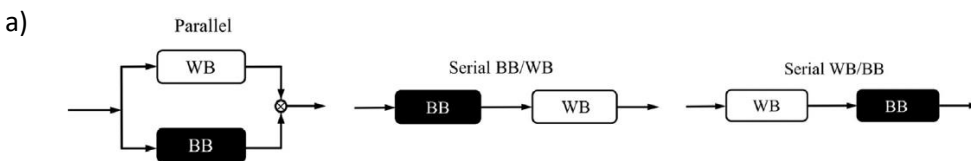
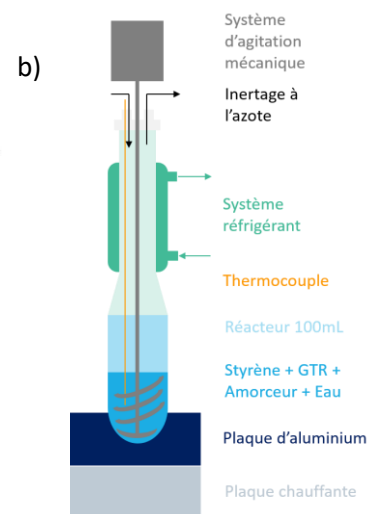


Figure a. Exemples d'architectures hybrides [2] ;

WB : white box (modèle phénoménologique) - BB : black box (modèle ML).

Figure b. Système de polymérisation.



Références

- [1] Dimitrios Meimaroglou, Daniela Florez, Guo-Hua Hu, "A kinetic modeling framework for the peroxide-initiated radical polymerization of styrene in the presence of rubber particles from recycled tires", *Chemical Engineering Science* **2020**.
- [2] Sohrab Zendehboudi, Nima Rezaei, Ali Lohi, "Applications of hybrid models in chemical, petroleum, and energy systems: A systematic review", *Applied Energy* **2018**, 228, 2539-2566.