



 plotly

NovaLabs facilite l'accès à la méthodologie CFD la plus utilisée pour la mise à l'échelle des réacteurs agités grâce à Plotly Dash

Résumé

- NovaLabs a développé une offre SaaS commerciale (CliqScale.R) en utilisant Dash comme cadre applicatif, fonctionnant sur une instance AWS pour explorer des visualisations 3D de modèles de simulation de réacteurs avec des paramètres définis par l'utilisateur.
- L'application réduit le délai d'accès à une méthodologie CFD de bout en bout pour la mise à l'échelle des réacteurs agités, passant d'un an à quelques minutes.
- Les entreprises pharmaceutiques peuvent potentiellement économiser des montants à 7 chiffres en évitant des essais répétitifs à grande échelle grâce aux résultats interprétables fournis par la méthodologie CFD.

Introduction

La CFD (Computational Fluid Dynamics) est une méthode permettant de simuler la dynamique des liquides et des gaz à l'aide d'un ordinateur.

Dans l'industrie pharmaceutique, la CFD est utilisée pour simuler les conditions de mélange dans les réacteurs où sont fabriqués les principes actifs (API) d'un médicament. Un cas d'usage courant est la mise à l'échelle d'une cristallisation qui doit être transférée vers un autre réacteur de taille différente.

Le changement d'échelle et d'équipement implique un risque important d'échec en raison des modifications inhérentes de la physique et des conditions de mélange. Pour réduire ce risque, un pré-dépistage CFD est la méthode de choix.

Avant d'utiliser la CFD pour accompagner ces mises à l'échelle, plusieurs étapes fastidieuses sont nécessaires : engager un expert, sélectionner soigneusement le matériel et les logiciels, ce qui représente un investissement initial entre 70 000 et 100 000 dollars, et un délai pouvant atteindre six mois. Après l'exécution des premières simulations, le développement d'une méthodologie appropriée commence, prenant plusieurs mois, pour un délai total pouvant aller jusqu'à un an.

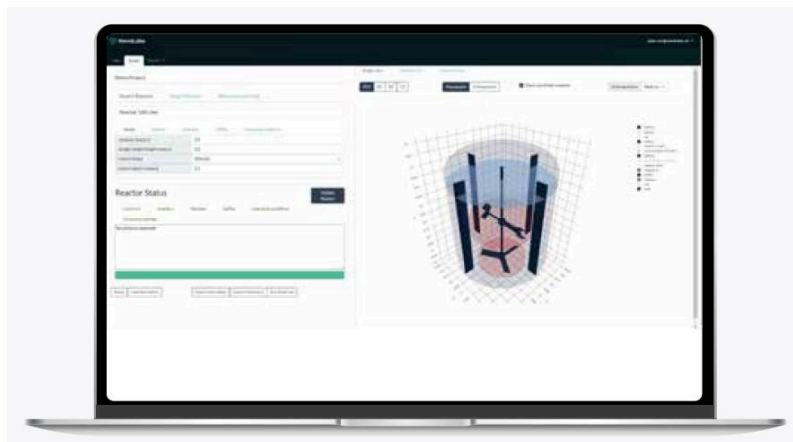
Avec CliqScale.R, NovaLabs a radicalement changé cette réalité grâce à Plotly Dash.

Défi

La CFD, en tant qu'outil dans l'arsenal d'une entreprise pharmaceutique, peut être comparée à un laboratoire prêt à l'emploi (matériel) avec toutes les matières de base pour synthétiser une nouvelle substance (logiciel), mais sans recette pour répondre aux besoins des patients (parties prenantes). La « recette » dans cette analogie correspond à la méthodologie, qui, une fois suivie, fournit des résultats analytiques interprétables et exploitables.

Mettre en place cette chaîne d'outils de bout en bout exige des connaissances en sciences computationnelles, en ingénierie et en codage, ainsi qu'une expertise métier pour choisir la méthodologie adéquate. Elle doit être facilement accessible et utilisable pour être comprise par des utilisateurs non experts.

Pour répondre à ces exigences, la CFD a besoin d'une méthodologie approuvée par l'industrie, fournie sous forme de solution complète, accessible et utilisable instantanément. NovaLabs a développé CliqScale.R pour répondre à ce besoin.



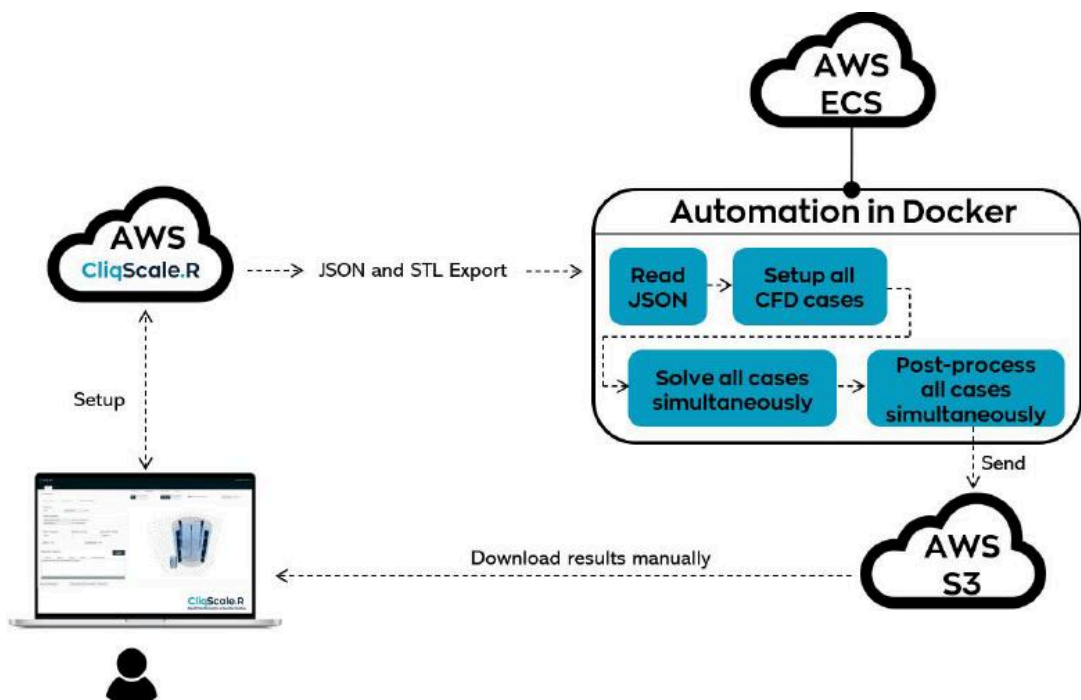
Solution

Définition des conditions de simulation des réacteurs : les paramètres requis, y compris le nombre de simulations nécessaires pour prendre des décisions éclairées, sont fournis via l'interface graphique Dash et stockés dans un fichier JSON définissant l'ensemble de la configuration de simulation.

Génération de tous les cas CFD à partir du fichier JSON : cette étape est entièrement automatisée, incluant le maillage, la définition des conditions aux limites et l'exécution simultanée de toutes les simulations. Elle a été mise en œuvre à l'aide de modules Python développés en interne et de scripts shell.

Post-traitement automatisé des solutions CFD : l'équipe a utilisé Python et des scripts shell pour produire des résultats interprétables et directement intégrables dans des rapports.

L'application Dash, où tous les paramètres sont définis par l'utilisateur, s'exécute sur une instance AWS et peut être utilisée simultanément par différents utilisateurs. Les données générées en ligne sont correctement associées grâce à une tokenisation et un dossier de données lié à chaque jeton. La partie automatisée est découplée de l'application et s'exécute comme une application conteneurisée sur AWS ECS. Les résultats sont stockés dans un bucket S3 et accessibles via un lien de téléchargement.



Résultats

Avec le développement de CliqScale.R, l'équipe NovaLabs permet aux entreprises pharmaceutiques d'obtenir les résultats suivants :

- Le délai pour accéder à une méthodologie CFD prête à l'emploi et complète pour la mise à l'échelle des réacteurs agités est réduit d'un an à quelques minutes grâce à l'approche SaaS par abonnement.
- La méthodologie contribue à réduire considérablement le risque d'échec lors de la mise à l'échelle grâce au pré-dépistage CFD des différences entre les deux réacteurs. Cela entraîne une réduction significative des essais répétitifs à grande échelle, pouvant générer des économies de plusieurs centaines de milliers à un million de dollars, en particulier à l'échelle commerciale.
- La méthodologie utilisée fournit des résultats interprétables et directement exploitables, tels que des diagrammes de distribution statistique comparant le réacteur source et le réacteur cible, incluant une proposition de vitesse d'agitation pour le réacteur cible correspondant aux conditions du réacteur source.

À propos de NovaLabs

NovaLabs fournit des services en ingénierie computationnelle, en apprentissage automatique et en développement de logiciels scientifiques. Sa mission est d'aider les entreprises à prendre de meilleures décisions grâce à son expertise en calcul scientifique et à réduire les coûts, le temps et les ressources pour un avenir plus durable, avec son produit phare, CliqScale.R.