

Biocomposites from Poly (3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate) and Lignocellulosic Fillers

Processes Stored in Data Warehouse Structured by an Ontology

Mélanie Munch, Patrice Buche, Stéphane Dervaux, Amélie Breysse, Marie-Alix Berthet, Grégoire David, Sarah Lammi, Fleur Rol, Amandine Viretto, Hélène Angellier-Coussy

INRAE

 I2M BORDAUX INSTITUT DE MÉCANIQUE ET D'INGÉNIERIE

 [®] agence nationale de la recherche
D2KAB AU SERVICE DE LA SCIENCE

Contexte (1)

50s: Wonderful Plastic Packaging!



Wonderful Plastic Packaging : incredible **accumulation**

- We are consuming 60 kg of plastics/year/inhabitant
- 40% of this plastic is for packaging
- 90 % of this plastic will be still on Earth after our own death



Nécessité de développer de nouvelles alternatives au plastique!

Contexte (2)

50s: Wonderful Plastic Packaging!



Wonderful Plastic Packaging : incredible **accumulation**

- We are consuming 60 kg of plastics/year/inhabitant
- 40% of this plastic is for packaging
- 90 % of this plastic will be still on Earth after our own death



Nécessité de développer de **nouvelles alternatives au plastique!**

Biopolymères (PHBV, PHA,...)



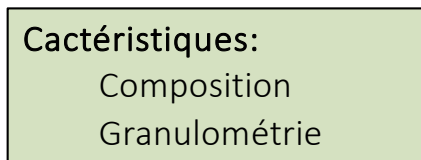
Biomasses (sarments, grignons...)



Contexte (3)

Biomasse *Déchets de parcs urbains,
Sarments de vignes,*

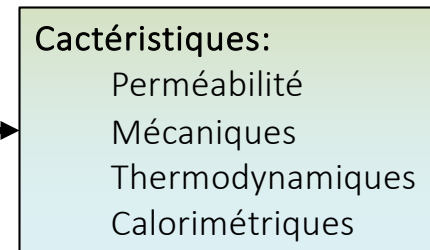
...



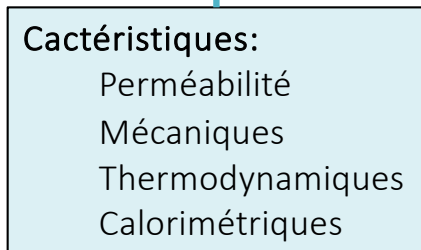
Taux de charge



Emballage



Matrice



→ **Objectif:** Comment raisonner sur l'impact des différents paramètres sur le résultat final?

Enjeux et défis

Sources hétérogènes

MALICE

NoAW

EcoBioCAP

Resurbis

Usable

Sarment de vigne
Ecorce de pin
Paille de blé
Grignon d'olive

Sarment de vigne

Paille de blé
Grignon d'olive

Déchets verts de
parc urbains
Farine de bois

Cellulose pure

Grande variabilité des mesures, des productions, des critères mesurés...

NoAW: <https://cordis.europa.eu/project/id/688338>

EcoBioCAP: <https://cordis.europa.eu/project/id/265669>

Resurbis: <https://cordis.europa.eu/project/id/7303493>

Usable: <https://cordis.europa.eu/project/id/836884>

→ Quels sont les enjeux présentés par cette collection de données?

5

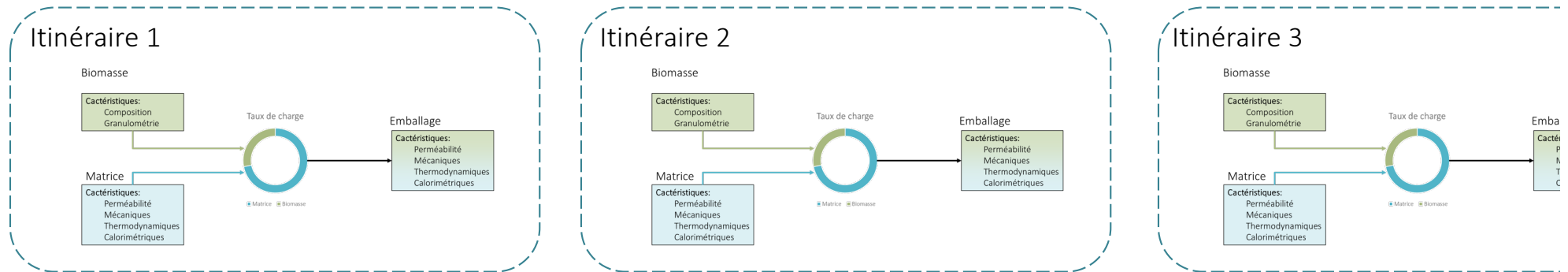
Enjeux et défis

Intégration de raisonnements

1. **Présence d'incertitudes:** données manquantes, mesurées, répétées...
2. **Complexité des itinéraires de production:** étapes multiples, raisonnement temporel...
3. **Enjeux technologiques:** questions et connaissances expertes à intégrer
4. **Ouverture sur d'autres bases:** quelles liaisons possibles?

→ Quelles informations pour caractériser ces données?

Typologie des données



Un itinéraire:

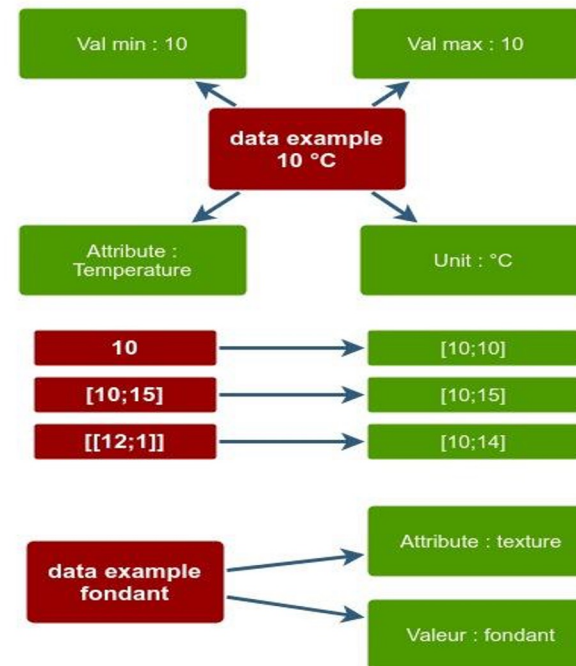
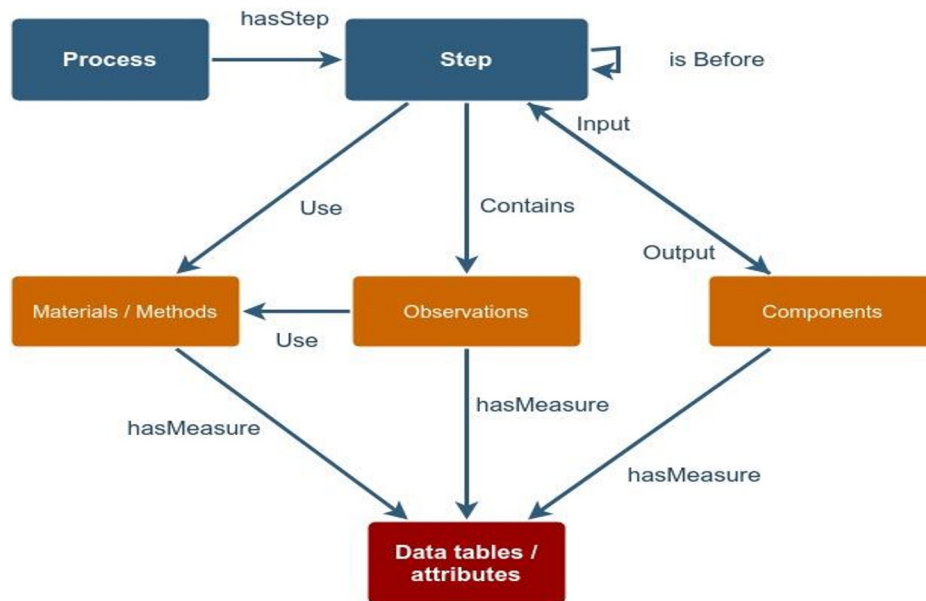
- Une **biomasse**: décrite par ses caractéristiques, son process de fabrication...
- Une **matrice**: décrite par ses caractéristiques
- Un **emballage**: décrit par ses caractéristiques, son process de fabrication...

Pour chacune, nécessité de définir un **vocabulaire expert précis**

→ Comment représenter les mesures réalisées et les contextualiser dans le procédé?

7

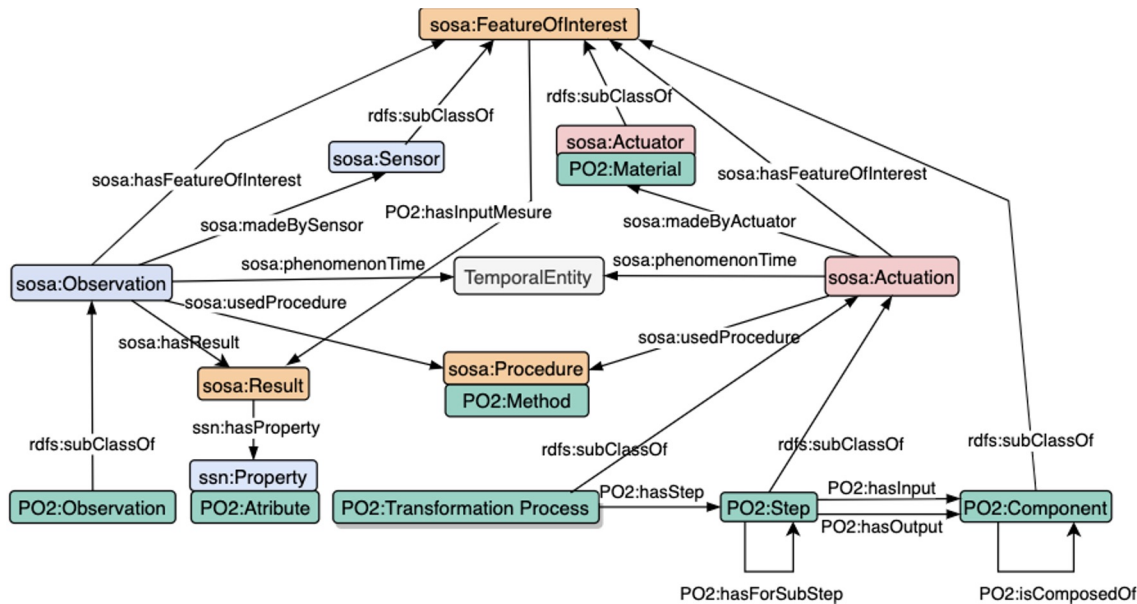
Process and Observation Ontology (1)



→ Comment cette structure est-elle définie?



Process and Observation Ontology (2)



67 classes et 79 relations

7 classes de base PO2: ...

Défini en [OWL](#)

Réutilise des ontologies standards

- [SOSA/SSN](#)
- [Time Ontology](#)
- [BFO](#)

Spécialisé en domaines d'application:

- fabrication des gels laitiers [[INDA2019](#)]
- fabrication des saucisses [[IFOW2020](#)]
- fabrication d'emballages [[MTSR 2021](#)]

<http://quantum.agroparistech.fr/PO2/>

→ Comment les données ont-elles été saisies?

9


PO² Manager : Edition du vocabulaire

PO² Manager - Biorefinery






File Tools Help

- ▶ PO2 / attribute
- ▼ PO2 / component
 - ▼ biomass
 - Brewing spent grain
 - ▼ Grasses and energetic plants
 - bagasse**
 - Corn stover
 - Oilseed rap straw
 - rice straw
 - Sugarcane leaf
 - Sugarcane straw
 - Switchgrass
 - wheat straw
 - Lignocellulosic filler
 - Olive pomace
 - Rapeseed oil cake
 - ▶ Urban park vegetal residue
 - ▶ Vine shoot
 - ▶ Wood
 - ▶ Gaz
 - ▶ polymers
 - ▶ Service product
 - ▶ PO2 / material
 - ▶ PO2 / method
 - ▶ PO2 / observation

online Biorefinery Composite ...

 **bagasse**

http://opendata.inra.fr/PO2_biorefinery/component/Bagasse
 > component > biomass > Grasses and energetic plants

	Label	Synonyms	Description
	bagasse		
	Bagasse		
	Bagasse		
	bagazo		
	Bagassa		

Exact Match

<http://lod.nal.usda.gov/nalt/15515>

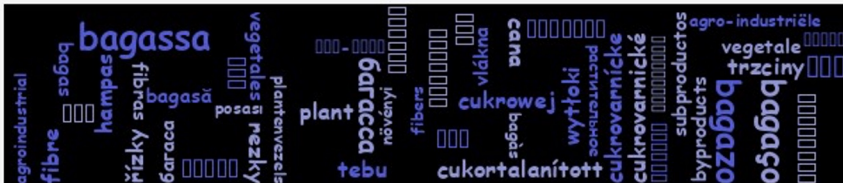
http://aims.fao.org/aos/agrovoc/c_776


<http://id.agrisemantics.org/gacs/C13405>

<http://id.cabi.org/cabt/16848>

Close Match

No content in table





PO² Manager : Annotation des données (itinéraire)

PO² Manager - Composite making process

File Tools Help

- Composite making process
 - Composite making process - ECOBIOCAP project ()
 - Itinerary 1 (WS production)
 - Ball milling (Ball milling IM)
 - Granulometry observation (Granulometry BM)
 - cutting milling (Cutting milling WS0)
 - cutting milling (Cutting Milling WS1)
 - Granulometry observation (Granulometry CM)
 - Impact milling (Impact Milling CM)
 - Granulometry observation (Granulometry IM)
 - Impact milling (Impact Milling WS1)
 - Granulometry observation (Granulometry WSF)
 - Itinerary 10 (PHBV-BM(20%))
 - Itinerary 11 (PHBV-BM(30%))
 - Itinerary 12 (OM production)
 - Itinerary 13 (PHBV2-WSF(20%))
 - Itinerary 14 (PHBV2-OM(20%))
 - Itinerary 2 (PHBV Characterization)
 - Itinerary 3 (PHBV-CM(10%))
 - Itinerary 4 (PHBV-CM(20%))
 - Itinerary 5 (PHBV-CM(30%))
 - Itinerary 6 (PHBV-IM(10%))
 - Itinerary 7 (PHBV-IM(20%))
 - Itinerary 8 (PHBV-IM(30%))
 - Itinerary 9 (PHBV-BM(10%))

online Biorefinery Composite ...

Itinerary 1 -- name: WS production

No compositions Show all compositions (red nodes) Show only input/output compositions export img

Step	Ne...
cut...	
cut...	
Im...	
Ball...	
cut...	cut...
cut...	Im...
Im...	Ball...
Im...	
cut...	Im...

```

graph TD
    WS[Wheat Straw] --> CM0[cutting milling (Cutting milling WS0)]
    CM0 --> WS1((WS1))
    CM0 --> WS2((WS2))
    WS1 --> CM1[cutting milling (Cutting Milling WS1)]
    WS2 --> IM1[Impact milling (Impact Milling WS1)]
    CM1 --> CM1_1((CM 1))
    CM1 --> CM1_2((CM 2))
    CM1 --> CM1_3((CM))
    IM1 --> WSF((WSF))
    CM1_1 --> IM2[Impact milling (Impact Milling CM)]
    CM1_2 --> IM2
    CM1_3 --> IM2
    IM2 --> IM2_1((IM))
    IM2 --> IM2_2((IM 2))
    IM2_1 --> BM[Ball milling (Ball milling IM)]
    IM2_2 --> BM
    BM --> BM((BM))
    
```

PO² Manager : Annotation des données (observation)

PO² Manager - Composite making process

File Tools Help

Composite making process

- Composite making process - ECOBIOCAP project ()
 - Itinerary 1 (WS production)
 - Ball milling (Ball milling IM)
 - Granulometry observation (Granulometry BM)
 - cutting milling (Cutting milling WS0)
 - cutting milling (Cutting Milling WS1)
 - Granulometry observation (Granulometry CM)
 - Impact milling (Impact Milling CM)
 - Granulometry observation (Granulometry IM) **(selected)**
 - Impact milling (Impact Milling WS1)
 - Granulometry observation (Granulometry WSF)
 - Itinerary 10 (PHBV-BM(20%))
 - Itinerary 11 (PHBV-BM(30%))
 - Itinerary 12 (OM production)
 - Itinerary 13 (PHBV2-WSF(20%))
 - Itinerary 14 (PHBV2-OM(20%))
 - Itinerary 2 (PHBV Characterization)
 - Itinerary 3 (PHBV-CM(10%))
 - Itinerary 4 (PHBV-CM(20%))
 - Itinerary 5 (PHBV-CM(30%))
 - Itinerary 6 (PHBV-IM(10%))
 - Itinerary 7 (PHBV-IM(20%))
 - Itinerary 8 (PHBV-IM(30%))
 - Itinerary 9 (PHBV-BM(10%))

Observation

Observation type : Observation name :

Date : (YYYY-MM-DD) Scale :

Time : (hh:mm:ss) Repetition :

Time duration : (hh:mm:ss)

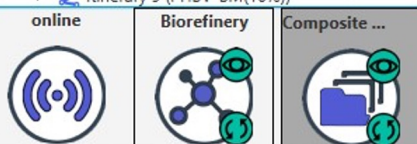
Objects observed :

- Step - Impact milling (Impact Milling CM)
- Composition - wheat straw (IM)
- Composition - wheat straw (IM 2)
- Composition - wheat straw (CM 2)

Materials & Methods

Observation 1 raw data

#	attribute	object	value	unit	comment	
0	Volume D50		[[109.4;4.9]]	µm		<input type="button" value="+"/> <input type="button" value="x"/>
1	Volume D10		[[21.2;1.6]]	µm		<input type="button" value="+"/> <input type="button" value="x"/>
2	Volume D90		[[363.18;24.8]]	µm		<input type="button" value="+"/> <input type="button" value="x"/>
3	Volume span		3.1	1(One)		<input type="button" value="+"/> <input type="button" value="x"/>



Accessibilité

Sous forme de SPARQL endpoint

http://quantum.agroparistech.fr/graphdb/repositories/Composite_making_process

A travers un web-service

<http://quantum.agroparistech.fr/spoq>

Sous forme de CSV

<https://data.inrae.fr/dataset.xhtml?persistentId=doi:10.15454/G3GBJC>

Présentation du *dataset*

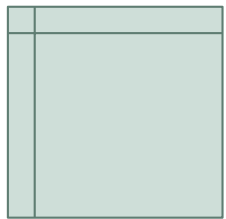
A light green square icon representing a table, with a vertical line on the left side and a horizontal line at the top.

Table 1.
Description des
biomasses

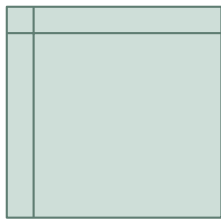
A light green square icon representing a table, with a vertical line on the left side and a horizontal line at the top.

Table 4. Étapes de
production des biomasses

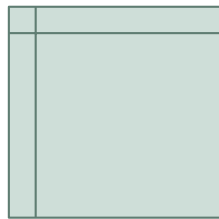
A light green square icon representing a table, with a vertical line on the left side and a horizontal line at the top.

Table 2.
Description du
PHBV

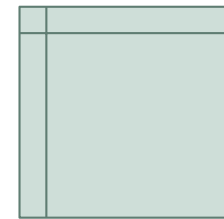
A light green square icon representing a table, with a vertical line on the left side and a horizontal line at the top.

Table 3.
Description des
composites

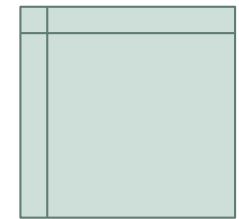
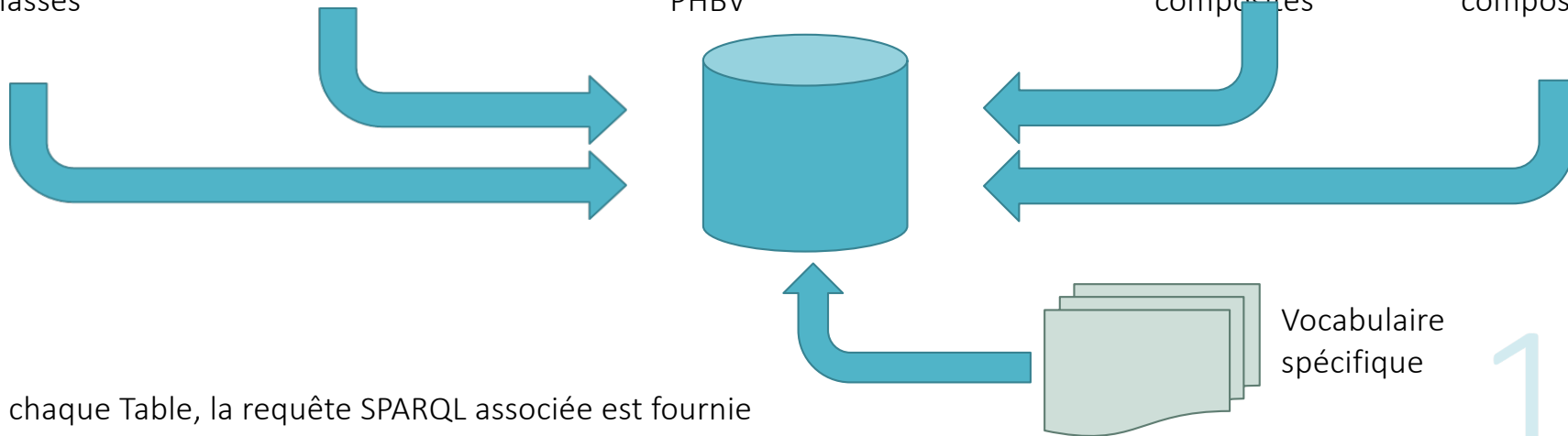
A light green square icon representing a table, with a vertical line on the left side and a horizontal line at the top.

Table 5. Étapes de
production des
composites



Pour chaque Table, la requête SPARQL associée est fournie

Conclusion

Jeu de données réelles construits à partir de différents projets sur la conception d'emballages bio-composites
Travail d'homogénéisation réalisée à partir de l'ontologie PO²
Plusieurs façons d'accéder aux différentes données
Elaboration d'un thésaurus pour décrire le vocabulaire spécifique expert

Présentation d'une application potentielle jeudi 30/06/2022 à IC (Session 6)
Une approche d'ingénierie inverse combinant ontologies et modèles relationnels probabilistes: application aux emballages bio-composites

[[ESWA 2022](#)] Munch M., Buche P., Dervaux S., Dibie J., Ibanescu L., Manfredotti C., Wuillemin P.H., Angellier-Coussy H. (2022) **Combining Ontology and Probabilistic Models for the Design of Bio-based Product Transformation Processes**. Expert Systems with Applications (in press)
[[DIB 2022](#)] Munch M., Buche P., Dervaux S., Breyse A., Berthet M-A., David G., Lammi S., Rol F., Viretto A., Angellier-Coussy H. **Biocomposites from poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate) and lignocellulosic fillers: Processes stored in data warehouse structured by an ontology**, Data in Brief (2022)