



# ➤ L'écosystème web sémantique PO2/TransformON: en route vers le FAIR By Design!

Ontologie pour l'intégration des données sur les aliments, les  
bioproduits et les biodéchets au sein du département  
TRANSFORM

Patrice Buche et Liliana Ibanescu

Séminaire SESAME 12/02/2024

[Weber2023\_Science]

npj | science of food

Explore content ▾ About the journal ▾ Publish with us ▾

---

[nature](#) > [npj science of food](#) > [articles](#) > article

Article | [Open Access](#) | [Published: 04 September 2023](#)

# PO2/TransformON, an ontology for data integration on food, feed, bioproducts and biowaste engineering

[Magalie Weber](#) , [Patrice Buche](#), [Liliana Ibanescu](#), [Stéphane Dervaux](#), [Hervé Guillemin](#), [Julien Cufi](#), [Michel Visalli](#), [Elisabeth Guichard](#) & [Caroline Pénicaud](#)

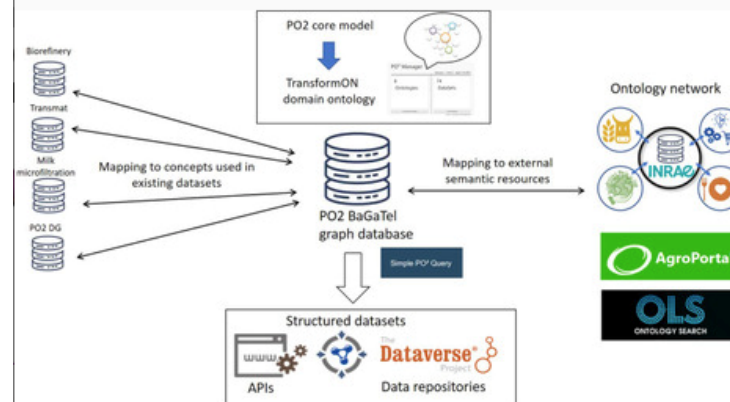
# PO2/TransformON, an ontology for data integration on food, feed, bioproducts and biowaste engineering

[Magalie Weber](#) ✉, [Patrice Buche](#), [Liliana Ibanescu](#), [Stéphane Dervaux](#), [Hervé](#)

[Guillemin](#), [Julien Cufi](#), [Michel Visalli](#), [Elisabeth Guichard](#) & [Caroline Pénicaud](#)

Comment intégrer les données permettant de prendre en compte les multiples dimensions de la valorisation des bioressources ?

Scoop.it!



De [www.nature.com](#) - 19 septembre, 11:16

Dans une étude publiée dans *npj Science of Food*, des scientifiques d'INRAE et d'AgroParisTech, dont deux unités de UPSaclay (MIA-Paris-Saclay et SayFood), présentent une approche pour intégrer les données de la recherche dans le domaine des aliments et bioproduits. En effet, le partage et le croisement des données de recherche constituent de puissants leviers d'innovation mais nécessitent de mettre en place des systèmes d'information performants. De tels systèmes peuvent s'appuyer sur des ontologies, qui fournissent un modèle pour intégrer des sources et des formats hétérogènes. En donnant une structure commune aux données dans un format lisible par une machine, les ontologies permettent de mettre en lien les données entre elles et de structurer la connaissance. Les chercheurs présentent une nouvelle ontologie, PO2/TransformON, spécifique à l'ingénierie des aliments, des bioproduits et des biodéchets qui n'a pas à ce jour d'équivalent à l'échelle internationale.

Cette ontologie fournit le modèle de concepts, de relations et le vocabulaire permettant de décrire tout processus de transformation de la biomasse et la caractérisation des entrées et/ou sorties de ces processus. Les données structurées à l'aide de l'ontologie peuvent ensuite être ex-

Caro: Notre papier a été remarqué par l'UPSay et mis à l'honneur dans le département sciences de la vie : <https://sco.lt/6qvJKK> !!!



## Un projet sémantique INRAE récompensé par le Prix Science Ouverte 2023 !



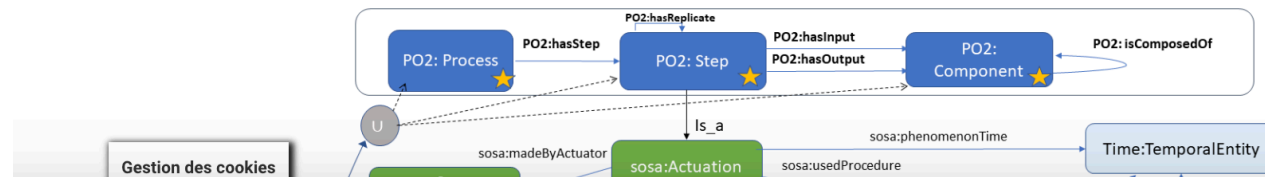
L'écosystème d'outils PO2 développé au sein du CATI DIISCICO et le projet ANR DataSusFood ont reçu le Prix National de la Science Ouverte dans la catégorie « Créer les conditions de la réutilisation » le 29 novembre 2023 lors de la cérémonie qui s'est déroulée au ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche.

Ces travaux s'inscrivent dans la politique du Plan National pour la Science Ouverte, déclinée au niveau institutionnel INRAE dans les domaines de l'agriculture, de l'alimentation et de l'environnement.

**La démarche s'appuie sur la mise en œuvre "by-design" des principes FAIR pour la mise en visibilité des données et leur intelligibilité.**

L'intelligibilité s'entend ici au sens de compréhension du contexte d'obtention des données grâce à l'utilisation d'une ontologie de domaine permettant de structurer les données et de définir les concepts et le vocabulaire spécifiques utilisés par les scientifiques pour décrire les données. La FAIRification repose sur les technologies du web sémantique et sur l'ontologie Process and Observation Ontology (PO2) illustré ci-dessous. Ce modèle générique a été spécialisé pour répondre au périmètre des recherches du département TRANSFORM INRAE. Le résultat est l'[ontologie de domaine TransformON](#) consultable sur AgroPortal.

### Core model de PO2/TransformON

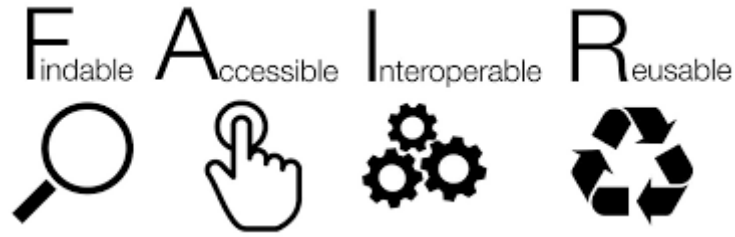






# Collecter, gérer et mettre à disposition des données

Dans un contexte de science ouverte



**Données Faciles à trouver, Accessibles, Interopérables, Réutilisables**

## « Data-driven research »

- Nécessité de **formaliser la connaissance** pour la rendre « explicite » et « partageable » : pas seulement les données mais aussi les informations sur les données



**Importance majeure de l'utilisation des ontologies**

**Ontologie = une représentation structurée et formalisée d'un domaine de connaissance**

- un consensus entre les experts du domaine
- basée sur un formalisme logique
- exploitable par la machine

# Cas d'études (1/4) [Weber2023\_Science]

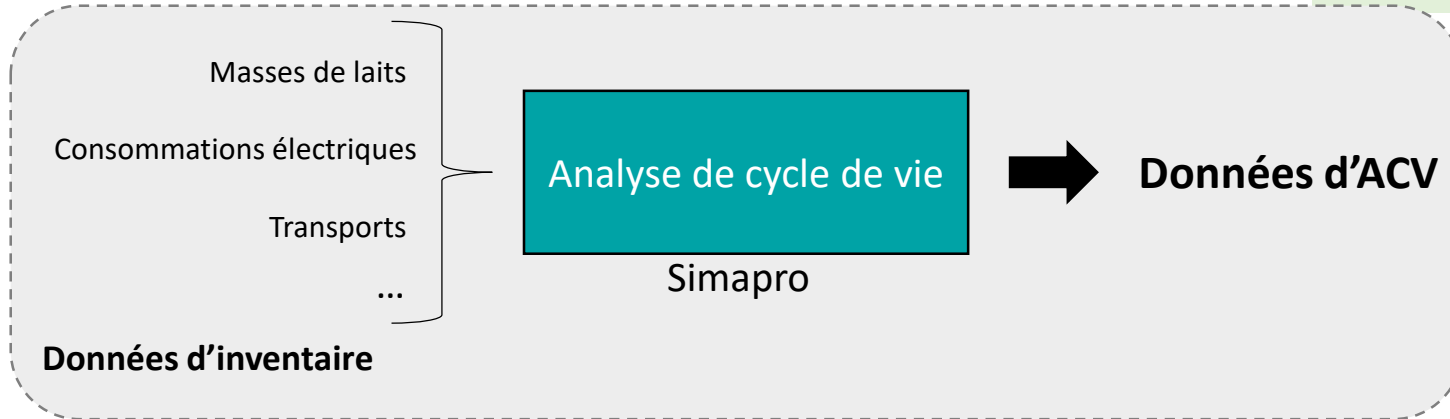
- Etudier la variabilité des impacts environnementaux des fromages (**SAYFOOD**)
  - Fabrication de fromage
  - Données d'inventaire pour l'analyse de cycle de vie (ACV)



## EQUIPE PORTEUSE DE CAS D'ETUDE



- **SAYFOOD** (INRAE, AgroParisTech): C. **Pénicaud** (6mM), coord. DataSusFood, A. **Cortesi** (doctorante)  
Ecoconception des aliments, bioproduits, bioprocédés et procédés alimentaires.



# Cas d'études (2/4) [Weber2023\_Science]

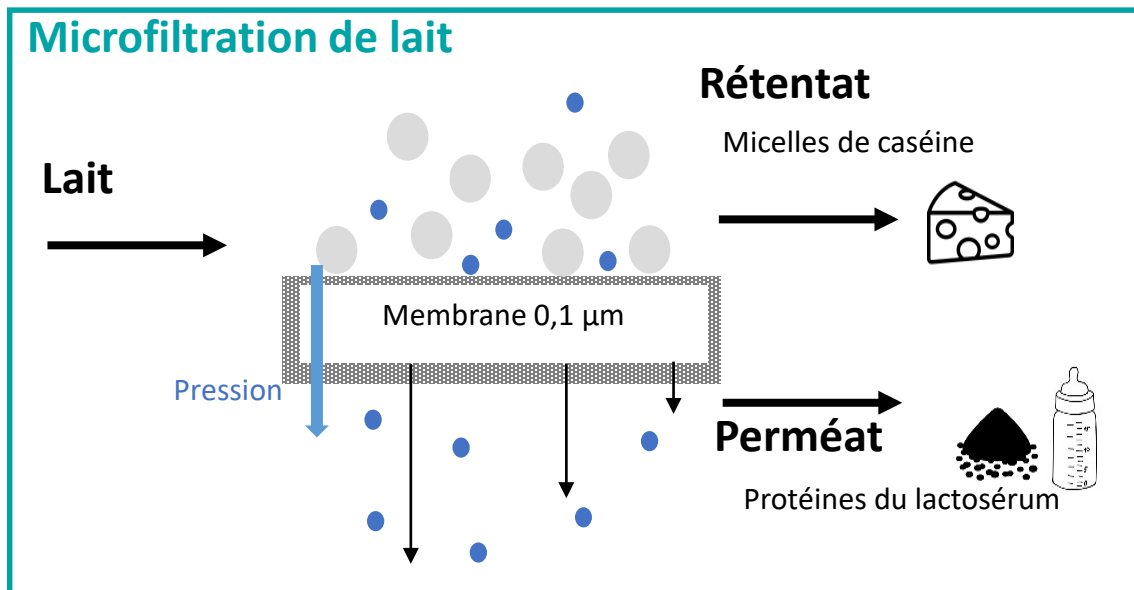


STLO

- Prédire les performances des opérations de microfiltration de lait (**STLO**)
  - Différentes technologies
  - Données incomplètes

## EQUIPE PORTEUSE DE CAS D'ETUDE

- **STLO** (INRAE, Agrocampus Ouest): G. **Gésan-Guiziou**. Génie des procédés, produits laitiers.





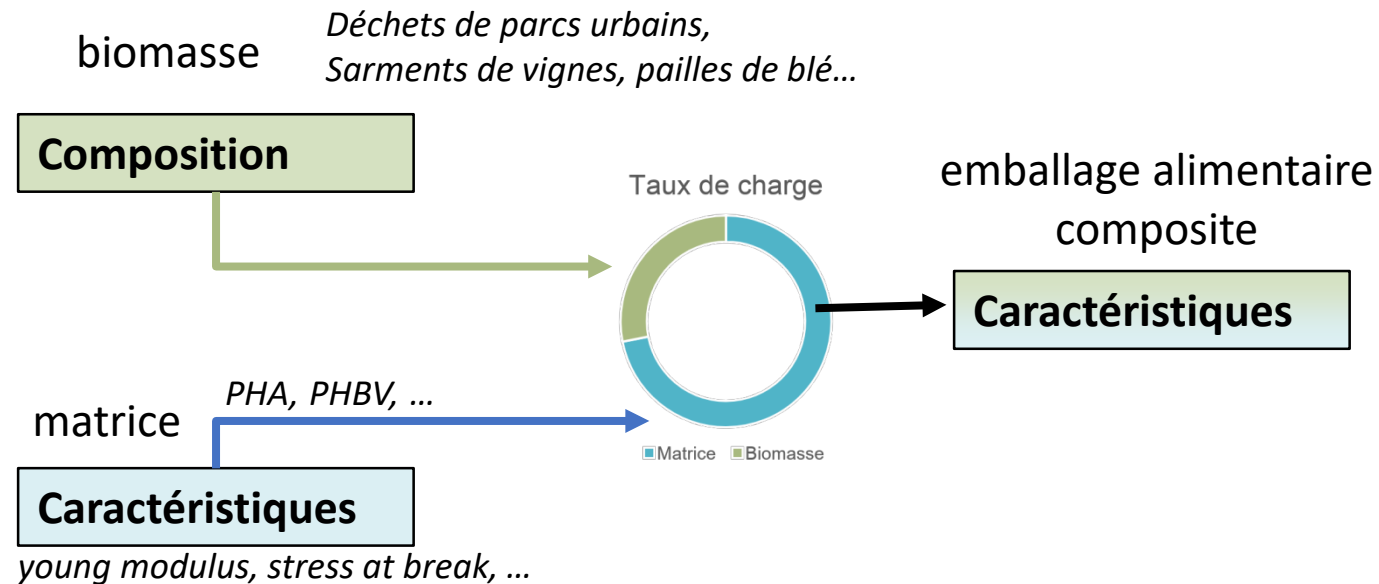
# Cas d'études (3/4) [Weber2023\_Science]

- Aide à la formulation de emballage alimentaire biocomposites (**IATE**)
  - Ingénierie inverse: quelle composition pour atteindre des caractéristiques mécaniques souhaités?

## EQUIPE PORTEUSE DE CAS D'ETUDE



- **IATE** (INRAE, CIRAD, Université de Montpellier, Montpellier Supagro): P. **Buche**, M. **Munch**



# Cas d'études (4/4) [Weber2023\_Science]

- Relier la perception sensorielle du consommateur aux autres propriétés des aliments (**CSGA**)
  - Procédés de transformation
  - Rhéologie
  - Écoconception

## Caractéristiques sensorielles des aliments

*Appétissant, pâte moelleuse, pâte croustillante, fromage fondant, salé.*

## Evaluation par les consommateurs

**PIZZA 8059070740813**

*« Appétissante. Pâte moelleuse et croustillante sur les bords, fromage fondant. Un peu salée. »*

*Liking = 7/10*



## EQUIPE PORTEUSE DE CAS D'ETUDE

- **CSGA** (INRAE, CNRS, UB-FC, AgroSupDijon): E. **Guichard**, C. **Salles**, M. **Visalli**, T. **Thomas-Danguin**. Mécanismes physico-chimiques, biologiques et psychologiques de la perception sensorielle.

**Relations entre procédés de transformation, écoconception, composition et qualité sensorielle**

**Relations entre composition, rhéologie et propriétés sensorielles**

# En pratique, quels besoins avec nos données ?



## Données d'intérêt

**Hétérogènes:** multi-source, multiformat...

**Multidisciplinaires :**  
microbiologie, biochimie,  
nutrition, physico-chimie,  
génie des procédés...

**Complexes :** perceptions  
sensorielles, impacts  
environnementaux,  
performance des usages...

**REUTILISER**

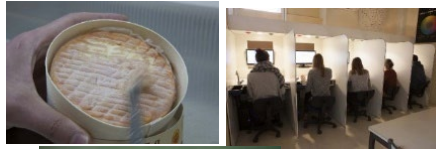
Avec d'autres outils  
*Interopérabilité*

**OUVRIR**

PRODUIRE DE NOUVELLES  
CONNAISSANCES,  
AIDER A LA DECISION, ...

**COUPLAGE DE MODÈLES,  
SYSTEMES MULTI-AGENTS....**

# Verrous méthodologiques: comment réutiliser et exploiter nos données ?



**Données d'intérêt**

**Hétérogènes:** multi-source, multiformat...

**Multidisciplinaires :**  
microbiologie, biochimie,  
nutrition, physico-chimie,  
génie des procédés...

**Complexes :** perceptions  
sensorielles, impacts  
environnementaux,  
performance des usages...

STRUCTURER

STANDARDISER (W3C)

INTERROGER

**REUTILISER**

Avec d'autres outils  
*Interopérabilité*

**OUVRIR**

PRODUIRE DE NOUVELLES  
CONNAISSANCES,  
AIDER A LA DECISION, ...

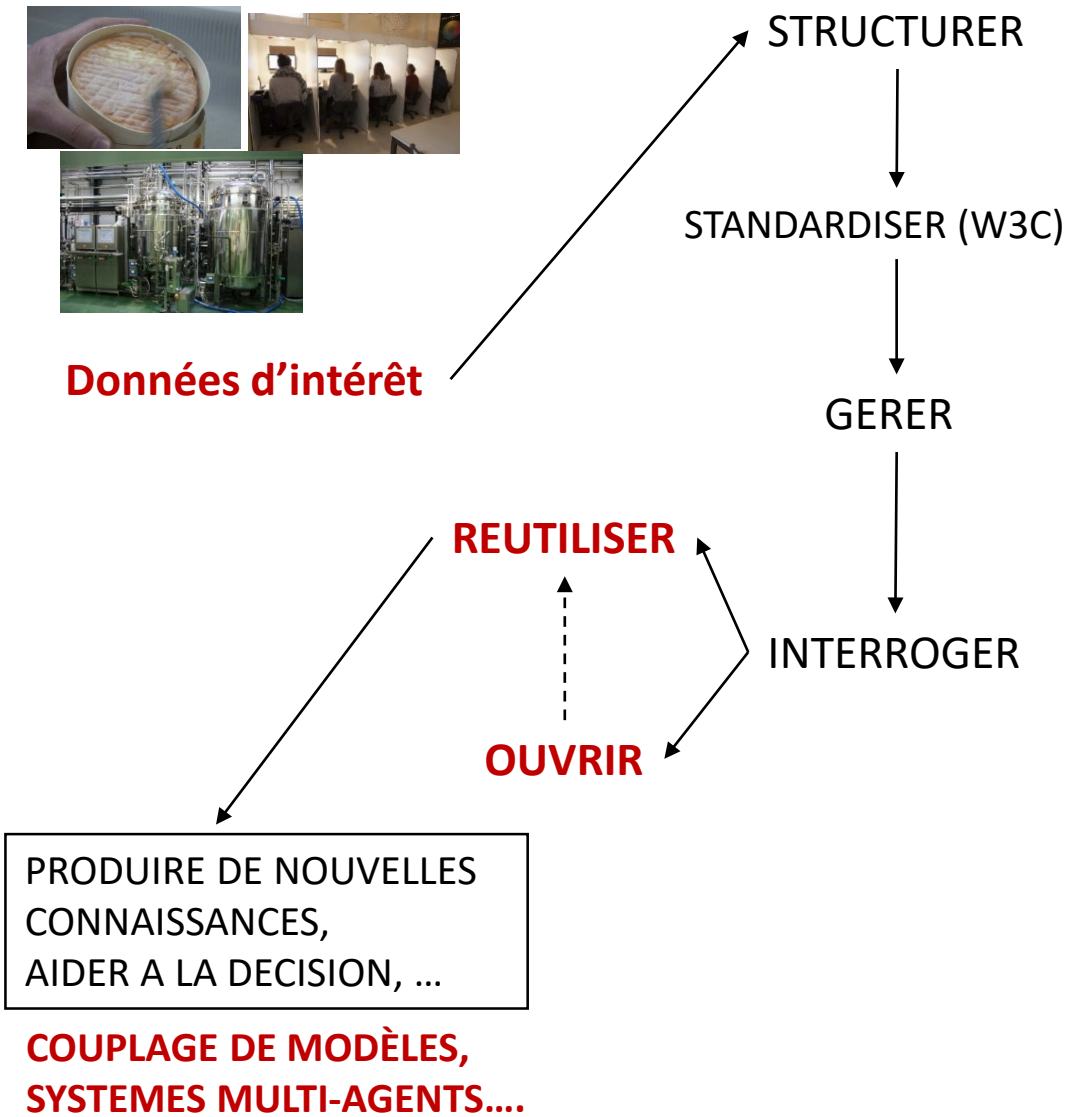
ENRICHIR la base, Réutilisation des  
règles apprises pour CONTROLER LA  
QUALITE des données

**COUPLAGE DE MODÈLES,  
SYSTEMES MULTI-AGENTS....**

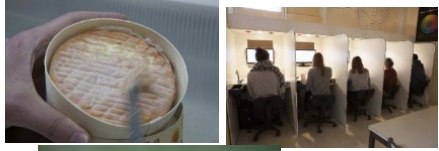




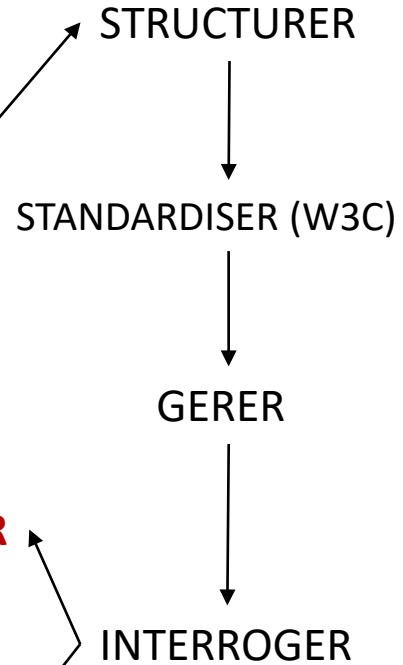
# Workflow



# Structurer les données



**Données d'intérêt**



**REUTILISER**

**OUVRIR**

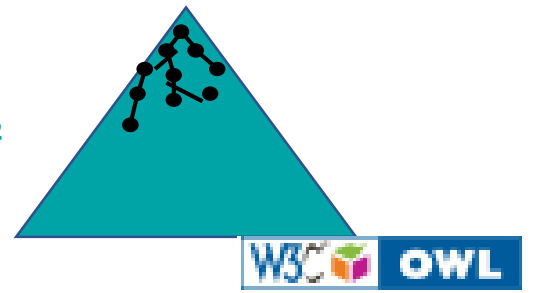
INTERROGER

PRODUIRE DE NOUVELLES  
CONNAISSANCES,  
AIDER A LA DECISION, ...

**COUPLAGE DE MODÈLES,  
SYSTEMES MULTI-AGENTS....**

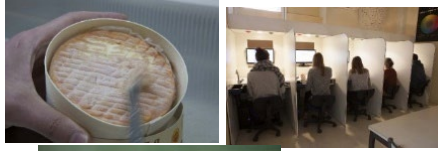
Modèle PO<sup>2</sup>

PO<sup>2</sup>-TransformON

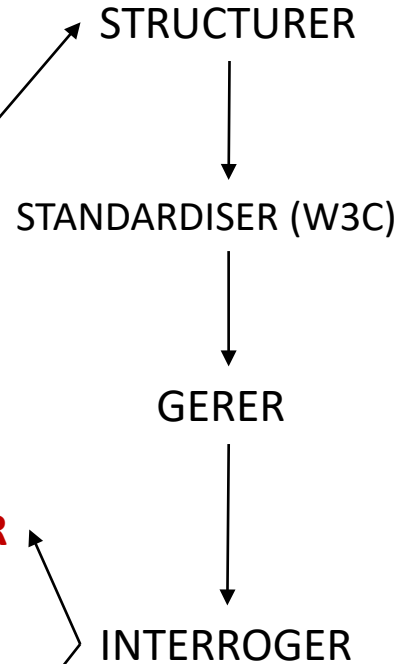


- un modèle PO<sup>2</sup>
- un vocabulaire pour annoter

# Gérer : un outil PO2 Manager



**Données d'intérêt**



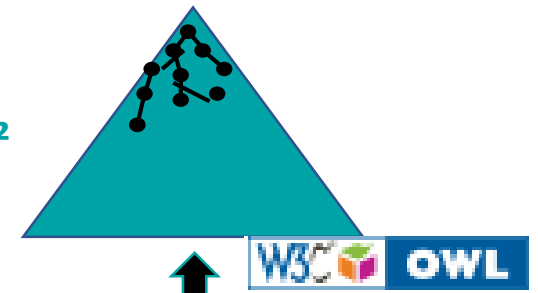
**REUTILISER**

**OUVRIR**

PRODUIRE DE NOUVELLES  
CONNAISSANCES,  
AIDER A LA DECISION, ...

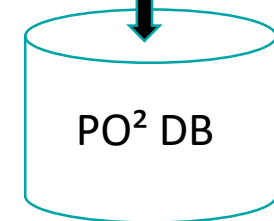
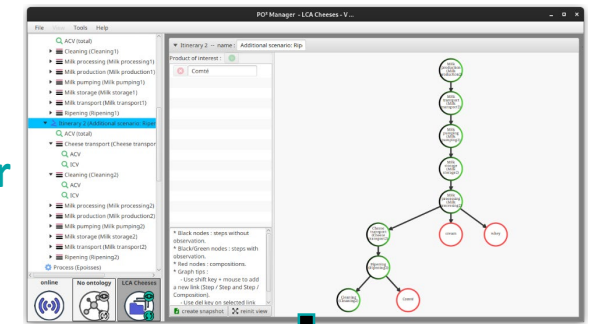
**COUPLAGE DE MODÈLES,  
SYSTEMES MULTI-AGENTS....**

Modèle PO<sup>2</sup>  
PO<sup>2</sup>-TransformON

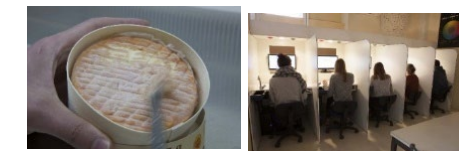


PO<sup>2</sup>-Manager

- Gérer le vocabulaire
- Produire la BD graphe



# Interroger: un outil SPO2Q



**Données d'intérêt**

STRUCTURER

STANDARDISER (W3C)

GERER

INTERROGER

**REUTILISER**

**OUVRIR**

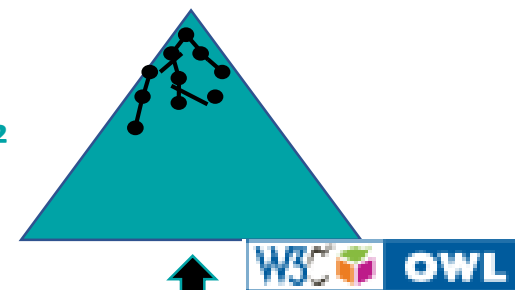
PRODUIRE DE NOUVELLES  
CONNAISSANCES,  
AIDER A LA DECISION, ...

**COUPLAGE DE MODÈLES,  
SYSTEMES MULTI-AGENTS....**

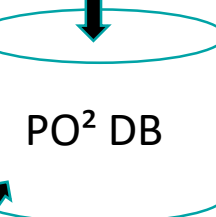
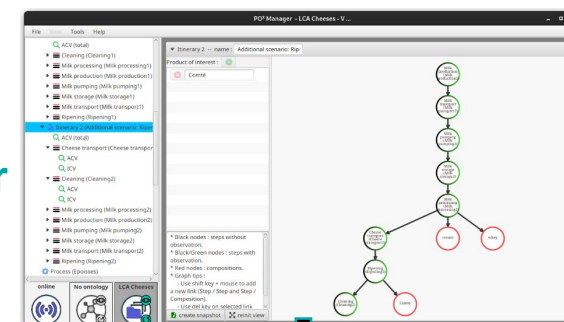
• et publier

Modèle PO<sup>2</sup>

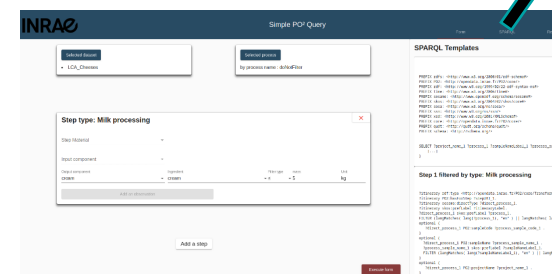
PO<sup>2</sup>-TransformON



PO<sup>2</sup>-Manager



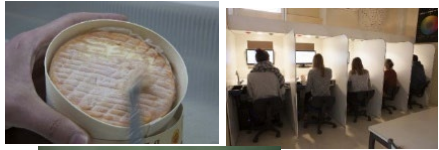
SPO<sup>2</sup>Q



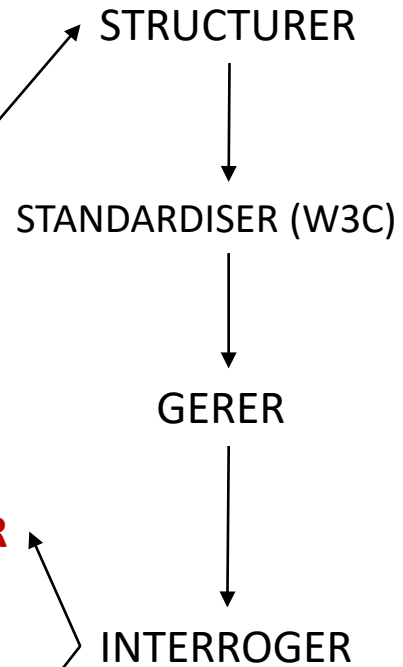
Data INRAE



# Structurer les données

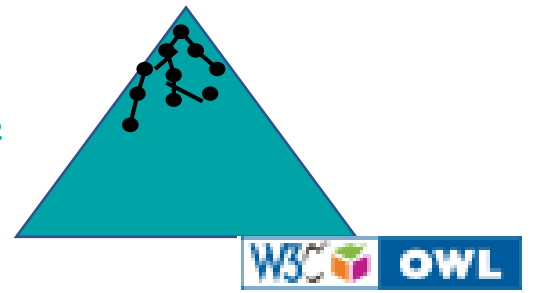


**Données d'intérêt**



Modèle PO<sup>2</sup>

PO<sup>2</sup>-TransformON



- un modèle PO<sup>2</sup>
- un vocabulaire pour annoter

PRODUIRE DE NOUVELLES  
CONNAISSANCES,  
AIDER A LA DECISION, ...

**COUPLAGE DE MODÈLES,  
SYSTEMES MULTI-AGENTS....**

**PO<sup>2</sup> Process & Observation Ontology**

A core ontology for modeling transformation processes and their observations

PO<sup>2</sup> V2.3 SCHEMA (JPG) IN-PROGRESS PO<sup>2</sup> V2.3 TTL IN-PROGRESS

PO<sup>2</sup> V2.2.2 SCHEMA (JPG) PO<sup>2</sup> V2.2.2 TTL

PO<sup>2</sup> Manager, a tool for create ontologies, annotate and publish semantics data based on PO<sup>2</sup> Core Ontology

DOWNLOAD

SPO<sup>2</sup>Q is your interface to easily query your semantics data

# Le modèle Process and Observation Ontology (PO2)

## Modèle générique réutilisant des standards :

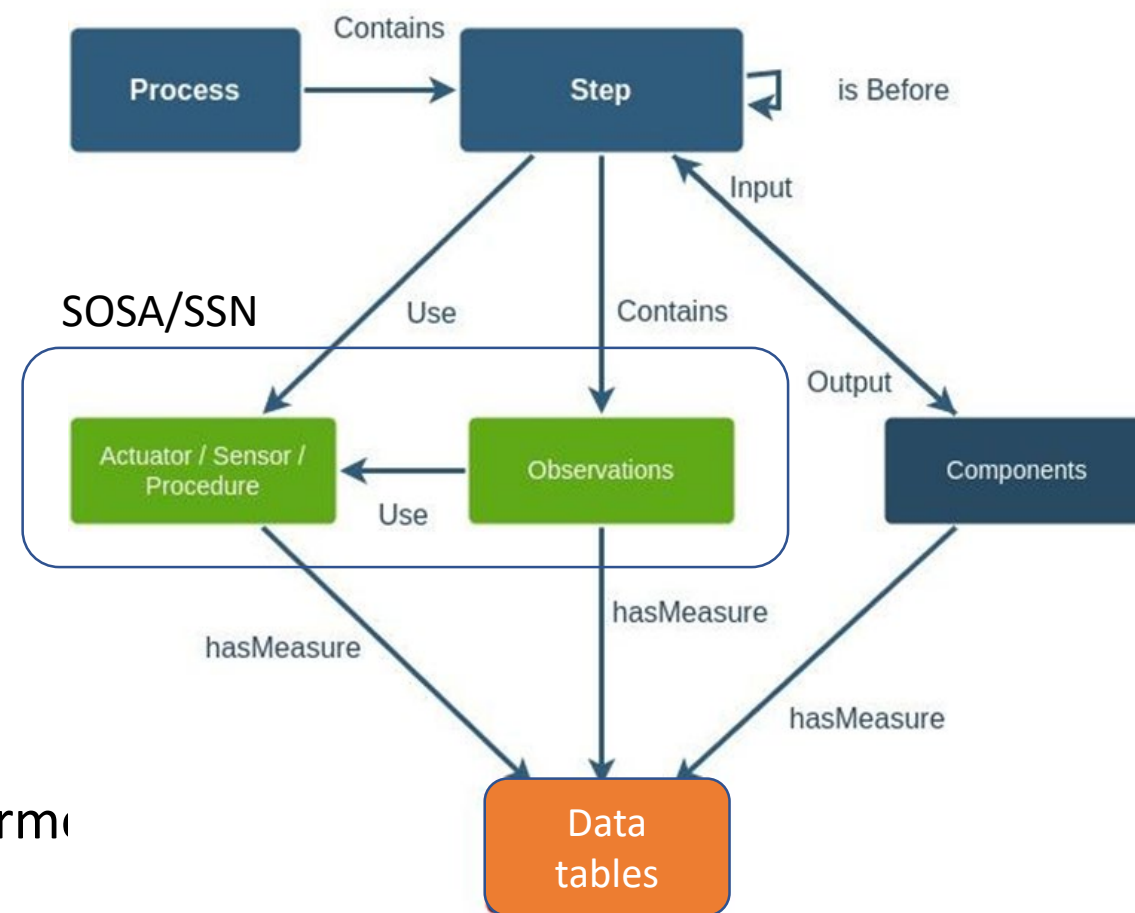
- [SOSA/SSN](#)
- [Time Ontology](#)
- [QUDT](#)
- [schema.org](#)
- [BFO](#)

## 7 concepts « cœur » à spécialiser

### pour représenter :

- des processus de transformation
- des composants en entrée et en sortie
- des matériels et des méthodes
- des propriétés mesurées ou observées
- des observations à différentes échelles,

permettant de structurer et de documenter des données qualitatives ou quantitatives sous la forme de jeux de données annotés (=sémantisés)



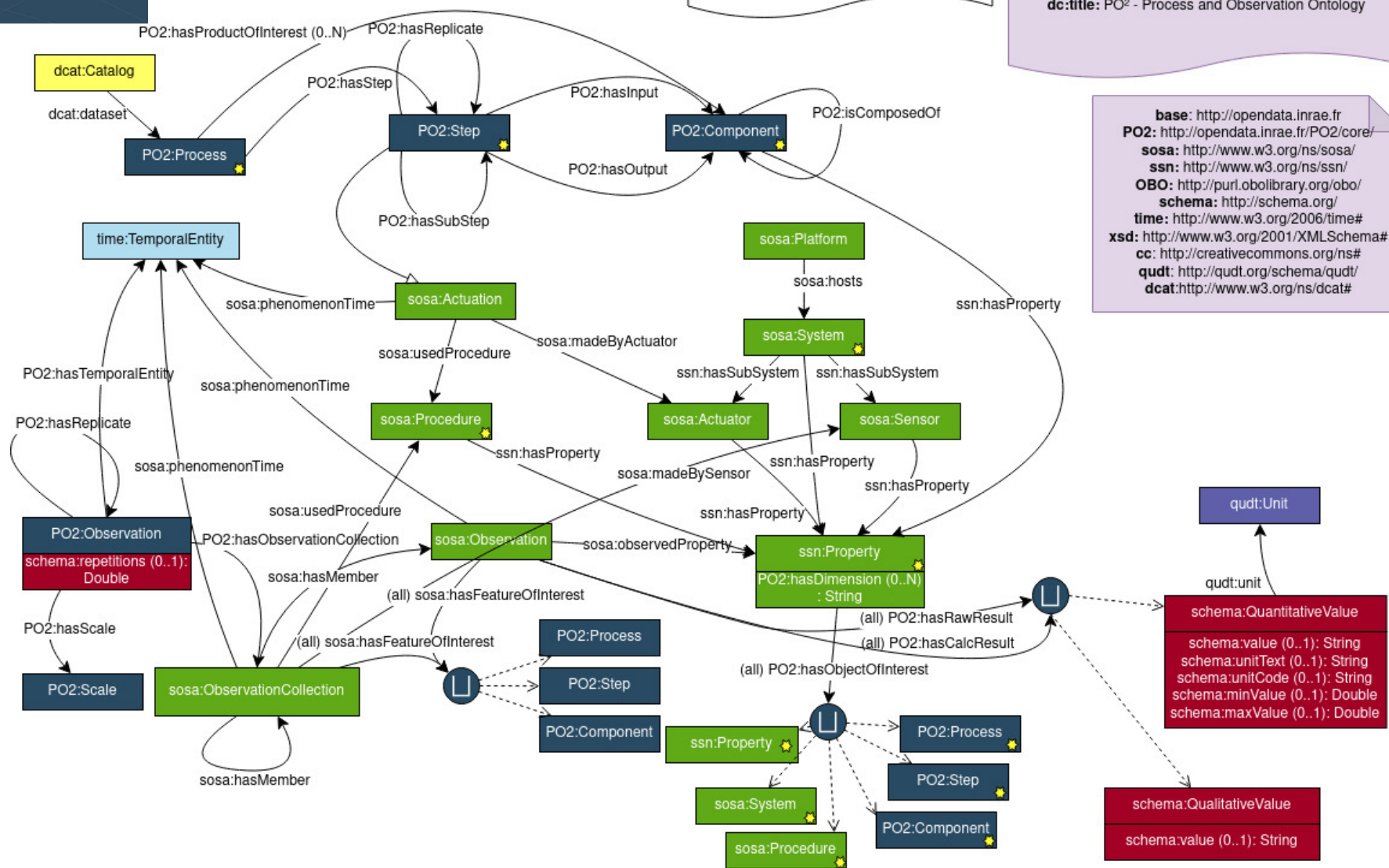
Représentation simplifiée

# Le modèle Process and Observation Ontology (PO2 V2.3)

**SPO<sup>2</sup>Q is your interface to easily query your semantics data**

**dc:contributor:** Stephane Dervaux  
**dc:contributor:** Liliana Ibanescu  
**dc:contributor:** Joe Raad  
**dc:contributor:** Juliette Dible  
**owl:versionInfo:** 2.3  
**dc:date:** april 2023  
**se:** <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>  
**title:** PO<sup>2</sup> - Process and Observation Ontology

**base:** <http://opendata.inrae.fr>  
**P02:** <http://opendata.inrae.fr/P02/core/>  
**sosa:** <http://www.w3.org/ns/sosa/>  
**ssn:** <http://www.w3.org/ns/ssn/>  
**OBO:** <http://purl.obolibrary.org/obo/>  
**schema:** <http://schema.org/>  
**time:** <http://www.w3.org/2006/time#>  
**xsd:** <http://www.w3.org/2001/XMLSchema#>  
**cc:** <http://creativecommons.org/ns#>  
**qudt:** <http://qudt.org/schema/qudt/>  
**dcat:** <http://www.w3.org/ns/dcat/>





# PO2/TransformON: spécialisation des 7 concepts « cœur » PO2 (Weber et al. 2023)

## Partie Process

### ▼ PO2 / Component

#### ▼ living organism

- ▶ algae (as living organism)
- ▶ animal (as living organism)
- ▶ bacteria (as living organism)
- ▶ fungi (as living organism)
- ▶ lichen (as living organism)
- ▶ plant (as living organism)

#### ▼ substance

- ▶ biochemical constituent
- ▶ feed
- ▶ food
- ▶ non-food substance
- ▶ water (generic)

### ▼ PO2 / Process

#### ▼ physiological process

- ▶ human physiological process
- ▶ microbial physiological process
- ▶ plant physiological process

#### ▼ planned process

- ▶ characterization process
- ▶ transformation process

### ▼ PO2 / Step

#### ▶ characterization step

#### ▶ physiological process step

#### ▼ transformation step

- ▶ cleaning
- ▶ handling
- ▶ harvesting
- ▶ packaging
- ▶ pre-processing
- ▶ processing
- ▶ slaughtering
- ▶ storage
- ▶ transport

## Partie Observation

### ▼ PO2 / Material

- ▶ measuring instrument
- ▶ processing equipment

### ▼ PO2 / Method

- ▶ analytical method
- ▶ assessment method
- ▶ computation and modelling
- ▶ semi-empiric instrumental method
- ▶ standard operating procedure

### ▼ PO2 / Scale

- ▶ measurement scale
- ▶ process scale

## Partie Résultat

### ▼ PO2 / Attribute

#### ▼ calculation outcome

- ▶ experimental data attribute
- ▶ LCIA
- ▶ nutritional score

#### ▼ inherent quality

- ▶ identification attribute
- ▶ label or labelling claim
- ▶ physical state
- ▶ status of food name

#### ▼ measurement attribute

- ▶ biological attribute
- ▶ mensuration
- ▶ physico-chemical attribute
- ▶ quantity
- ▶ temporality



Dimensions

UCUM codes

Add dimension from unit

Dimension : none

Show prefix code

Show units code

Only UCUM Code can be used in the text field.

e.g. [degF]/min -> °F/min  
um.s-1.d-1 -> µm/s/d

If the unit is not available in UCUM, you can annotate your unit with {}  
e.g. (CBU)/g -> CBU/g

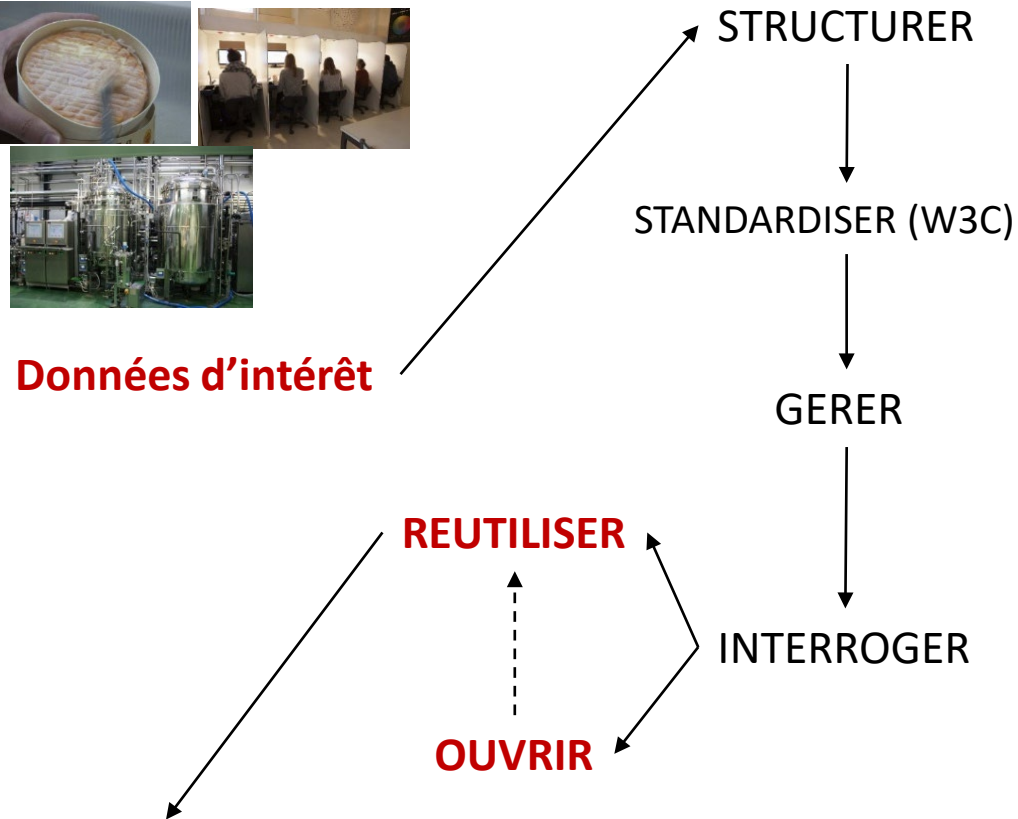
Hide Details

OK

Cancel



# Gérer : un outil PO2 Manager



**Données d'intérêt**

**REUTILISER**

**OUVRIR**

**STRUCTURER**

**STANDARDISER (W3C)**

**GERER**

**INTERROGER**

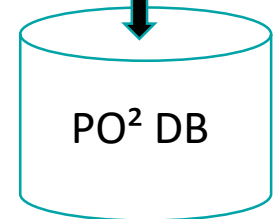
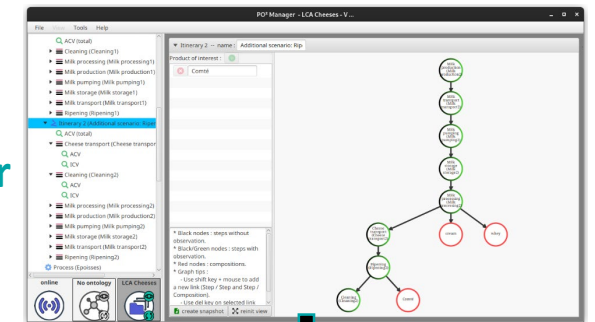
PRODUIRE DE NOUVELLES  
CONNAISSANCES,  
AIDER A LA DECISION, ...

**COUPLAGE DE MODÈLES,  
SYSTEMES MULTI-AGENTS....**

**Modèle PO<sup>2</sup>**  
**PO<sup>2</sup>-TransformON**

**PO<sup>2</sup>-Manager**

- Gérer le vocabulaire
- Produire la BD graphe



**W3C** **RDF**

# PO<sup>2</sup> Manager



## PO<sup>2</sup> Manager for Windows

Current Version : 1.4.0.3

October 21 2022

EXE



## PO<sup>2</sup> Manager for Linux

Current Version : 1.4.0.3

October 21 2022

DEB

RPM

APPIMAGE



## PO<sup>2</sup> Manager for OSX

Current Version : 1.4.0.2

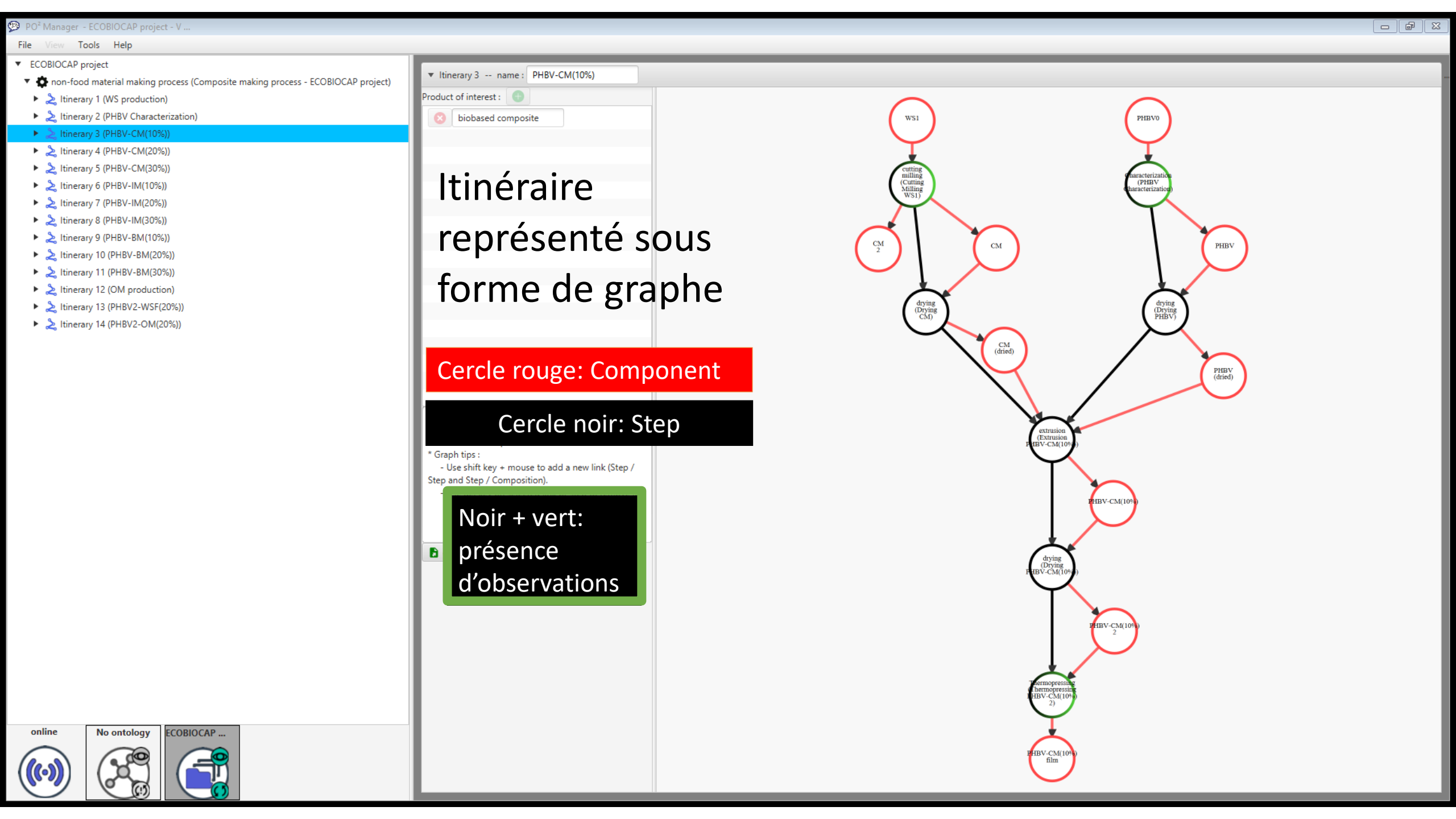
September 7 2022

WELCOME

PO<sup>2</sup> MANAGER

SPO<sup>2</sup>Q

AVAILABLE DATA



PO<sup>2</sup> Manager - Planet-Milling itineraries for a collection of crop byproducts - V ...

FileViewToolsHelp

Planet-Milling itineraries for a collection of crop byproducts

material making process (vegetal powder making process)

Itinerary 1 (1-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

ultra fine milling (Ball milling step 1.1)

FF1

Itinerary 2 (2-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 3 (3-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 4 (4-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 5 (5-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 6 (6-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 7 (7-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 8 (8-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 9 (9-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 10 (10-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Step

Step type :  
ultra fine milling

Step name : 1  
Ball milling step 1.1

Date (YYYY-MM-DD) :  
2017-06-28

Description :  
initial water content 2.7%

Time (hh:mm:ss) :

Time duration (hh:mm:ss) :

Materials & Methods

milling machine (SWECO)

Parameters

#	attribute	object	value	unit	comment	
0	Treatment duration		23	h		<div><div></div><div></div></div>
1	mass	ball of milling machine	48	kg		<div><div></div><div></div></div>

add

del

Composition --- Type : Input Composition type : flax fibre Composition name : Flax fibre (1)

Composition

Guideline

#	attribute	component	value	unit	comment	
0	Mass	flax fibre	1000.0	g		<div><div></div><div></div></div>

Composition --- Type : Output Composition type : flax fibre Composition name : Flax fibre (2)

Composition

Guideline

#	attribute	component	value	unit	comment	
0	Mass	Flax fibre	970.0	g		<div><div></div><div></div></div>

28

online

TransformON

Planet-Milling ...

SOSA System

& SOSA Procedure

Input

Component

Output

Component



FileViewToolsHelp

Planet-Milling itineraries for a collection of crop byproducts

material making process (vegetal powder making process)

Itinerary 1 (1-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

ultra fine milling (Ball milling step 1.1)

FF1

Itinerary 2 (2-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 3 (3-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 4 (4-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 5 (5-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 6 (6-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 7 (7-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 8 (8-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 9 (9-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

Itinerary 10 (10-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts)

PO2

Observation

Sous la forme de tableau simple ou de tableau complexe

Observation

Observation type :  
observation

Observation name :  
FF1

Date (YYYY-MM-DD) :  
2017-06-28

Time (hh:mm:ss) :

Time duration (hh:mm:ss) :

Scale :

Repetition :  
1.0

Objects observed :  

Step - ultra fine milling (Ball milling step 1.1)

Input composition - flax fibre (Flax fibre (1))

☒ Output composition - flax fibre (Flax fibre (2))

Materials & Methods

Mastersizer 2000 (Malvern 2000)

granulometry (standard operating condition - SOP4)

adddel

Observation 1 raw data

#	attribute	object	value	unit	comment
0	Volume D50		8.101	µm	
1	Volume D10		1.504	µm	
2	Volume D90		54.353	µm	
3	Span		6.657	1	
4	Specific surface		1.36	m2/g	

Observation 2 raw data

#	Sampling time (min)	Volume D50 (µm)	Volume D10 (µm)	Volume D90 (µm)	Span (1)	Specific surface (m...
0	0	328.124	81.068	1020.171		
1	90	135.194	14.095	725.032	5.259	0.168
2	180	91.252	10.398	486.668	5.219	0.217
3	270	75.803	9.248	364.788	4.69	0.245
4	360	50.76	7.263	217.859	4.149	0.348
5	420	39.139	6.32	169.538	4.17	0.412

online

TransformON

Planet-Milling ...

SOSA  
ObservationCollection

SOSA Observation

# PO<sup>2</sup> Manager

Un outil pour gérer le vocabulaire

PO<sup>2</sup> Manager - TransformON - V 1.20

File View Tools Help






physiological process step

- ▼ transformation step
  - ▶ cleaning
  - ▶ handling
  - ▶ harvesting
  - ▶ packaging
  - ▶ pre-processing
  - ▼ processing
    - ▼ biological processing
      - acidification by a microbial agent
      - ageing
      - autolysis
      - ▶ bioconversion
      - ▶ biodegradation
      - ▶ biosynthesis
      - composting
      - ▼ fermentation
        - bulk fermentation
        - final proofing
      - ▶ maturation
      - methanisation
      - ▶ chemical processing
      - ▶ physical processing
      - ▶ slaughtering

maturation

<http://opendata.inrae.fr/PO2/Ontology/TransformON/Step/LBzGIY>

> Step > transformation step > processing > biological processing

	Label	Synonyms	Definition
	maturation	:: maturing :: ripening	
	maturation	:: affinage :: mûrissement	
			
			
			

Scope Note	Editorial Note

Exact Match	Close Match
No content in table	No content in table

online TransformON LCA Cheeses

Concept scheme

main

# Interroger: un outil SPO2Q



**Données d'intérêt**

STRUCTURER

STANDARDISER (W3C)

GERER

INTERROGER

**REUTILISER**

**OUVRIR**

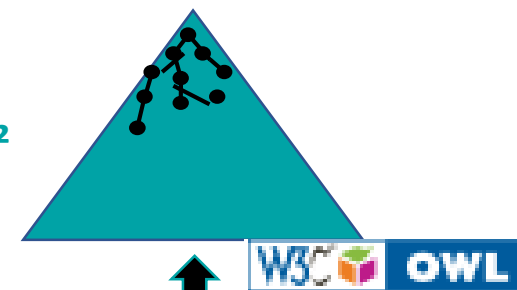
PRODUIRE DE NOUVELLES  
CONNAISSANCES,  
AIDER A LA DECISION, ...

**COUPLAGE DE MODELES,  
SYSTEMES MULTI-AGENTS....**

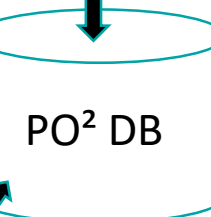
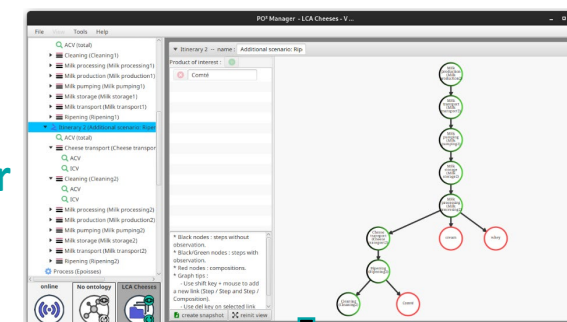
- et publier

Modèle PO<sup>2</sup>

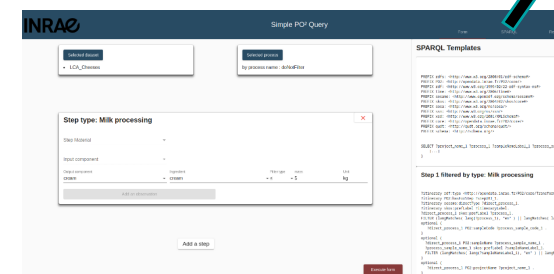
PO<sup>2</sup>-TransformON



PO<sup>2</sup>-Manager



SPO<sup>2</sup>Q



Data INRAE

# SPO<sup>2</sup>Q : Simple PO<sup>2</sup> Query

SPO<sup>2</sup>Q is a web app that allows you to query your semantic data in a simple way.

GOTO SPO<sup>2</sup>Q

WELCOME

PO<sup>2</sup> MANAGER

SPO<sup>2</sup>Q

AVAILABLE DATA

## Available data

use the contact link ...

Project n... ⚙	St... ⚙	Process name ⚙	Process T... ⚙	Contact ⚙	Contact mail ⚙
AlimaSSens	private	Process en bouche	Process	Elisabeth Guichard	elisabeth.guichard@inrae.fr
AIC_PF_4	private	Vinification - Baies de	Process	Elisabeth	elisabeth.guichard@inrae.fr



### Selected dataset

- Planet-Milling\_itineraries\_for\_a\_collection\_of\_crop\_byproducts

### Selected process

by process name : doNotFilter

### Step type: milling

Step Material ▾

Input component ▾

Output component ▾

### Observation type: Observation

#### volume D50

☐ Show objects

Filter type	Value	Unit
≤	▾ 10	um

Observation Material ▾

Add an observation property  
result to filter on

Add an observation

Execute form

## SPARQL Templates

```
PREFIX rdfs: <http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#>
PREFIX PO2: <http://opendata.inrae.fr/PO2/core/>
PREFIX rdf: <http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#>
PREFIX time: <http://www.w3.org/2006/time#>
PREFIX sesame: <http://www.openrdf.org/schema/sesame#>
PREFIX skos: <http://www.w3.org/2004/02/skos/core#>
PREFIX sosa: <http://www.w3.org/ns/sosa/>
PREFIX ssn: <http://www.w3.org/ns/ssn/>
PREFIX xsd: <http://www.w3.org/2001/XMLSchema#>
PREFIX core: <http://opendata.inrae.fr/PO2/core/>
PREFIX qudt: <http://qudt.org/schema/qudt/>
PREFIX schema: <http://schema.org/>
```

```
SELECT ?project_name_1 ?process_1 ?sampleNameLabel_1 ?process_sample_cod...
[...]
```

### Step 1 filtered by type: milling

```
?itinerary rdf:type <http://opendata.inrae.fr/PO2/core/Transformation_Pr...
?itinerary PO2:hasForStep ?stepURI_1.
?itinerary sesame:directType ?direct_process_1.
?itinerary skos:prefLabel ?itineraryLabel.
?direct_process_1 skos:prefLabel ?process_1.
FILTER (langMatches( lang(?process_1), "en" ) || langMatches( lang(?proc...
optional {
  ?direct_process_1 PO2:sampleCode ?process_sample_code_1 .
}
optional {
  ?direct_process_1 PO2:sampleName ?process_sample_name_1 .
  ?process_sample_name_1 skos:prefLabel ?sampleNameLabel_1.
  FILTER (langMatches( lang(?sampleNameLabel_1), "en" ) || langMatches( ...
}
optional {
  ?direct_process_1 PO2:projectName ?project_name_1 .
}
?stepURI_1 skos:prefLabel ?step_1.
FILTER (langMatches( lang(?step_1), "en" ) || langMatches( lang(?step_1)-
?stepURI_1 rdf:type <http://opendata.inrae.fr/PO2/Ontology/TransformON/s...
```

### Observation filter 1





Displayed columns

project_name_1	process_1	ItineraryLabel	step_1	observation_11	property_111	valueOrigin_prop_111	unitOrigin_prop_111
Planet-Milling itineraries for a collection of crop byproducts	vegetal powder making process	Itinerary 1 - 1-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts	Ball milling step 1.1	observation	Volume D50	8.101	um
Planet-Milling itineraries for a collection of crop byproducts	vegetal powder making process	Itinerary 3 - 3-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts	Ball milling step 3.3	observation	Volume D50	[8.382;8.491]	um
Planet-Milling itineraries for a collection of crop byproducts	vegetal powder making process	Itinerary 6 - 6-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts	Ball milling step 6.2	observation	Volume D50	[4.739;5.098]	um
Planet-Milling itineraries for a collection of crop byproducts	vegetal powder making process	Itinerary 10 - 10-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts	Ball milling step 10.2	observation	Volume D50	[4.739;5.098]	um
Planet-Milling itineraries for a collection of crop byproducts	vegetal powder making process	Itinerary 6 - 6-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts	Ball milling step 6.2	observation	Volume D50	[5.443;5.514]	um
Planet-Milling itineraries for a collection of crop byproducts	vegetal powder making process	Itinerary 3 - 3-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts	Ball milling step 3.3	observation	Volume D50	[8.382;8.491]	um
Planet-Milling itineraries for a collection of crop byproducts	vegetal powder making process	Itinerary 10 - 10-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts	Ball milling step 10.2	observation	Volume D50	[5.443;5.514]	um
Planet-Milling itineraries for a collection of crop byproducts	vegetal powder making process	Itinerary 10 - 10-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts	Ball milling step 10.2	observation	Volume D50	[6.448;6.492]	um
Planet-Milling itineraries for a collection of crop byproducts	vegetal powder making process	Itinerary 6 - 6-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts	Ball milling step 6.2	observation	Volume D50	[6.448;6.492]	um
Planet-Milling itineraries for a collection of crop byproducts	vegetal powder making process	Itinerary 1 - 1-Table 1 - Itineraries description for a collection of crop byproducts	Ball milling step 1.1	observation	Volume D50	9.162	um

Items per page: 10

1 – 10 of 22



Export results

Publish results on Dataverse INRAE



### SPARQL Editor

Planet-Milling\_itineraries\_for\_a\_collection\_of\_crop\_byproducts

1000

lines



```
1
2 PREFIX rdfs: <http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#>
3 PREFIX PO2: <http://opendata.inrae.fr/PO2/core/>
4 PREFIX rdf: <http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#>
5 PREFIX time: <http://www.w3.org/2006/time#>
6 PREFIX sesame: <http://www.openrdf.org/schema/sesame#>
7 PREFIX skos: <http://www.w3.org/2004/02/skos/core#>
8 PREFIX sosa: <http://www.w3.org/ns/sosa/>
9 PREFIX ssn: <http://www.w3.org/ns/ssn/>
10 PREFIX xsd: <http://www.w3.org/2001/XMLSchema#>
11 PREFIX core: <http://opendata.inrae.fr/PO2/core/>
12 PREFIX qudt: <http://qudt.org/schema/qudt/>
13 PREFIX schema: <http://schema.org/>
14
15
16 SELECT ?project_name_1 ?process_1 ?sampleNameLabel_1 ?process_sample_code_1 ?itineraryLabel ?step_1 ?observation_11 ?property_111
17 ?valueOrigin_prop_111 ?unitOrigin_prop_111 WHERE {
18
19   #####Step 1 filtered by type: milling
20   ?itinerary rdf:type <http://opendata.inrae.fr/PO2/core/Transformation_Process>.
21   ?itinerary PO2:hasForStep ?stepURI_1.
22   ?itinerary sesame:directType ?direct_process_1.
23   ?itinerary skos:prefLabel ?itineraryLabel.
24   ?direct_process_1 skos:prefLabel ?process_1.
25   FILTER (langMatches( lang(?process_1), "en" ) || langMatches( lang(?process_1), "" )).
26   optional {
27     ?direct_process_1 PO2:sampleCode ?process_sample_code_1 .
28   }
29   optional {
30     ?direct_process_1 PO2:sampleName ?process_sample_name_1 .
31     ?process_sample_name_1 skos:prefLabel ?sampleNameLabel_1.
32     FILTER (langMatches( lang(?sampleNameLabel_1), "en" ) || langMatches( lang(?sampleNameLabel_1), "" )).
33   }
34   optional {
35     ?direct_process_1 PO2:projectName ?project_name_1 .
36   }
37   ?stepURI_1 skos:prefLabel ?step_1.
38   FILTER (langMatches( lang(?step_1), "en" ) || langMatches( lang(?step_1), "" )).
```

### SPARQL Templates

```
PREFIX rdfs: <http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#>
PREFIX PO2: <http://opendata.inrae.fr/PO2/core/>
PREFIX rdf: <http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#>
PREFIX time: <http://www.w3.org/2006/time#>
PREFIX sesame: <http://www.openrdf.org/schema/sesame#>
PREFIX skos: <http://www.w3.org/2004/02/skos/core#>
PREFIX sosa: <http://www.w3.org/ns/sosa/>
PREFIX ssn: <http://www.w3.org/ns/ssn/>
PREFIX xsd: <http://www.w3.org/2001/XMLSchema#>
PREFIX core: <http://opendata.inrae.fr/PO2/core/>
PREFIX qudt: <http://qudt.org/schema/qudt/>
PREFIX schema: <http://schema.org/>
```

```
SELECT ?project_name_1 ?process_1 ?sampleNameLabel_1 ?process_sample_code_1 ?itineraryLabel ?st...
[...]
```

#### Step 1 filtered by type: milling

```
?itinerary rdf:type <http://opendata.inrae.fr/PO2/core/Transformation_Process>.
?itinerary PO2:hasForStep ?stepURI_1.
?itinerary sesame:directType ?direct_process_1.
?itinerary skos:prefLabel ?itineraryLabel.
?direct_process_1 skos:prefLabel ?process_1.
FILTER (langMatches( lang(?process_1), "en" ) || langMatches( lang(?process_1), "" )).
optional {
  ?direct_process_1 PO2:sampleCode ?process_sample_code_1 .
}
optional {
  ?direct_process_1 PO2:sampleName ?process_sample_name_1 .
  ?process_sample_name_1 skos:prefLabel ?sampleNameLabel_1.
  FILTER (langMatches( lang(?sampleNameLabel_1), "en" ) || langMatches( lang(?sampleNameLabel_1...
})
optional {
  ?direct_process_1 PO2:projectName ?project_name_1 .
}
?stepURI_1 skos:prefLabel ?step_1.
FILTER (langMatches( lang(?step_1), "en" ) || langMatches( lang(?step_1), "" )).
```

## Itinerary Description for biocomposites from poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate) and lignocellulosic fillers

Version 7.4



Hélène Angellier-Coussy; Patrice Buche; Stéphane Dervaux; Mélanie Munch, 2021, "Itinerary Description for biocomposites from poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate) and lignocellulosic fillers", <https://doi.org/10.15454/G3GBJC>, Recherche Data Gouv, V7, UNF:6:57QW5j8EPBoTeypEpVkdpw== [fileUNF]

Citer le jeu de données ▾

Pour en apprendre davantage sur le sujet, consulter le document [Data Citation Standards \[en\]](#).

Modalités d'accès au jeu de données ▾

Contact

Partager

Statistiques d'utilisation sur les jeux de données ?

793 consultations ?

169 téléchargements ?

0 citation ?

### Description ?

This dataset regroups the results of five projects aiming to produce biocomposite packagings from a polymeric matrix (PHBV) and different lignocellulosic fillers stemming from either crop residues (Chercheur d'avenir région Languedoc-Roussillon MALICE and H2020 NoAW), agro-food by-products (FP7 EcoBioCAP), urban parks and gardens green residues (H2020 Resurbis) and pure cellulose (H2020 Usable Packaging). For each of the 88 products described, fabrications steps as well as their components' principal characteristics (compositions and measurements) are structured thanks to the Process and Observation Ontology (PO<sup>2</sup>), committed to the representation of transformation processes. The provided link allows to interrogate the ontology with SPO<sup>2</sup>Q, a dedicated web service proposing two ways for querying: (1) with an accessible form re-using the associated vocabulary, or (2) directly through queries expressed with the SPARQL language. All data are available at the

[Lire la suite de Description \[+\]](#)

### Sujet ?

Agricultural Sciences

### Mot-clé ?

Material Science, biocomposite, PHBV, lignocellulose

### Publication associée ?

Mélanie Munch, Patrice Buche, Stéphane Dervaux, Amélie Breysse, Marie-Alix Berthet, et al.. Biocomposites from poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate) and lignocellulosic fillers: Processes stored in data warehouse structured by an ontology. Data in Brief, 2022, 42, pp.108191. (10.1016/j.dib.2022.108191). (hal-03650668) doi: [10.1016/j.dib.2022.108191](https://doi.org/10.1016/j.dib.2022.108191)

### Lien vers les données ?

<https://quantum.mia-ps.inrae.fr/spoq/form>



# Interrogation depuis OpenAIRE (moissonnage RDG)

OpenAIRE

EXPLORE

SearchDepositLinkData sourcesFunders

Sign in

Advanced search

biocomposites from poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate)

RESEARCH PRODUCTS (1)PROJECTS (0)DATA SOURCES (0)ORGANIZATIONS (0)

Filters

Clear All

Access (1)

Clear

Open Access (1)

Type (4)

Clear

Publications

Research data

Research software

Other research products

Document Type (1)

Dataset (1)

1 Research Products for biocomposites from poly(3-hydroxybut...

DOWNLOAD RESULTS

RESEARCH DATA

OPEN ACCESS

Sort by

Relevance

Itinerary Description for biocomposites from poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate) and lignocellulosic fillers

Research Data

» Dataset • 2021 • Recherche Data Gouv

Authors: *Hélène Angellier-Coussy*; *Patrice Buche*; *Stéphane Dervaux*; *Mélanie Munch*;

DOI: [10.15454/g3gbjc](https://doi.org/10.15454/g3gbjc)

This dataset regroups the results of five projects aiming to produce biocomposite packagings from a polymeric matrix (PHBV) and different lignocellulosic fillers stemming from either crop residues (Chercheur d'avenir région Languedoc-Roussillon MALICE and H202...

Data INRAE; Recherch...

Link to

Share

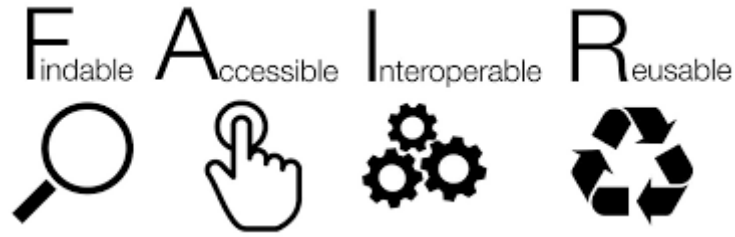
Cite

Claim

0

# Collecter, gérer et mettre à disposition des données avec PO2/TransformON

Dans un contexte de science ouverte



## Données Faciles à trouver, Accessibles, Interopérables, Réutilisables

**F**indable: Recherche Data Gouv, OpenAIRE, WOS (via le data paper), liens data paper<->dataset RDG<->articles scientifiques<->HAL/Software heritage (DOI sur le logiciel PO2/TransformON)

**A**ccessible: interrogation de la base PO2/Bagatel par SPO2Q (la dernière version en ligne), Recherche Data Gouv (versions publiées d'exports de la base)

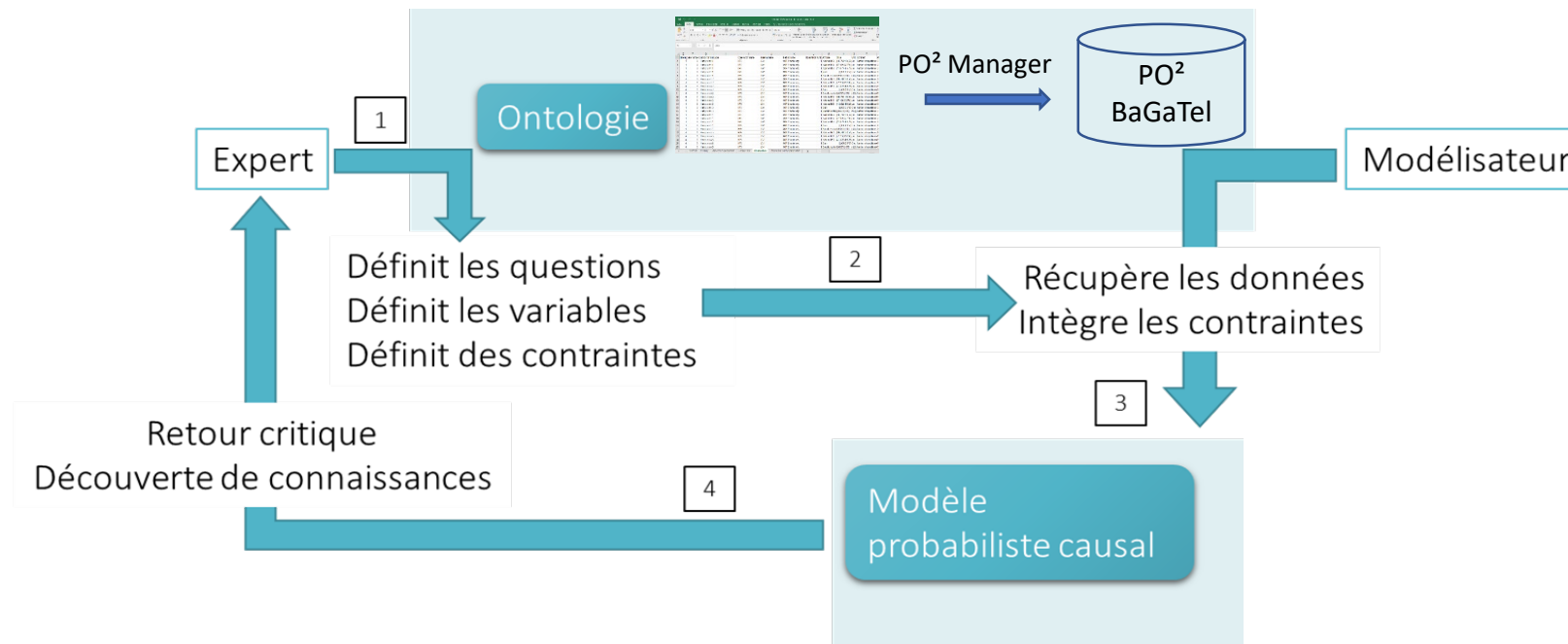
**I**nteropérable: utilisation des formats TSV (exports SPO2Q) et RDF (requêtes fédérées SPARQL)

**R**éutilisable: réutilisation facilitée par la structuration des données au format PO2/TransformON

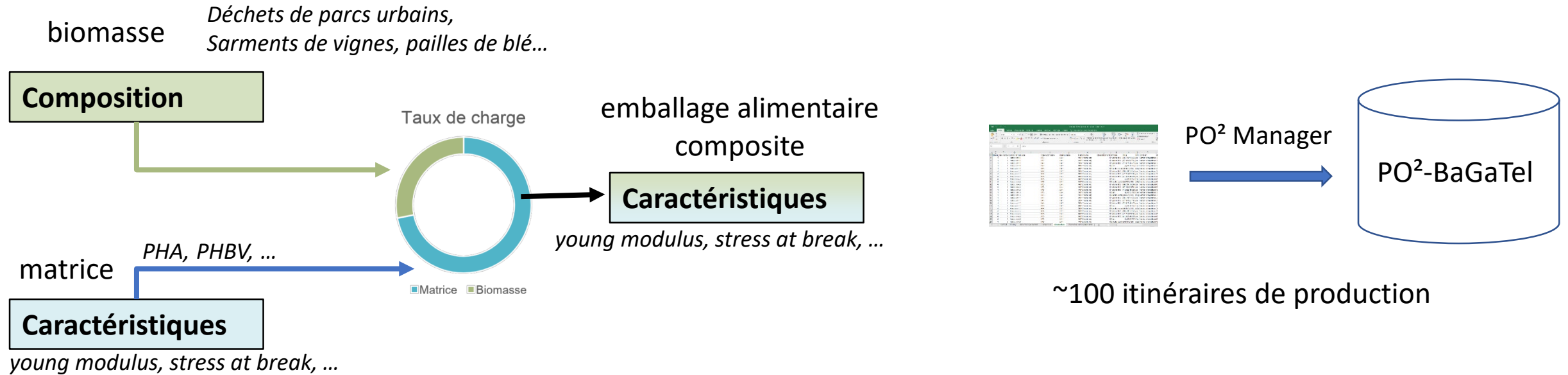


Un exemple de réutilisation pour  
répondre à une question de recherche

# Démarche itérative



# Aide à la formulation de biocomposites



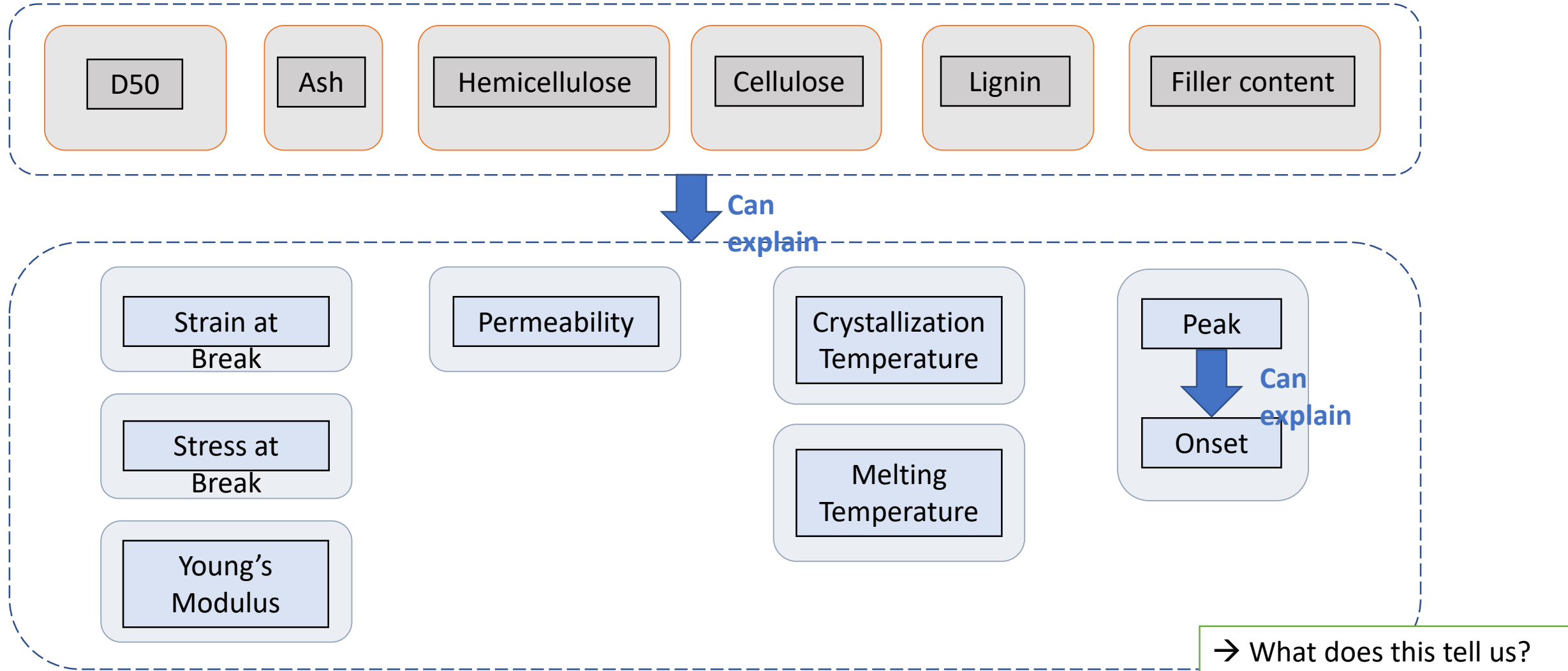
**Objectif** : Prédire les caractéristiques fonctionnelles des biocomposites à partir des caractéristiques des co-produits des filières utilisées en entrée pour l'aide à la formulation.

## Problématique

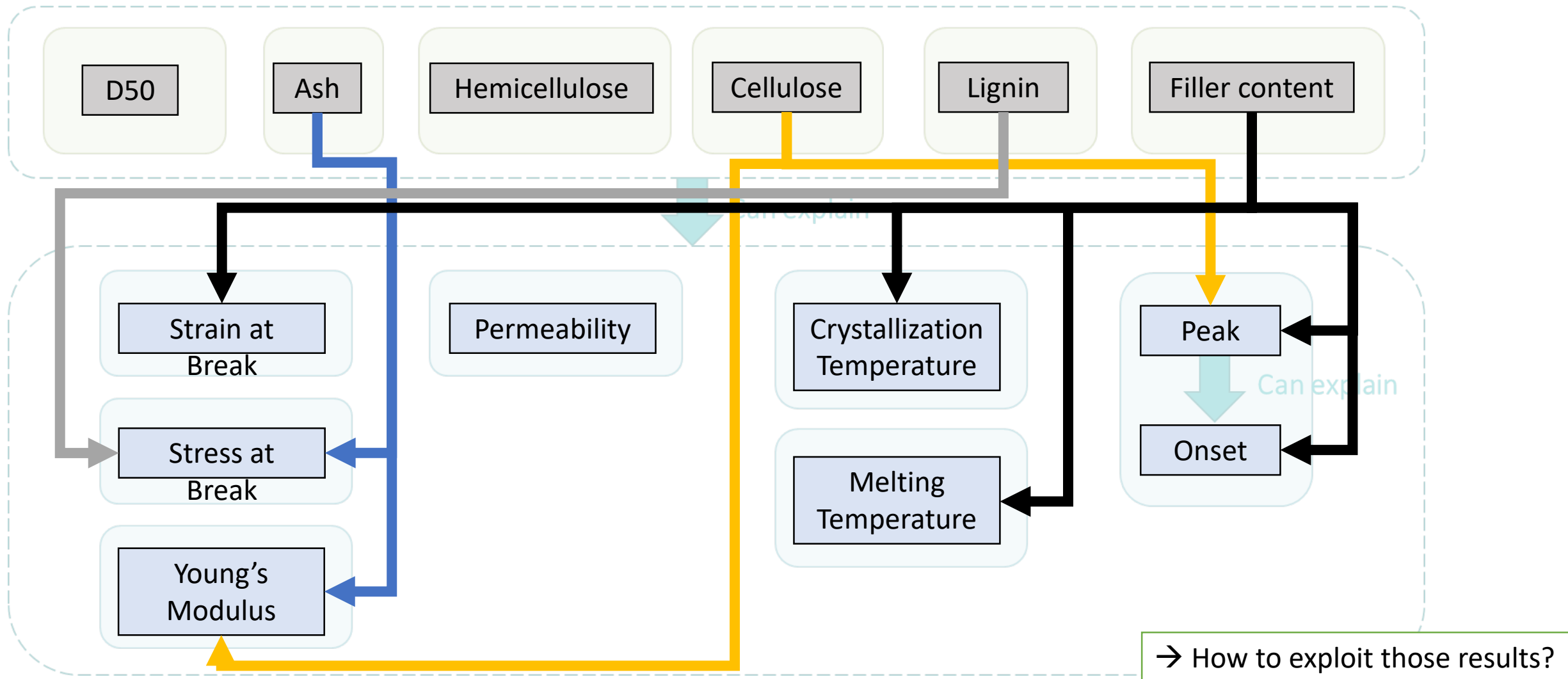
- **Echelle d'un itinéraire** et non d'une opération unitaire
- Pas de modèles numériques existants
- Données hétérogènes et incomplètes

# Expert Knowledge Expression

## Definition of precedence constraints

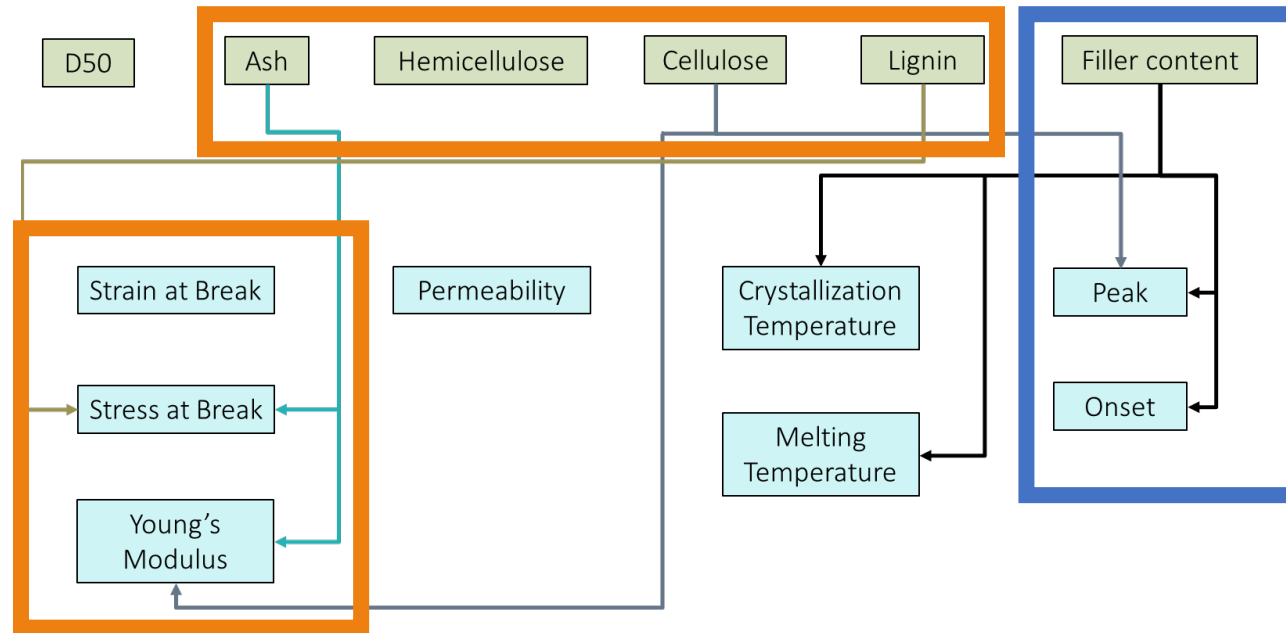


# Causal Bayesian Network





# Application to composite food packaging – Decision Making



The **filler content** has a direct impact over the **thermal degradation temperatures**

The **composition** has a direct impact over the **mechanical properties**

- Q1. How the **filler content** influences the thermal degradation temperature and mechanical properties?
- Q2. Which **composition** should I prefer if I want to optimize the packaging?



# Q1. Influence of the filler content

Filler Content	Peak Temperature		
	]0.72; 0.95]	]0.95; 1]	]1; 1.16]
]2; 4]	0.09	<b>0.82*</b>	0.09
]4; 11]	0.38	<b>0.52*</b>	0.1
]11; 21]	<b>0.91*</b>	0.09	0
]21; 50]	<b>0.6*</b>	0.2	0.2

Table 2: Conditional Probability Table showing the influence of the **Filler Content** over the **Peak Temperature** distribution. \* shows the maximum likelihood.

L'augmentation du taux de charge a un impact négatif sur la température de décomposition la plus rapide (peak temperature)

# Q1. Influence of the filler content

Augmentation of the strain at break

Out[5]:

Augmentation of the filler rate

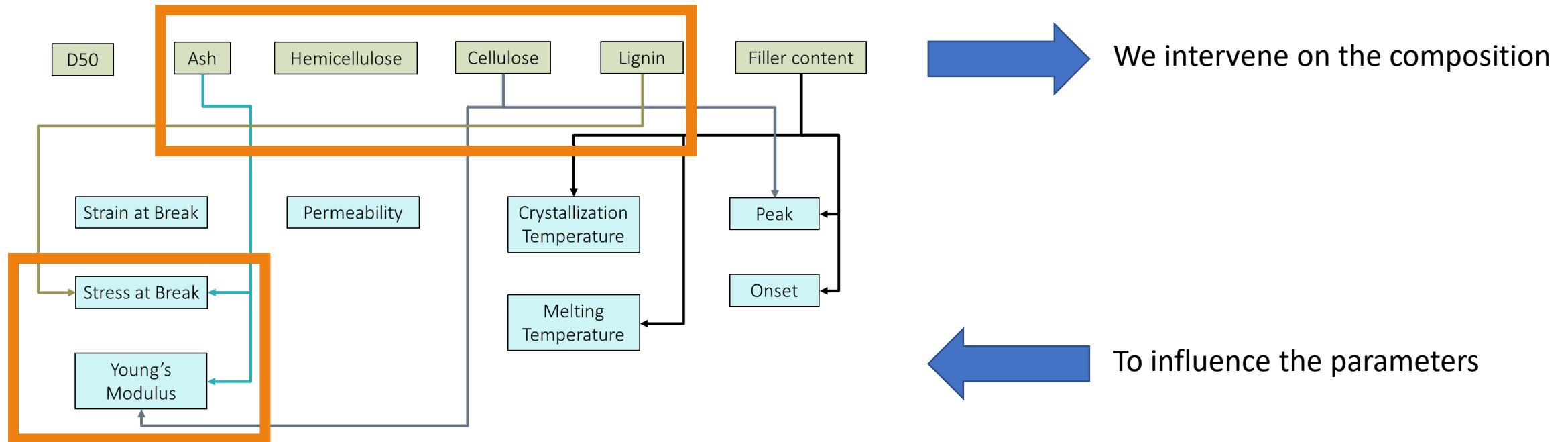
	meca_0.strainatbreak			
tdc_0.taux	t_0	t_1	t_2	t_3
t_0	0.0076	0.4924	0.4924	0.0076
t_1	0.0020	0.7700	0.1620	0.0660
t_2	0.3624	0.4522	0.1826	0.0028
t_3	0.5747	0.2630	0.1071	0.0552

L'augmentation du taux de charge a un impact négatif sur l'élongation à la rupture (strain at break)

# Q2. Reverse Engineering (1)

Optimizing *Young Modulus et Stress at Break*

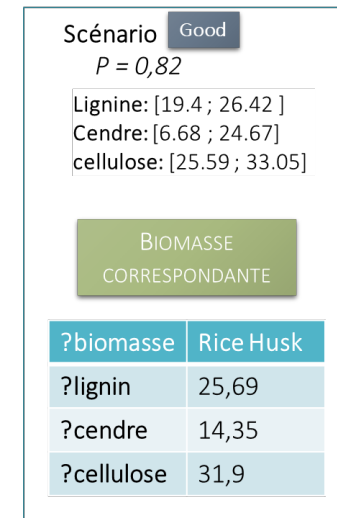
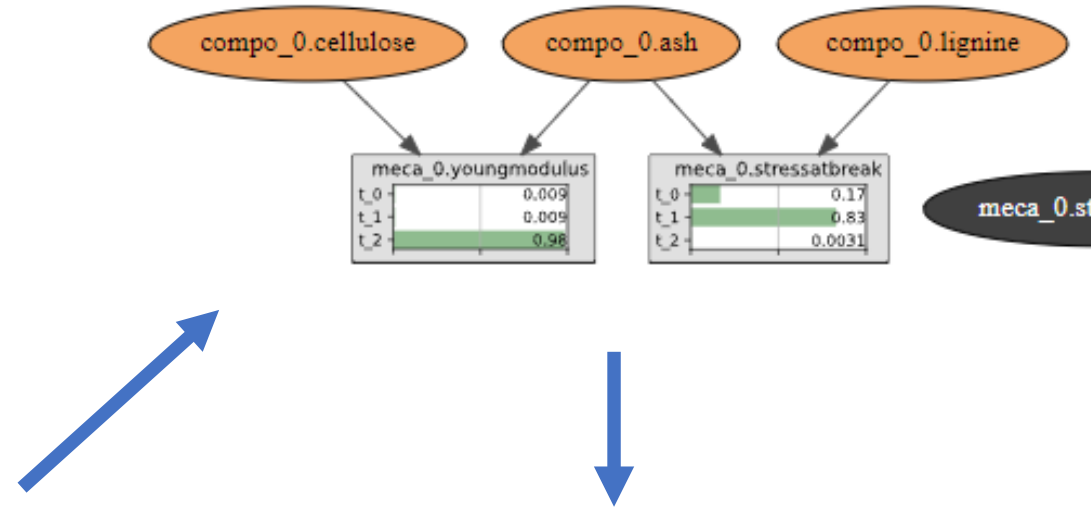
## 1. Identification of the relevant parameters



→ How to determinate our goal?

# Q2. Reverse Engineering (2)

**Question (ingénierie inverse) :** Quelle biomasse pour atteindre des caractéristiques mécaniques souhaitées ?



Réutilisation des données du data paper Fabre et al. 2020

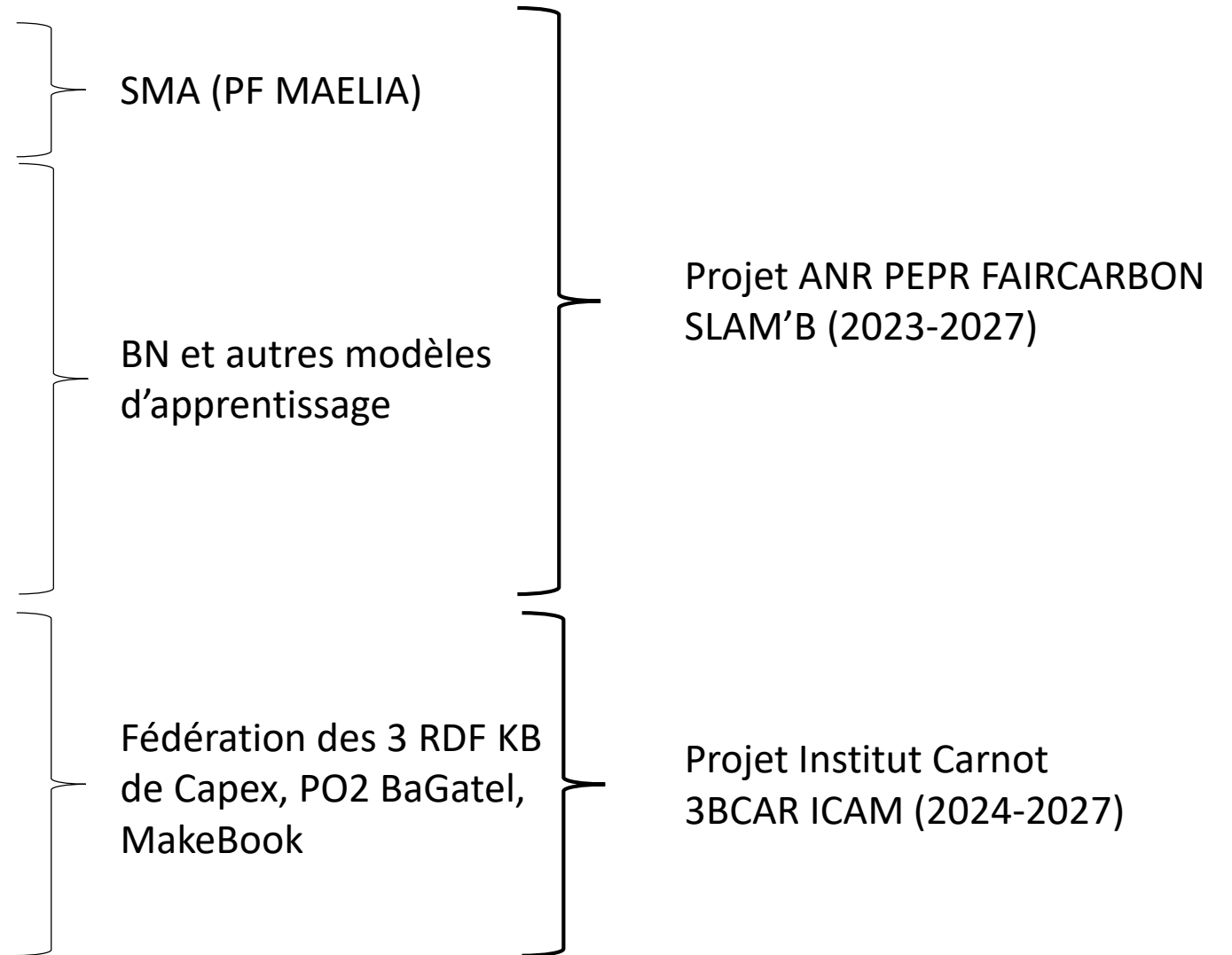
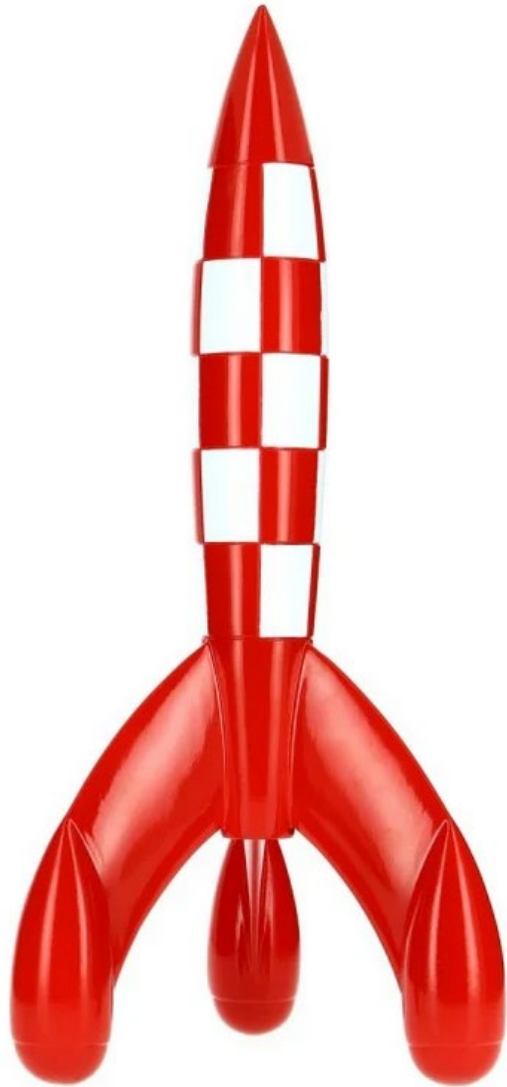
=> enveloppe de riz, chènevotte

# Conclusion

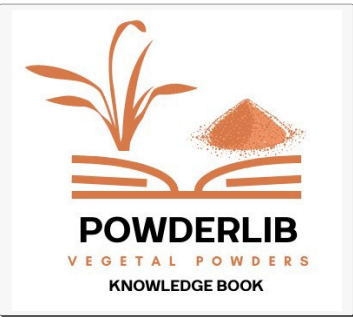
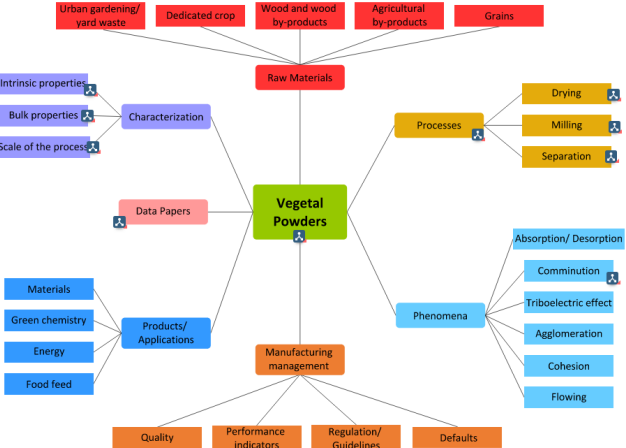
- L'écosystème PO2/Bagatel est [lauréat du prix Sciences ouvertes données de la recherche 2023](#) décerné par le MESR dans le cadre du PNSO dans la catégorie « créer les conditions de la réutilisation »
- L'ontologie PO2/TransformON publiée en 2023 dans la revue *npj science of Food du Nature portfolio*
- L'approche combinant KB PO2 et BN « A process reverse engineering approach using Process and Observation Ontology and Probabilistic Relational Models: application to processing of bio-composites for food packaging », *best paper de la conférence International Conference on Metadata and Semantics Research* (MTSR 2021)
- **Qualité des données**: Réutilisation des règles d'inférence pour générer un ensemble de contraintes SHACL/SPARQL (article en cours de rédaction)
- La base PO2/BagaTel intègre des données collectées/produites dans **plusieurs unités du département Transform (IATE, BIA, CSGA, SAYFOOD, STLO et FARE)**
- L'écosystème logiciel est développé et géré par **un collectif de 9 ingénieur.e.s au sein du CATI DIISCICO avec l'appui scientifique de 10 DR, PR, CR, MC et IE** répartis dans plusieurs unités des départements Transform et MathNum



# Perspectives



# Projet ICAM (2024-26): Ingénierie des Connaissances et Analyse Multidimensionnelle de la Durabilité pour valoriser les données, les connaissances et l'expertise scientifique des plateformes de bioraffinerie



## Livre de connaissances (LDC)

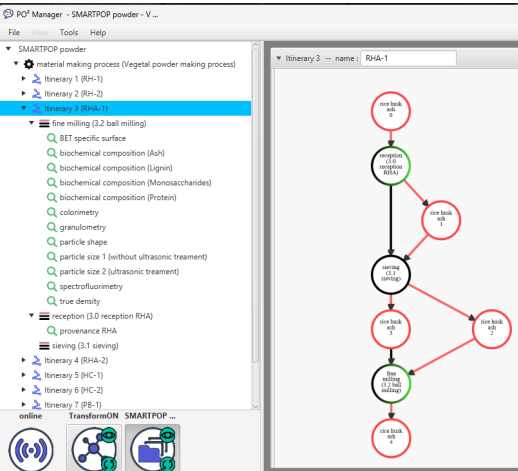
PO² Manager - TransformON - V 4.1

rice husk

<http://opendata.inrae.fr/PO2/Ontology/TransformON/Compon...>

Labels	Definition
rice husk	:: Rice hulls (or rice husks) are the hard protecting coverings of grains of rice. In addition to protecting rice during the growing season, rice hulls can be put to use as building material, fertilizer, insulation material, or fuel. Rice hulls are part of the chaff of the rice. @source <a href="https://en.wikipedia.org/wiki/Rice_hulls">https://en.wikipedia.org/wiki/Rice_hulls</a> , @date 16/08/2022, @created by Patrice Buche.
balle de riz	:: La balle de riz est un sous-produit dérivé du décorticage du riz, opération qui permet de transformer le riz récolté (ou riz paddy), en riz complet (ou riz cargo). Ce dernier doit subir une deuxième étape de transformation, le blanchiment,

## Ontologie PO2 TransformON



## Base de données expérimentales (PO2 Bagatel)

Particles too large in comparison to the expected median particle size {coarse milling, SM100, SM300} (at least 20% > than median particle size)

+ Mill setting not suitable

-> The engine consumes too much energy (the door is hot on contact with...)

-> There is clogging of the grid and/or walls

-> Input not dry enough (Moisture content > 10%)

+ Stop the crusher, dry the product and re-mill

+ Check the moisture content of the biomass before milling (Moisture < 10%)

-> The crusher does not have enough space to mill

-> Milling chamber overfilled

-> The feed flow is too fast

+ Check the noise of the mill to verify that the feed flow is not too elevated

+ Use a doser for large quantities

## Aide à la reco d'actions technologiques (CAPEX)

## Projet ICAM (2024-26): vers le FAIR By Design

	Code	Humidification	Décortilage	Fragmenteur	Type
Exp 1	SDNHT	SANS	AVEC	SANS	Blé Tendre
Exp 2	SDNHD	SANS	AVEC	SANS	Blé Dur
Exp 3	SDHD	AVEC	AVEC	SANS	Blé Dur
Exp 4	SDHT	AVEC	AVEC	SANS	Blé Tendre
Exp 5	SENHT	SANS	SANS	SANS	Blé Tendre
Exp 6	SENHD	SANS	SANS	SANS	Blé Dur
Exp 7	SEHT	AVEC	SANS	SANS	Blé Tendre
Exp 8	SEHD	AVEC	SANS	SANS	Blé Dur

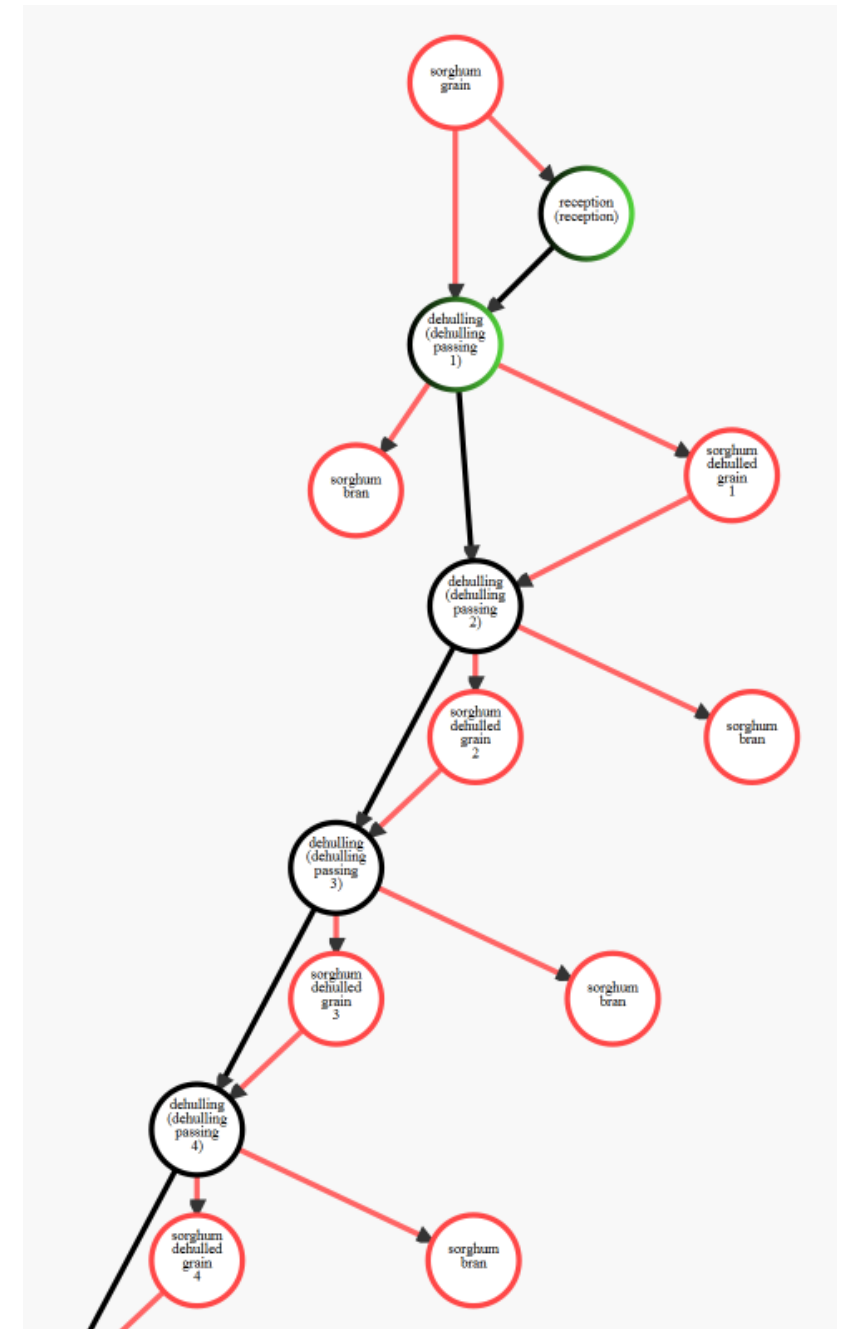
Extrait du plan d'expérience d'itinéraires de production de farine de sorgho  
stage de Chloé Pujol, équipe GRAIN(E)S

## Projet ICAM (2024-26): vers le FAIR By Design

Une modalité du plan d'expérience correspond à une séquence d'opérations unitaires

Objectif: générer le template PO2 intégrant l'ensemble des modalités du plan d'expérience dès la réalisation du plan d'expérience

Décorticage: AVEC





Claire Mayer  
IR HDR INRAE  
IATE Montpellier



Valérie Guillard  
PR UM  
IATE Montpellier



Hélène Coussy  
MC HDR UM  
IATE Montpellier



Sylvie Clerjon  
IR INRAE  
QUAPA Clermond



Amidou Traoré  
IR INRAE  
QUAPA Clermond



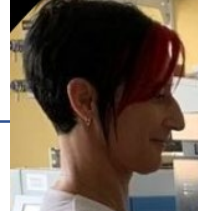
Stéphane Dervaux  
IE INRAE  
MIA Paris



Liliana  
Ibanescu  
MCF APT  
MIA Paris



Cédric Baudrit  
CR INRAE  
I2M Bordeaux



Géraldine  
Lucchi  
IR INRAE  
CSGA Dijon



Julien Cufi  
IR INRAE  
IATE Montpellier



Michel  
Visali  
IR INRAE  
CSGA Dijon



Adrien Réau  
IE INRAE  
IATE Montpellier



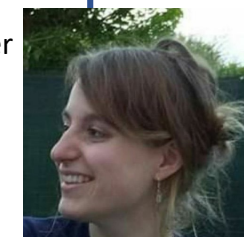
Leslie Lhomond  
IE INRAE  
IATE Montpellier



Caroline Pénicaud  
CR HDR INRAE  
SAYFOOD Saclay



Geneviève Gésan-Guiziou  
DR INRAE  
STLO Rennes



Mélanie Münch  
IR INRAE  
STLO Rennes



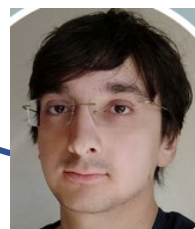
Luc Menut  
AI INRAE  
IATE Montpellier



Hervé Guillemain  
IR INRAE  
URTAL Poligny



Patrice Buche  
IR HDR INRAE  
IATE Montpellier



Alrick Oudot  
IE CDD INRAE  
IATE Montpellier



Reine Barbar  
MC Institut Agro  
IATE Montpellier



Magalie Weber  
IR INRAE  
BIA Nantes



Merci pour votre attention !  
l'équipe PO2 et son premier  
cercle de collaboration

# Bibliographie

- Baudrit et al. 2022: Cedric Baudrit, Patrice Buche, Nadine Leconte, Christopher Fernandez, Maëllis Belna, et al.. Decision support tool for the agri-food sector using data annotated by ontology and Bayesian network: a proof of concept applied to milk microfiltration.. *International Journal of Agricultural and Environmental Information Systems*, 2022, 13 (1), [10.4018/IJAEIS.309136](#). [hal-03738973](#)
- Fabre et al. 2020: Charlène Fabre, Patrice Buche, Xavier Rouau, Claire Mayer-Laigle. Milling itineraries dataset for a collection of crop and wood by-products and granulometric properties of the resulting powders. *Data in Brief*, 2020, 33, pp.106430. [10.1016/j.dib.2020.106430](#). [hal-03004903](#)
- Munch et al. 2022a : Mélanie Munch, Patrice Buche, Stéphane Dervaux, Juliette Dibie, Liliana L. Ibanescu, et al.. Combining ontology and probabilistic models for the design of bio-based product transformation processes. *Expert Systems with Applications*, Elsevier, 2022, 203, pp.117406. [10.1016/j.eswa.2022.117406](#). [hal-03662183](#)
- Munch et al. 2022b : Mélanie Munch, Patrice Buche, Helene Angellier-Coussy, Cristina Manfredotti, Pierre-Henri Willemin. Formalising contextual expert knowledge for causal discovery in linked knowledge graphs about transformation processes: application to processing of bio-composites for food packaging. *International Journal of Metadata, Semantics and Ontologies*, 2022, 16 (1), pp.1-15. [10.1504/IJMSO.2022.131129](#). [hal-04115029](#)
- Munch et al. 2022c : Mélanie Munch, Patrice Buche, Stéphane Dervaux, Amélie Breysse, Marie-Alix Berthet, et al.. Biocomposites from poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate) and lignocellulosic fillers: Processes stored in data warehouse structured by an ontology. *Data in Brief*, 2022, 42, pp.108191. [10.1016/j.dib.2022.108191](#). [hal-03650668v2](#)
- Weber et al. 2023: Magalie Weber, Patrice Buche, Liliana Ibanescu, Stéphane Dervaux, Hervé Guillemain, et al.. PO2/TransformON, an ontology for data integration on food, feed, bioproducts and biowaste engineering. *npj Science of Food*, 2023, 7, pp.47. [10.1038/s41538-023-00221-2](#). [hal-04197618](#)



# Q2. Reverse Engineering (2)

Optimizing *Young Modulus* et *Stress at Break*

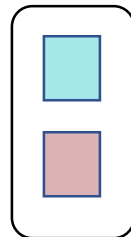
## 2. Expression of the expert's expectations



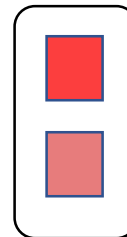
*Young Modulus*



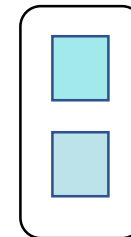
*Stress at break*



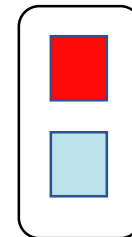
Average



Bad



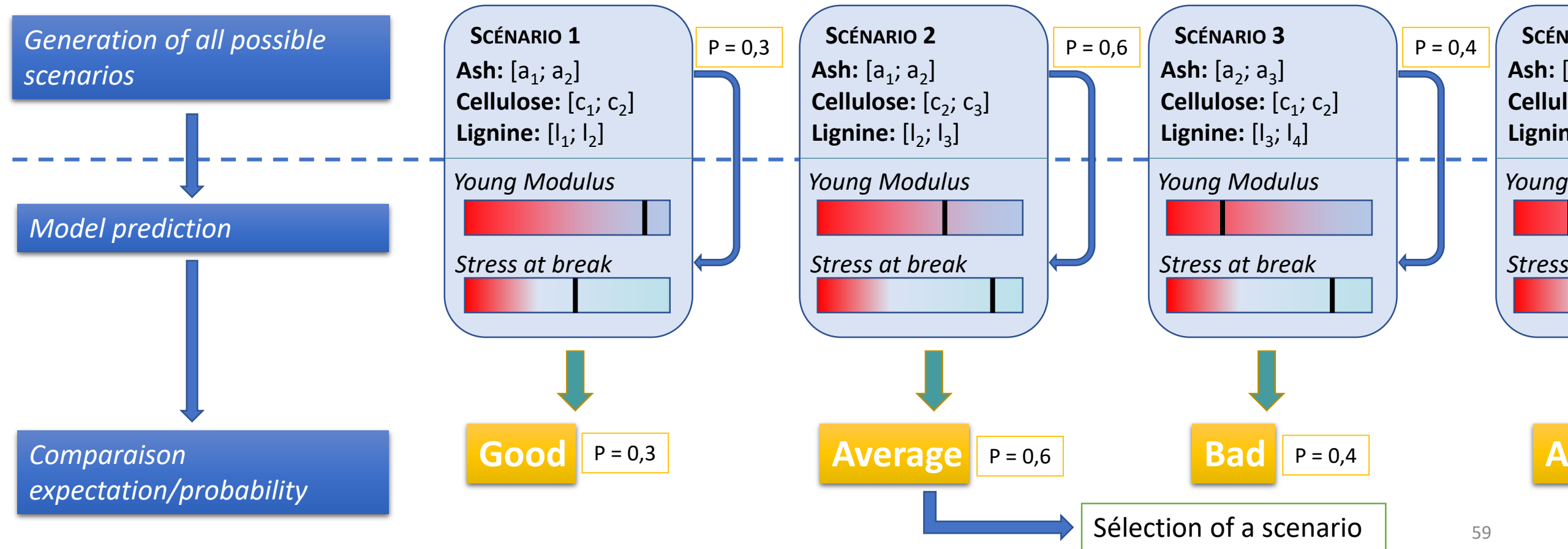
Good



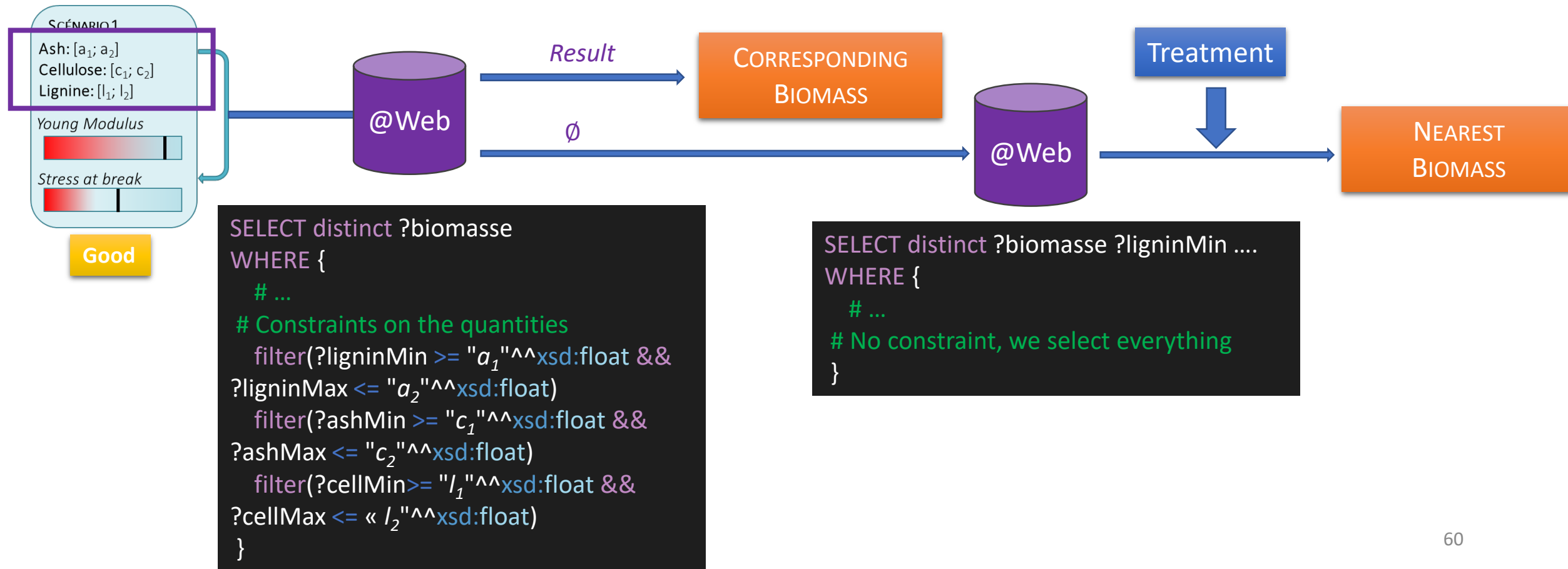
???

→ How to generate constraints to address the problem?

## Q2. Reverse Engineering (3)



## Q2. Reverse Engineering (4)



## Q2. Reverse Engineering (5)

Scenario **Good**

$P = 0,82$

Lignin: [19.4 ; 26.42 ]

Ash: [6.68 ; 24.67]

Cellulose: [25.59 ; 33.05]

CORRESPONDING  
BIOMASS

?biomass e	Rice Husk
?lignin	25,69
?ash	14,35
?cellulose	31,9

Scenario **Good**

$P = 0,99$

Lignin: [26.42 ; 49 ]

Ash: [6.68 ; 24.67]

Cellulose: [25.59 ; 33.05]

CORRESPONDING  
BIOMASS

∅

NEAREST  
BIOMASS

Pas de resultat. Correspondance avec les matériaux présents:

pine\_bark 5.26 {'lig': 27.33, 'ash': 1.44, 'cel': 20.6}

rice\_husk 7.049999999999997 {'lig': 25.69, 'ash': 14.35, 'cel': 31.9}

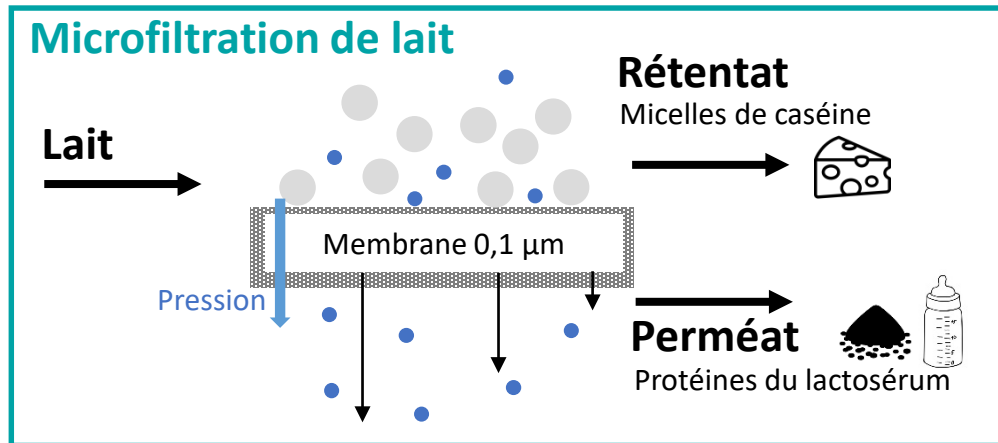
hemp\_core 14.973000000000003 {'lig': 24.0, 'ash': 1.157, 'cel': 32.59}

wheat\_straw 15.19 {'lig': 23.04, 'ash': 4.71, 'cel': 35.4}

pine\_sawdust 24.95 {'lig': 28.0, 'ash': 0.16, 'cel': 44.0}

flax\_fibre 71.03999999999999 {'lig': 3.0, 'ash': 3.5, 'cel': 70.0}

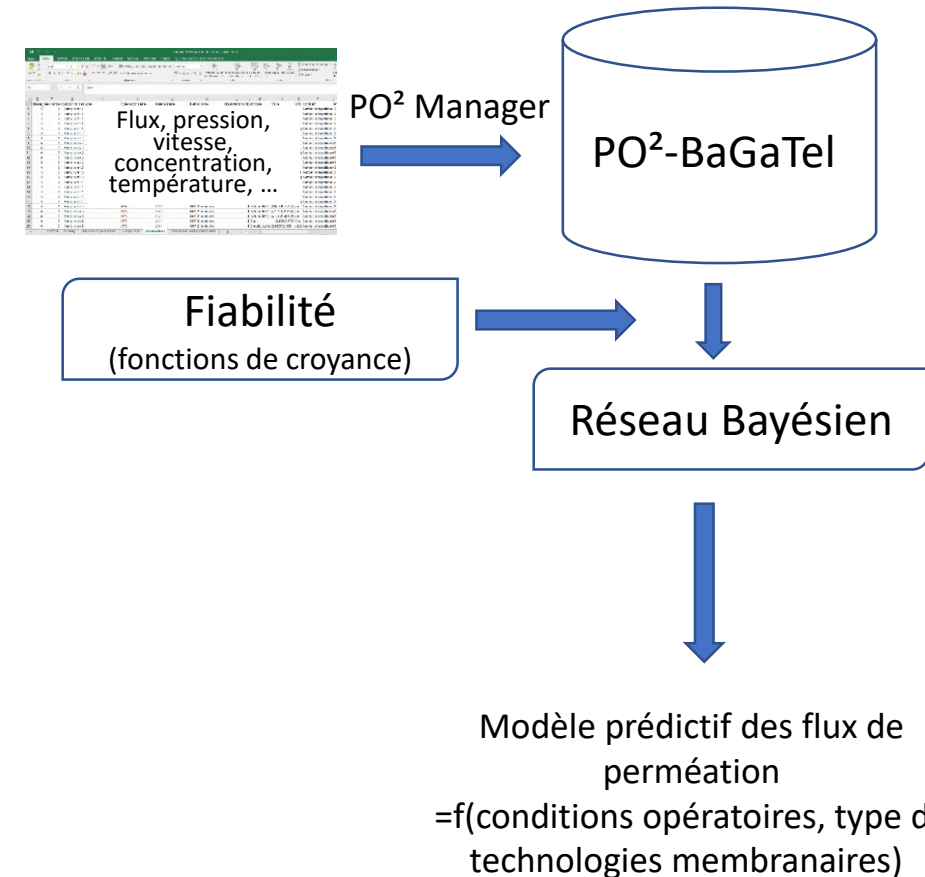
# Prédiction des performances de la microfiltration de lait



**Objectif** : Prédire les performances des opérations de microfiltration du lait

## Problématique

- Différentes technologies membranaires (conception, conduite)
- Modèles existants limités à une gamme précise de conditions opératoires
- Données très hétérogènes et incomplètes
- Données de fiabilité variable



## Retombées

- Identifier les trous de connaissances
- Aborder de nouvelles questions de recherche (ex: impact du traitement amont du lait)
- Elargir l'outil à d'autres critères de performances

# Perspectives

- **Couplages** réalisés ou en cours de réalisation: réseaux bayésiens et autres méthodes de data mining, couplage avec ACV (PF MEANS), livres de connaissances (MakeBook), aide à la décision multicritères basée sur le savoir-faire technologique (CAPEX)
- **FAIR by design:**
  - Etudes de faisabilité en cours avec plusieurs **PF CALIS**: PLANET, AGRORESONANCE, CHEMOSENS
  - Elaboration de **templates Excel au format PO2** de structuration des données procédés et caractérisation multi-équipes/multi-unités (projet ICAM IATE, projet Echantillothèque BIA, projet Innosalt QUAPA, ...)
  - Capitalisation de données produites dans des **projets multi-partenaires hors Transform** (démonstration en cours dans l'ANR EVAGRAIN coordonné par BIA)



# Publication sous forme de data paper

Munch et al. 2022c



Contents lists available at ScienceDirect

Data in Brief

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/dib](http://www.elsevier.com/locate/dib)



## Data Article

### Biocomposites from poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate) and lignocellulosic fillers: Processes stored in data warehouse structured by an ontology



Mélanie Munch<sup>a,b,\*</sup>, Patrice Buche<sup>a,c</sup>, Stéphane Dervaux<sup>d</sup>,  
Amélie Breysse<sup>a</sup>, Marie-Alix Berthet<sup>a</sup>, Grégoire David<sup>a</sup>,  
Sarah Lammi<sup>a</sup>, Fleur Rol<sup>a</sup>, Amandine Viretto<sup>a</sup>,  
Hélène Angellier-Coussy<sup>a</sup>

<sup>a</sup> IATE, INRAE, Montpellier SupAgro, Université de Montpellier, Montpellier F-34060, France

<sup>b</sup> IATE and I2M, INRAE, Université de Bordeaux, Talence 33405, France

<sup>c</sup> LIRMM, CNRS, INRIA Graphik, Université de Montpellier, Montpellier F-34060, France

<sup>d</sup> UMR MIA-Paris, AgroParisTech, INRAE, Université Paris-Saclay, Paris F-75005, France

## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 28 February 2022

Revised 11 April 2022

Accepted 14 April 2022

Available online 22 April 2022

### Keywords:

Biocomposites

Tensile properties

Lignocellulosic fillers

Food packaging

Water vapour permeability

## ABSTRACT

Due to the rising amount of plastic waste generated each year, multiple questions are emerging about their harmful long-term effects on the environment, the eco-systems and human health. One possible strategy to mitigate these issues is to substitute conventional plastics by materials fully biodegradable in natural conditions, such as poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate) (PHBV). In order to decrease the overall cost and environmental impact of PHBV-based materials while modulating their technical performance, PHBV can be combined with lignocellulosic fillers. In this article, a total of 88 formulations of PHBV-based biocomposites has been collected, distributed over 5 interdisciplinary projects involving computer scientists, data scientists and biomass processing experts for food and bio-based material production. Available data concern the technical process descriptions, including the description of each step and the different observations measured.