Digitalisation des procédés pour les systèmes biologiques

Baptiste BOIT[1], Claude-Gilles DUSSAP[2]

Affiliation 1 : Biotechnology and Process Development, Roquettes Frères, Lestrem, France

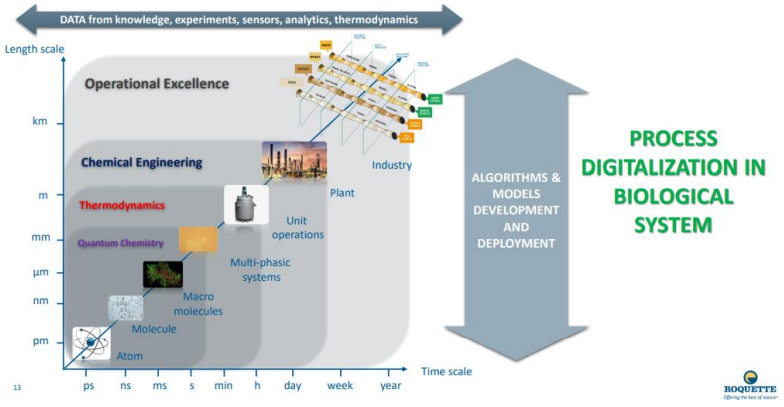
Affiliation 2 : CNRS, SIGMA Clermont, Institut Pascal, Université Clermont Auvergne, Clermont-Ferrand, France

Introduction

Les évolutions dans le domaine des outils de digitalisation (cloud, big data, Intelligence Artificielle, puissance de calcul) permettent d'ouvrir de nouveaux horizons dans le domaine du génie des procédés et en particulier pour les industries opérant avec des milieux biologiques complexes (bioraffineries, biotechnologies, industries pharmaceutiques, agroalimentaires…). Ils pourraient permettre d'accélérer la transformation vers l'usine du futur et accroitre la compétitivité de ces industries. Sa mise en œuvre représente une mutation technologique et culturelle dans la manière dont une entreprise ou une industrie aborde le développement, la fabrication, la qualité et la sécurité.

La digitalisation des procédés

L'approche systémique dans les industries de transformation ou d'extraction s'avère relativement complexe car elle opère dans des échelles d'espace et de temps très différentes. Dans le cadre de l'intégration des technologies de digitalisation pour les systèmes biologiques, il conviendra de développer les outils permettant une approche globalisée et cohérente dans son ensemble.



Axes de développement

La connaissance et la prédiction des propriétés thermodynamiques des systèmes constitue le socle de cette approche, tout autant que pour des procédés chimiques « classiques » d'ailleurs. Dans les systèmes biologiques composés de protéines, de carbohydrates et de sels, l'eau joue un rôle majeur en y apportant un certain degré de complexité. Les outils traditionnels de la thermodynamique ont été historiquement développés pour la chimie ou la pétrochimie mais ne sont pas pleinement adaptés aux systèmes aqueux. Les approches de type COSMO basées sur des approches de simulation de la mécanique quantique ont été étudiées et permettront de répondre à cette problématique.

La modélisation des procédés constitue également un axe majeur dans cette perspective. Des éditeurs de logiciel comme PROSIM ou Siemens PSE fournissent des solutions de plus en plus avancées pour la prédiction des propriétés thermodynamiques, la modélisation des opérations unitaires et des unités

de production. Les réflexions se portent vers l'évolution de nos méthodologies par l'approche hydride combinant modélisations mécanistiques et machine learning et l'utilisation des outils d'intelligence artificielle par les ingénieurs procédés pour l'analyse et le traitement des données.

La technologie de procédés analytiques (PAT) fait appel à différents outils d'analyse conçus pour fournir des informations en temps réel ou en temps quasi réel permettant le contrôle et l'optimisation des procédés. Les technologies spectroscopiques Raman ou de fluorescence, qui sont peu sensibles à l'influence de l'eau, constituent un axe de développement prometteur pour les systèmes biologiques. La démocratisation des outils d'intelligence artificielle, l'intégration d'approches basées sur la mécanique quantique et la chimiométrie devront permettre d'extraire de plus en plus d'informations.

Les jumeaux numériques utilisant les outils de modélisation, les technologies de procédé analytique (PAT) et l'intelligence artificielle permettront l'amélioration de la performance industrielle (optimisation, contrôle avancé…) en temps réel. L'approche par méta-modèle sera à considérer pour assurer la minimisation des temps de calcul et la réactivité des systèmes.

Conclusion

La digitalisation offre des perspectives importantes pour les défis futurs dans les industries impliquant des procédés et des bioprocédés. Elle devra être intégrée aux efforts menant à une production à grande échelle, tels que l'extrapolation et le développement de procédés à un stade précoce et avancé. Une collaboration forte avec le monde universitaire permettra de mettre en place des outils et des méthodologies adaptées aux procédés de transformation et d'extraction opérant dans les systèmes biologiques.

Références bibliographiques

Bergmann, E. ; Baritaux, J.C. ; Boit B. ; Lecocq, A. ; Rebuffel, V. ; Toure, O. ; Ibert, M. (2017). Method for determining a degree of polymerisation of a polymer, *Patent WO2019129982, CEA, Roquette Frères*

Commenge, J.M. (2020). Big Data et Intelligence Artificielle pour le Génie des Procédés. *École d'ingénieur. France*, hal-03107557

Dumouilla, V.; Dussap, C. G. (2021). Online analysis of D-glucose and D-mannose aqueous mixtures using Raman spectroscopy: an in silico and experimental approach, *Bioengineered*, 12:1, 4420-4431

Markarian, J. (2021). Opportunities for Digital Twins, BioPharm International, September 2021 Issue, 34, 9, 30–33

McBride, K.; Sundmacher, K. (2019). Overview of Surrogate Modeling in Chemical Process Engineering. *Chemie Ingenieur Technik*, 91: 228-239

Negny, S. (2021). Vers un usage des méthodes de deep learning en génie des procédés. *L'Intelligence Artificielle : outil incontournable pour le génie des procédés*, les zooms de la SFGP, GT IAP

Toure, O. ; Lebert, A. ; Dussap, C.G. (2016). Extension of the COSMO-RS-PDHS model to the prediction of activity coefficients in concentrated {water-electrolyte} and {water-polyol} solutions. *Fluid Phase Equilibria*, 424, 90-104

Toure, O.; Boit B.; Dussap, C.G.(2018). Predictive determination of excess chemical potentials. *Patent WO2019229378, Roquette Frères*

Dumouilla, V.; Dussap, C. G. (2021). Online analysis of D-glucose and D-mannose aqueous mixtures using Raman spectroscopy: an in silico and experimental approach, *Bioengineered*, 12:1, 4420-4431