

Математическое и программное обеспечение для аналитического контроля производственных процессов (MSPC/PAT): перспективы разработки и внедрения в России

А.Ю. Богомолов^a, П.К. Берзигияров^b

^a РХО, Черноголовка

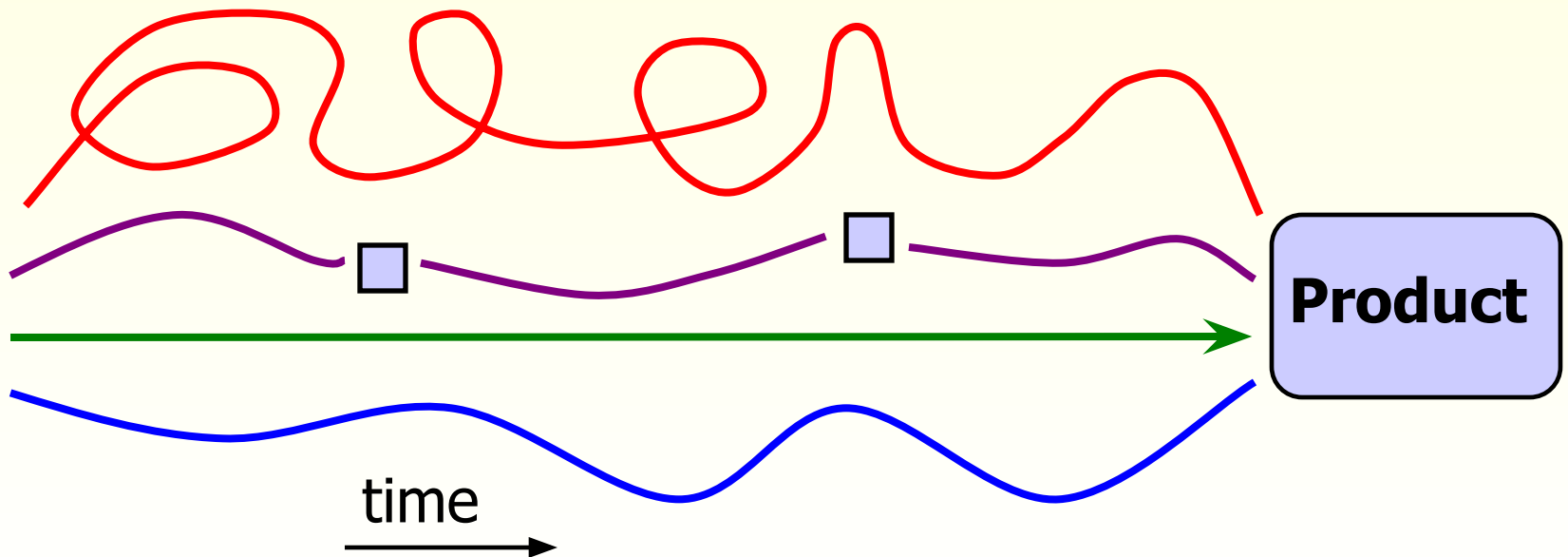
^b InterProgma, Черноголовка

Тезисы доклада

- Контроль и оптимизация производственных процессов: цели, участники и движущие силы
- РАТ создает условия для активного внедрения новых подходов к изучению, контролю и оптимизации процессов в индустрии
- Проект программного обеспечения для MSPC/PAT
- Новые возможности для создания наукоемкого ПО в России

Промышленные процессы

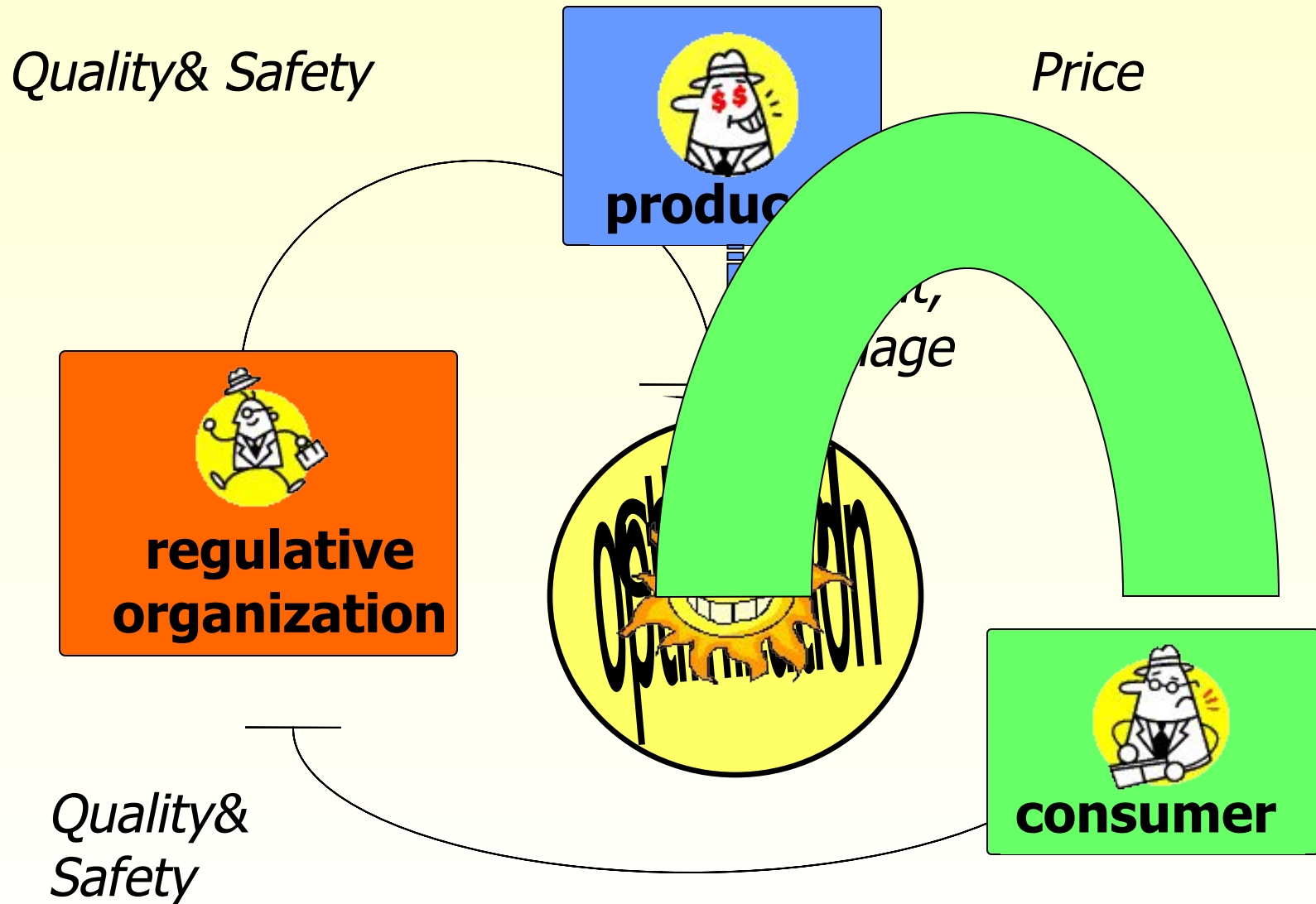
- «Процесс - ход, развитие какого-нибудь явления, последовательная смена состояний в развитии чего-нибудь» *Толковый словарь русского языка.*
- Производственный процесс характеризуется наличием цели – продукта.



Контроль и оптимизация процессов: Зачем и как?

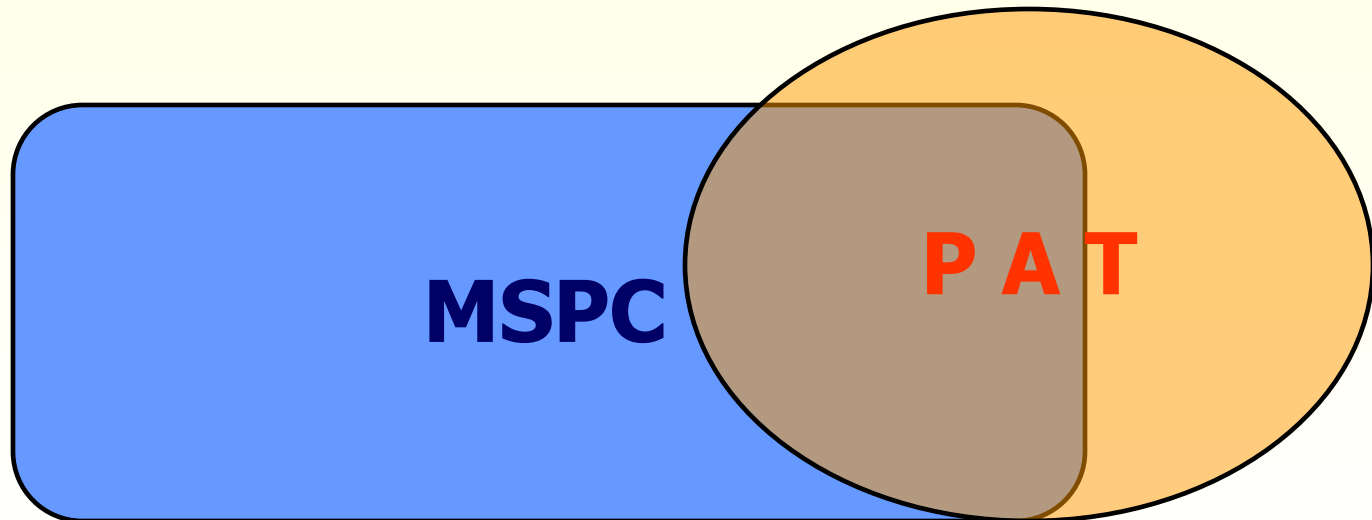
- Цели контроля и оптимизации:
 - Получение продукта требуемого (высокого) качества
 - Стабильность качества продукции
 - Снижение затрат на производство и контроль качества
- Виды оптимизации процессов:
 - На стадии проектирования (организация, реорганизация)
 - Текущие улучшения
 - Оптимизация в реальном времени
- Контроль процессов и их оптимизация тесно взаимосвязаны:
 - Служат для получения качественного продукта
 - Современные методы оптимизации базируются на новых принципах контроля процессов (MSPC)

Контроль и оптимизация процессов: Участники и движущие силы



MSPC и PAT: Терминология

- Multivariate Statistical Process Control (MSPC) – набор современных математических и статистических методов контроля и оптимизации производственных процессов
- Process Analytical Technology (PAT) – инициатива FDA, устанавливающая контролируемые рамки для внедрения инновационных технологий в фармацевтическом производстве и контроле качества



Предпосылки появления PAT

- Существующая практика контроля и оптимизации производственных процессов морально устарела
- Действующие принципы внешнего регулирования тормозят внедрение новых методов
- U.S. FDA Process Analytical Technology имеет глобальное значение

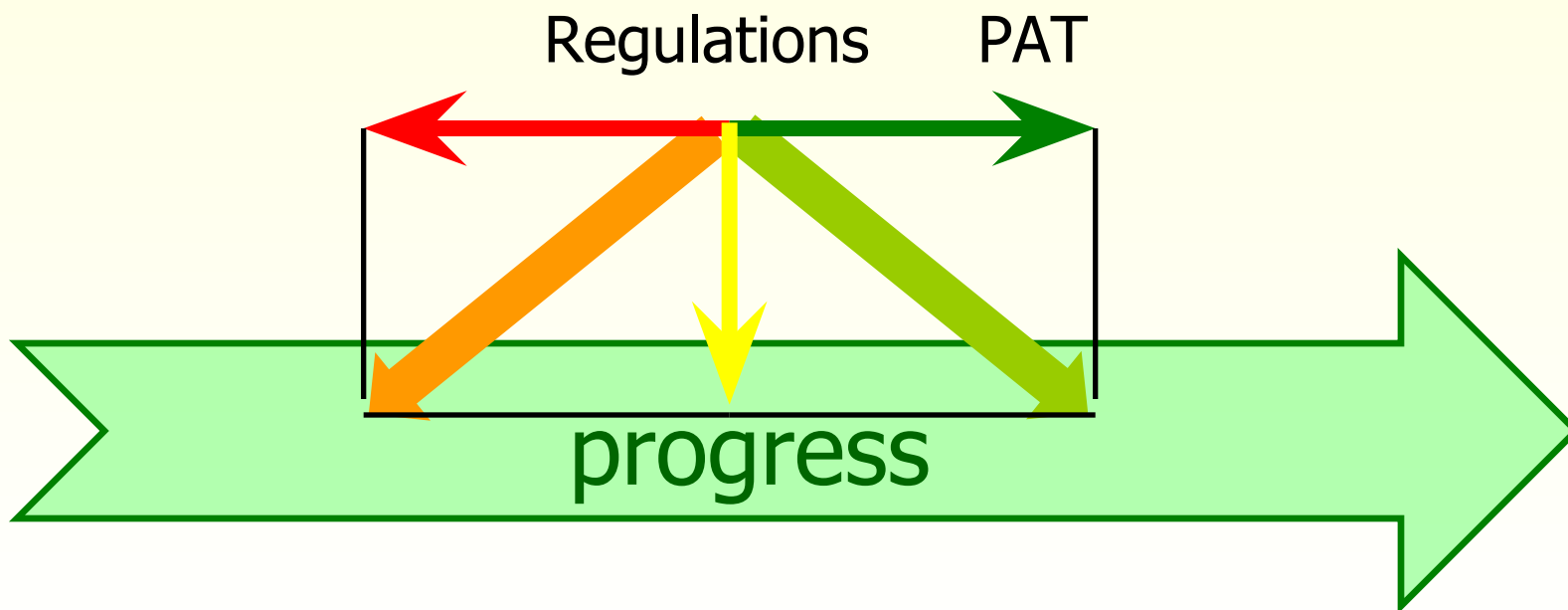
**Guidance for Industry
PAT — A Framework for
Innovative Pharmaceutical
Development, Manufacturing,
and Quality Assurance**

Основные положения РАТ

- Необязательные рекомендации, призванные **содействовать** разработке и внедрению инноваций
- Акцент на **понимании** процесса, как основе для лучшего контроля качества и оптимизации
- Подход основанный на **управлении рисками**
- Управление качеством в реальном времени: приоритет **тестирования процесса** перед тестированием продукта
- Использование косвенных методов анализа для **in-, at- и on-line** методов контроля (вместо off-line)
- Активное использование **MSPC** и хемометрики
- Постоянный **диалог с предприятием**, гибкие механизмы корректировки регулирующих правил

Принципиальное значение РАТ

- Создание механизмов регулирования, которые не препятствуют, а содействуют прогрессу
- => Более эффективная борьба с болезнями, спасение и продление жизней



Выгоды от использования MSPC

- Сокращение производственного цикла за счет использования косвенных методов анализа
- Контроль качества сырья и исходных материалов
- Уменьшение и предотвращение отбраковок и переделок
- Ранняя диагностика «неудачного» процесса
- Контроль точки окончания процесса в реальном времени
- Контроль качества (выпуск продукта) в реальном времени
- Повышение безопасности работы оператора и уменьшение количества ошибок из-за «человеческого фактора»

Программное обеспечение – техническая основа РАТ

- С технической точки зрения

$$\text{РАТ} = \text{«Железо»} + \text{ПО}$$

- «Железо» в РАТ:
 - Сенсоры
 - Аналитические приборы
 - Компьютеры
- Программное обеспечение в РАТ:
 - Управляющее ПО приборов
 - ПО для MSPC
 - ПО для управления информацией и знаниями (хранение, поиск, передача)

Индустрии нужно ПО для MSPC/PAT

- В индустрии существует растущая потребность в ПО для MSPC
- В настоящее время компании решают проблему ПО при внедрении PAT за счет:
 - Внутренней разработки ПО
 - Заказ ПО у компаний-разработчиков
 - Сотрудничества с экспертами в академической среде
- Нет явного лидера в разработке ПО для MSPC/PAT
- => Благоприятная ситуация для нового проекта

Проект ПО для MSPC/PAT

- Создание профессионального ПО для MSPC/PAT
- Коммерческий проект при тесном взаимодействии с наукой
- Новая архитектура ПО
- Первоначальный ориентир на Западный рынок с перспективой внедрения на Российских предприятиях
- Поддержка государства - материальная база для успешного старта проекта

Потенциальные клиенты

- Крупные Западные фармацевтические компании (список «Fortune 500») активно поддерживают внедрение PAT
- Более мелкие компании будут ориентироваться на готовые решения
- Инициатива PAT будет оказывать влияние и на Европейскую фармацевтику, не зависящую от FDA
- Предприятия не связанные с производством пищевых продуктов и лекарств представляют перспективный сектор для MSPC в будущем
- Российские предприятия повторят путь Западной индустрии с опозданием на 10–15 лет

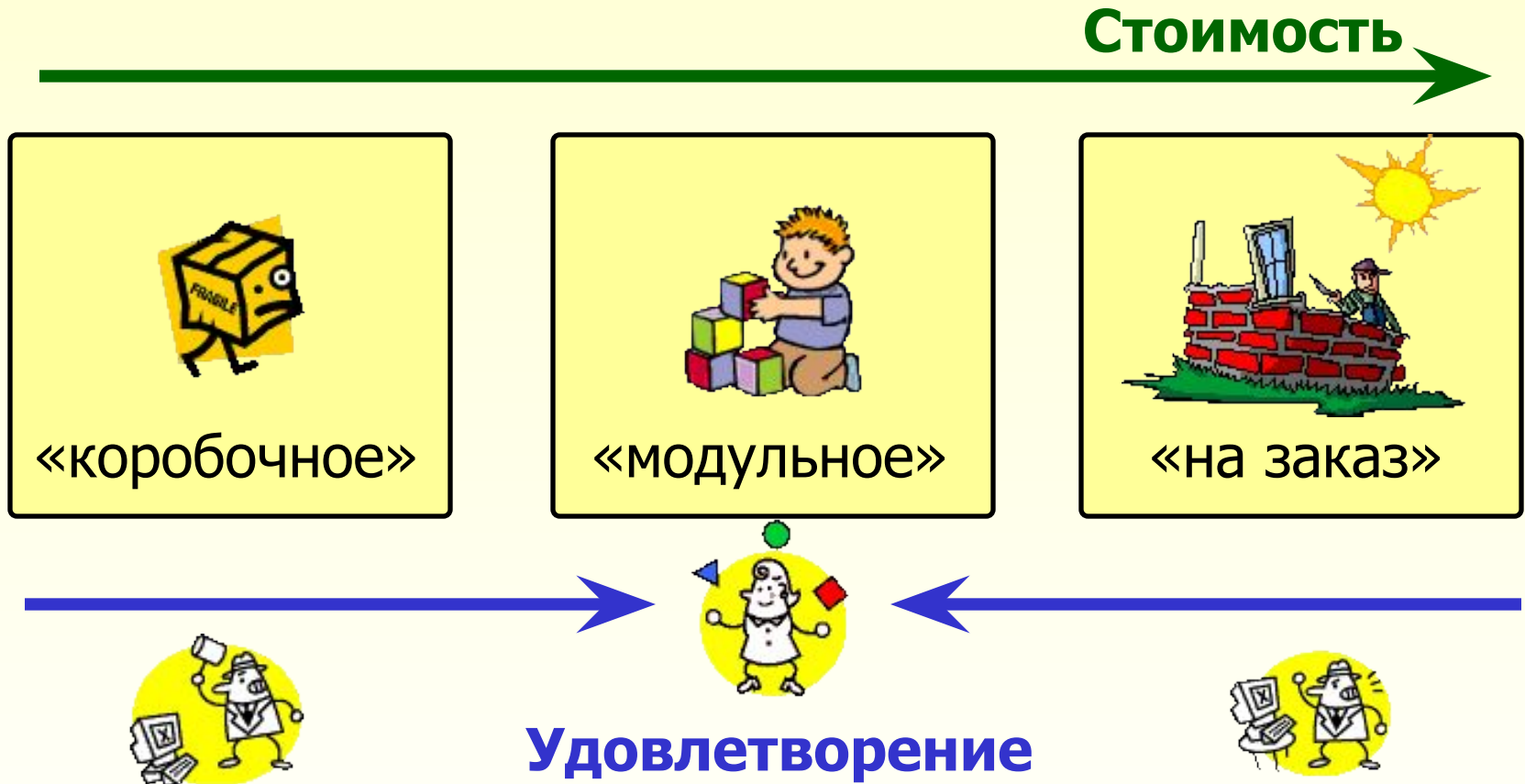
Специфика разработки наукоемкого программного обеспечения

- На сегодня, теория разработки ПО является зрелой областью знания
- Однако, разработка наукоемких приложений имеет существенные особенности
 - Фигура эксперта в производственном цикле
 - Трудности привлечения венчурных инвестиций
 - Требуется специальных управленческих навыков
- Как правило, компании - производители наукоемкого ПО спонтанно вырастают из академической среды
 - Продолжительный процесс
 - Недостаточно профессиональное исполнение
- Хемометрика – предельный случай наукоемкого ПО

Особенности ПО для MSPC/PAT

- Задачи по внедрению MSPC на предприятиях индивидуальны; клиенту требуется **решение**, а не программа
- Успешное ПО для MSPC/PAT должно быть «проблемно-ориентировано»
 - Настраиваемым под конкретную задачу и производственную ситуацию
 - Поставляться вместе с экспертными услугами по адаптации, поддержке и обучению персонала
- Принцип конструктора («модульное» ПО)
 - Набор алгоритмических и интерфейсных блоков
 - Собственный язык для «сборки» решения и создания новых модулей

Идеология «модульного» ПО



Архитектура продукта

- Приложение для MSPC будет иметь два пользовательских уровня
- I. Уровень эксперта (программирование)
 - Дизайн системы
 - Построение и валидация моделей
 - Создание новых методов
 - Оптимизация
- II. Уровень оператора (использование)
 - Управление данными
 - Использование моделей для контроля процессов
 - Управление опциями приложения

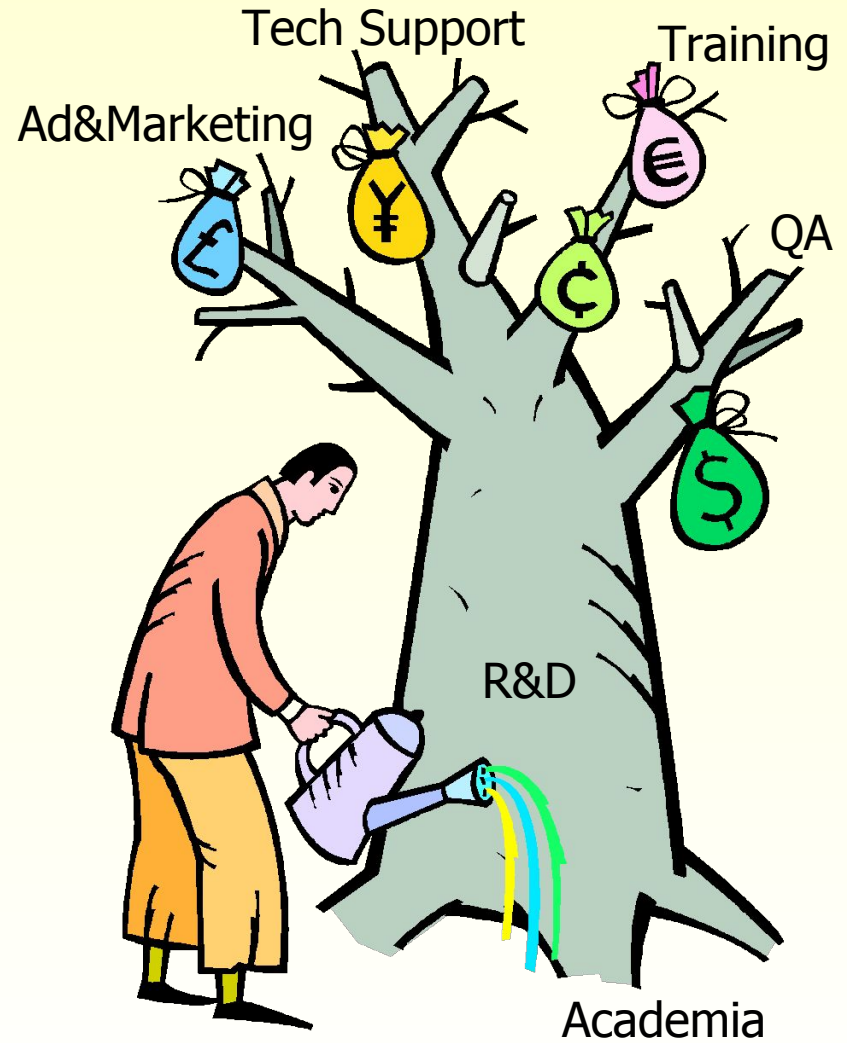
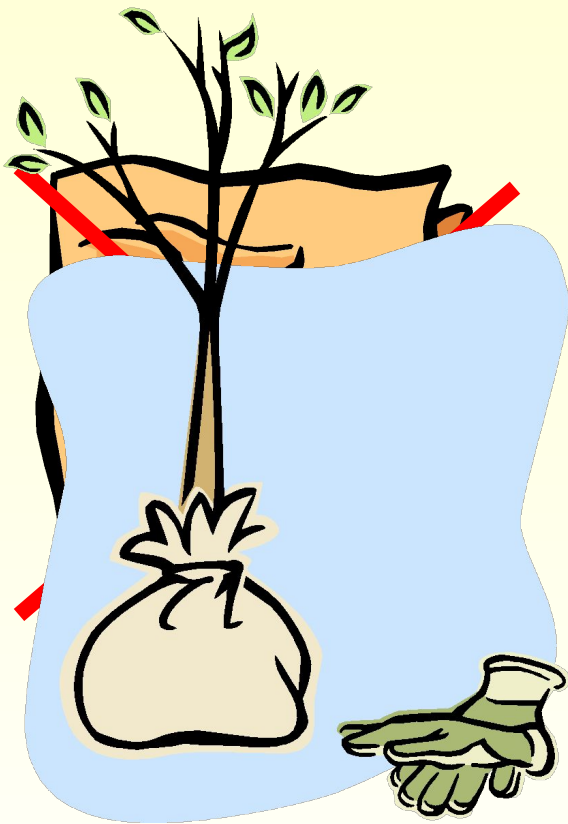
Методы и алгоритмы MSPC

- Факторный анализ
 - Principal Component Analysis (PCA)
 - Partial Least Squares (PLS)
- Многомерная калибровка
 - Principal Component Regression (PCR)
 - PLS1, PLS2
- Моделирование процессов
 - Multivariate Curve Resolution (MCR)
 - Process Simulation
- Классификация (распознавание образов)
 - PLS-Discrimination
 - Soft Independent Modeling of Class Analogy (SIMCA)
 - Hierarchical Cluster Analysis (HCA)

Стартовая позиция проекта

- Благоприятная ситуация на рынке
- Команда высококвалифицированных специалистов
 - Теоретический и практический опыт в MSPC и хемометрике
 - Обширный опыт в области разработки коммерческого ПО
- Научная и образовательная база РАН в Черноголовке
- Потенциал будущего ИТ-парка «Черноголовка»
- Обширные связи в Западном мире: в науке, промышленности, и в сфере разработки ПО
- «Собственная» международная конференция WSC
- Партнерские отношения с Российскими предприятиями

Стратегия развития проекта: "Fruit Tree Planting"



План реализации проекта

- **Этап I. Внутреннее развитие**

- Бизнес-планирование, проектирование
- Создание ключевых алгоритмических модулей
- Создание пилотных проектов на Российских предприятиях

- **Этап II. Активное развитие**

- Создание сопутствующих структур: Quality Assurance, Tech Support, Advertising and Marketing, User Training
- Создание зарубежного представительства
- Активное развитие продукта, начало продаж
- Активное продвижение продукта на Западном рынке
- Сертификация ISO, CMM

- **Этап III. Спокойное развитие**

- Улучшение продуктов
- Расширение клиентской базы
- Поддержка

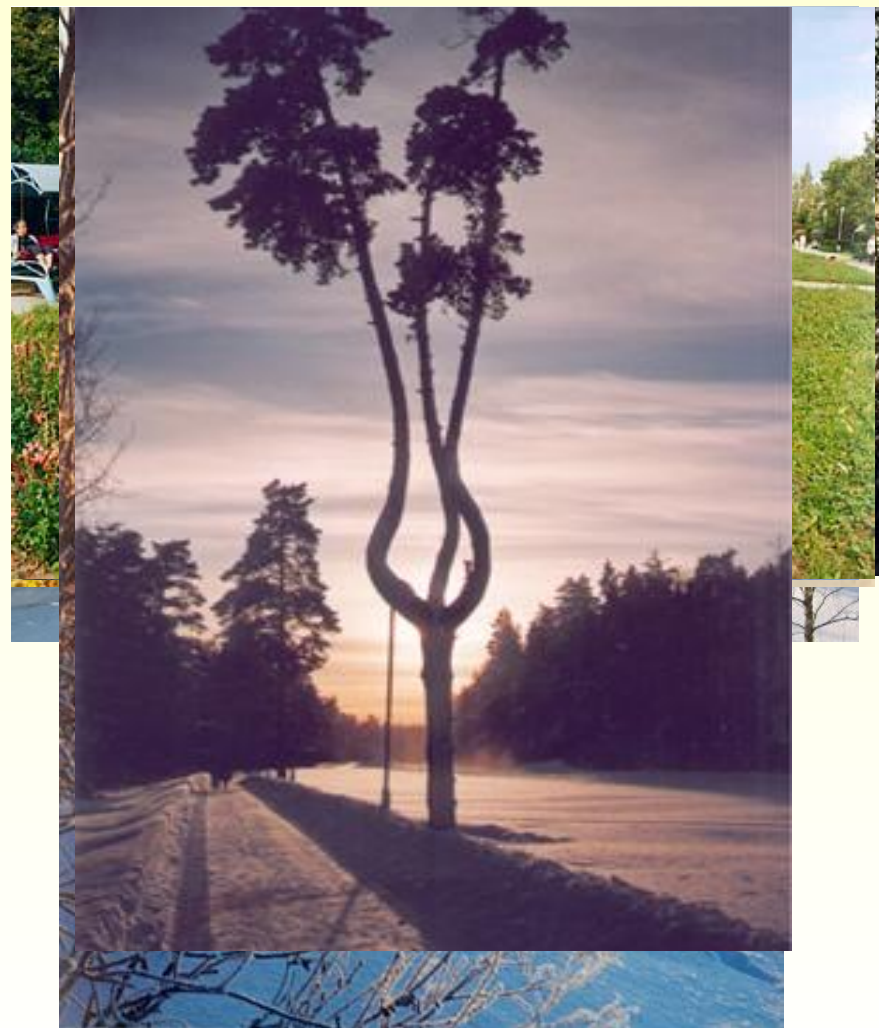
Программа создания ИТ-парков в России

- **Переход от сырьевой экономики к экономике знаний**
 - Развитие наукоемких и информационных технологий
 - Экспорт технологий
 - Усиление науки и образования
- **Использование потенциала сложившихся научных центров**
- **Создание первых «пилотных» ИТ-инкубаторов**
 - Санкт-Петербург, Новосибирск, Нижний Новгород, Дубна, Черногловка
 - Экономические льготы
 - Государственные субсидии
- **Создание новых ИТ-парков с использованием наработанных моделей**
- **Принятие программы ИТ-инкубаторов правительством ожидается уже в первой половине 2005 года**

ИТ-парк «Черноголовка»



- Материальная и производственная база
 - 8 научных институтов
 - Завод научного приборостроения
 - Квалифицированные кадры
 - ИТ- и высокотехнологичный бизнес
 - Филиал МГУ
 - Потенциал роста города
- Условия жизни и отдыха
 - Развитая инфраструктура
 - Жищное строительство
 - Заповедная природа
 - Близость к Москве



«InterProgma», Черноголовка



- Разработка наукоемкого ПО с 2001 г.
- Базируется в ИПХФ РАН
- Моделирование, системы контроля качества и Интернет-технологии
- Квалифицированная команда и руководство
- Тесные связи с Российским ИТ-бизнесом



Заключение

- Благодаря правительственной программе создания технопарков возникли благоприятные условия для создания наукоемкого ПО в России
- Одной из наиболее перспективных областей для разработки наукоемкого ПО является обработка аналитических данных
- Группой ученых из РХО и ИПХФ РАН предложен проект ПО для MSPC/PAT для реализации на базе ИТ-парка «Черноголовка»
- В настоящий момент сложились благоприятные условия для развития такого продукта в России и его успешного экспорта на Запад

Полезные ресурсы

- А.Л. Померанцев, О.Е. Родионова. *Многомерный статистический контроль процессов*, Методы менеджмента качества **6** (2002)
- Российское хемомертическое общество (РХО)
rcs.chph.ras.ru
- Сайт «Хемомертика в России»
www.chemometrics.ru
- Международная конференция WSC-5 по MSPC/PAT в 2005 г.
rcs.chph.ras.ru/WSC5/
- Официальный сайт г.Черноголовка
www.chernogolovka.net
- Сайт компании «InterProgma»
www.interprogma.ru
- Этот доклад будет выложен на
www.chemometrics.ru