



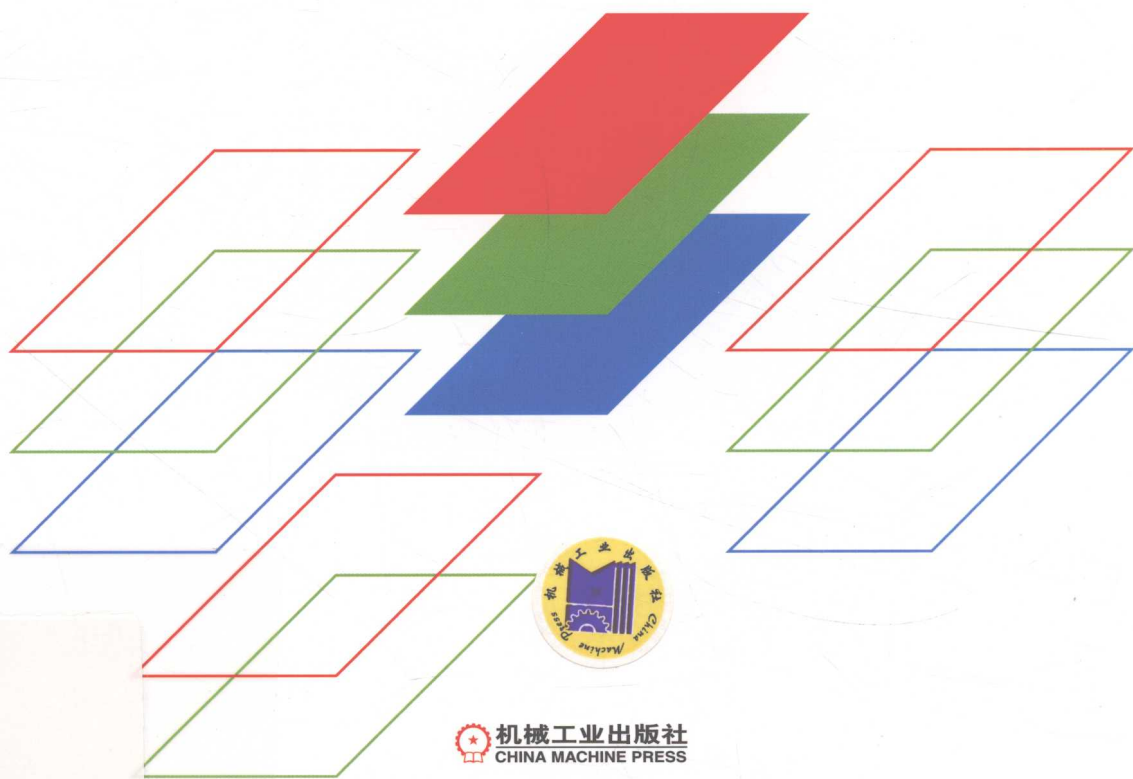
智能制造与装备制造业转型升级丛书
MADE IN CHINA

MODERN PROCESS ANALYTICAL TECHNOLOGY:

CURRENT STATUS AND FUTURE PROSPECTS

现代过程分析技术交叉学科 发展前沿与展望

中国仪器仪表学会 组编
褚小立 张莉 燕泽程 编著



机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS

智能制造与装备制造业转型升级丛书

现代过程分析技术交叉学科 发展前沿与展望

中国仪器仪表学会 组编
褚小立 张 莉 燕泽程 编著



机械工业出版社

现代过程分析技术 (PAT) 是多学科、多技术和多方法相互渗透、融合而形成的一种交叉学科, 涉及分析化学、仪器科学、信息科学、应用数学、系统工程和控制工程等诸多内容。本书阐述了以光谱和化学计量学为核心的现代过程分析技术的内涵和构成; 系统综述了国际该学科的历史发展轨迹、技术现状和发展趋势, 以及国内这一技术的研究和应用现状、亮点与差距; 结合我国对过程分析技术的社会需求现状和应用前景, 提出了我国该技术的发展趋势和应重点支持的研究方向; 论述了我国设立过程分析技术学科的可行性与必要性, 并提出了该学科在我国的主要任务及发展措施建议。

本书可供政府部门、高校、企业和科研院所制订相关研发决策时参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

现代过程分析技术交叉学科发展前沿与展望/褚小立, 张莉, 燕泽程编著. —北京: 机械工业出版社, 2016. 5
(智能制造与装备制造业转型升级丛书)

ISBN 978-7-111-53895-0

I. ①现… II. ①褚…②张…③燕… III. ①工程技术
IV. ①TB

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 113740 号

机械工业出版社 (北京市百万庄大街 22 号 邮政编码 100037)

策划编辑: 牛新国 责任编辑: 付承桂 张沪光

责任校对: 刘怡丹 责任印制: 乔 宇

北京市四季青双青印刷厂印刷

2016 年 7 月第 1 版第 1 次印刷

169mm × 239mm · 9 印张 · 167 千字

0001-2000 册

标准书号: ISBN 978-7-111-53895-0

定价: 50.00 元

凡购本书, 如有缺页、倒页、脱页, 由本社发行部调换

电话服务

网络服务

服务咨询热线: 010-88361066

机工官网: www.cmpbook.com

读者购书热线: 010-68326294

机工官博: weibo.com/cmp1952

010-88379203

金书网: www.golden-book.com

封面无防伪标均为盗版

教育服务网: www.cmpedu.com

前言

现代过程分析技术 (PAT) 是多学科、多技术和多方法相互渗透、融合而形成的一种交叉学科, 涉及分析化学、仪器科学、信息科学、应用数学、系统工程和控制工程等诸多内容。国际上, 以光谱和化学计量学为核心的现代过程分析技术学科的成立是以 1984 年美国国家科学基金会在华盛顿大学建立“过程分析化学中心”(The Center for Process Analytical Chemistry, CPAC) 为标志的, 21 世纪初根据学科发展和需求的变化, 该中心更名为“过程分析与控制中心”(The Center for Process Analytical and Control, CPAC)。CPAC 是国际上首个综合性的现代过程分析技术研究团队, 也是大学、科研院所与工业界合作的典范。随后, 在英国和德国等工业化强国, 也都陆续建立了专门的过程分析技术研究中心。国际上, 经过近 30 年的发展, 该技术已走过了所谓的概念炒作期, 进入了稳步发展的平台期。实践证明, 过程分析技术为发达国家的工业信息化与自动化的深度融合起到了决定性的作用, 它所提供的实时测量信息可使工业生产过程保持最优化的控制, 从而优化资源配置, 降低生产成本和资源消耗, 并能在显著提高产品质量的同时, 将生产安全和环境影响降低到最小化, 从而给企业带来了丰厚的经济回报。

自 20 世纪 80 年代末开始, 我国就有学者开始介绍过程分析技术的理念, 到 90 年代中期, 国内在多个传统学科和技术领域, 例如近红外光谱、化学计量学和过程优化控制等, 出现了与现代过程分析技术相关的研发方向, 取得了一些可喜的研究和应用成果。但遗憾的是, 由于该技术的学科交叉跨度很大, 迄今国内尚没有一个完整意义上的过程分析技术团队、实验室或研究中心。由于缺乏长期的核心技术积累, 没有形成系统的过程分析技术自主创新体系与机制和“政、产、学、研、用”战略联盟, 使该技术在我国大型流程工业的具体实施和应用中受到了极大限制, 没有发挥出应有的作用和效果。为了进一步推动现代过程分析技术在我国的发展, 实现多学科和多技术的深度融合, 充分发挥科技社团在推动全社会创新活动中的作用, 中国仪器仪表学会将“现代过程分析技术及学科发展研究”课题列为 2012 年的“学会能力提升专项”工作。

随即,中国仪器仪表学会组织我国业内不同学科和专业领域的多位专家和学者对国内外该技术的发展现状进行了调研,系统查阅了国内外公开发表的文献;2012年8月邀请多位国际知名学者在上海召开了首届中国国际过程分析与控制学术会议;2013年初组织9名国内专家赴美国参加了第27届国际过程分析与控制论坛(IFPAC),与IFPAC组委会及华盛顿大学过程分析与控制中心(CPAC)进行了充分交流,充分了解了国外这一学科的发展现状;2013年上半年学会组织业内专家对十余家国内企业进行了调研活动,涉及的企业既有过程分析技术的研制企业又有过程分析技术具体的应用企业;2013年5月在北京中国国家会议中心还组织召开了“过程分析与控制技术研究及应用研讨会”,邀请多位国际知名专家共同探讨了该领域最新技术进展。通过上述系列调研活动,较为完整地掌握了国际过程分析技术的发展现状与趋势以及国内的实际情况。

本书是在上述调研基础上进行编写的,阐述了以光谱和化学计量学为核心的现代过程分析技术的内涵和构成;系统综述了国际该学科的历史发展轨迹、技术现状和发展趋势,以及国内这一技术的研究和应用现状、亮点与差距;结合我国对过程分析技术的社会需求现状和应用前景,提出了我国该技术的发展趋势和应重点支持的研究方向;最后,论述了我国设立过程分析技术学科的可行性与必要性,并提出了该学科在我国的主要任务及发展措施建议。本书初稿由褚小立、张莉和燕泽程等执笔,于2013年6月初完成,初稿送请中国科学院陆婉珍院士、中石化石油化工科学研究院郭锦标教授级高工、北京化工大学潘立登教授和袁洪福教授、清华大学化学系罗国安教授和王义明教授、清华大学精仪系李岩教授、中国科学院化学所陈义研究员、天津大学曾周末教授、湖南大学吴海龙教授、重庆科技学院王森教授和总后油料研究所刘慧颖高工等专家审阅,广泛听取意见。2013年8月底,根据专家们提出的评审建议,对本书做了内容和文字上的修改。2013年9月,学会组织10位教授和专家对修改稿进行了最后的修订和审定,2014年12月和2015年7月又进行了必要的修改和补充,最终形成了本书。

本书凝聚和承载了国内众多专家学者的心血、智慧和期望,提出的论点、设想和建议是国内本领域众多专家学者的集体共识,借此向为支持和推动我国过程分析技术发展而做出了贡献的所有人士表示衷心的感谢。也由衷希望在今后的5至10年中,本书能对我国过程分析技术发展起到一定推动作用,给这一领域的年青一代科技工作者以鼓舞和信心,让更多的企业家认识到过程分析技术的发展是通往智能型生产的必经之路,使我国的“过程分析”与“过程控制”两位强者紧紧握起手,以其迸发出的强大威力推动工农业生产的科技进步,更期望政府和社会由此而对这一高跨度交叉技术的发展给予更多的关注和支持。

因研究课题任务重、时间紧,有些工作尚欠细致和深入,本书内容难免有疏漏和欠妥之处。一个新型交叉学科的建立与发展涉及一系列重大问题,本书要真

正能为国家决策提供参考，还需经过一定时间的逐步完善过程，恳请相关领域的专家和读者提出宝贵意见，持续地把这项工作做好，共同为我国的过程分析技术事业而努力。

本书的部分工作受到国家自然科学基金（21365008）的资助，特此致谢。

褚小立

石油化工科学研究院

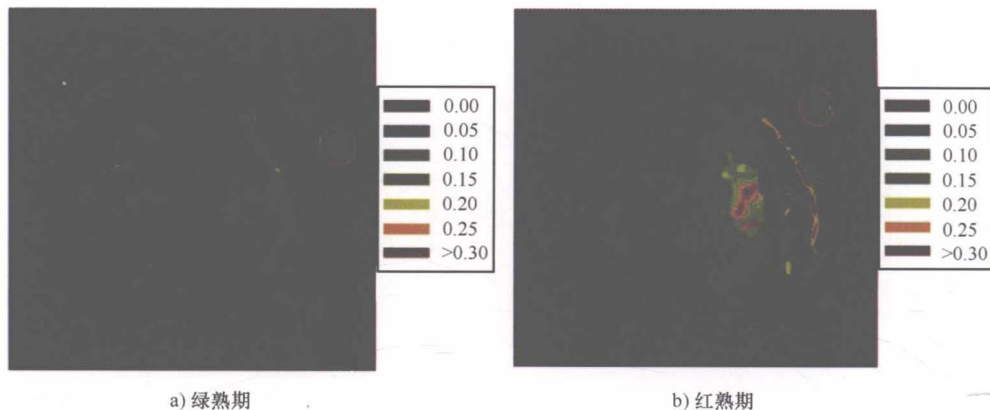


图42

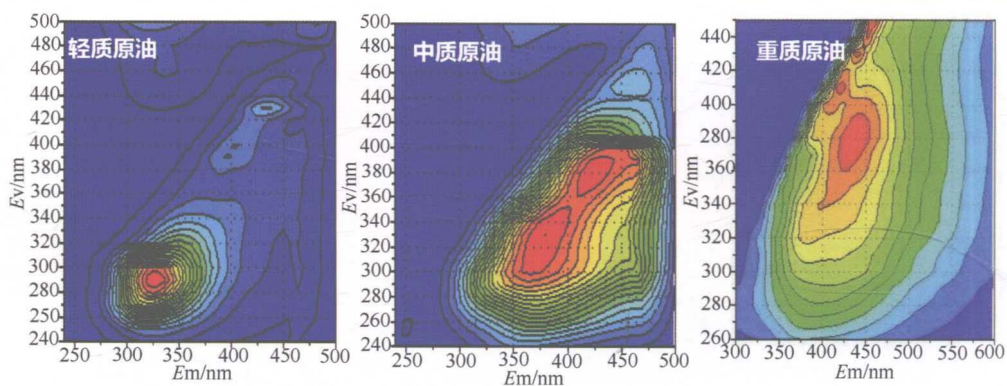


图47

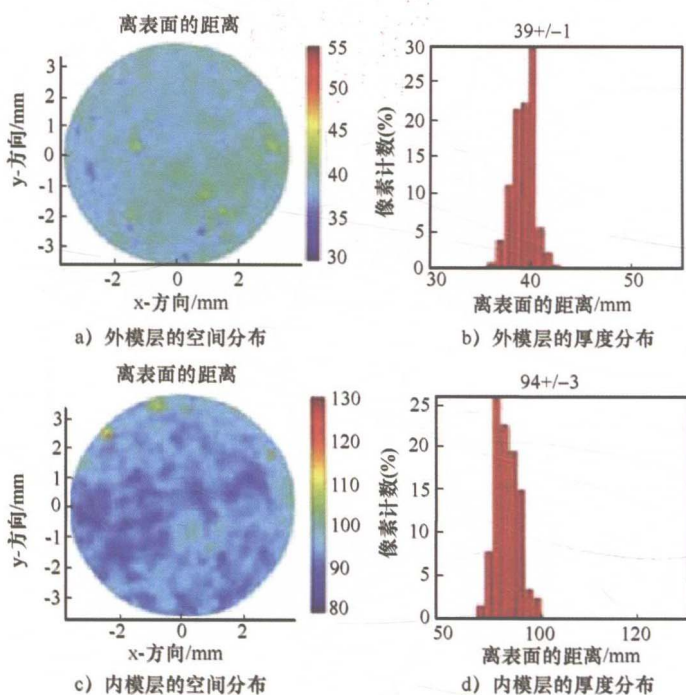


图49

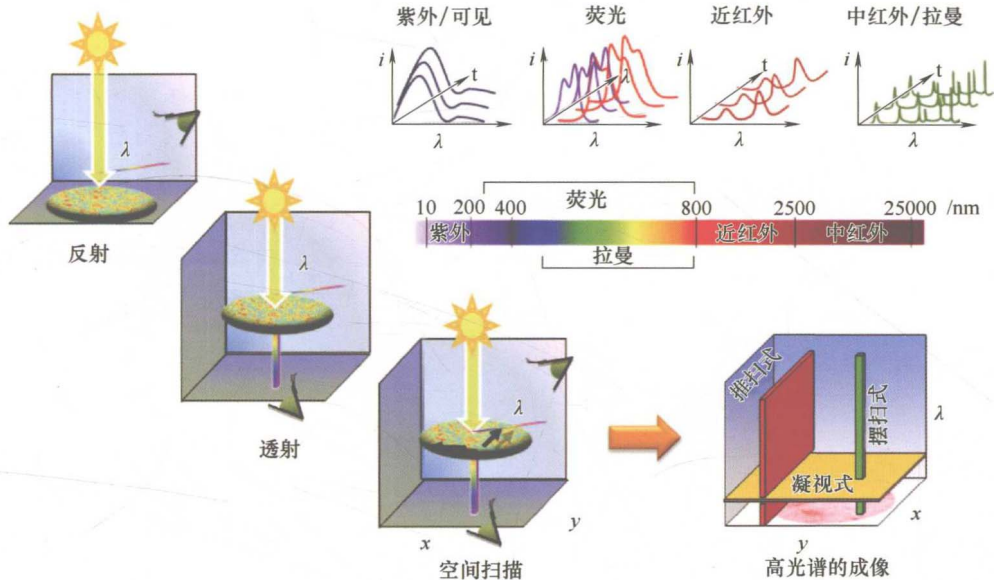


图51

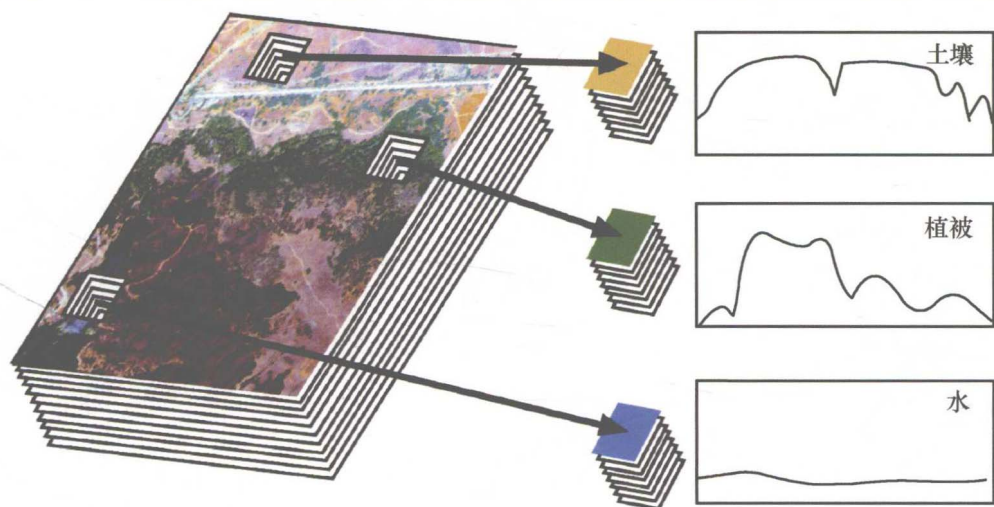


图52

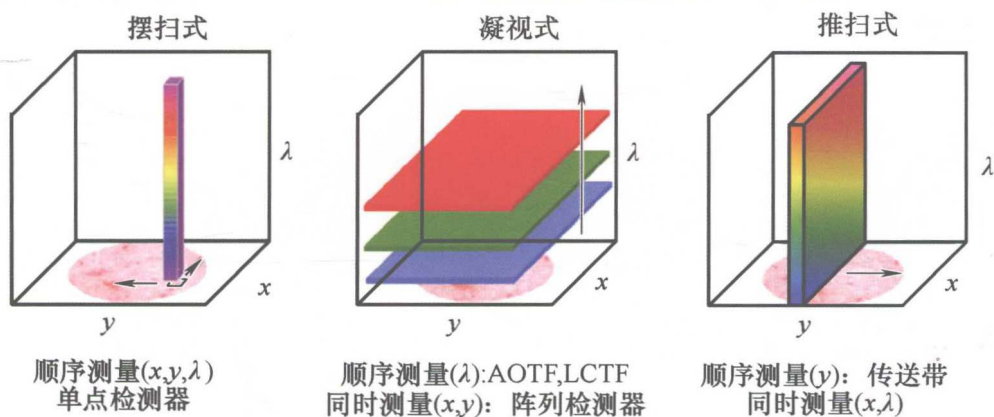


图53

目 录

前 言

第 1 部分 国外过程分析学科、技术的发展及概况	1
1.1 引言	1
1.2 过程分析技术的范畴与构成	6
1.3 现代过程分析技术及应用概况	14
1.3.1 过程分析几种实施方式	14
1.3.2 过程化学计量学	17
1.3.3 近红外光谱	19
1.3.4 中红外光谱	29
1.3.5 拉曼光谱	33
1.3.6 紫外-可见光谱	39
1.3.7 分子荧光光谱	42
1.3.8 核磁共振谱	45
1.3.9 太赫兹谱	48
1.3.10 光谱成像	52
1.3.11 其他技术	58
1.4 国际 PAT 学科现状	59
1.4.1 研究团队	59
1.4.2 社会团体	64
1.4.3 出版物、网站和学术会议	68
第 2 部分 我国过程分析与控制交叉学科、技术组成及现状	74
2.1 现代过程分析技术研究与应用现状	74
2.1.1 主要研究团队及成果	75
2.1.2 社会团体、会议和出版物	80

2.1.3 商品化技术及应用现状	85
2.2 过程控制技术研究与应用现状	88
2.2.1 国际过程控制技术的发展历程	88
2.2.2 我国研究团队及成果	92
2.2.3 社会团体与会议	96
2.2.4 商品化技术及应用现状	97
2.3 过程分析与过程控制结合现状	101
第3部分 我国过程分析技术交叉学科发展趋势与前景	107
3.1 社会需求与发展前景	107
3.2 技术发展趋势	108
第4部分 设立及发展我国过程分析与控制交叉学科的建议	116
4.1 学科设立的可行性和必要性	116
4.2 学科任务和发展措施建议	119
4.3 组建过程分析国家工程(技术)研究中心的建议	126
参考文献	131

第 1 部分

国外过程分析学科、技术的发展及概况

1.1 引言

在国内外的大型流程工业尤其是石油化工领域，过程分析技术（Process Analytical Technology, PAT）远不是 21 世纪的一个崭新名词，自 20 世纪 50 年代初期，国际上有了石油化学工业之后，过程分析技术也就随之产生了。当时，用于过程分析的仪器多是从实验室仪器经必要的技术改造而制成的，主要是用来监测关键的生产环节，在保证产品质量的前提下，尽可能降低生产成本。由表 1 所示，通过过程分析仪的长期应用，其作用可归纳为以下几个方面：

- 1) 进行产品质量卡边操作，以获得最大的经济效益；
- 2) 对原料和生产的中间环节进行监测，以保证装置的稳定生产和及时调整；
- 3) 对影响生产安全运行的要素进行监控，以保证生产的安全运行；
- 4) 对影响环保的排放口进行监控，以达到环境保护的要求。

表 1 过程分析技术的应用环节和目的

应用环节	应用目的
原料接收 生产过程	进厂原料的 QC（质量控制）/QA（质量保证）识别 过程终点 过程故障检测 质量属性趋势（统计过程控制或多变量统计过程控制） 过程控制（反馈和前馈）
产品放行 车间操作	确定最终产品的质量属性 实时水质分析 清洁验证
环境健康及安全	废料流的监测和控制 危险区域监测 环境监测与合规性

国际上第一本全面介绍过程分析技术的专著是 1972 年英国工程师 K. J. Clevett 先生编写的《Handbook Of Process Stream Analysis》(《工业过程分析手册》见图 1), 该书主要介绍了石油工业领域中用到的在线质量仪表, 涉及物质组分、黏度、馏程、倾点、浊点、蒸气压、含氧量、pH 值、湿度、辛烷值和热导率等众多方面的测量。书中论及了气相色谱、紫外、红外和光电效应等多种分析技术, 还收集了美、英及西欧等国家制造的 200 余种在线质量仪表的工作原理、结构和技术特性, 并对在线质量仪表在石油、化工、造纸和环境保护等部门的应用做了较为详尽的叙述。值得提及的是, 1981 年我国石油工业出版社将该书翻译出版(见图 2), 在一定程度上推进了我国石油石化领域在线仪表的发展和应用。

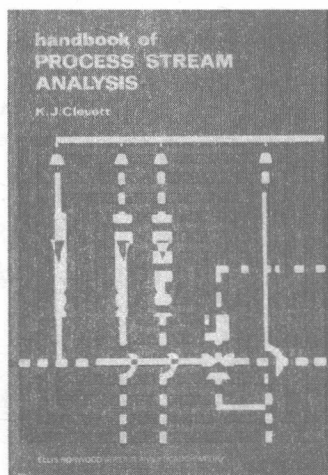


图 1 1973 年出版的
《Handbook of process stream analysis》



图 2 1981 年我国译著的
《工业过程分析手册》

20 世纪 80 年代之前, 尽管在石油工业领域已有在线分析仪表的应用, 但是绝大多数分析数据的获得还都采用离线方式, 即人工从装置上采样后送到化验室进行分析, 所以这些数据的提供往往都滞后于生产过程。因此, 对必须调整的过程参数往往不能及时实施, 甚至中间产物或最终产品的返工或报废也在所难免, 造成了生产成本的提高。进入 20 世纪 80 年代, 工业生产技术的发展十分迅速, 而且对生产过程的环境保护提出了更高的要求, 再加上国际剧烈的市场竞争, 要求工业生产做到既保证产品有稳定的高质量, 又尽最大可能降低成本, 分析信息稍有延迟或疏忽都会造成经济上的巨大损失。为保证最终获得合格产品, 冶金、机械、石油、化工、材料和医药等工业生产对质量控制的要求愈益提高, 这都要求对其生产过程进行监控和测试, 其中有关成分、结构、状态和纯度等物化参数

的监测就必须用到过程质量分析仪器。

而当时的现实情况是,传统在线质量分析仪器大多由实验室仪器改进而来的,因测量原理所限,分析速度慢,精度比实验室仪器差,一种仪表仅能测量一种参数,如需测量多种质量参数,则需要购置多台仪表,造成设备投资过大,仪器的易损件和消耗品多,维护量大且频次高,在线分析仪表的实际应用效果并未达到预期理想水平,甚至有相当一部分被停用。

正是基于这样的时代背景,从20世纪80年代中期,西方发达国家尤其是美国投入了大量人力、物力研究和开拓对工业生产过程质量控制的新技术和新方法。就分析化学学科本身的发展而言,自动化分析仪器的涌现和化学计量学(Chemometrics)学科快速发展,使分析化学出现了崭新的面貌,也为工业生产质量控制新方法的形成创造了有利条件。于是以化学计量学为基础并大量采用自动化分析仪器的生产过程质量控制的新方法——过程分析化学(Process Analytical Chemistry, PAC)学科诞生了。

国际上,首个过程分析化学中心(Center for Process Analytical Chemistry, CPAC)是由Bruce R. Kowalski教授受美国国家科学基金会(NSF)和21家企业共同资助于1984年在美国华盛顿大学(西雅图)建立的,这是国际过程分析技术发展过程中的一个里程碑。该研究中心的核心任务是研究和开发先进的在线分析仪器及分析方法,使之成为生产过程自动控制的组成部分,为生产过程提供定量和定性的信息,这些信息不仅用于对生产过程的控制和调整,而且还用于能源、生产时间和原材料等的有效利用和最优化。由于采用了计算机,实现了实时分析、数据处理、条件优化和过程反馈联合工作而使整个生产过程处于自动控制 and 调整之中,在工业生产中应用PAC之后,可使整个生产过程合理、生产成本降低、产品质量提高、环境污染减少。

尽管该中心以“过程分析化学”(PAC)中心命名,实际上与“过程分析技术”(PAT)研究内容和方向是一致的,其主要研究课题有采样、仪器装置、多元数据分析及判断、自动化控制等方面,从那时起PAC与PAT两个词经常互换使用,但在理学期刊、书籍和会议等学术圈中较多使用“过程分析化学”一词,而在工科范畴中多用“过程分析技术”一词。大家公认的是,PAC或PAT是由分析化学、化学工程、电子工程、工艺过程、自动化控制及计算机等学科领域相互渗透交叉组成,涉及生产工程师、过程化学家、分析化学家以及仪器设计、电子技术等技术人员。对分析化学工作者绝不仅仅停留在提供分析数据这一步,而是要深入生产,参与生产中有关问题的解决,能把分析数据与生产过程中的有关参数联系起来,从而能对测得的数据做出解释。

20世纪90年代以来,在激光、光纤、微电子、计算机和化学计量学(Chemometrics)等与光谱和波谱仪器相关新技术不断发展的带动下,出现了许多新型

的光谱和波谱类过程分析仪器，如红外、近红外、拉曼、荧光以及核磁共振等，使得原来只能在实验室中进行物质成分分析的结构复杂、体积庞大的分析仪器也能用于工业现场的实时在线分析。随着生产过程对先进控制和优化控制要求的不断提高，这些现代的过程分析技术越来越广泛地进入到石化、制药、化工等大型流程工艺的各个生产环节，它所提供的及时、准确的分析数据为稳定生产、优化操作、节能降耗起到了不可替代的作用。

在过程分析技术发展过程中，另一个具有里程碑意义的事件是，如图3所示，2004年9月，美国食品药品监督管理局（FDA）以工业指南的方式颁布了《创新的药物研发、生产和质量保障框架体系-PAT》（Guidance for Industry PAT- A Framework for Innovative Pharmaceutical Development, Manufacturing, and Quality Assurance），旨在通过PAT技术提高对药品研发、生产和质量全过程更加科学性的控制。PAT作为药物研发、生产和质量保障中支撑创新和提高效率的体系，能够实现“质量源于设计（Quality by Design, QbD）”的理念。从研发设计、生产过程和工艺上保证药品的质量，消除安全隐患，改变目前只能依靠严格和生硬的认证规范现状，实现生产过程数据的全面保存及可追溯性，被认为是目前国际上最有效的可验证的手段和方法。

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

Additional copies are available from:

*Office of Training and Communication
Division of Drug Information, HFD-340
Center for Drug Evaluation and Research
Food and Drug Administration
5600 Fishers Lane
Rockville, MD 20857
(Tel) 301-827-4373*

<http://www.fda.gov/cder/guidance/index.htm>

*and/or
Communications Staff, HFV-12
Center for Veterinary Medicine
Food and Drug Administration
7519 Standish Place
Rockville, MD 20855
(Tel) 301-827-3800*

<http://www.fda.gov/cvm/guidance/published.html>

*U.S. Department of Health and Human Services
Food and Drug Administration
Center for Drug Evaluation and Research (CDER)
Center for Veterinary Medicine (CVM)
Office of Regulatory Affairs (ORA)
September 2004
Pharmaceutical CGMPs*

图3 FDA制订的PAT工业指南

FDA 的这份工业指南指出, PAT 是一个通过即时测量原料、过程中物料以及过程本身的关键技术指标来实现设计、分析和生产控制的技术集成系统, 目的是保证过程的可靠性, 确保最终产品的质量。换句通俗易懂的话讲, PAT 就是对关键质量数据(包括原始物料质量、中间物料质量及工艺过程质量)和工艺工程数据的实时监控进行生产设计、分析及控制以确保成品的质量。

FDA 制定的 PAT 框架中所采用的技术包括以下四部分: ①用于设计、数据采集和分析的多变量工具; ②过程分析仪器; ③过程控制工具; ④持续改进和知识管理工具。通过这些工具可以将系统信息综合和集成, 利用特定的分析模块对整个过程信息进行系统地选择或校正并寻找过程运行的长周期规律, 从而有效控制产品质量, 使得生产全过程中不发生产品质量问题。虽然 PAT 是以指导文件的方式出现, 但 FDA 已将其作为 21 世纪美国《现行生产质量管理规范》(Current Good Manufacturing Practices, cGMPs) 改革的新趋势之一, 以显示其重要性。FDA 制定的 PAT 框架体系促进了 PAT 技术在制药领域的实施和应用, 为制药企业和管理部门带来了诸多益处, PAT 的推广已显现出其所带来的巨大经济和社会效益(见表 2), 同时也带动 PAT 技术在其他领域中的发展。

表 2 应用 PAT 技术给制药企业带来的益处

益处分类	具体表现
降低操作运行成本	提高运行效率; 减少生产周期, 包括缩短放行时间, 减少测试样品制备时间, 快速分析, 减少产品质量对于最终产品分析的依赖性; 减少运行成本; 使工艺具有可持续性; 实时数据监管, 反馈控制; 缩短生产周期, 从而减少了库存; 提高生产能力; 可以按照计划进行生产, 排除异常现象的干扰; 减少返工损失
改善质量	工艺指纹图谱的建立, 减少产品质量的变化, 减少批与批之间质量的差异, 减少不合格品; 将质量设计在过程中, 提高对工艺过程的理解程度; 无需取样, 或者减少了取样, 因为实行了在线分析, 减少了取样误差; 提供关键工艺参数控制; 快速确定伪劣药品原料(包括中间体、原料药、半成品制剂等); 防止/避免召回产品; 将分销商和患者的风险降低到最低
对于药检部门的意义	减轻 FDA 的工作量; 为监管提供了科学的数据和评价基础; 提高安全性, 防止与毒性物质接触的事故放生
对于研究开发部门的意义	缩短上市时间; 缩短开发周期; 降低研发成本
对于环境的意义	减少环境污染, 保证排放的三废都在法规规定的范围内。生产过程中减少废物废料产生

实际上, 在 1984 年美国华盛顿大学成立 PAC 中心和 2004 年 FDA 颁布 PAT 工业指南之前, 还有另一个对过程分析技术产生深远影响的事件是 1974 年瑞典

化学家 Svante Wold 和美国 Bruce R. Kowalski 教授创建的化学计量学学科 (Chemometrics), 这一学科产生的基础是计算机技术的快速发展和分析仪器的现代化。现代光谱、质谱、核磁共振谱和色谱等分析仪器产生了海量的数据, 计算机的普及使分析化学家可以快速实现许多强有力的数学方法, 以处理和解析这些海量数据并从中提取出有用信息。化学计量学也为过程分析技术的发展带来了新的思路和方法, 其直接显著的贡献之一是唤醒了现代近红外光谱 (NIR) 技术这个沉睡的“过程分析巨人”。

与传统的红外吸收特征相比, 近红外光谱的吸收非常弱, 且谱带宽而交叠严重, 依靠传统的光谱分析方法很难对其进行应用, 尽管在 20 世纪 50 ~ 60 年代在工业化学品和药品等分析方面有些应用研究报道, 但较为零散, 没有引起人们的广泛重视。到 1968 年, 美国农业部的工程师 K. Norris 博士将多元线性回归方法用于近红外定量分析, 并采用漫反射技术测定固体农产品, 才建立了现代 NIR 分析技术的基础。由于这类方法与传统的光谱分析有很大的不同, 当时这一领域的工作在光谱界并未引起足够的重视。与之配合的不是著名的光谱仪器公司, 而是一些专用仪器生产厂商, 主要是以滤光片为色散元件, 这也影响了近红外光谱技术的发展。

值得庆幸的是, 20 世纪 80 年代, 当时一些知名的应用光谱专家 (如美国分子光谱学家 T. B. Hirschfeld) 开始逐渐重视这一技术, 为近红外光谱技术的崛起起到了推波助澜的作用。更重要的是, 计算机的快速发展成了近红外光谱背后的强大驱动力, 使更复杂数据的获得和处理成为可能, 一些基于主成分分析的化学计量学方法开始被大家所采用, 如主成分回归和偏最小二乘等, 这显著提高了 NIR 分析结果的准确性和可靠性。不久就出现了第三方化学计量学软件供应商, 为数据处理提供了更宽范围的选择, 使用户不受仪器供应商的限制。

20 世纪 90 年代以来, 随着近红外光谱仪器的不断改进、材料科学的发展以及化学计量学数据处理方法的应用, 近红外光谱技术在工业应用中的优势逐渐被人们所认识, 迅速被应用到多个领域的过程分析 (包括现场分析、在线分析和实验室快速分析), 为企业带来了丰厚的效益, 成为过程分析技术中一种不可或缺的分析手段。目前, 化学计量学方法除了在近红外光谱中的应用外, 还被广泛应用到其他分析手段中, 如紫外-可见光谱、荧光光谱、红外光谱、核磁、太赫兹和拉曼光谱等, 成为复杂混合体系光谱辨析和多组分同时测定的一种常用数据处理手段, 也成为过程分析技术大家族中重要的一个组成部分。

1.2 过程分析技术的范畴与构成

20 世纪 80 年代美国 Bruce R. Kowalski 教授成立过程分析化学中心 (CPAC)

时,将过程分析化学定义为“应用分析科学检测和控制工业化学过程(Process analytical chemistry is the application of analytical science to the monitoring and control of industrial chemical process)”。实际上,针对“过程”一词可有很多诠释,但概况起开可分为“狭义过程”和“广义过程”两大类。

“狭义过程”的内容与 Bruce R. Kowalski 教授定义的内容基本相同,指的是流程工业(如石化、化工、制药、冶金和食品等)的过程。流程工业里面又分“小过程”和“大过程”,“小过程”是指单元过程,如制药工业中的药粉混合单元、化学工业中的一个反应器等;“大过程”则是指某一产品完整的生产链条,例如炼油工业中从原料原油监控、原油蒸馏、二次炼油装置(如催化裂化、催化重整、加氢)至成品油调和的整个过程。

“广义过程”的内容则包罗万象,除流程工业外,还包括各式各样的过程,例如材料随使用时间的老化过程、汽油在发动机中的燃烧过程、润滑油在机械设备运行中的衰变过程、葡萄酒品质在储存中的变化过程、药物在人体中代谢的过程、水果生长时品质的变化过程、人体血糖的变化过程、单个细胞内的重要元素的变化过程等,上述这些只是“广义过程”中的几个实例,冰山一角而已。也即 Bruce R. Kowalski 教授生前曾提到的:“过程分析化学已从工业过程控制发展到生化及生态过程控制甚至生命过程控制”。

原则上讲,用于“狭义过程”和“广义过程”的分析技术都属于过程分析技术,但 Bruce R. Kowalski 教授对 PAC 定义以及 FDA 制订的 PAT 工业指南中,过程分析技术不仅仅指的是工业过程中的分析技术,而是均含有过程控制,即过程分析与过程控制的紧密结合。但是在学科分类中,过程分析技术和过程控制技术是完全不同的学科(见图4),当今的时代要求必须将过程分析技术与过程控制技术密切结合起来,

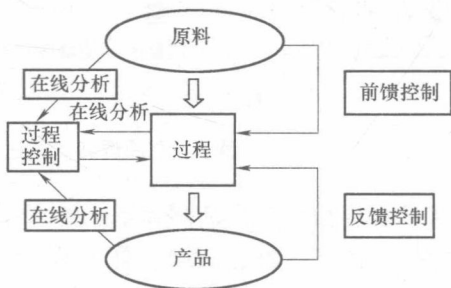


图4 典型的过程分析（在线分析）与过程控制之间的关系

仅靠过程分析技术产生不出任何预期的经济和社会效益,而没有现代过程分析技术提供及时、可靠的分析数据,过程控制技术如同瞎子摸象,茫然无措。

基于上述考虑,本研究报告的“过程”主要指的是“狭义过程”,过程分析技术则主要指的是不含过程控制的过程分析技术,其中也涉及少部分“广义过程”以及必要的过程控制内容。下面以石化行业中汽油调和单元为例,说明现代过程分析技术的主要构成,以及各部分所起的作用。国际上,以在线近红外光谱分析技术为核心结合优化控制软件形成的汽油管道调和系统被称为是现代炼油企