

Simulazione, modellazione ed ottimizzazione di processi di produzione di estratti vegetali.

Il processo di produzione di estratti vegetali è governato da un numero elevato di parametri. La selezione delle condizioni di estrazione più adatte per ottenere un estratto vegetale dotato delle proprietà desiderate e standardizzato è quindi un'operazione molto complessa.

Mediante la simulazione *in silico* di processi di estrazione, **ALIDANS** crea modelli computazionali che suggeriscono come scegliere e modificare le condizioni di estrazione per guidare il processo verso l'ottenimento dell'estratto desiderato, con un risparmio sul lavoro sperimentale, sul tempo e sui costi necessari alla messa a punto del processo di estrazione.

ALIDANS è quindi in grado di creare procedure per

- migliorare la conoscenza di processi di estrazione,
- creare nuovi di processi di estrazione,
- standardizzare processi di estrazione,
- ottimizzare e migliorare l'efficienza di processi di estrazione.

ALIDANS opera con un team di esperti in chemoinformatica e bioinformatica ed utilizza tecniche di:

TEXT MINING

Ottenimento di informazioni dall'analisi di testi quali articoli scientifici, report e brevetti.

DATA MINING

Ottenimento, mediante tecniche quali regressioni multilneari, processi gaussiani, reti neurali, regole di classificazione ed alberi di decisione, di informazioni contenute in dati strutturati in modo da renderle disponibili e direttamente utilizzabili.

PROGETTAZIONE DI PROCESSI IN SILICO

Metodologie computazionali per la progettazione di nuovi processi di estrazione.

RELAZIONI QUANTITATIVE STRUTTURA/ PROPRIETÀ (QSPR)

Creazione di relazioni matematiche che esprimono quantitativamente proprietà di un estratto, quali solubilità, reattività chimica, punto di ebollizione, pressione di vapore e coefficiente di ripartizione, in funzione di determinate caratteristiche teoriche chimico-fisiche o strutturali dei componenti dell'estratto.

MODELLAZIONE QUANTOMECCANICA/ TERMODINAMICA

Utilizzo di metodi quantomeccanici, quali il metodo COSMO-RS (CONductor like Screening Model for Realistic Solvents) e termodinamici per la predizione di proprietà di fluidi puri, miscele di fluidi, soluzioni.

SIMULAZIONE DI BILANCI DI MATERIA E DI ENERGIA

Ottenimento di informazioni sui bilanci di massa e di energia dei vari passaggi di un processo per avere suggerimenti utili per la progettazione, l'ottimizzazione e lo scaling-up del processo stesso.