INTRAL

Interpretable and Interactive Transfer Learning in Process Analytical Technology

Programm / Ausschreibung	Produktion der Zukunft, Produktion der Zukunft (KP 2020), 36. AS PdZ - Nationale Projekte 2020 (GP)	**Status**	abgeschlossen
Projektstart	01.05.2021	**Projektende**	30.04.2024
Zeitraum	2021 - 2024	**Projektlaufzeit**	36 Monate
Keywords	Transfer learning, Process Analytical Technology, Process Modelling, Cheometrics		

Projektbeschreibung

Ausgangssituation: Prozess Analytische Technologien (PAT) bilden die Grundlage für die Gewährleistung einer sicheren, effizienten und Ressourcen schonenden Produktion (bio-basierter) pharmazeutischer Erzeugnisse und sind maßgeblicher Bestandteil von Industrie 4.0. Herzstück zur Realisierung von industriellen PAT Lösungen bilden daten-getriebene Modelle, sei es bei der Kalibrierung photonischer Sensoren zur Prozessüberwachung, der Erstellung digitaler Prozessmodelle oder der Etablierung intelligenter Regelungssysteme.

Problem und Motivation für das F&E Projekt: Zum einen ist der Ressourcen Aufwand bei der Erhebung der benötigten Daten für die Erstellung solcher Modelle in der Regel beträchtlich, zum anderen haben diese einen oft sehr kurzen Lebenszyklus. Der Tausch einer Messsonde oder eines Bioreaktors oder die Umstellung auf einen genetisch leicht modifizierten Organismus bei der Prozess Entwicklung erfordert meistens die Erstellung neuer (Prozess-) Modelle. Dies hat zur Folge, dass das volle Potential von PAT in der (bio-) pharmazeutischen und verwandten Industrien bis dato kaum ausgeschöpft wird. Transfer Learning (TL) Ansätze bergen das Potential, den Ressourcen Aufwand bei der Entwicklung, Instandhaltung und Anpassung daten-getriebener Modelle an neue Gegebenheiten dramatisch zu reduzieren, indem (historische) Daten aus ähnlichen Domänen, im Vergleich zu herkömmlichen Modellierungsansätzen, besser nutzbar gemacht werden können. State-of-the-art TL Ansätze basieren jedoch auf nicht interpretierbaren "black-box" Modellen und bieten kaum Möglichkeiten, Experten-Wissen einzubetten, was deren Einsatz in stark regulierten Bereichen wie der (bio-) pharmazeutischen Industrie erschwert.

Ziele und Innovationsgrad: INTRAL verfolgt das Ziel, Transfer Learning Verfahren für PAT Anwendungen im (bio-) pharmazeutischen Bereich zu entwickeln bzw. zu etablieren. Gegenüber dem Stand der Technik werden neuartige, interpretierbare TL Algorithmen für die Modellinstandhaltung entwickelt, die es ermöglichen sollen Experten-Wissen zu integrieren.
Ein Fokus liegt hierbei insbesondere auf der effizienten Nutzung von Daten und der Kombinationen von verschiedenen Modellbildungsverfahren (Hybride Modellierung).

Erwartete Ergebnisse: Das Hauptergebnis des Projekts wird ein Software-Framework sein, das Algorithmen, Workflows und

Schnittstellen für die Erstellung, Interpretation und Validierung von TL Modellen für PAT Anwendungen bündelt.

Konsortium: INTRAL bündelt alle erforderlichen wissenschaftlichen & technologischen Kompetenzen durch die Partner TU Wien (Prozess Analytische Technologien), SCCH (Transfer Learning und Software-Architektur), Takeda (über die 100%ige Tochter Baxalta Innovations Gmbh, biopharmazeutische Prozessentwicklung) und Sandoz (Fermentationstechnologie und Biopharmazeutika)

Abstract

Initial Situation: Process Analytical Technology (PAT) are major enablers of safe, efficient and sustainable production of (bio-based) pharmaceuticals and constitute an important building block of industry 4.0. Data-driven models are at the core of any industrial PAT application, be it for calibration of advanced photonic sensors for process monitoring, for establishing digital process models or for deriving intelligent process control systems.

Problem and motivation for the R&D project: On the one hand, a significant amount of resources are required for data acquisition in order to derive such models while on the other, their lifecycle is often short. Changing a probe or a bioreactor, or changing the production to a microorganism with slightly different genotype during process development usually requires development of new models. As a consequence, the full potential of PAT is hardly leveraged in the (bio-) pharmaceutical and related industries yet. Transfer learning (TL) bears the potential to dramatically reduce the resources required for model development, maintenance and adaptation to new process conditions as it allows, in contrast to conventional modelling approaches, more efficient integration of historical data from related domains. However, state-of-the-art TL approaches are based on difficult to interpret "black box" models and offer limited possibilities to include expert knowledge, which hampers their use in strictly regulated environments such as the (bio-) pharmaceutical industry.

Goals and level of innovation compared to state-of-the-art: With INTRAL we aim at developing and promoting transfer learning methods for PAT applications in the (bio-) pharmaceutical and related domains. Compared to the state of the art, novel, interpretable TL algorithms for model maintenance are developed. Their interactivity allows to include expert knowledge making them suitable for the tightly regulated pharma sector.
Another focus of INTRAL lies on the efficient use of data by transfer learning and the combination of different modeling methods (hybrid modeling) to increase transferability and interactivity.

Expected results and findings: The main result of the project will be a software framework providing algorithms, workflows and interfaces for deriving, interpreting and validating TL models for PAT applications.

Consortium: INTRAL combines all necessary scientific & technological competences through its partners TU Vienna (process analytical technologies), SCCH (transfer learning und software architecture), Takeda (via its subsidiary Baxalta Innovations GmbH, biopharmaceutical process development) and Sandoz (fermentation and biopharmaceutical technologies)

Projektkoordinator

- Technische Universität Wien Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und technische Biowissenschaften

Projektpartner

- Baxalta Innovations GmbH
- Novartis Pharmaceutical Manufacturing GmbH
- Software Competence Center Hagenberg GmbH