



Digitalisering af forskning og undervisning på DTU Kemiteknik

Dreyer, Jochen A. H.; N. Jones, Mark ; Kager, Julian; Larsen, Steen; Woodley, John M.; Dam-Johansen, Kim; Huusom, Jakob K.

Published in:
Dansk Kemi

Publication date:
2023

Document Version
Publisher's PDF, also known as Version of record

[Link back to DTU Orbit](#)

Citation (APA):
Dreyer, J. A. H., N. Jones, M., Kager, J., Larsen, S., Woodley, J. M., Dam-Johansen, K., & Huusom, J. K. (2023). Digitalisering af forskning og undervisning på DTU Kemiteknik. *Dansk Kemi*, 104(1), 6-11.

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.



Digitalisering af forskning og undervisning på DTU Kemiteknik

Digitalisering er et af de tre hovedmål i Danmarks Tekniske Universitets (DTU) strategi 2020-2025 og er derfor også et vigtigt fokusområde på DTU Kemiteknik (DTU KT).

Af Jochen A.H. Dreyer¹, Mark N. Jones², Julian Kager¹, Steen Larsen¹, John M. Woodley¹, Kim Dam-Johansen¹ og Jakob K. Huusom¹

¹ DTU Kemiteknik

² Molecular Quantum Solutions ApS

Vi er midt i den fjerde industrielle revolution, og vigtigheden af data er støt stigende. Samtidig vinder nye digitale værktøjer til undervisning indpas. Denne tendens blev forstærket under covid-19-pandemien, men går langt ud over onlineforelæsninger eller videopræsentationer.

DTU KT's faciliteter og pilotanlæg tilbyder et ideelt miljø til at udvikle og verificere effekten af nye værktøjer inden for digitalisering i grænsefladen mellem laboratorieforskning og industrielle processer. Faciliteterne anvendes til både forskning og uddannelse. Disse unikke pilotfaciliteter har udviklet

sig gennem årtier og omfatter mange traditionelle enhedsoperationer inden for

kemi, bioteknologi, fødevarer, medicin og energi (for eksempel membran,



Figur 1. Startskærmen for present4D-appen viser her seks af de i alt otte enhedsoperationer, som Pilot Plant VR-miljøet er tilgængeligt for.



visning i DTU KT's pilotanlæg. Digitaliseringsprojektet er initieret med tre hjørneste, og artiklen er struktureret herefter: virtual reality til undervisning; webbaserede brugergrænseflader til drift af enhedsoperationer; samt datalagring og databehandling.

Virtual reality til undervisning

Målet med Pilot Plants virtual reality-miljø (VR) har været at supplere det fysiske miljø med tidssvarende anvendelse af digitale værktøjer til brug i uddannelsen af næste generation af kemiingeniører. Værktøjerne kan effektivisere de studerendes forberedelse til de praktiske øvelser og guide dem gennem processen med at betjene de enkelte enhedsoperationer. Resultatet er en bedre visuel



Figur 2. Skærmbillede fra Pilot Plant VR-miljøet til Destillation i Bubble-Cap Tray Column-enhedsdrift.

destillation, absorption, tørring, krystallisationsprocesser etc.).

Senest er der i forbindelse med projektet Fermentation based Bio Manufacturing (finansieret af Novo Nordisk Fonden) etableret moderne pilotanlæg til opskalering og test af fermenteringsprocesser og de tilhørende oprensingsprocesser. Det inkluderer et dedikeret GMO Klasse I storskala pilotanlæg til arbejde med genetisk modificerede organismer.

Data fra de >30 forskellige enheder udgør et betydeligt potentiale for nye anvendelser, såfremt de behandles og lagres optimalt, og nye digitale undervisningsværktøjer giver helt særlige muligheder for at optimere læringsmiljøet. Formålet med denne artikel er at opsummere resultater fra arbejdet igennem de seneste to år med henblik på at digitalisere dele af forskning og under-

forståelse af udstyr, procedurer, analyser og sikkerhedsaspekter.

Et skærmbillede af VR-startskærmen kan ses i figur 1. VR består af 360° billeder, interaktive knapper og indlejrede instruktionsvideoer og animationer. Vores projektpartner MediaMedic ApS skabte 3D-modeller af vores proceshaller og flere enhedsoperationer. Disse modeller blev derefter brugt til at skabe og gengive animationer og 360° billeder (figur 2). Dette indhold kombineres med videooptagelser og lydinstruktioner og er struktureret til at følge de nødvendige trin for at gennemføre de praktiske øvelser.

Pilot Plant VR-miljøet er frit tilgængeligt, og den interesserede læser er velkommen til at prøve det. Man skal blot downloade Present4D-applikationen fra <https://present4d.com/en/download/> eller

app-butikken på en mobilenhed. Når applikationen kører (figur 1), skal man indtaste portalnøglen tyj-qjn og downloade VR-miljøet til enhedsoperationer af interesse. Yderligere information kan findes i en nylig publikation [1].

Webbaserede brugergrænseflader til procesdrift

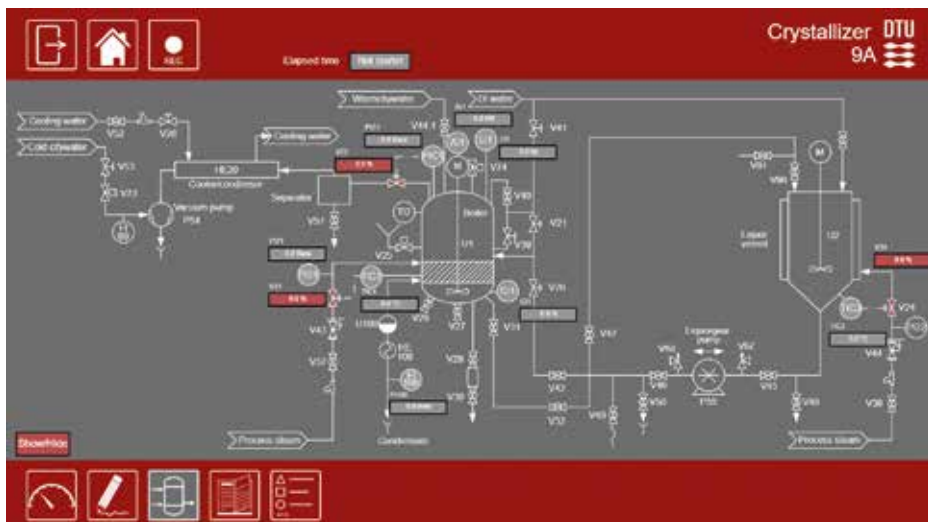
Traditionelt foregår driften af vores eksperimentelle opstillinger via et lokalt kontrolpanel eller en computer. Brugergænsefladen var et internt udviklet LabVIEW-program eller noget software leveret af leverandørerne af de enkelte anlæg.

Sådan en traditionel digital infrastruktur har flere ulemper. Operatøren skal gøre sig bekendt med en bred vifte af brugergænseflader. Alle data, der registreres under eksperimenterne, vil kun blive gemt lokalt, og dataanalyse kræver betydelig forbehandling på grund af forskellige filstrukturer og formater. Selv hvis alle de genererede data ville blive indsamlet, ville nyten være begrænset, da afgørende information om eksperimentet kun registreres i analoge laboratorie-notesbøger.

Den nye digitale infrastruktur udviklet i Pilot Plant erstatter det lokale kontrolsystem med et state-of-the-art styrings- og dataindsamlingssystem (SCADA, se figur 3, side 8). Helt konkret udveksler alle enheder, der er en del af SCADA, data med en central server, der anvender WinCC Unified (Siemens). De brugergænseflader, der genereres i WinCC Unified, er tilgængelige via en webbrowser, så enhederne kan betjenes fysisk i pilot-hallerne fra en håndbåren "tablet", mens de også overvåges fra en kontor-pc. Layout af brugergænsefladen er identisk for alle enheder. Hver enhed har en dedikeret "fane" til registrering af metadata, dvs. enhver information, der ellers ville være skrevet i en analog laboratorie-notesbog. Alle data (målinger, styresignaler, metadata) sendes automatisk til en centraliseret "server/cloud" gennem en IoT gateway (vNode) og gemmes i en SQL-database. Data kan efter endte eksperimenter ekstraheres i for eksempel CSV-format til brug i Excel eller anden databehandlingssoftware.

Datalagring og behandling

For at udvikle en skalerbar og /fremtids-sikret "data science" infrastruktur for vores forsknings- og øvelsesdata fra Pilot Plant, har vi etableret en dedikeret server som central "data lake" [2]. For kort at opsummere nogle af de tekniske detaljer, så er serveren af typen Kuber-



Figur 3. Interaktivt skærbillede fra den nyudviklede webbaserede SCADA-brugergrænseflade. Eksemplet viser fanen P&ID i Citric Acid Crystallizer.

netes (K8s) og alle softwareapplikationer organiseres i Docker-containere. Brugeradministration og softwareimplementering udføres gennem GitLab.

Data er nøglen til at kunne anvende avanceret programmer til at opbygge forståelse for processerne (for eksempel maskinlæring, kunstig intelligens, procesoptimering, osv.), og korrekt datalagring til fremtidig brug er derfor yderst vigtig. Projektet har derfor haft særlig fokus på udviklingen af SQL-databasen og strukturen af de indbyrdes forbundne tabeller til kategorisering af data. I sin nuværende form består databasen af 12 tabeller med visse gensidige relationer. Denne struktur muliggør avanceret søgning af data på tværs af udstyr eller eksperimenter.

Data kan herefter anvendes på alle tænkelige måder. For eksempel Grafana

kan bruges til avanceret datavisualisering, Python-scripts kan udvikles i JupyterHub til at analysere data, automatisere eksperimenter eller anvende kunstig intelligens gennem KubeFlow. Det er selvfølgelig også muligt at udvikle dedikerede programmer/applikationer såsom digitale tvillinger.

Konklusioner og udsigter

I løbet af de seneste to år er der sket store fremskridt i digitaliseringen af Pilot Plant-faciliteterne på DTU KT. Virtual reality-plattformen er blevet godt modtaget af vore danske og internationale studerende (figur 4). I løbet af de kommende måneder vil det didaktiske udbytte af det nye VR-miljø blive evalueret, for eksempel til vurdering af om de studerende i praksis er bedre forberedte, når de skal udføre deres praktiske



Figur 4. To Summer University-studerende fra University of Alabama betjener Citric Acid Crystallizer, mens de har adgang til VR-miljøet og SCADA-brugergrænsefladen via to tablets.

eksperimenter, om der kræves mindre lærersupervision under øvelserne og om de studerende opnår en dybere forståelse af den enkelte øvelse.

SCADA-brugergrænsefladen er i fuld drift og blev også godt modtaget (figur 4). De studerende sætter pris på at arbejde med en intuitiv og moderne brugergrænseflade på en "tablet". Fordelene ved at have et centralt datalager og en webbaseret brugergrænseflade har allerede vist sig.

Serveren til data er klar til brug, og tiden vil vise, hvordan forskellige studerende og forskere vil bruge indholdet. Der er nu enestående muligheder for at akkumulere data til en stadig dybere forståelse af kemiske enhedsoperationer.

Endelig vil nye veje relateret til digitalisering blive udforsket i fremtiden. For eksempel kunne de genererede 3D-modeller af nogle enhedsoperationer bruges til mere interaktive virtuelle eksperimenter eller "gamification" af øvelserne. Selvstudier er ved at blive konfigureret for at lette instruktionen til anvendelse af data, og nogle af værktøjerne (SQL, Python osv.) kan snart blive integreret i undervisningen. Nye værktøjer til udvikling af virtuelle laboratorier eller -udflugter udforskes også baseret på avancerede 3D 360°-fotos og -videoer, eksempler kan findes i fotosektionen på DTU KT's Google Maps-side.

Pilot Plant er opsat på at indlede samarbejder inden for digitalisering med industrielle og akademiske partnere, så tag endelig kontakt, hvis denne artikel fangede din interesse.

Sponsorer

Tak for økonomisk støtte fra Novo Nordisk Fonden som en del af Fermentation-based Biomanufacturing Initiative (FBM), bevillingsnummer: NNF17SA0031362.

E-mail:

Jochen A.H. Dreyer: jodre@kt.dtu.dk

Referencer

1. DE Carberry, K Bagherpour, C Beenfeldt, JM Woodley, SS Mansouri, MP Andersson (2023) A roadmap for designing eXtended reality tools to teach unit operations in chemical engineering: Learning theories & shifting pedagogies, *Digital Chem. Eng.*, 6, 100074.
2. MN Jones, M Stevnsborg, RF Nielsen, D Carberry, K Bagherpour, SS Mansouri, S Larsen, KV Gernaey, JAH Dreyer, J Woodley, JK Huusom, K Dam-Johansen (2022) Pilot Plant 4.0: A review of digitalization efforts of the Chemical and Biochemical Engineering Department at the Technical University of Denmark (DTU), *Comput.-Aided Chem. Eng.*, 49, 1525-1530.

Aerogel-indkapsling reducerer biocidforbruget i bundmalinger

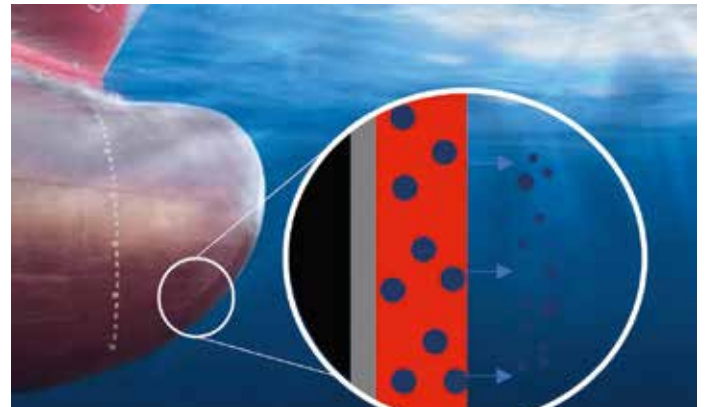
I skibsindustrien bruges store mængder biocidholdig bundmaling til at beskytte skrog og skruer, hvilket har negative konsekvenser for både havmiljøet og driftsøkonomien. Hvordan reduceres brugen af stofferne, samtidig med at der opnås en effektiv beskyttelse af skibets bund?

Af Tenna Frydenberg¹, Eva Wallström¹, Claus Erik Weinell² og Søren Kiil²

¹ EnCoat ApS

² CoaST, Institut for Kemiteknik, DTU

Marin begroning, også kendt under betegnelsen biofouling, er akkumulering og aflejring af marine organismer på overflader, der befinder sig under vandoverfladen. Mange har observeret alger eller muslinger, som gror på bølgebrydere af sten ved stranden, men faktisk er mere end 4.000 marine arter kendt for at kolonisere offshore-platforme, skibsskrog og andre ”kunstige” overflader. For skibe er begroning forbundet med negative miljømæssige, økonomiske og sikkerhedsrelaterede konsekvenser. Organismerne skaber en overfladeruhed på skibets skrog, som reducerer sejlhastigheden på grund af den forhøjede vandmodstand. For at kompensere øges brændstofforbruget med helt op til 85 procent, hvilket er dyrt og bidrager til øget luftforurening. Derudover mindsker marin begroning skibets manøvreedygtighed, korrosionshastigheden af skroget påvirkes negativt og risikoen for spredning af invasive arter går i vejret. Sidstnævnte fænomen mindsker marin biodiversitet. Bundmalinger begrænser begroningen (se figur 1) og giver hvert år skibsindustrien minimum 60 milliarder dollars i besparelser.



Figur 1. Antifouling-coatings beskytter skibsbunden ved at frigive begroningshæmmende aktivstoffer (biocider).

Desuden reducerer malingerne den årlige globale udledning af CO₂ til atmosfæren med 384 millioner tons [1].

Hvad er antifouling-coatings?

En bundmaling består noget forsimplet af bindemidler, som holder sammen på malingen, pigmenter, der giver farve og

Vention LAB
Din indeklima partner

STIKSKABSSERVICE & SPORGASMÅLING

OG MEGET MERE...

- MERE END 25 ÅRS ERFARING INDENFOR LABORATORIEVENTILATION
- SERVICE AF PROCESUDSUGNING OG KOMFORT VENTILATIONSANLÆG
- FEJLFINDING OG FEJLRETNING
- ENERGIOPTIMERING

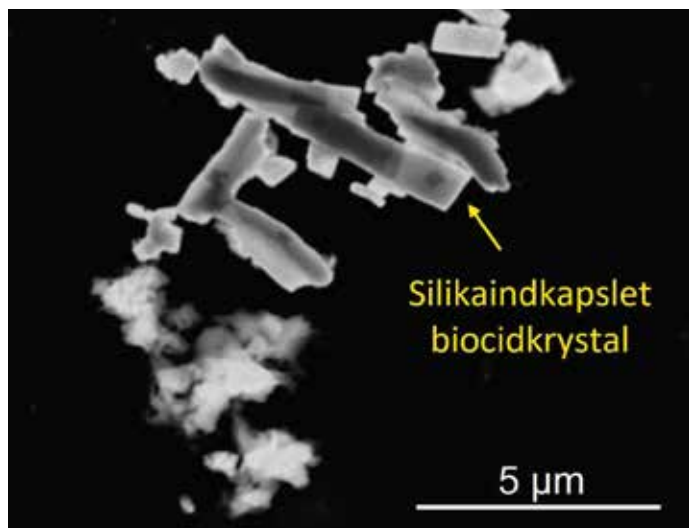
KONTAKT OS PÅ 7196 9317 ELLER INFO@VENTION.DK



mekanisk styrke, samt diverse fyldstoffer og additiver. Størstedelen af kommercielle bundmalinger, de såkaldte antifouling-malinger, er baseret på aktivstoffer (biocider), der på vægtbasis udgør op til 50 procent af malingen. Malingerne virker ved at frigive biocider fra overfladen, hvorved begroning forhindres. Historisk set har flere forskellige biocider været brugt til formålet. I dag benyttes kobberoxid (Cu_2O) som det primære biocid og normalt i kombination med mindre mængder organiske co-biocider for at få en bredspektret effekt mod den marine begroning [1,2].

Miljølovgivning og besparelser skaber fremdrift

For 20 år siden blev en antifouling-maling anset som værende god, så længe den holdt skibsbunden ren. I dag ser vi også på det miljømæssige aftryk, som bundmalingerne efterlader. Inden for EU er antifoulingmalinger reguleret gennem The Biocidal Product Regulation (BPR), som kræver, at alle antifoulingmalinger skal opnå godkendelse, før de frigives til det europæiske marked. Godkendelsesprocessen involverer en miljørisikovurdering, der blandt andet omfatter, at fabrikanter indsender frigivelseshastigheder for biocider i malingen [3]. Det har skabt øget



Figur 2. Elektronmikroskopibillede (STEM) af silika-aerogel-indkapslet biocidkrystaller (kobber pyrithion). Gentryk fra [4] med tilladelse.

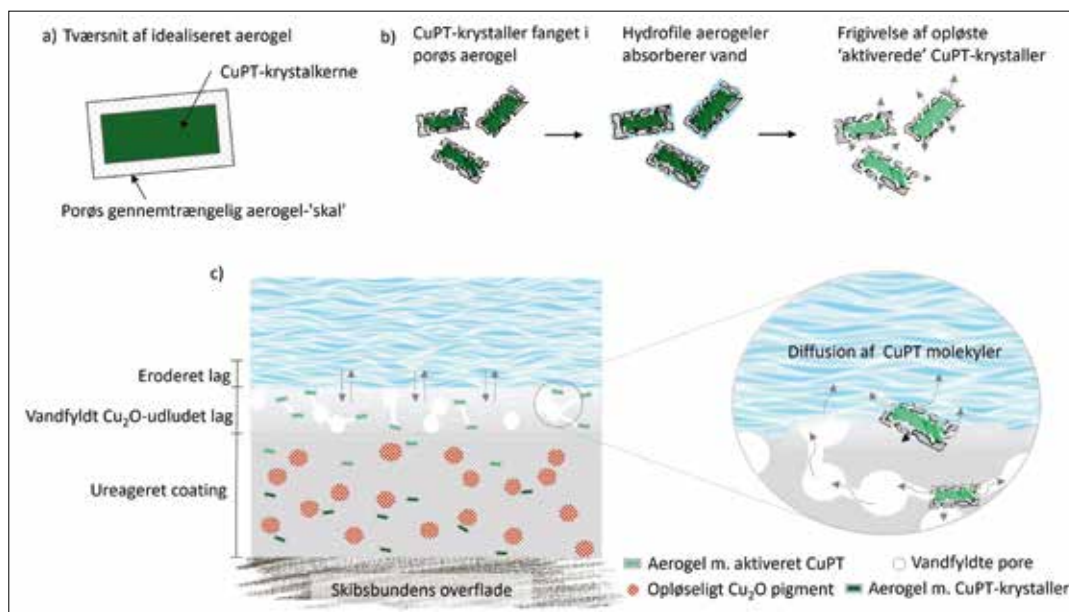
fokus på at opnå en effektiv biociddosering gennem kontrollede frigivelsessystemer. Ved en optimal udnyttelse af biocidet opnås desuden en besparelse, da biocider er dyre ingredienser.

Biocidindkapsling - en mere miljøvenlig løsning

Den danske virksomhed EnCoat ApS har udviklet en indkapslingsteknologi baseret på silika-aerogeler, der kan reducere det samlede biocidbehov i traditionelle antifoulingmalinger. En aerogel er et meget let materiale, som primært består af luft (heraf navnet), og en meget høj porøsitet gør, at materialet egner sig godt til såkaldte "controlled release"-systemer. For at opnå en bedre forståelse af de bagvedliggende mekanismer, og derved bidrage til udviklingen af et optimeret malingsystem med langvarig beskyttelse, er aerogelerne blevet grundigt karakteriseret. Det er gjort gennem et forskningsprojekt i samarbejde mellem EnCoat ApS og DTU CoaST (The Hempel Foundation Coatings Science and Technology Centre). På figur 2 ses et elektronmikroskopibillede af et silika aerogel-indkapslet co-biocid, kobber pyrithion (CuPT). Silika-aerogelerne danner et nanometer-tyndt og porøst lag omkring de enkelte rektangulære CuPT biocidkrystaller [4].

Figur 3a viser en skematisk illustration af det indkapslede co-biocid (kobber pyrithion), der tilføjes som et additiv til bundmalingen. Biocidkrystallerne er effektivt fanget inde i strukturen af silika-aerogelen (figur 3b). Gelens hydrofile egenskaber tiltrækker havvand, som fylder porennetværket, hvilket over tid skaber et lokalt vandmiljø omkring biocidkrystallen. Med en hastighed, der afhænger af opløselighed, hydrofobicitet, diffusivitet og nedbrydning af aerogel-strukturen, vil det opløste biocid blive frigivet. Aerogelens hydrofile egenskaber øger "opholdstiden" for opløsning af de svært havvandsopløselige CuPT-krystaller, hvilket tillader den maksimalt mulige biocidkoncentration på malingsoverfladen.

Derudover sikrer aerogel-skallen omkring de faste CuPT-krystaller, at kun opløste CuPT-molekyler diffunderer ud gennem aerogelens porer. Figur 3c viser frigivelsesmekanismerne bag den aerogel-baserede antifouling-coating. De indkapslede CuPT-krystaller og de opløselige pigmenter (for eksempel Cu_2O) er fordelt i hele bindemiddelsmatricen. Når malingsfilmen udsættes for havvand, begynder bindemiddelsmatricen og de opløselige pigmenter at reagere med ioner fra havvandet, hvorved der skabes et porøst pigmentudludt lag yderst i malingsfilmen. Kun aktiveret CuPT diffunderer ud gennem det



Figur 3. (a) Skematisk illustration af CuPT krystaller indkapslet i silika-aerogelmatrice. (b) Mekanismen bag aerogeler og frigivelsen af aktivstoffer, som kobber pyrithion (CuPT). (c) Tværsnit af havvandseksponeret maling baseret på aerogel-indkapslet CuPT. Gentryk fra [4] med tilladelse.



Figur 4. Paneler med aerogel antifouling-coatings, monteret i stålrammer og klar til at blive nedsænket i havvand.

udludede lag og giver biocidbeskyttelse på malingens overflade. Desuden eroderer malingen i overfladen (dvs. lagtykkelsen på malingen reduceres), når bindemiddelsmatricen er blevet tilstrækkelig vandopløselig og frigives til havvandet. På den måde assisteres frigivelsen af biocider fra malingen.

Test af beskyttelsen i et naturligt havmiljø

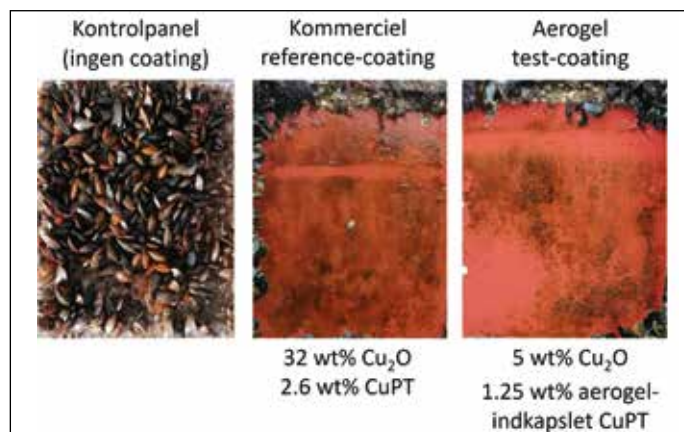
Hvor godt aerogelmalingerne beskytter mod marin begroning sammenlignet med antifouling-coatings, der har et højt biocidforbrug, er blevet testet statisk under maritime havforhold. Malingerne påførtes testpaneler for efterfølgende at blive nedsænket i havvand ved CoaST Maritime Test Center (CMTC) i Hundested Havn, Danmark. En uddybende beskrivelse af CMTC kan læses i [5]. Se eksempel på de coatede paneler i figur 4.

Den såkaldte antifouling-performance (dvs. evnen til at beskytte mod marin begroning) bedømmes ved at vurdere typen og graden af begroning på de eksponerede antifoulingmalinger hen over en sejlsæson. Afgivelsen af aktivstoffer, og dermed den generelle antifouling-performance af malingerne, er stærkt afhængig af havvandets temperatur og saltindhold. I eksponeringsperioden fra april til november 2021 varierede parametrene i intervallerne 8-25°C og 15-21‰.

Figur 5 viser, at en aerogel-indeholdende antifouling-coating med en lav biocidkoncentration udviser lige så høj beskyttelse mod marin begroning som den kommercielle antifouling-coating med mere end fire gange så meget biocid. På begge de coatede paneler (kommerciel og test) blev der kun observeret et tyndt lag slim, men der var hverken makroalger, rurer eller muslinger som på kontrolpanelet efter syv måneders eksponering. Hård fouling, såsom rurer og muslinger, betragtes generelt som værende mere problematisk for skibsindustrien i forhold til slim og alger, der til en vis grad vaskes af, når skibet sejler. Den store reduktion i biocidindholdet opnås for aerogel-coatingen grundet mere effektiv dosering og levering af co-biocidet CuPT. En øget udnyttelse af CuPT skaber kombinationseffekter med Cu₂O biocidet, der samlet set er større end virkningerne af de enkelte biocider [6]. Derfor kan forbruget af Cu₂O også reduceres i en aerogel-maling uden at miste den høje beskyttelseseffekt mod den marine begroning.

Fremtiden for antifouling-coatings

Indkapslingsteknologien gør det muligt at reducere det totale biocidforbrug i nutidens traditionelle antifouling-coatings betragteligt gennem kontrolleret og effektiv biociddosering. Og det uden at gå på kompromis med det primære formål af antifou-



Figur 5. Billeder af paneler efter syv måneders statisk eksponering i havvand ved CoaST Maritime Test Center i Hundested Havn. Kontrolpanel (venstre), kommerciel reference-coating (midten) og test-coating med aerogel-indkapslet CuPT. Mængden af biocid-komponenter er indikeret under hvert panel. Begroningens vedhæftningsevne er blevet testet ved forsigtigt at bevæge en finger tværs over panelernes overflade (ses som lyse striber på billederne).

ling-coatings, som er at beskytte skibet mod begroning. Ud over at et minimeret biocidforbrug beskytter verdenshavene, hvilket er i overensstemmelse med en af de globale bæredygtigheds mål (SDG 14), så er der også en økonomisk gevinst. Den nye forståelse af frigivelsesmekanismerne i en antifouling-coating med indkapslet CuPT er værdifuld i forhold til arbejdet med udvikling af nye og effektive malingsformuleringer. Interaktionen mellem et kontrolleret indkapslingssystem, mekanismerne i antifouling-coatings samt indflydelsen fra havvandtemperatur, pH, saltindhold og sejlhastighed gør dog fortsat den overordnede forståelse af selve malingen kompleks. Derfor arbejdes der stadig på at afklare, hvordan de forskellige ingredienser og deres parametre påvirker hinanden. Derudover udvikles indkapslingsteknologien også til andre co-biocider, som har anderledes fysiske og kemiske egenskaber end kobber pyrithion.

Tak til Innovationsfond Danmark for økonomisk støtte til erhvervsforskerprojektet, som har været et samarbejde mellem CoaST (The Hempel Foundation Coatings Science and Technology Centre) ved DTU Kemiteknik og EnCoat ApS.

E-mail:

Tenna Frydenberg: tlf@encoat.dk

Referencer

1. Maureen E. Callow and James A. Callow, Marine biofouling: a sticky problem, *Biologist*, 49.1 (2002), 1-5.
2. Diego M. Yebra, Søren Kiil and Kim Dam-Johansen, Antifouling technology-past, present and future steps towards efficient and environmentally friendly antifouling coatings, *Progress in organic coatings* 50.2 (2004), 75-104.
3. E.J.O.J.E.U.L. Union, Regulation (EU) No 528/2012 of the European Parliament and of the Council of 22 May 2012 concerning the making available on the market and use of biocidal products, *Official Journal of the European Union L*, 167 (2012), 1-116.
4. Tenna Frydenberg, Claus E. Weinell, Kim Dam-Johansen, Eva Wallström and Søren Kiil, Characterization and Release Mechanisms of Aerogel-Encapsulated Biocide Crystals for Low-Loading and High-Utilization Antifouling Coatings. *ACS Omega (paid open access)* 7.39 (2022), 34824-34838.
5. Weinell et al. "Forskning i bæredygtige begroningshindrende bundmalinger", *Dansk Kemi*, nummer 1, februar 2022.
6. Tenna Frydenberg, Claus E. Weinell, Kim Dam-Johansen, Eva Wallström, and Søren Kiil. Silica aerogel-encapsulated biocide crystals for low-loading antifouling coatings: rheology, water absorption, hardness, and biofouling protection. *J Coat Technol Res* (2022), <https://doi.org/10.1007/s11998-022-00713-y>.