

F. Jović*

TEVA API R&D Pilotno postrojenje
PLIVA HRVATSKA d. o. o.
Prilaz baruna Filipovića 25
10 000 Zagreb

Zoran Gomzi i Želimir Kurtanjek Modeliranje u kemijskom inženjerstvu

Izdavači: Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu; Glavni urednik: Nenad Bolf; Tehnički i likovno-grafički urednik, dizajn naslovnice: Zdenko Blažeković; Recenzenti: Marin Hraste, Mladen Jurak, Nenad Bolf; Lektura: Mirjana Štraus; Tisak: Denona d. o. o., prosinac 2019., broj stranica: 568, naklada: 400 kom.; ISBN: 978-953-6894-66-6

Udžbenik “Modeliranje u kemijskom inženjerstvu” sadržava dva velika poglavlja, prvo poglavlje u kojem je uvodni i napredni tekst, u kojem su opisani pojmovi modeliranja i numeričkih metoda, te drugo poglavlje s konkretnim primjerima, u kojem je prikazano osnovno izvođenje modela, numeričko rješavanje te provjera i primjena modela u kemijskom inženjerstvu. Kako je trenutačno u PLIVI, u odjelu Istraživanja i razvoja aktivnih farmaceutskih supstancija u tijeku razvoj niza projekata u različitim fazama, posebno nam je interesantno vidjeti ovakav udžbenik u kojem se ističe pristup razvoju procesa koji se temelji na naprednim računalnim postupcima matematičkog modeliranja tj. simuliranja i predviđanja vrlo različitih procesa tijekom proizvodnje, zatim proračuna mehanike fluida za karakterizaciju procesa miješanja, ali i statističkim alatima. U tom smislu udžbenik “Modeliranje u kemijskom inženjerstvu” nedvojbeno doprinosi jasnom uvidu kroz uvodna poglavlja *Metodologija modeliranja*, kao i *Vrstama modela* te primjerima metodologije modeliranja procesa koji se mogu primjenjivati na postojećim proizvodima, kako bi se oni unaprijedili i, još važnije, ostali konkurentni unutar i izvan Teva grupe. Ovaj udžbenik daje značajan teorijski uvid u primjenjivost pristupa modeliranja u tako različitim aspektima razvoja kemijsko inženjerskih procesa. Sve te aktivnosti u PLIVI moguće su zahvaljujući među ostalim i autorima, profesorima Gomziju i Kurtanjeku, koji su kontinuirano uvodili nova znanja i tehnologije, dugi niz godina educirali studente kroz diplomsku i poslijediplomsku nastavu, zatim podizali znanstvene i stručne ekspertize u području kemijskog inženjerstva, ali i edukacijama zaposlenika unutar PLIVE (od kojih bih izdvojio skup *Matematičko modeliranje te Edukaciju o Big Data* tijekom 2017.). Sve to je obuhvaćeno u farmaceutskom razvoju kroz polja organske sinteze i katalitičkih pretvorbi, analitičke kemije uz naglasak na specifične analitičke tehnike i analizu tragova, fizikalne karakterizacije, pronalaska novih i istraživanja postojećih formi čvrstoga stanja, razvoja i uvećanja procesa metodologijom razvoja i analize matematičkih i računalnih modela, izrade bilanci mase i energije, izračunima i statističke obrade podataka, optimiranja operacija i procesa primjenom gotovih modela, odnosno primjenom različitih računalnih programa. U poglavlju 1.3., *Modeli upravljanja* naročito mogu biti korisni u farmaceutskoj industriji, na primjer pri takozvanom “realnom otpuštanju u stvarnom vremenu” (engl. *Real Time Release Testing*) u kombinaciji s procesno-analitičkim tehnikama (PAT). Primjer takvog procesa je *in situ* kontrola razdiobe veličine čestica i brzine kristalizacije pomoću regulacije pro-

fila hlađenja metodom izravne nukleacije. Poglavlje 1.4 opisuje bilančne jednadžbe koji se u praksi često primjenjuju u farmaceutskoj industriji pri projektiranju šaržnih procesa i izbora opreme i na pregledan način opisuje sve granične slučajeve. Pored kvalitete proizvoda procesni parametri moraju biti odabrani tako da vođenje procesa unutar odabranih vrijednosti pri čemu se koristi dizajn eksperimenata omogućuje provedbu procesa u industrijskim razmjerima. Naglasak je na sustavnom pristupu koji dovodi do razumijevanja samog procesa. Određivanje procesnog prostora omogućuje uvid u robusnost procesa (autori upotrebljavaju pojam “Parametarska osjetljivost procesa”) i pronalaženje optimalnih procesnih parametara (za farmaceutsku industriju je to obično minimum onečišćenja i maksimum iskorištenja i kemijske čistoće), što je opisano u poglavlju 1.5. *Procjena parametara*. U PLIVI upotrebljavamo komercijalne programske pakete za numeričke metode, ovisno o matematičkom modelu, koje su opisane u poglavlju 1.6. za rješavanje diferencijalnih jednadžbi i poglavlju 1.7 za statističke metode. U ovom dijelu istraživanja i razvoja vrijedi još jednom provjeriti je li u potpunosti istražen eksperimentalni prostor, u čemu pomažu metode statističkoga planiranja pokusa (tzv. DoE) te drugi postupci matematičkoga modeliranja (npr. termodinamičke ravnoteže). Prvi dio knjige završava pregledom vrlo relevantne literature u poglavlju 1.8., odnosno poglavlju 1.9 s popisom oznaka. Kako je namjera udžbenika edukacija studenata, Poglavlje 2. sadrži primjere modela i metodologije modeliranja, ali ne samo za studente već i za sve one koji u svojem profesionalnom radu trebaju osnovna znanja o primjeni modela u različitim tehnološkim procesima, pa tako i farmaceutskim koje primijenimo u PLIVI.



* Dr. sc. Franjo Jović, Principal Pilot Inženjer,
Glavni stručnjak za sigurnost procesa i računalne alate
e-pošta: franjo.jovic@pliva.com