

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

А.Ю. Богомолов<sup>a</sup>, П.К. Берзигияров<sup>b</sup>

<sup>a</sup> РХО, Черноголовка

<sup>b</sup> InterProgma, Черноголовка

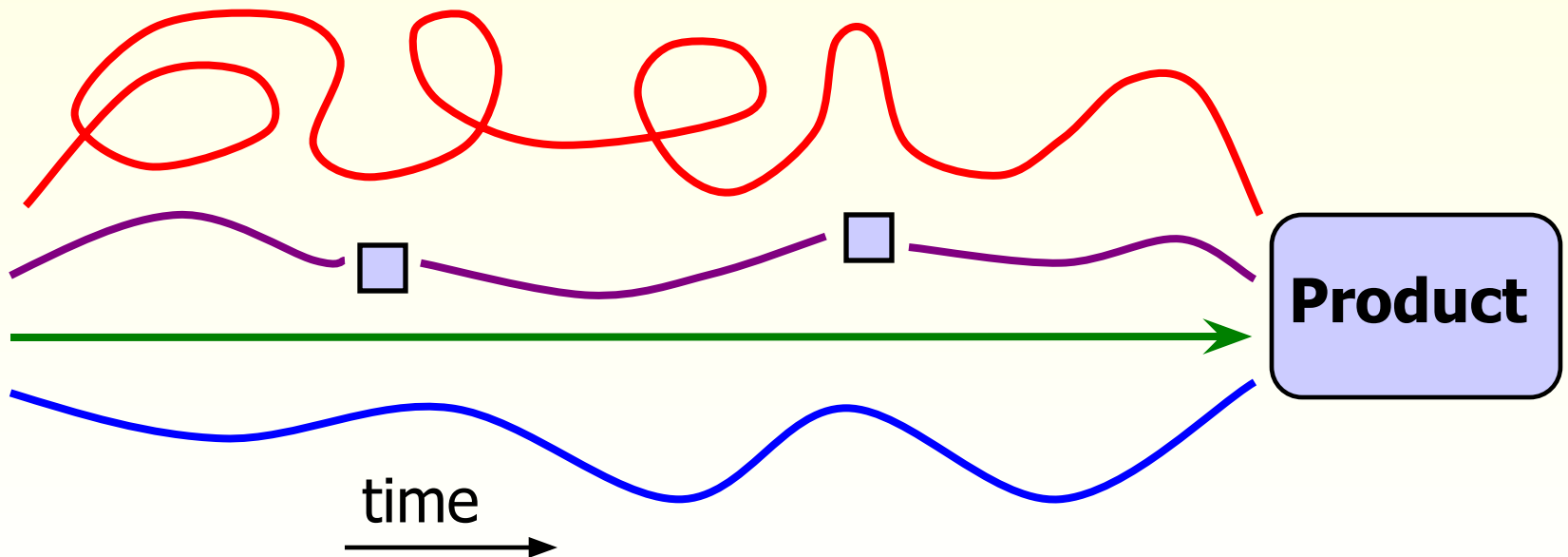
# Тезисы доклада

---

- 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.

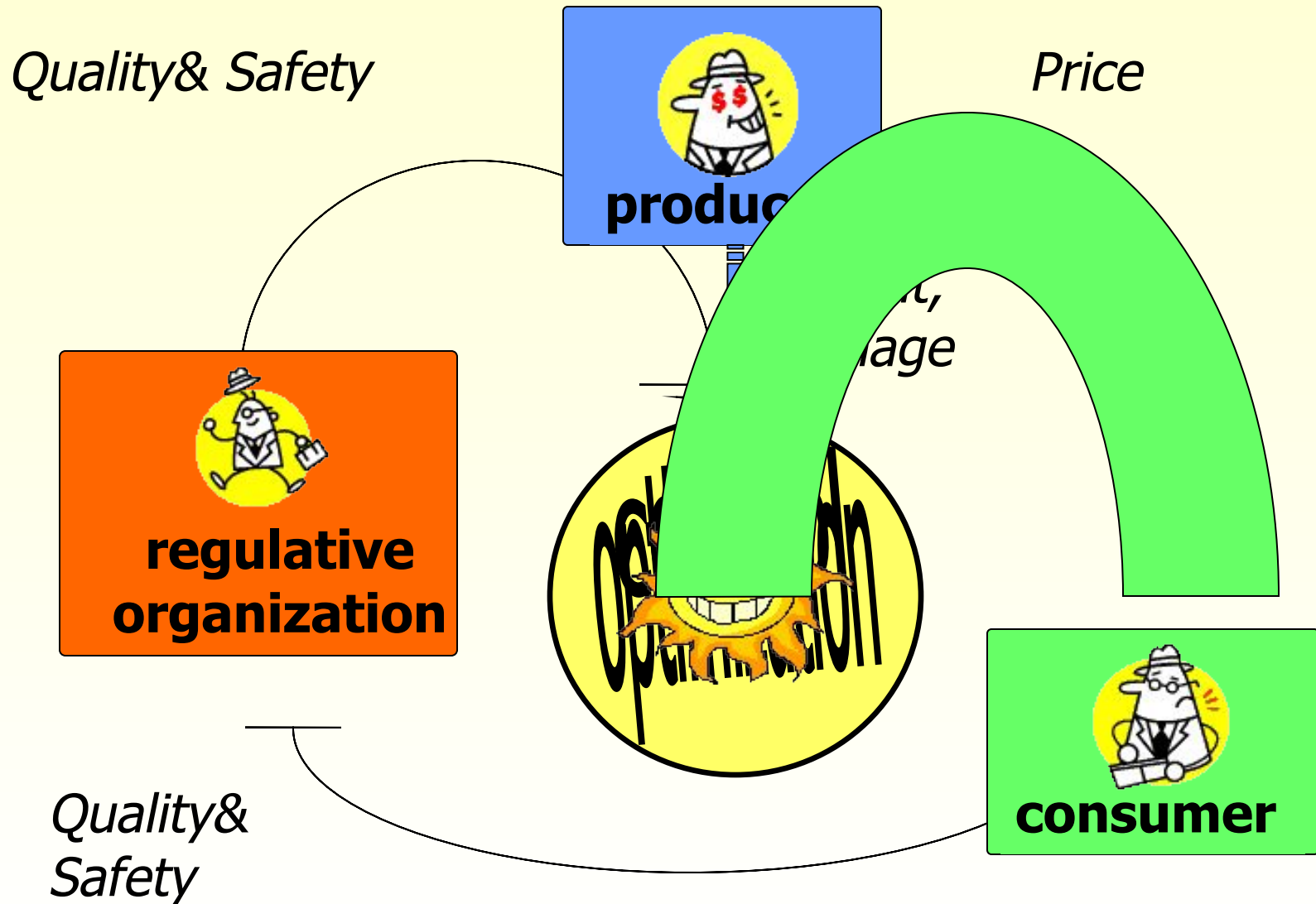


# Контроль и оптимизация процессов: Зачем и как?

---

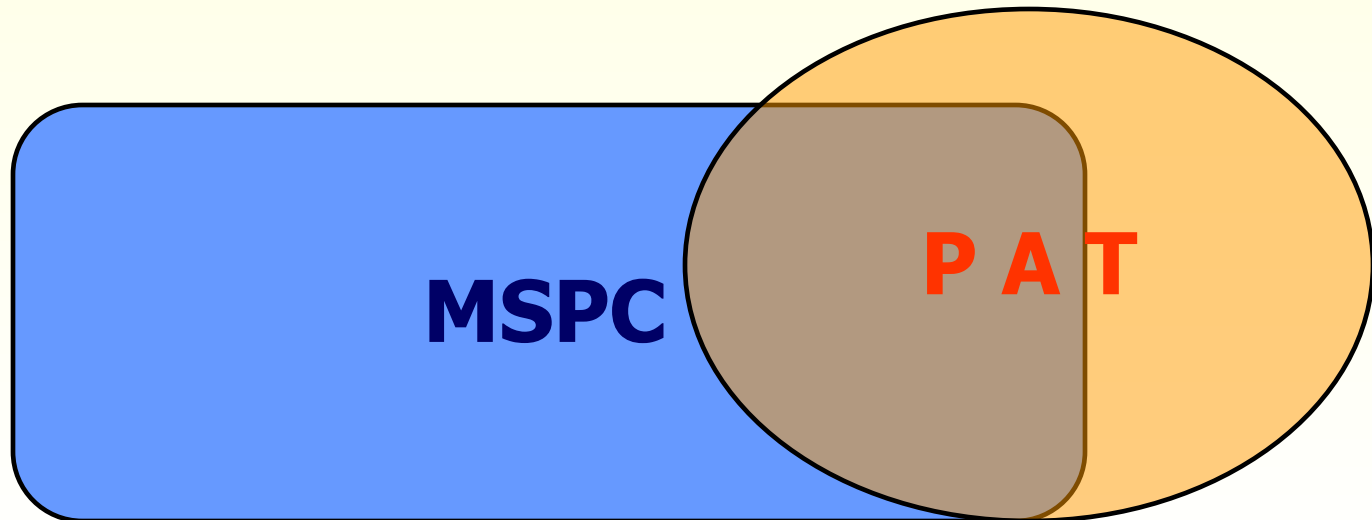
- Цели контроля и оптимизации:
  - Получение продукта требуемого (высокого) качества
  - Стабильность качества продукции
  - Снижение затрат на производство и контроль качества
- Виды оптимизации процессов:
  - На стадии проектирования (организация, реорганизация)
  - Текущие улучшения
  - Оптимизация 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

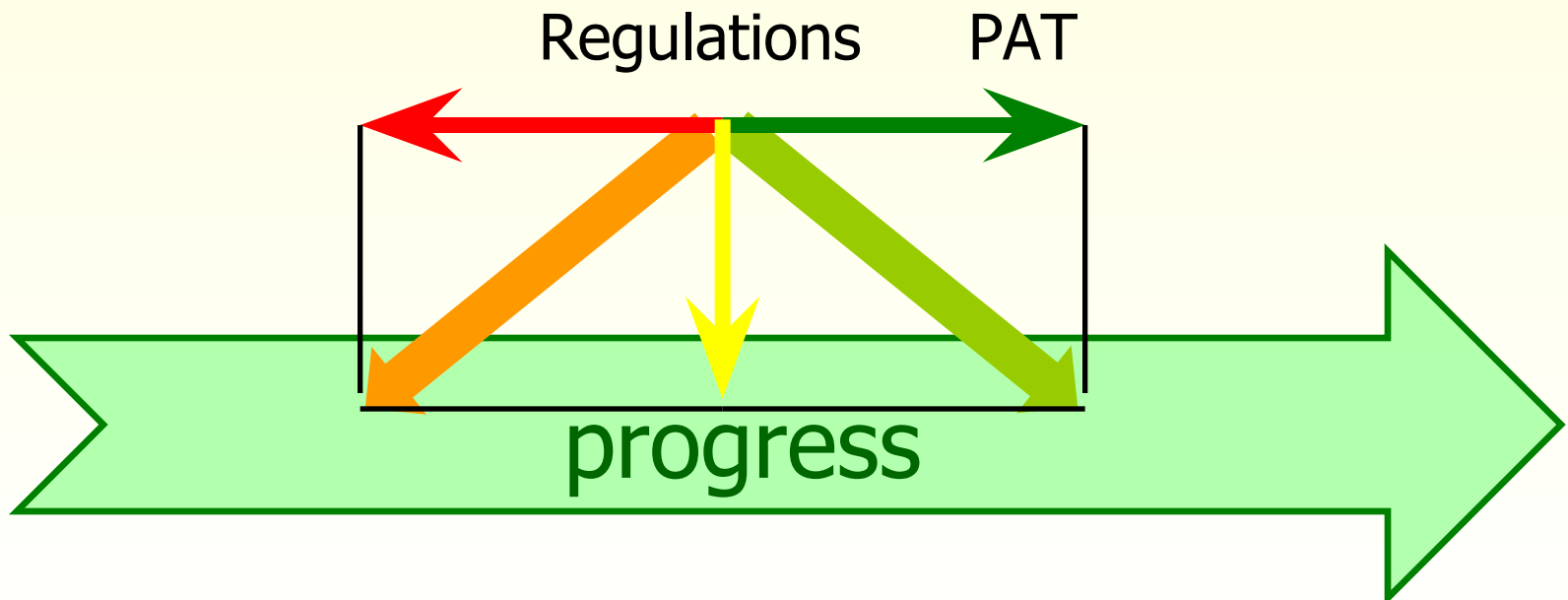
---

- 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

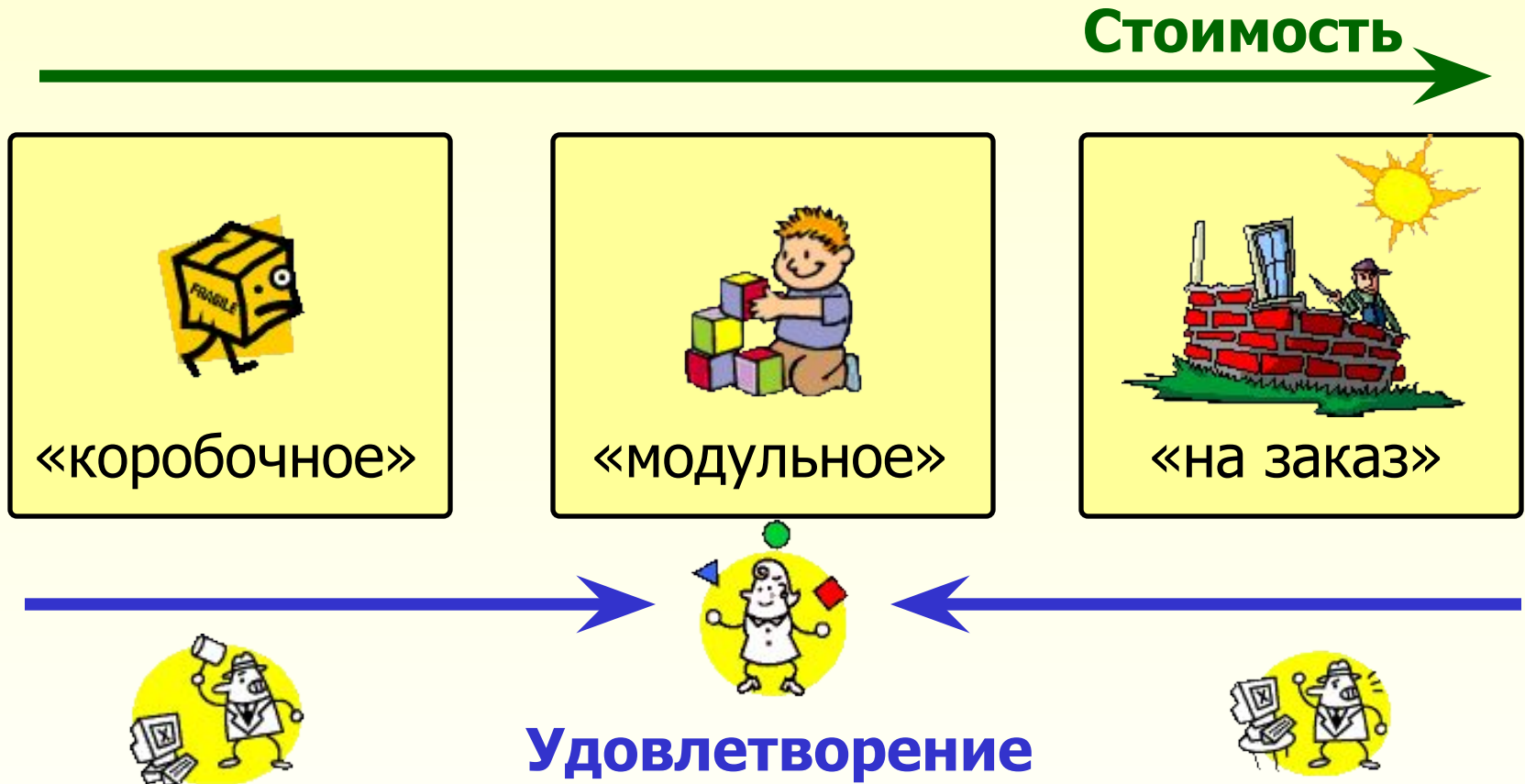
# Особенности ПО для MSPC/PAT

---

- 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

---

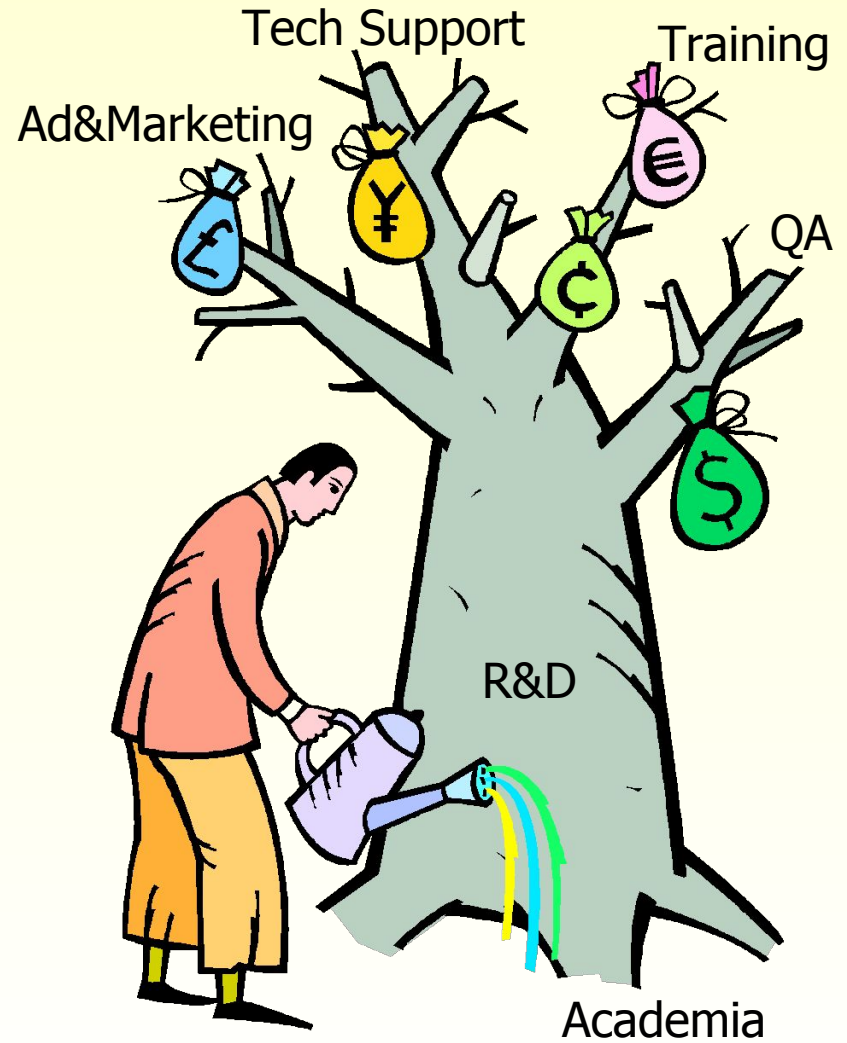
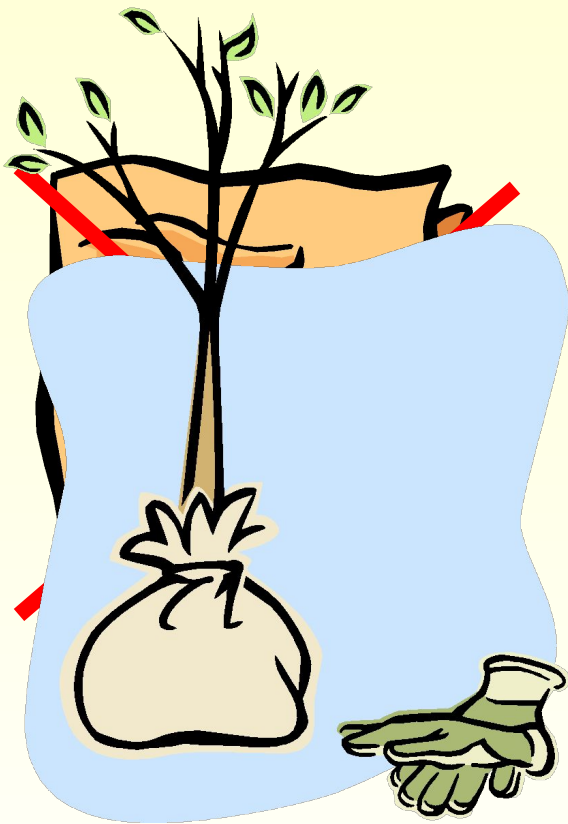
- Факторный анализ
  - Principal Component Analysis (PCA)
  - Partial Least Squares (PLS)
- Многомерная калибровка
  - Principal Component Regression (PCR)
  - PLS1, PLS2
- Моделирование процессов
  - Multivariate Curve Resolution (MCR)
  - Process Simulation
- Классификация (распознавание образов)
  - 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

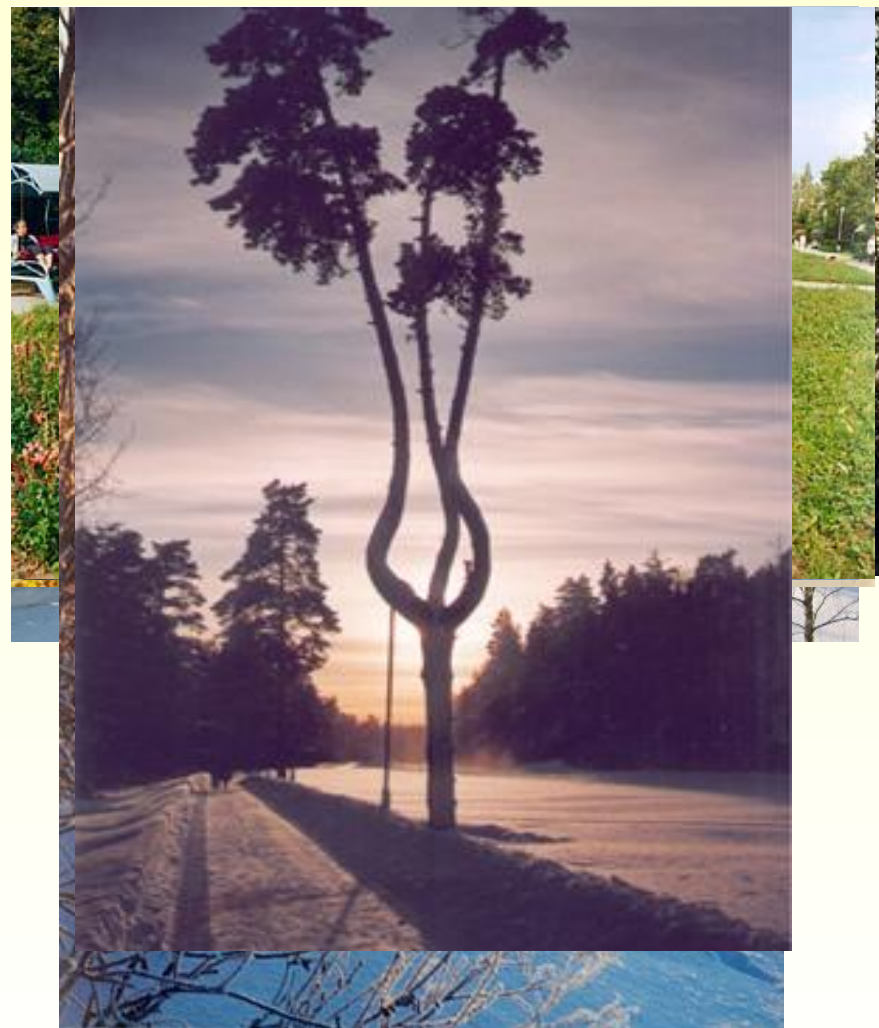
---

- **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, Черноголовка
  - 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 хемометрическое общество (РХО)  
[rcs.chph.ras.ru](http://rcs.chph.ras.ru)
- Сайт «Хемометрика в России»  
[www.chemometrics.ru](http://www.chemometrics.ru)
- Международная конференция WSC-5 по MSPC/PAT в 2005 г.  
[rcs.chph.ras.ru/WSC5/](http://rcs.chph.ras.ru/WSC5/)
- Официальный сайт г.Черноголовка  
[www.chernogolovka.net](http://www.chernogolovka.net)
- Сайт компании «InterProgma»  
[www.interprogma.ru](http://www.interprogma.ru)
- Этот доклад будет выложен на  
[www.chemometrics.ru](http://www.chemometrics.ru)