



**School of  
Engineering**

ICP Institute of  
Computational Physics

## **Institutsbericht 2022**



Die rechte Bildhälfte zeigt den 900 Kubikmeter grossen Heissluftballon *HB-QZT Homebuilt*, der vom international bekannten Schweizer Heissluftballonfahrer Stefan Zeberli 2020 selbst gebaut wurde. Die linke Bildhälfte zeigt die von Jessica Stoll im Rahmen ihrer Masterarbeit simulierte Luftströmung im Ballon 30 Sekunden nach Brennerstart.

# Vorwort

Ich nutze dieses Vorwort, um in eigener Sache zu informieren: Endlich sind meine F&E-Projekte umfangreich genug, um diese als eigenständigen thematischen Schwerpunkt zu präsentieren. Erste Resultate werden in diesem Forschungsbericht sowie auch auf der ICP-Website gezeigt. Darüber hinaus beschreibt Kapitel 6 meine Vision, wie wir am ICP die Simulation im Gebäudebereich in den nächsten Jahren noch weiterentwickeln möchten. Ich bin überzeugt, dass wir damit einen Mehrwert schaffen und dass Computersimulationen für Gebäudeplanung und -betrieb auch aus ökologischer Sicht Sinn ergeben.

Die Sichtbarkeit ist wichtig für die weitere Akquisition und hat auch eine positive Ausstrahlung in die Lehre. Es gibt den Projekten zusätzlichen Schwung, wenn die Gemeinsamkeiten der verschiedenen Aktivitäten erkennbar werden und die Themen in den Auftritt des Instituts eingebettet sind. Es freut mich dabei sehr, dass einige Forschungstätigkeiten, die schon vor meiner Zeit am ICP begonnen und in den letzten Jahren weiter vertieft wurden, nun sehr gut in das neue Feld passen: So wurde die Simulation von Personenströmen nun auch auf Innenräume erweitert (lesen Sie dazu den Beitrag 5.1). Weiter unterstützt das Thermolabor die Gebäudesimulation mit wichtigen Beiträgen im Zusammenhang mit dem digitalen Zwilling und der Validierung der Modellierung.

Der Aufbau eines eigenen thematischen Schwerpunkts hat seit meinem Start an der ZHAW im Oktober 2015 nun einige Jahre gedauert. Einerseits war es meine Absicht, zu warten, bis die kritische Masse überschritten wurde. Andererseits sind im mehrfachen Leistungsauftrag die Prioritäten oft von aussen gegeben. Es ist schwierig, neben dem Tagesgeschäft und der Lehre die Intensität aufrechtzuerhalten, die es fürs Antragschreiben braucht, und mit der man die eigenen Projekte vorantreiben kann. Es ist aber typisch ICP, dass die F&E neben der Lehre eine sehr wichtige Rolle einnimmt, und ich bin stolz darauf, dass sich dies in meiner eigenen Tätigkeit nun auch so zeigt. Ich möchte an dieser Stelle meinen Kolleginnen und Kollegen am ICP danken, die mich immer grossartig unterstützt haben. Sie haben mich jederzeit darin bestärkt, diesen Weg weiterzuverfolgen, und ich freue mich darauf, mit Multiphysik-Simulationen im Gebäudesektor aktiv zu sein.

Andreas Witzig,  
Institutsleiter ICP

Link:

<https://www.zhaw.ch/de/engineering/institute-zentren/icp/gebaeudesimulation/>

# Inhaltsverzeichnis

|                                                                                                                                                                    |           |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Vorwort</b>                                                                                                                                                     | <b>I</b>  |
| <b>Inhaltsverzeichnis</b>                                                                                                                                          | <b>II</b> |
| <b>1 Multiphysik-Modellierung</b>                                                                                                                                  | <b>1</b>  |
| 1.1 Evaluation von Cloud-Computing-Anbietern im Hinblick auf Massive Simultaneous Cloud Computing (MSCC), Effizienz und Usability aus Sicht eines Ingenieurs ..... | 2         |
| 1.2 Simulation des Pumpmechanismus von Schlauchpumpen .....                                                                                                        | 3         |
| 1.3 Das hydromechanische Verhalten von Brüchen in Opalinuston: Kombination von Rauheitsmessungen und Computersimulationen .....                                    | 4         |
| 1.4 Massive Simultaneous Cloud Computing (MSCC) für datengetriebene Optimierung von SOFC-Elektroden .....                                                          | 5         |
| 1.5 Modellbasierte Optimierung von MIEC-SOFC-Anoden .....                                                                                                          | 6         |
| 1.6 Digitales Mikrostruktur Repository (DMR) für Daten-basierte Entwicklung von Energiematerialien .....                                                           | 7         |
| 1.7 PhysioCath: Verbesserter Mikrokatheter-Blutflusssensor .....                                                                                                   | 8         |
| 1.8 Simulation der Hüllentemperatur eines Heissluftballons .....                                                                                                   | 9         |
| 1.9 Schlierenfotografie: Strömungsanalyse beim WIG-Schweissen.....                                                                                                 | 10        |
| 1.10 Nichtlineare Thermomechanik des Oberflächenwachstums für additive Fertigungsanwendungen.....                                                                  | 11        |
| <b>2 Elektrochemische Zellen und Mikrostrukturen</b>                                                                                                               | <b>12</b> |
| 2.1 Makroskopische Zellmodelle für organische Redox-Flow-Batterien.....                                                                                            | 13        |
| 2.2 Bestimmung des Einflusses der porösen Elektrodenmesostruktur auf die elektrochemische Leistung von Redox-Flow-Batterien .....                                  | 14        |
| 2.3 3-D-Modell des Wasser- und Wärmetransports in PEMFCs bei Verdunstungskühlung und Befeuchtung .....                                                             | 15        |
| <b>3 Organische Elektronik und Photovoltaik</b>                                                                                                                    | <b>16</b> |
| 3.1 Neuartige Halbleiterbauelemente .....                                                                                                                          | 17        |
| 3.2 Neue Tools für die Charakterisierung von Quantenpunkt-Displays.....                                                                                            | 18        |
| 3.3 Untersuchung des Ladungstransports in organischen Halbleitern mit elektrochemischen Methoden und theoretischen Modellen.....                                   | 19        |
| 3.4 Multispektrale Bildanalyse und maschinelles Lernen für PV-Qualitätssicherung .....                                                                             | 20        |
| 3.5 Organische Terahertz-Photonik .....                                                                                                                            | 21        |
| <b>3.6 Dynamik von Ladungstransferzuständen in organischen Halbleiterbauelementen: Kombination von Experiment und Simulation (CTDyn).....</b>                      | <b>22</b> |
| <b>4 Sensorik und Messsysteme</b>                                                                                                                                  | <b>23</b> |
| 4.1 Entwicklung eines Thermotherapiegeräts für die Behandlung der kutanen Leishmaniose.....                                                                        | 24        |
| 4.2 Eine neue thermografische Methode zur Quantifizierung der Schweissdrüsenaktivität in vivo .....                                                                | 25        |
| 4.3 Design und Entwicklung von künstlichen Hautmodellen für taktile Sensoranwendungen .....                                                                        | 26        |



|               |                                                                                                                                 |           |
|---------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 4.4           | Tragbares Gerät zur Frühdiagnose von Lymphödemen.....                                                                           | 27        |
| <b>5</b>      | <b>Gebäudesimulation</b>                                                                                                        | <b>28</b> |
| 5.1           | <b>Simulation von Personenströmen und der damit verbundenen Ausbreitung von Infektionskrankheiten</b> .....                     | 29        |
| 5.2           | <b>ThermoPlaner3D - Detaillierte Energiebeurteilung von Gebäuden aus grossflächiger 3D-Thermografie</b> .....                   | 30        |
| 5.3           | 3D-Architektenpläne für Gebäudesimulation zugänglich gemacht.....                                                               | 31        |
| 5.4           | Raumklima-Optimierung aus dem digitalen Zwilling .....                                                                          | 32        |
| 5.5           | <b>Digitaler Zwilling II: Livedaten in der Mivune Building Cloud</b> .....                                                      | 33        |
| 5.6           | Digitaler Zwilling III: Messtechnik in Cloudanwendungen.....                                                                    | 34        |
| 5.7           | Vergleich zwischen Konvektions- und Strahlungsheizung in Bezug auf die Feuchtigkeit in einer Backsteinwand mit EPS-Dämmung..... | 35        |
| 5.8           | Schlanke Gebäudetechnik mit Simulation unterstützen .....                                                                       | 36        |
| <b>6</b>      | <b>Multiphysik-Simulationen für Gebäude und Quartiere</b>                                                                       | <b>37</b> |
| <b>Anhang</b> |                                                                                                                                 | <b>41</b> |
| A.1           | Studierendenprojekte .....                                                                                                      | 41        |
| A.2           | Wissenschaftliche Publikationen.....                                                                                            | 42        |
| A.3           | Buchkapitel.....                                                                                                                | 46        |
| A.4           | Konferenzen und Workshops.....                                                                                                  | 46        |
| A.5           | Vorlesungen .....                                                                                                               | 47        |
| A.6           | ICP-Spin-off-Firmen .....                                                                                                       | 49        |
| A.7           | ICP-Mitarbeitende .....                                                                                                         | 51        |
| A.8           | Standort.....                                                                                                                   | 52        |

# 1 Multiphysik-Modellierung

Multiphysik-Modelle sind wirksame Werkzeuge, um eine grosse Bandbreite an physikalischen Phänomenen zu erkunden, und so die Energieflüsse, Strukturen, elektromagnetische, thermodynamische, chemische und akustische Effekte miteinander zu verbinden. Auf diesem Gebiet gab es in den letzten Jahrzehnten enorme Fortschritte und die potenzielle Reichweite der Anwendungen wurde stetig ausgeweitet. Zudem wurden numerische Methoden immer ausgefeilter und an die verfügbaren, wachsenden Rechnerkapazitäten angepasst. Heutzutage sind detaillierte physisch-chemische Modelle kombiniert mit belastbaren numerischen Lösungsmethoden beinahe zu einer Notwendigkeit für die Planung und Optimierung multifunktionaler technischer Apparate und Prozesse geworden.

Am ICP machen wir angewandte Forschung auf dem Gebiet der Multiphysik-Modelle und entwickeln Finite-Elemente- ebenso wie Finite-Volumen-Simulationssoftware.

Unsere weitläufige Erfahrung in numerischer Analyse, Modellierung und Simulation erlaubt es uns, simulationsbasierte Optimierung in vielen Fachgebieten erfolgreich anzuwenden. Dabei sind wir mit einer grossen Bandbreite an physikalischen Gleichungen vertraut und finden auch dann numerische Lösungen, wenn die Effekte in enger Wechselwirkung zueinander stehen. Wir entwickeln auch Ein-Zweck-Werkzeuge, die auf die Bedürfnisse unserer Partner spezifisch zugeschnitten sind, und wir nutzen kommerzielle Software dort, wo sie besser geeignet ist.

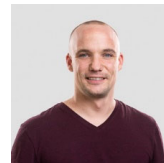
Zu unseren Spezialitäten auf diesem Gebiet gehören die Anwendung, Erweiterung und Entwicklung gekoppelter Modelle mittels unserer eigenen Finite-Element-Software SESES, der Fluidodynamik-Software OpenFoam (Open Source) und kommerziell angebotener Produkte wie COMSOL.



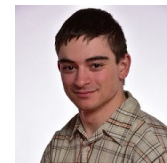
G. Boiger



M. Boldrini



V. Buff



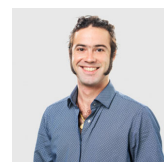
S. Ehrat



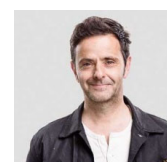
L. Hocker



L. Holzer



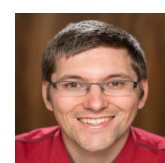
M. Hostettler



L. Keller



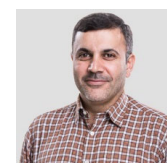
V. Lienhard



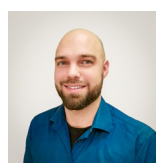
P. Marmet



J. Michel Rivero



Y. Safa



A. Schubiger



D. Sharman



B. Siyahhan



J. Stoll

## 1.1 Evaluation von Cloud-Computing-Anbietern im Hinblick auf Massive Simultaneous Cloud Computing (MSCC), Effizienz und Usability aus Sicht eines Ingenieurs

Im Rahmen dieses intern finanzierten Projektes wird eine Evaluation unterschiedlicher HPC-Cloud-Computing-Anbietern in Bezug auf Effizienz und Benutzerfreundlichkeit bzw. *User Experience* durchgeführt. Hauptanwendung sind COMSOL Multiphysics und die Möglichkeiten, welche die Cloud für grosse Simulationen und Parameterstudien in Anbetracht von Skalierbarkeit und Flexibilität bietet. Besonderes Augenmerk wird auf Massive Simultaneous Cloud Computing (MSCC) gelegt.

Mitwirkende: A. Schubiger, G. Boiger  
Partner: Intern  
Finanzierung: Intern  
Dauer: 2022

Der Bereich der numerischen Simulation ist heute mit steigenden Anforderungen an datenintensive Untersuchungen konfrontiert. Einerseits erfordern ingenieurwissenschaftliche Aufgabenstellungen Parameterstudien, Sensitivitätsanalysen und Optimierungsläufe in immer größerem Umfang. Zum anderen drängt der Bereich der künstlichen Intelligenz (KI) mit seinem notorischen Datenhunger dazu, immer umfangreichere, numerisch abgeleitete Lern-, Test- und Validierungsdaten für das Training von z. B. künstlichen neuronalen Netzen (KNN).

Andererseits hat das aktuelle *Zeitalter des Cloud Computing* die Voraussetzungen dafür geschaffen, dass heutzutage jeder Nutzer von Simulationssoftware Zugang zu potenziell unbegrenzten Hardwareressourcen hat [1].

Hat man sich entschieden, seine Applikationen bzw. Simulationen in die Cloud auszulagern, steht man vor der Herausforderung, welcher der vielen momentan verfügbaren Anbieter die eigenen Geschäftsbedürfnisse und -anforderungen erfüllt. Die Anbieter unterscheiden sich stark im Angebot und in der Art und Weise, wie mit der Cloud interagiert wird.

Diese Studie fokussiert sich auf COMSOL Multiphysics. COMSOL Multiphysics unterstützt mit Hilfe ihrer Partner, ihre Software in einer Virtual Private Cloud (VPC) auszuführen. Zu diesen offiziellen Partnern gehören *Nimbix*, *rescale*, *TotalCAE*, *CPU 24/7*, *Penguin Computing* und *Compute Canada*. Zusätzlich zu diesen offiziellen Partnern soll der von *Kaleidosim* spezifisch für COMSOL Multiphysics neu entwickelte *Cloud-Companion* (Abb. 1) getestet werden.

Die unterschiedlichen Anbieter werden sowohl unter technischen Aspekten als auch unter dem Aspekt der Benutzerfreundlichkeit bzw. der User Experience [2] bewertet und es soll der gesamte Workflow der Ersteinrichtung und der täglichen Ingenieurarbeiten berücksichtigt werden. Die Studie beinhaltet Aspekte wie:

- Erstellung eines Kontos
- Lizenzanbindung

- Datenübertragung
- Speicherung von Daten
- Automatisierung
- Dokumentation / Support
- Preisgestaltung

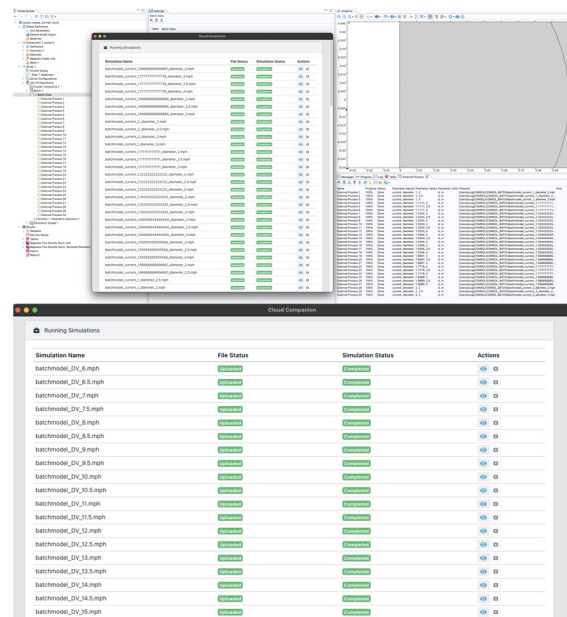


Abb. 1: Parameterstudie mit 30 simultanen COMSOL Simulationen mit dem Kaleidosim Cloud-Companion.

### Literatur:

- [1] Boiger, Gernot Kurt, et al. "A massive simultaneous cloud computing platform for OpenFOAM." 9th OpenFOAM Conference, online, 19-20 October 2021. ZHAW Zürcher Hochschule für Angewandte Wissenschaften, 2021.
- [2] Laugwitz, B., Schrepp, M. und Held, T. (2006): Konstruktion eines Fragebogens zur Messung der User Experience von Softwareprodukten. In: Heinecke, A. M. und Paul, H. (Hrsg.): Mensch & Computer 2006 – Mensch und Computer im Strukturwandel. Oldenbourg Verlag, S. 125–134

## 1.2 Simulation des Pumpmechanismus von Schlauchpumpen

Schlauchpumpen werden bei der Förderung von Flüssigkeiten von kleinen Volumenströmen eingesetzt. Ihr Vorteil gegenüber anderen Pumptypen liegt unter anderem darin, dass die Fördermenge idealerweise proportional zur Pumpdrehzahl und unabhängig von den Betriebsbedingungen eingestellt werden kann. Dies bedingt jedoch, dass die mechanischen Effekte des Schlauches vernachlässigbar klein sind. Bei höheren Pumpraten oder dem anwendungsbedingten Einsatz von suboptimalen Schlauchmaterialien können diese Effekte das Fördervolumen jedoch massgeblich beeinträchtigen. Im Rahmen eines Innosuisseprojekts wurde ein Simulationsmodell erarbeitet, welches das Pumpenkennfeld unter Berücksichtigung der dynamischen Eigenschaften des Schlauches bestimmt.

Mitwirkende: M. Hostettler, G. Boiger  
Partner: Vertraulich  
Finanzierung: Innosuisse  
Dauer: 2019–2022

Für die Förderung von Flüssigkeiten steht eine Vielzahl von unterschiedlichen Pumptypen zur Verfügung. Jedes Pumpenprinzip bietet dabei individuelle Vor- und Nachteile. Da die Auswahl eines Pumpsystems oftmals anwendungsspezifisch eingeschränkt ist, gilt es, den Schwächen und Limitierungen der eingesetzten Pumpe Rechnung zu tragen.

So werden zum Beispiel Schlauchpumpen eingesetzt, wo das geförderte Medium nicht in Kontakt mit der Umwelt kommen darf. Sie beruhen auf dem Prinzip, dass das in einem Schlauch geführte Medium durch gezieltes, mechanisches Zerquetschen des Schlauches entlang diesem gefördert wird (siehe Abb. 1). Dies geschieht durch externe Rollen oder Schieber, welche einen zyklischen Bewegungsablauf ausführen. Im Idealfall ist das geförderte Volumen pro Zyklus dabei konstant, da es durch die Geometrie der äusseren Peristaltik vorgegeben wird. Das bedingt jedoch, dass der Schlauch diesem Bewegungsablauf gleichbleibend folgt und es nicht zu einem Abheben der Peristaltik kommt. Dies kann aber je nach Materialeigenschaften und Fördergeschwindigkeit durchaus vorkommen und führt direkt zu einer Durchsatzeinbusse.

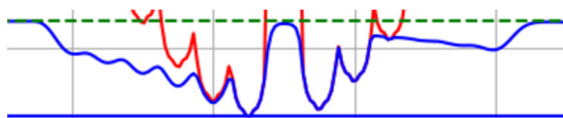


Abb. 1: Querschnitt durch die Pumpenperistaltik mit den externen Schiebern in rot und dem zerquetschten Schlauch in blau.

Die Prognose solcher Durchflussverluste bedingt ein Verständnis der komplexen dynamischen Eigenschaften des Schlauchmaterials unter dem Einfluss von äusseren Rahmenbedingungen wie Pumprate und Schlauchinnendruck. Zusätzlich unterliegen die mechanischen Eigenschaften des Schlauchmaterials noch Temperatur- und Ermüdungseffekten. Die Charakterisierung des Pumpenkennfeldes wurde daher

bislang rein experimentell aus einer Vielzahl von aufwändigen Messungen ermittelt.

Im Rahmen dieses Projektes wurde nun ein physikalisches Modell erstellt, um die komplexen viskoelastischen Materialeffekte abzubilden und den Pumpprozess einer spezifischen Peristaltikpumpe mittels numerischer Simulation nachzubilden. Dies ermöglicht eine weitaus kostengünstigere Charakterisierung des Pumpsystems.

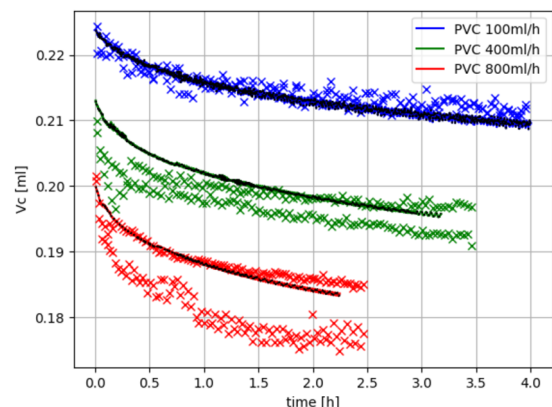


Abb. 2: Vergleich Messungen (Kreuze) und Simulation für drei unterschiedliche Pumpraten. Aufgetragen ist das geförderte Volumen pro Zyklus über die Zeit.

Basierend auf den Erkenntnissen von aufwändigen 3D-Fluid-Struktur-Interaktionssimulationen, der Analyse von konstitutiven Materialmodellen und unter Einbezug analytischer Fluidodynamik konnte ein vereinfachtes Pumpenmodell bestimmt werden, welches das mechanische Verhalten des Schlauches in der Peristaltik beschreibt. Des Weiteren wurden spezifische Messverfahren entwickelt für die Erhebung der relevanten Schlaucheigenschaften.

Für die Validierung der Ergebnisse wurden Vergleiche mit Durchflussmessungen an realen Schlauchpumpen herangezogen (siehe Abb. 2).

### 1.3 Das hydromechanische Verhalten von Brüchen in Opalinuston: Kombination von Rauheitsmessungen und Computersimulationen

Im Zusammenhang mit der Lagerung von gefährlichen Stoffen in Gesteinseinheiten ist das Vorhandensein von Rissen von besonderem Interesse, da sie die Transporteigenschaften des Gesteins grundlegend verändern können. Bei der Lagerung radioaktiver Abfälle in Tongesteinen bilden sich durch die Bautätigkeit Bruchzonen; es ist aber auch möglich, dass sich während der langen Lagerung Scherzonen bilden, die die Transporteigenschaften lokal verändern. Es ist daher von grundlegender Bedeutung, den Materialtransport in Klüften, die sich in Tongesteinen bilden, zu verstehen. Die vorliegende Studie untersucht die Wandrauhigkeit natürlicher Scherbrüche im Opalinuston, einem jurassischen Schiefer, der in der Schweiz als Wirtsgestein für radioaktive Abfälle vorgesehen ist. Die Höhenverteilung der Bruchflächen wurde optisch gemessen und charakteristische Größen wie die mittlere quadratische Höhe und die fraktale Dimension wurden aus dem Rauigkeitsspektrum bestimmt. Die gemessenen Rauigkeitsleistungsspektren wurden dann als Input für die Erstellung von künstlichen Bruchmodellen verwendet, die wiederum für virtuelle Kompressionsexperimente und numerische Strömungssimulationen zur Vorhersage der hydromechanischen Eigenschaften in einzelnen Brüchen des Opalinustons eingesetzt wurden.

Mitwirkende: L. Keller  
Partner: Nagra, EURAD  
Finanzierung: Nagra, EURAD  
Dauer: 2020–2023

Die Rolle der Oberflächenrauigkeit von Brüchen in Opalinuston und in Gesteinen im Allgemeinen ist wichtig für das Verständnis des hydromechanischen Verhaltens von Brüchen. Trotz umfangreicher Forschungsarbeiten auf diesem Gebiet ist die detaillierte Beziehung zwischen Rauheitsparametern, Bruchkontaktverhalten, mechanischen Eigenschaften von Brüchen und Transporteigenschaften noch nicht abschließend geklärt. Es wurden zwei verschiedene Bruchflächen von Scherbrüchen im Opalinuston untersucht. Die Bruchflächen (Abb. 1) wurden auf der Grundlage ihres Rauigkeitsspektrums charakterisiert. Es wurde festgestellt, dass die glatten Bruchflächen bis zur längsten Skala fraktal-ähnlich sind, mit einer fraktalen Dimension  $D_f \sim 2,1$  und keinem Roll-off-Bereich bei langen Wellenlängen. Im Gegensatz dazu weisen die glasartigen Bruchflächen einen Roll-off-Bereich auf, der für eine flache Oberfläche mit eher kleinen und lokalen topografischen Höhenunterschieden charakteristisch ist. Die glasartige Bruchfläche ist nahezu fraktal mit  $D_f \sim 2,0$ . Die beiden Oberflächen unterscheiden sich signifikant in ihrer mittleren quadratischen Höhe ( $h_{rms}$ ), die im Fall der Slickensides im Bereich von einigen Dutzend Mikrometern (abhängig von der Größe des untersuchten Bereichs) und im Fall des glasartigen Bruchs bei einigen Mikrometern liegt. Das gemessene Rauheitsleistungsspektrum wurde zur Erstellung von Bruchmodellen verwendet, die als Input für virtuelle Druckversuche dienten (Abb. 1). Die Rauheitsparameter  $h_{rms}$  und  $D_f$  beeinflussen das Kontaktbildungsverhalten,

das wiederum die hydromechanischen Eigenschaften steuert (Abb. 1). Je niedriger  $h_{rms}$  und  $D_f$  sind, desto höher ist die Bruchsteifigkeit bzw. desto geringer ist die Bruchnachgiebigkeit. Vergleichsweise kleinere Werte von  $h_{rms}$  und  $D_f$  führen zu einer größeren Anzahl von Kontaktflächen, was die Bruchsteifigkeit erhöht und die Durchlässigkeit verringert. Darüber hinaus beeinflusst die Kontaktbildung die Verteilung des Restwassers während der Entwässerung. Mit zunehmender Kompression und der damit verbundenen Bildung neuer Kontaktbereiche werden die Regionen der angeschlossenen Wasserkörper grösser.

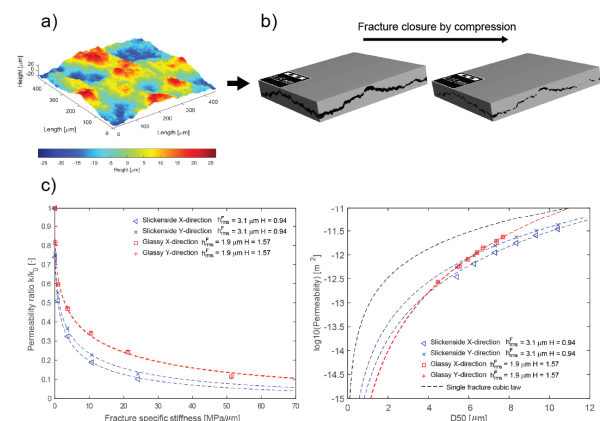


Abb. 1: Gemessene Topographie der Scherflächen (a), die zur Erstellung von Bruchmodellen (b) verwendet wurde. Diese wiederum wurden virtuell durch Kompression geschlossen (b) und die sich ändernden Transporteigenschaften berechnet (c).



## 1.4 Massive Simultaneous Cloud Computing (MSCC) für datengetriebene Optimierung von SOFC-Elektroden

Digital Materials Design (DMD) ermöglicht eine systematische modellbasierte Entwicklung und Optimierung von Materialsystemen und Mikrostrukturen. Die Anwendung von DMD für die Entwicklung von Solid Oxide Fuel Cell (SOFC)-Elektroden führt zu einem sehr grossen Parameterraum, der mit konventionellen Rechenressourcen sehr zeitaufwändig ist. Das Konzept des Massive Simultaneous Cloud Computing (MSCC) ermöglicht den Zugriff auf nahezu unbegrenzte Rechenressourcen auf Abruf. Diese drastische Reduktion der Rechenzeiten ermöglicht die volle Nutzung des DMD-Ansatzes für die Entwicklung der nächsten Generation von SOFC-Elektroden.

Mitwirkende: L. Holzer, P. Marmet, T. Hocker, G. Boiger, J. M. Brader, J. G. Grolig, H. Bausinger, A. Mai, S. Reeb, M. Fingerle  
 Partner: Hexis AG, Math2Market GmbH, Kaleidosim Technologies AG  
 Finanzierung: Bundesamt für Energie (BFE), Eurostars  
 Dauer: 2019–2023

Digital Materials Design (DMD) ist ein moderner Ansatz zur modellbasierten Materialoptimierung. In unserem DMD-Ansatz zur Optimierung von SOFC-Elektroden kombinieren wir stochastische Mikrostrukturmodellierung (d. h. Simulation der Auswirkung von Fertigungsparametern auf 3D-Morphologien), virtuelle Tests von 3D-Mikrostrukturen und ein Multiphysik-Elektrodenmodell. Damit kann ein grosser Parameterraum als Basis für die datengetriebene Mikrostrukturoptimierung untersucht werden.

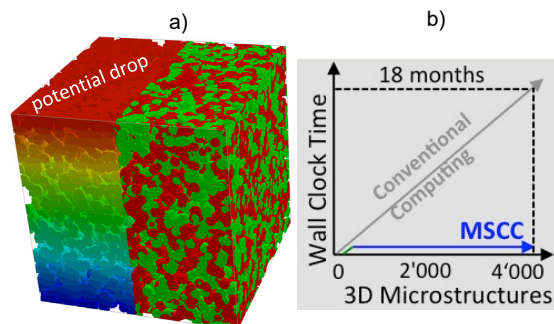


Abb. 1: a) Virtuelle Titanat/CGO-Struktur einer SOFC-Anode mit simuliertem Potentialabfall, b) Vergleich der Rechenzeit mit klassischem und MSCC-Ansatz.

Allerdings begrenzen lange Rechenzeiten oft den Einsatz von grossen Parameterstudien. In einer Zusammenarbeit von der ZHAW, der Kaleidosim AG und der Math2Market GmbH wurden kürzlich neue Konzepte für Massive Simultaneous Cloud Computing (MSCC) entwickelt, die den Zugang zu nahezu unbegrenzten Rechenressourcen ermöglichen. Tausende von Mikrostrukturen können parallel berechnet werden. Für eine Parameterstudie mit beispielsweise  $10^3$  -  $10^4$  3D-Szenarien, wie in Abb. 1 b) visualisiert, beträgt die Rechenzeit für stochastische Simulationen und zugehörige virtuelle Tests mit einem klassischen Ansatz auf einem lokalen Server typischerweise mehr als 1 Jahr. Im Gegensatz dazu ist die Rechenzeit mit MSCC nahezu unabhängig von der Anzahl der Parameterkombinationen und reduziert sich daher auf nur 1–2 Tage.

Ein Beispiel für eine Parameterstudie ist in Abb. 2 dargestellt, wobei die Zusammensetzung und Porosität einer Titanat/CGO-Anode variiert werden.

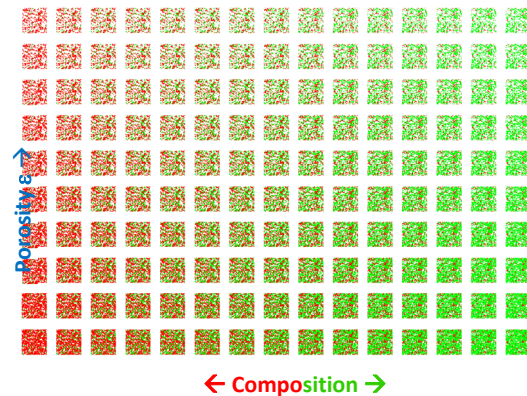


Abb. 2: Beispiel einer Parameterstudie für verschiedene Porositäten und Zusammensetzungen einer Titanat/CGO-Anode.

Die virtuellen Mikrostrukturen werden mit einer Kombination von 3D-Analysen und numerischen Simulationen charakterisiert. Anschliessend werden die Mikrostruktureigenschaften als Input für ein Elektrodenmodell verwendet, welches die Leistungsfähigkeit der Elektroden berechnet (Abb. 3). Die Analyse dieser Ergebnisse führt schliesslich zu neuen Designrichtlinien für optimierte SOFC-Elektroden.

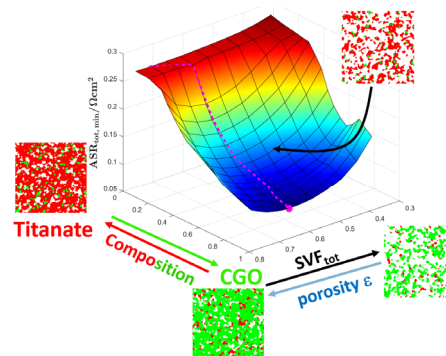


Abb. 3: Flächenspezifischer Anodenwiderstand als Funktion der Porosität und Zusammensetzung einer Titanat/CGO-Anode.

## 1.5 Modellbasierte Optimierung von MIEC-SOFC-Anoden

**Kosten und Lebensdauer sind zurzeit die limitierenden Faktoren für den breiteren Einsatz von Festoxid-Brennstoffzellen (SOFC) mit Erdgas zur kombinierten Erzeugung von elektrischem Strom und Wärme. Darum ist eine systematische Optimierung von Materialien und Zell-Design erforderlich, um die Effizienz und Lebensdauer zu steigern. In unserem Ansatz setzen wir auf digitales Materialdesign (DMD), wobei Methoden der Multiphysik-Simulation, 3D-Mikrostrukturcharakterisierung (Tomographiedaten), und elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS) kombiniert werden. Basierend auf dem DMD-Ansatz werden die Beziehungen zwischen Materialeigenschaften, Mikrostruktur, Zell-Design und Performance auf einem quantitativen Level erarbeitet. Dieser Ansatz ermöglicht die Definition von Design-Richtlinien für optimierte Elektroden und beschleunigt den Innovationszyklus für zukünftige SOFC-Geräte.**

Mitwirkende: P. Marmet, L. Holzer, T. Hocker, J. Brader, J. Grolig, H. Bausinger, A. Mai  
 Partner: Hexis AG  
 Finanzierung: Bundesamt für Energie (BFE)  
 Dauer: 2019–2022

Für die nächste Generation von SOFC (Solid Oxide Fuel Cells) verlangt der Markt nach höherem Wirkungsgrad, längerer Lebensdauer und niedrigeren Systemkosten. Um diesen Anforderungen gerecht zu werden, arbeiten wir an neuen Anodenkonzepten, die auf Mischleitern (mixed ionic and electronic conductors, MIEC) wie dotiertem Ceroxid und Titanat-Materialien basieren. Aufgrund der komplexen physikalisch-chemischen Prozesse, die den Gas-transport in den Poren, den Transport von Ionen und Elektronen in der Ceroxidphase, die Brennstoffoxida-tionsreaktion an der Oberfläche des Ceroxids usw. beinhalten, gibt es zahlreiche entgegengesetzte Anfor-derungen, welche den Entwicklungsprozess erschweren. Für eine systematische Optimierung des Systems sind daher ausgefeilte Methoden erforderlich, die sowohl mathematische Modelle als auch experimentelle Methoden umfassen.

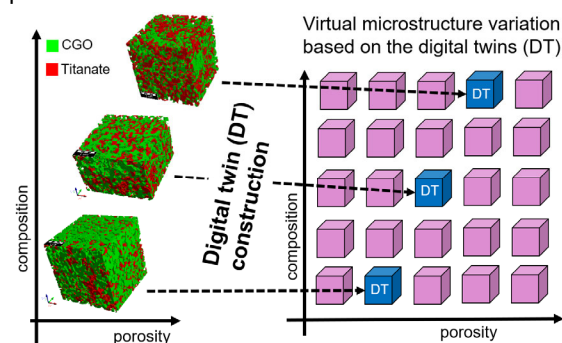


Abb. 1: Stochastische digitale Zwillinge mit passenden Mikrostrukturparametern werden für eine kleine Anzahl realer Mikrostrukturen konstruiert und ermöglichen eine virtuelle, aber realistische Mikrostrukturvariation für einen grossen Parameterraum.

In der SOFC-Forschung ist die elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS) ein wesentliches Charakterisierungswerkzeug, das als Grundlage für die Materialoptimierung auf Elektroden-, Zellen- und Stack-Level dient. Am ICP entwickelte Multiphysik-Simulationsmodelle mit AC- und DC-Modi ermöglichen die

Simulation der EIS-Spektren sowie des DC-Verhaltens während des normalen Zellbetriebs. Damit werden ein grundlegendes Verständnis der komplexen Prozesse und eine Separierung der EIS-Spektren erreicht. Mit dem digitalen Materialdesign-(DMD)-Ansatz kann der Effekt von Mikrostrukturvariationen erfasst werden. Reale Mikrostrukturen werden dazu mit FIB-Tomographie für eine kleine Anzahl von fabrizierten Zellen mit unterschiedlicher Zusammensetzung und Porosität erfasst (Abb. 1 links). Stochastische digitale Zwillinge mit passenden Mikrostrukturparametern werden für jede reale Struktur konstruiert, wie in Abb. 1 (rechts) und Abb. 2 dargestellt. Auf dieser Basis können Mikrostrukturen auf eine realistische Weise virtuell variiert werden. Die Mikrostrukturanalyse ermöglicht die Quantifizierung morphologischer Merkmale (Tortuosität, Porosität usw.) und der damit verbundenen Transporteigenschaften. Mit dem Multiphysik-Simulationsmodell kann schliesslich der Einfluss der Mikrostrukturvariation auf die Zellenleistung berechnet werden.

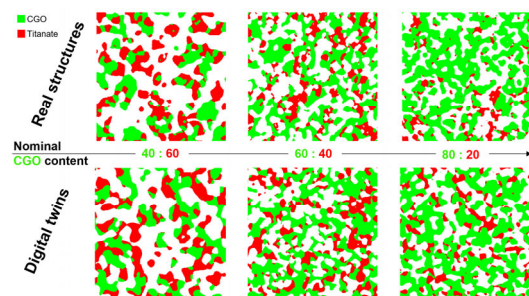


Abb. 2: Visueller Vergleich der realen Mikrostrukturen mit den zugehörigen digitalen Zwillingen.

Indem die Beziehung zwischen Materialeigenschaften, Mikrostruktur, Zelldesign und Leistung hergestellt wird, können Richtlinien für ein neues Anodenmaterialdesign abgeleitet werden. Dies ermöglicht eine schnellere und systematischere Entwicklung neuer SOFC-Elektroden.

## 1.6 Digitales Mikrostruktur Repository (DMR) für Daten-basierte Entwicklung von Energiematerialien

Die zunehmende Digitalisierung in der modernen Materialentwicklung auf Mikrostrukturebene generiert einen immer grösser werdenden Bedarf an 3D-Bilddaten aus Mikro-Tomographie. Um diesen Bedarf besser abzudecken, hat die ZHAW in Zusammenarbeit mit der Math2Market GmbH angefangen, ein Digitales Mikrostruktur Repository (DMR) aufzubauen. Dieses soll der Forschungsgemeinschaft für die Speicherung, den Austausch und die Organisation von Tomographiedaten zur Verfügung stehen. Das DMR fokussiert insbesondere auf Bilddaten von Energiematerialien, wie beispielsweise Elektroden von Batterien oder Brennstoffzellen.

Mitwirkende: L. Holzer, P. Marmet, V. C. Klaas, A. Fürholz  
 Partner: Math2Market GmbH  
 Finanzierung: Eurostars  
 Dauer: 2021–2023

Konventionelle Materialentwicklungen basieren typischerweise auf der Analyse von experimentellen Daten. Dabei ist jedoch meistens der Parameterraum, welcher mit einem vertretbaren zeitlichen und finanziellen Aufwand abgedeckt werden kann, stark eingeschränkt. Eine interessante Alternative stellt das Digitale Material Design (DMD) dar, wobei moderne Methoden wie Tomographie, Bildanalyse, stochastische Geometrie und multi-physikalische Simulation miteinander kombiniert werden. Abbildung 1 zeigt ein Beispiel einer DMD-Methoden-Kombination, welche u.a. bei der Mikrostruktur-Optimierung von Brennstoffzellen-Elektroden eingesetzt wird. Mit dieser Methodenkombination wird eine Reihe von quantitativen Zusammenhängen beschrieben, beginnend mit den Parametern der Materialherstellung, über die entsprechenden Mikrostruktur- und Materialeigenschaften bis hin zur Elektrodenleistung. Im Unterschied zum konventionellen Ansatz kann mit DMD ein viel grösserer Parameterraum effizient beschrieben werden. Dabei muss aber beachtet werden, dass eine realistische Vorhersage der Elektrodenleistung nur gewährleistet ist, wenn die entsprechenden Modelle vorgängig mit experimentellen Daten kalibriert und validiert worden sind. Für DMD-basierte Mikrostrukturentwicklungen ist es besonders wichtig, dass die stochastischen Mikrostrukturmodelle gestützt auf experimentellen 3D-Daten aufgebaut werden. Tomographiemethoden werden heute zwar standardmässig eingesetzt für Mikrostrukturuntersuchungen. Trotzdem stehen die erzeugten 3D Bilddaten oft nicht für eine allgemeine Weiterverwendung durch die Forschungsgemeinschaft zur Verfügung. Dieser Mangel an Datenaustausch stellt eine wichtige Einschränkung dar für eine breite und erfolgreiche Anwendung von Mikrostrukturentwicklungen mit DMD-Methoden. Um diesem Problem entgegenzuwirken, soll nun ein digitales Mikrostruktur Repository (DMR) aufgebaut werden. Wie auf Abbildung 1 dargestellt, spielt das Digitale Mikrostruktur Repository (DMR) eine wichtige

rolle im DMD-Arbeitsablauf, um die Speicherung, Organisation und den Austausch von allen relevanten Input- und Output-Daten sicherzustellen. Experimentelle 3D-Daten, welche die systematische Variation von Herstellparametern repräsentieren, werden benutzt, um stochastische Modelle aufzubauen, welche ihrerseits die effiziente Generierung von zahlreichen virtuellen 3D-Mikrostrukturen mit realistischen Eigenschaften ermöglichen. Die entsprechenden Elektrodenleistungen können dann mit geeigneten multiphysikalischen Modellen vorhergesagt werden. Basierend darauf können mit modernen Optimierungsmethoden (z. B. KI) neue Rezepturen für die Materialherstellung definiert werden.

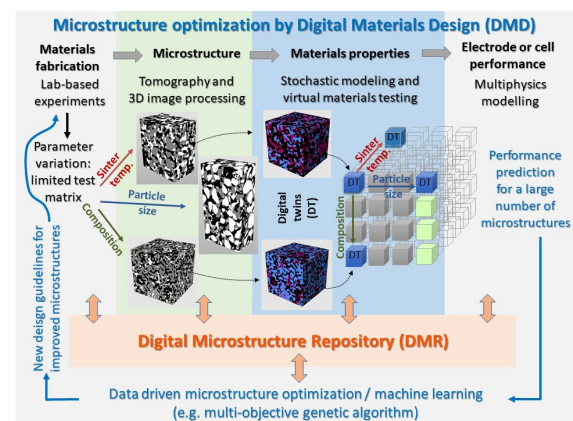


Abbildung 1: Das Digitale Mikrostruktur Repository (DMR) spielt eine zentrale Rolle im Arbeitsablauf für Digitales Material Design (DMD).

Die wichtigsten Merkmale des Digitalen Mikrostruktur Repository (DMR) sind wie folgt:

- Öffentliches Repository für 3D-Mikrostrukturdaten
- Fokus auf Energiematerialien
- Mit Metadaten (Herstellung, Charakterisierung etc.)
- Vollständig kompatibel mit den FAIR-Prinzipien
- Easy Upload, Auffind- und Wiederverwendbarkeit
- Besonders geeignet als Basis für DMD-Studien



## 1.7 PhysioCath: Verbesserte Mikrokatheter-Blutflusssensor

**Herz-Kreislauf-Erkrankungen (CVD) sind weltweit die häufigste Todesursache und betreffen jährlich 422,7 Millionen Menschen. Ischämie mit nicht-obstruktiver Koronararterie (INOCA) erhöht das Risiko schwerer kardialer Ereignisse mit einer 1,5-fach erhöhten Sterblichkeitsrate. Der Mangel an effektiven und genauen Instrumenten zur rechtzeitigen Bewertung von koronaren Beeinträchtigungen schafft einen ungedeckten Bedarf mit einer erheblichen Marktchance. Dieses Projekt zielt darauf ab, einen Blutflusssensor namens PhysioCath zu entwickeln, der auf dem Thermokonvektionsprinzip basiert und für eine effektive Diagnose von INOCA verwendet werden soll.**

Mitwirkende: M. Battaglia, S. Ehrat, T. Hocker, C. Kirsch, E. Knapp, G. Sartoris  
 Partner: Medyria AG, Ente Ospedaliero Cantonale (EOC), Universitätsspital Zürich (USZ)  
 Finanzierung: Innosuisse  
 Dauer: 2021–2023

Die Medyria AG entwickelt einen proprietären Sensor zur Messung lokaler, zeitaufgelöster Blutflussschwindigkeiten auf Basis des Prinzips der thermischen Konvektion. Der Sensor kann klein genug für ein mikro-endovaskuläres Gerät sein und wird mit einem handelsüblichen Drucksensor in einem speziell entwickelten Mikrokatheter, dem sogenannten PhysioCath, kombiniert. Das System ist so einfach, dass es während einer Angiographie verwendet werden kann, sodass der Bediener die verschiedenen Herzindizes in Echtzeit auf einem tragbaren Monitor sehen kann.

Basierend auf Messungen mit einem PhysioCath-Prototyp wurde festgestellt, dass unter externen Flussbedingungen übliche Herzindizes, die in der INOCA-Diagnostik verwendet werden, mit einer viel höheren Genauigkeit und Zuverlässigkeit im Vergleich zum aktuellen Stand der Technik erhalten werden konnten. Aufgrund des leistungsfähigeren Geschwindigkeitsmessprinzips konnten auch verfeinerte Herzindizes erhalten werden, was auf grosses Interesse bei den klinischen Partnern USZ und Cardiocentro Ticino gestossen ist.

Die Berechnung physiologischer Indizes erfordert die Messung von Strömungsgeschwindigkeit und Druck. Auf den ersten Blick scheinen diese Messungen einfache Aufgaben zu sein. Der pulsierende Blutfluss innerhalb des Koronararteriensystems ist jedoch sehr dynamisch und komplex. Auch die lokale Morphologie der Arterie beeinflusst die Strömung.

Für eine präzise Geschwindigkeits- und Druckmessung ist es daher notwendig, den Blutfluss und seine physikalischen Wechselwirkungen mit dem Sensor auf quantitativer Ebene zu beschreiben. Experimentelle Blutflussdaten zusammen mit Simulationsdaten werden an der ZHAW verwendet, um maschinelle Lernalgorithmen zu trainieren, um die Sensorsignale von Messfehlern zu kompensieren. Wenn eine Kompensation nicht möglich ist, sollten diese Algorithmen

zwischen *brauchbaren* und *unbrauchbaren* Sensorsignalen unterscheiden, um den Bediener aufzufordern, die Position der PhysioCath-Spitze entsprechend anzupassen. Auf diese Weise können Ärzte weiterhin ihre Standardinstrumente und -verfahren für die Angiographie verwenden, während sie vom PhysioCath zusätzliche Daten über mögliche INOCA-Beeinträchtigungen erhalten, die für eine frühe und genaue Diagnose von entscheidender Bedeutung sind.

Am ICP war die Anfangsphase des Projekts der Entwicklung eines FE/CFD-Modells des PhysioCath-Systems gewidmet, um eine große Menge an Simulationsdaten zum Trainieren des maschinellen Lernens bereitzustellen. Die größte Herausforderung dieses Wärmeströmungsmodells liegt in seiner Betriebsweise. Der Geschwindigkeitssensor basiert auf dem Anemometer-Prinzip. Bei einer Wärmequelle und einem Temperatursensor, die beide in oder in der Nähe einer Flüssigkeit eingetaucht sind, hängt die dem Heizgerät zugeführte elektrische Energie von der Strömungsgeschwindigkeit ab, indem eine konstante Temperatur über der Umgebungstemperatur am Sensor gehalten wird. Die Besonderheit des Medyria-Systems besteht darin, dass die Heizquelle auch als Temperatursensor verwendet wird, was realisiert werden kann, wenn die elektrische Leitfähigkeit des Heizwiderstands eine gewisse Temperaturabhängigkeit aufweist. Wenn man diese Abhängigkeit kennt, können wir die Temperatur des Sensors steuern und die Verlustleistung ergibt die Strömungsgeschwindigkeit.

Die numerische Herausforderung besteht darin, dass die Sensortemperatur nicht konstant ist und ihr Mittelwert extern geregelt wird und bis zu sechs Durchflusssensoren zur Kompensation von Signalfehlern verwendet werden können. Daher ist die Berechnung einer konsistenten Wärmeflusslösung alles andere als Standard.

## 1.8 Simulation der Hüllentemperatur eines Heissluftballons

Dieses Projekt hat zum Ziel, ein detailliertes physikalisches Modell eines Heissluftballons zu entwickeln, das seine Bewegung basierend auf realen Wetterdaten beschreibt. In einem vorgängigen Projekt wurde ein Modell zur Fahrtensimulation erstellt. In diesem Unterprojekt wird mittels computer-fluiddynamischen Simulationen die Temperatur-, Geschwindigkeits- und Druckverteilung ermittelt und eruiert, welche Parameter einen grossen Einfluss auf die genannten Verteilungen haben.

Mitwirkende: J. Stoll, T. Hocker, S. Ehrat  
 Partner: Air Ballonteam Stefan Zeberli GmbH  
 Dauer: 2021

Das computer-fluiddynamische (CFD) Modell basiert auf den Ballonangaben des *HB-QZT Homebuilt* von Stefan Zeberli. Da ein Heissluftballon achsensymmetrisch ist, kann zur Vereinfachung und Reduzierung der Simulationsdauer das System auf ein *Torstenstück* reduziert werden. Als Umgebungsbedingung wird der Umgebungsdruck verwendet. Zusätzliche Modell-Inputs für den Brenner sind dessen adiabate Flammentemperatur und basierend auf der Brennerleistung die Einströmgeschwindigkeit der Abgase.

Wichtige Grössen für die Performance eines Heissluftballons sind die Temperatur-, Druck- und die Geschwindigkeitsverteilung der Heissluft. Aus dem Innendruck folgt die Auftriebskraft, wohingegen die Geschwindigkeit sich auf die Temperaturverteilung und damit auf die Wärmeverluste auswirkt. Die Verteilung der Grössen können durch transiente Simulationen zeitabhängig dargestellt werden. Aufgrund grossräumiger Naturkonvektionsströmungen wird kein stationärer Zustand erreicht. Dies ist bei der Betrachtung der Temperaturverteilungen in Abbildung 1 gut zu erkennen.

Ein weiteres Ziel ist das Eruiere derjenigen Inputgrössen, die die Wärmeverluste über Ballonhülle und Opening am stärksten beeinflussen und so die maximal mögliche Fahrdauer des Ballons verändern. Untersucht wird das Luft-Brennstoffgemisch, die Brennerleistung, der Wärmeübergangskoeffizient an der Ballonhülle und der Durchmesser des Brenners. Durch das Erhöhen des Luft-Brennstoffgemischs reduziert sich die Flammentemperatur und erhöht die Einströmgeschwindigkeit. Die Reduzierung der Brennerleistung führt zu einer kleineren Wärmemenge. Durch den höheren Wärmeübergangskoeffizient werden die Wärmeverluste über die Ballonhülle erhöht. Durch das Erweitern des Brennerdurchmessers reduziert sich die Eintrittsgeschwindigkeit, was zu einer homogenen Verteilung der Temperatur führt. Durch die CFD-Simulationen ist es möglich, die Temperatur-, Druck- und Geschwindigkeitsverteilungen der Heissluft so zu verändern, dass daraus optimierte Fahreigenschaften resultieren. Zusätzlich können wichtige unbekannte Grössen, wie beispielsweise Isolationseffekte, nah an der Hüllennenseite bestimmt und in weitere Berechnungen berücksichtigt werden.

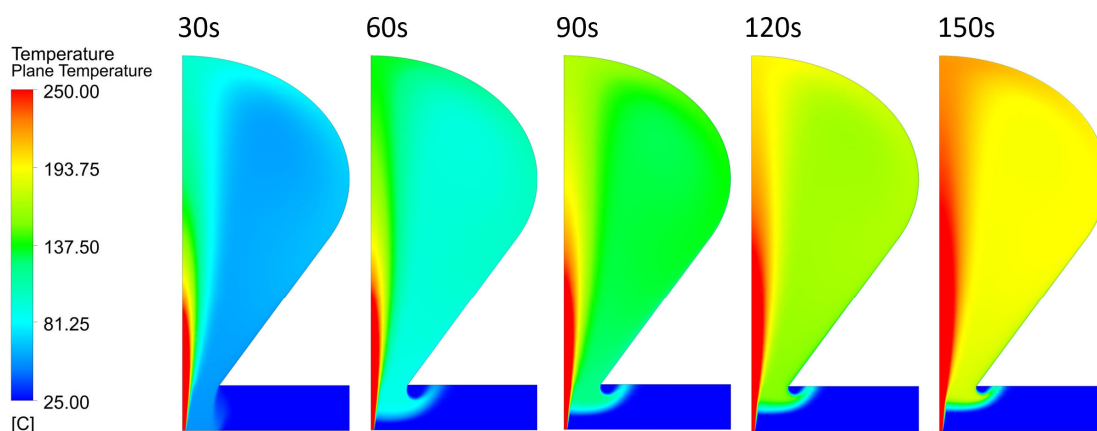


Abbildung 1: Darstellung der Temperaturverteilung in einem Heissluftballon über einen Zeitraum von 30s bis 120s.

## 1.9 Schlierenfotografie: Strömungsanalyse beim WIG-Schweissen

Die Schlierenfotografie bildet die örtliche Schwankung des Brechungsindex einer Flüssigkeit oder eines Gases ab. Hierbei lassen sich kleinste Luftströmungen, welche durch unterschiedliche Gasdichten und -temperatur hervorgehen, visualisieren. Mit diesem Verfahren soll die Schutzgasströmung beim WIG-Schweissen quantitativ untersucht und für zukünftigen Anwendungen optimiert werden.

Mitwirkende: S. Ehrat, T. Hocker  
 Partner: Wolfram Industrie GmbH  
 Finanzierung: Innosuisse  
 Dauer: 2021–2022

Beim Wolfram-Inertgas-Schweissverfahren, kurz WIG, entsteht ein Lichtbogen zwischen der Wolfram-Elektrode und dem zu schweisenden Bauteil. Beim gesamten Schweißprozess ist die Wolfram-Elektrode von einem Schutzgas, meist Argon, umgeben, um diese vor einer Oxidation durch den Luftsauerstoff zu schützen. In der Theorie bleibt somit die Elektrode intakt.

Trotzdem führen unterschiedlichste Einflüsse dazu, dass die Wolfram-Elektrode eine Oxidation erfährt. In Abbildung 1 sind drei Schweißelektroden abgebildet, welche sich für unterschiedliche Zeiten im Einsatz befanden. Hierbei ist deutlich zu sehen, dass die Elektrode mit zunehmender Einsatzzeit eine deutlichere Oxidation an der Spitze aufweist. Folglich liegt die Vermutung nahe, dass das Schutzgas die Elektrode nicht perfekt gegen die Umgebungsluft abschirmt.

Somit soll versucht werden, mittels Schlierenfotografie [1] die Schutzgasströmung während dem Schweißprozess zu visualisieren. Hierfür hat die Wolfram Industrie GmbH ein Testsetup aufgebaut, mit dem die ersten Schlierenvideos entstanden sind (siehe Abbildung 2). Solche Schlierenvideos liefern aber nur eine qualitative Aussage über die Schutzgasströmung.



Abbildung 1: Von links nach rechts TIG-Schweißelektroden nach 30, 60 sowie 90 Minuten Einsatzzeit. Deutlich sichtbar sind die Oxidationsspuren an der Elektrodenspitze.

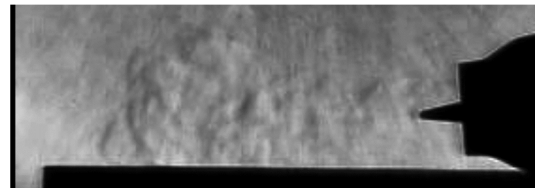


Abbildung 2: Schlierenfotografie einer Schutzgasströmung aus einer WIG-Düse über eine flache Platte, ohne Lichtbogen und ohne Bestromung der Elektrode.

Seit wenigen Jahren bieten algorithmische Analysen von Schlierenvideos, die sogenannte *quantitative Schlierenfotografie* [2], nun die Möglichkeit, aus Schlierenvideos lokale, vektorielle Strömungsgeschwindigkeiten sowie lokale Temperaturen zu extrahieren. Mit PIVlab [3], einem open-source Matlab-Addon für *particle image velocimetry*, soll in einem ersten Schritt versucht werden, diese Schlierenvideos auszuwerten.

Hierfür wurde das Schlierenvideo aus Abbildung 2 mithilfe von PIVlab ausgewertet und über die gesamte Aufnahmezeit ein Mittelwert gebildet (siehe Abbildung 3). Diese Auswertung zeigt ein hervorragendes Bild der mittleren Strömungsgeschwindigkeit und deren Verlauf (rote Strömungslinien) auf.

Somit ist dieses Tool für die Auswertung der Schutzgasströmungen für die unterschiedlichsten Umgebungen ideal. Daher kann dieses Verfahren bei der Gestaltung zukünftiger Gasdüsen und deren Einsatzgebiet behilflich sein.

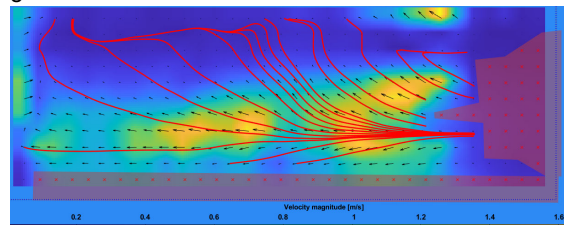


Abbildung 3: Auswertung der Schlierenfotografie aus Abbildung 2 mittels PIVlab [3]. Die Abbildung zeigt die mittlere Strömungsgeschwindigkeit über einen Aufnahmezeitraum von 145 Millisekunden bei 8'000 Frames pro Sekunde. Die Geschwindigkeiten sind farblich und einige Strömungslinien rot dargestellt.

### Literaturverzeichnis:

- [1] G. S. Settles, <https://www.springer.com/de/book/9783540661559>
- [2] G. S. Settles and M. J. Hargather, <https://doi.org/10.1088/1361-6501/aa5748>
- [3] PIVlab: <https://pivlab.blogspot.com>

## 1.10 Nichtlineare Thermomechanik des Oberflächenwachstums für additive Fertigungsanwendungen

Die additive Fertigung ist eine revolutionär entwickelte Technologie, die in verschiedenen Branchen eine immer größere Rolle spielt. Wir erstellen ein allgemeines Modell des thermoelastischen Oberflächenwachstums, bei dem der Vorgang des Hinzufügens von Material an die Grenze des Werkstücks mit den Erwärmungseffekten während der Erstarrung des hinzugefügten Materials gekoppelt wird

Mitwirkende: Y. Safa  
 Partner: A. Yavari, Georgia Tech Institute, USA  
 Finanzierung: Schweizerischer Nationalfonds (SNF) Scientific Exchange Programme  
 Dauer: 2019–2022

Die additive Fertigung, meist bekannt als 3D-Druck, hat bereits zahlreiche Anwendungen gefunden, die von der Hobbykunst bis zur Präzisionsfertigung in verschiedenen Branchen wie Maschinenbau, Luft- und Raumfahrt und Medizin reichen. Die Kontrolle der Eigenspannungen ist von entscheidender Bedeutung, um die Prozessparameter so zu gestalten, dass das hergestellte Teil die erforderlichen Eigenschaften unter den jeweiligen Arbeitsbedingungen erfüllt. Die hohen Temperaturen und die natürliche Abkühlung, denen das Teil während des additiven Fertigungsprozesses ausgesetzt ist, verursachen grosse Dehnungen und können zu einem hohen Mass an Eigenspannungen führen. Dies kann zu einer starken Verformung des Teils, Massungenauigkeiten und sogar zu Rissen im fertigen Objekt führen. Unter solchen Bedingungen sprengt das Problem der additiven Fertigung den Rahmen der Anwendung der linearisierten Elastizität. Wir erstellen ein allgemeines Modell des thermoelastischen Oberflächenwachstums, bei dem das Oberflächenwachstum mit der maschineninduzierten Erwärmung und der natürlichen Abkühlung während des Erstarrungsprozesses des hinzugefügten Materials gekoppelt ist. Für solche Strukturen ist die Kenntnis der mechanischen Eigenschaften der Bestandteile in ihrer spannungsfreien Konfiguration nicht ausreichend. Die Verteilung der Eigenspannungen hängt ausdrücklich vom Akkretionsprozess ab, z. B. von der Anfangstemperatur des hinzugefügten Materials zum Zeitpunkt des Anbringens, der Akkretionsgeschwindigkeit, der Vorgeschichte der Belastung usw. (Abbildung 1). In [1] wurde eine geometrische Theorie der nichtlinearen Akkretionsmechanik für ein symmetrisches Oberflächenwachstum von zylindrischen und kugelförmigen Körpern eingeführt. Diese Theorie wurde für die Analyse mehrerer Modellprobleme verwendet.

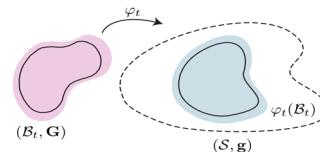


Abbildung 1: Nichtlinearer elastischer Körper, der einer Akkretion unterliegt. Die Referenzkonfiguration ist ein zeitabhängiger Satz und die Materialmetrik ist nicht a priori bekannt.

Später wurde sie auf nicht-symmetrische Akkretion in Verbindung mit der Wärmeleichung verallgemeinert [3]. In dem vorgeschlagenen Forschungsprogramm wird die Theorie von [1,2] erweitert, um das Twist-Fit-Problem der nichtlinearen Elastizität zu analysieren (siehe Abbildung 2). Genauer gesagt, betrachten wir eine endliche kreisförmige Welle aus einem inkompressiblen Festkörper, der im entspannten Zustand isotrop, transversal isotrop oder orthotrop sein kann. Wir nehmen an, dass diese Welle unter einem zeitabhängigen Drehmoment  $T(t)$  steht, während spannungsfreie Schichten auf den zylindrischen Rand der Welle gedruckt werden. Wir interessieren uns für i) die Eigenspannungsverteilung in der Welle, ii) ihre entspannte Form nach der Entlastung, iii) ihre Reaktion (Spannungsverteilung und Verdrehungswinkel) unter einem gegebenen statischen Drehmoment, nachdem sie additiv hergestellt wurde.

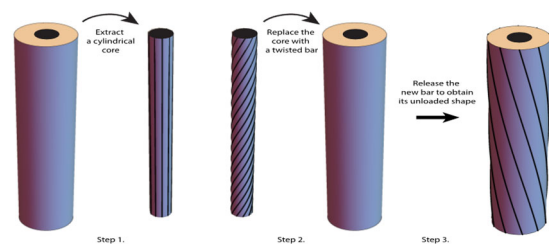


Abbildung 2: Die Torsionspassung: Ein zylindrischer Stab wird entfernt (Schritt 1.) und durch einen Stab gleicher Höhe und gleichen Radius ersetzt, der jedoch verdreht ist (Schritt 2.). Nach dem Lösen (Schritt 3) entwickelt der Verbundstab Eigenspannungen.

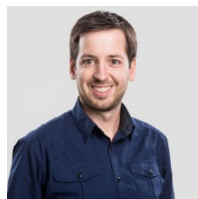
- [1] F. Sozio and A. Yavari, Nonlinear mechanics of surface growth for cylindrical and spherical elastic bodies. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 98:12 – 48, 2017.
- [2] F. Sozio and A. Yavari, Nonlinear mechanics of accretion, *Journal of Nonlinear Science* 29(4), 2019, 1813-1863
- [3] F. Sozio, M. F. Shojaei, S. Sadik, and A. Yavari, Nonlinear mechanics of thermoelastic accretion, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)* 71(3), 2020, 87.

## 2 Elektrochemische Zellen und Mikrostrukturen

Brennstoffzellen sind ein herausragendes Beispiel für elektrochemische Zellen. Sie verwandeln Treibstoffe wie Wasserstoff, Erdgas oder Methanol in elektrische Energie und Hitze. Brennstoffzellen können an Stelle von Batterien in Elektrogeräten verwendet werden, zur kombinierten Erzeugung von Hitze und Elektrizität in Haushalten und als Energiequelle in elektrischen Fahrzeugen. Wegen ihres flachen Designs können Brennstoffzellen leicht skaliert werden, indem sie zu Serien in der Form von Stapeln zusammengefasst werden. Elektrische Wirkungsgrade von über 60 % sind möglich, was deutlich über denen anderer dezentralisierter Energieerzeugungstechnologien liegt. Redox-Flow-Batterien gelten als vielversprechende Energiespeichertechnologie. Diese Batterien sind hocheffizient und bieten eine Energiespeicherlösung für fluktuierende Energie aus Windkraftanlagen und Photovoltaikzellen.

Das ICP unterstützt den Fortschritt bei der Entwicklung von elektrochemischen Zellen durch die Entwicklung von Multiphysik-Computermodellen. Grundsätzlich kann uns das Modellieren dabei helfen, die Kopplung von chemischen, thermischen, elektrischen, mechanischen und strömungstechnischen Prozessen besser zu verstehen mit dem Ziel, Schwächen des Systems zu erkennen und Design-Verbesserungen anzubieten. Häufig basieren diese Modelle auf detaillierten Informationen über die Mikrostrukturen der untersuchten Materialien. Deshalb ist beispielsweise die Charakterisierung von Gas-Diffusionsschichten und der Elektrolyt-Mikrostruktur in 2D oder 3D ein integraler Bestandteil unserer Modellierungsarbeiten.

Neben Brennstoffzellen und Redox-Flow-Batterien arbeiten wir auch an der Modellierung von Perowskit-Solarzellen und photoelektrochemischen Zellen (PECs), welche die Sonnenenergie zur Spaltung von Wasser und so zur Herstellung von Wasserstoff als Treibstoff verwenden. Die meisten Forschungsprojekte entstehen in Zusammenarbeit mit unseren strategischen Partnern Hexis AG in Winterthur (SOFC), Paul Scherrer Institut in Villigen (PEFC), EPFL in Lausanne (Wasserstoffherzeugung) und Universität Ulm (virtuelle Mikrostrukturen).



D. Bernhardsgrütter



R. Schärer



J. Schumacher



J. Włodarczyk



## 2.1 Makroskopische Zellmodelle für organische Redox-Flow-Batterien

Redox-Flow-Batterien (RFBs) sind eine vielversprechende Technologie für die stationäre Speicherung von Energie, die aus erneuerbaren Energiequellen stammt. Die Verwendung reichlich vorhandener, kostengünstiger organischer Moleküle stellt eine attraktive Alternative zu herkömmlichen Elektrolyten auf Metallbasis dar. Allerdings ist die Identifizierung gut geeigneter Verbindungen für RFBs aufgrund des großen verfügbaren chemischen Raums eine Herausforderung. Im Rahmen des europäischen Horizon-2020-Projekts SONAR wird ein Multiskalen-Modellierungs- und Optimierungs-Framework entwickelt, welches Hochdurchsatz-Screenings chemischer Verbindungen als auch die Optimierung von RFB-Komponenten und des gesamten Systemdesigns ermöglicht. Am ICP werden makroskopische Modelle entwickelt, die eine effiziente Simulation wichtiger physikochemischer Prozesse innerhalb von RFB-Zellen erlauben.

Mitwirkende: R. P. Schärer, G. Mourouga, J. Włodarczyk, J. O. Schumacher  
 Partner: ICT, SCAI, DTU, LRCS, KIT, UNSW, JenaBatteries GmbH  
 Finanzierung: European Union's Horizon 2020 Research and Innovation Programme  
 Dauer: 2020–2023

Eines der Hauptziele des SONAR-Projekts [1] ist die Identifizierung vielversprechender Verbindungen für organische RFBs, um die kommerzielle Nutzung von sicheren und kosteneffizienten Energiespeichern zu beschleunigen.

Die am ICP entwickelten makroskopischen Kontinuumsmodelle für elektrochemische RFB-Zellen beschreiben die thermodynamischen Kräfte und Flüsse von Masse und Ladung, die elektrochemischen Reaktionen des aktiven Materials in den porösen Elektroden, sowie die kritischen Transportphänomene durch die Membran.

Unser 0D-U-I-SoC-Zellmodell prognostiziert die Zellleistung in Abhängigkeit vom Ladezustand (SoC) der Batterie und der elektrischen Stromdichte. Das Modell berücksichtigt die wichtigen Aktivierungs- und Konzentrationsüberspannungen an der Elektrodenoberfläche sowie den elektro-osmotischen Fluss durch die Membran. Dank der Dimensionsreduktion auf 0D kann das Modell in Echtzeit ausgewertet werden.

In Abb. 1 ist die durch das 0D-U-I-SoC-Modell vorhergesagte Leistungsdichte einer RFB-Zelle als Funktion des Ladungszustands (SoC) und der elektrischen Stromdichte dargestellt. In Zusammenarbeit mit der JenaBatteries GmbH wurden Validierungsstudien mit einer RFB-Zelle in Laborgröße unter Verwendung des MV/TEMPTMA-Systems durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen eine vielversprechende Übereinstimmung zwischen dem Modell und den experimentellen Daten für Lade-Entlade- und Polarisations-Versuche, siehe Abb. 2. Kürzlich haben wir eine detaillierte Modellbeschreibung in einer begutachteten Zeitschrift veröffentlicht [2]. Die Modellimplementierung in Mathematica ist als Open-Source-Software auf unserem GitHub-Repository verfügbar [3].

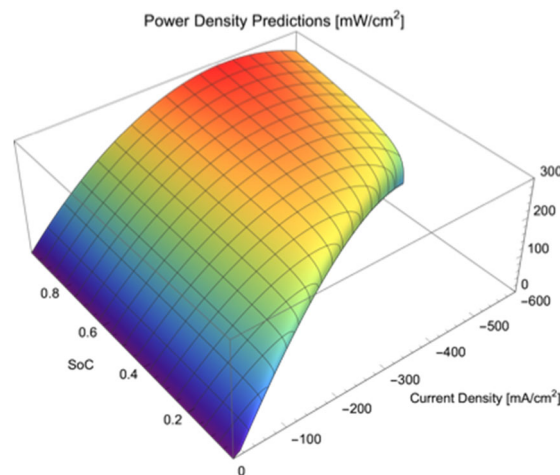


Abb. 1: Vorhergesagte Zell-Leistungsdichte als Funktion des Ladezustands (SoC) und der elektrischen Stromdichte.

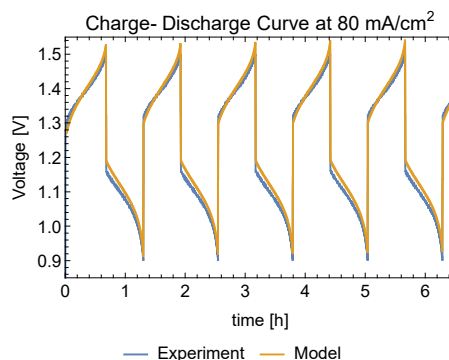


Abb. 2: Prognostizierte Zellspannung für Lade-Entlade-Zyklen bei einer konstanten Stromdichte (orange) zusammen mit den experimentellen Zellspannungswerten (blau).

### Literatur:

- [1] SONAR project web site: <https://www.sonar-redox.eu/>
- [2] G. Mourouga, R. P. Schärer, X. Yang, T. Janoschka, T. J. Schmidt, and J. O. Schumacher, *Electrochimica Acta* (2022).
- [3] Repository: <https://github.com/Isomorph-Electrochemical-Cells>

## 2.2 Bestimmung des Einflusses der porösen Elektrodenmesostruktur auf die elektrochemische Leistung von Redox-Flow-Batterien

Poröse Elektroden (PE) sind in der industriellen Elektrochemie allgegenwärtig, da mit ihnen hohe Stromdichten erzielt werden können und sie gleichzeitig eine relativ kompakte Grösse des elektrochemischen Reaktors ermöglichen. Ein Verständnis der makroskopischen Strömung des Elektrolyten in porösen Elektroden ermöglicht ein verbessertes Design der Elektrodenmesostrukturen. In dieser Studie verwenden wir vereinfachte und periodische PE-Geometrien auf der Mesoskala. Die Studie ist Teil des FlowCamp-Projekts [1] (ein vom Maria Skłodowska-Curie-Programm der Europäischen Union finanziertes Forschungs- und Ausbildungsprojekt) und des SONAR-Projekts [2].

Mitwirkende: J. K. Włodarczyk, R. P. Schärer, J. O. Schumacher  
 Partner: Fraunhofer ICT (Deutschland), unter anderen  
 Finanzierung: The European Union, Horizon 2020, Maria Skłodowska-Curie Actions  
 Dauer: 2018–2023

Redox-Flow-Batterien stellen eine vielversprechende Technologie für die Speicherung fluktuierender elektrischer Energie aus erneuerbaren Energiequellen dar. Die Komplexität der internen PE-Struktur wirft aus Sicht der theoretischen Analyse zahlreiche Probleme auf. Die Theorie periodischer flacher Elektroden ist gut verstanden. Dagegen erschwert das Zusammenspiel von unebenen Oberflächeneffekten und Transportprozessen in inhomogenen Medien die mathematische Analyse von porösen Elektroden. Das Verständnis der Auswirkungen der konvektiven Strömung im Inneren der Poren auf die elektrochemische Leistung von porösen Elektroden ist entscheidend für eine verbesserte Konstruktion und die Optimierung der Betriebsbedingungen.

Im Rahmen der europäischen Projekte FlowCamp und SONAR entwickeln wir derzeit eine systematische PE-Studie, indem wir einfache, periodische 2D- und 3D-Poren-Faser-Geometrien (Abb. 1) verwenden, die aus festen Fasern und Hohlräumen bestehen. Wir lösen dann die Transportgleichungen: die Stokes-Gleichung für die Elektrolytströmung und die Diffusions-Konvektions-Reaktions-Gleichung in einer hochskalierten Form unter Verwendung der *Volume Averaging-Methode* (VAM) [3]. Die Verwendung von VAM ermöglicht es uns, Mesostrukturmerkmale in unseren Modellen zu berücksichtigen, ohne auf rechenintensive direkte numerische Simulationen mit Geometrien zurückgreifen zu müssen, die hochauflösende Netze erfordern. Infolgedessen können wir die berechneten effektiven Transportparameter untersuchen, wie beispielsweise die effektive Diffusivität (Abb. 2), die sich als stark abhängig von der Reaktionsgeschwindigkeit erweist, die durch kinetische Parameter und die Elektrodenporosität ( $\epsilon$ ) gesteuert wird. Standardmethoden der Modellierung poröser Elektroden vernachlässigen häufig die Rolle der Mikrostruktur für verschiedene Leistungskennzahlen von Redox-Flow-Batterien.

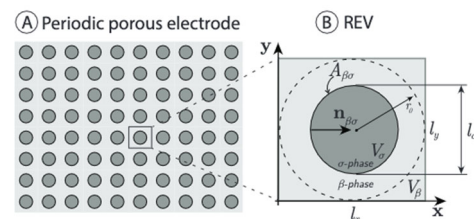


Abb. 1. A) Makroskopische Darstellung einer vereinfachten Geometrie poröser Elektroden. Es wurde eine periodische Struktur aus leitenden Fasern angenommen. B) das entsprechende repräsentative Symmetrieelement.

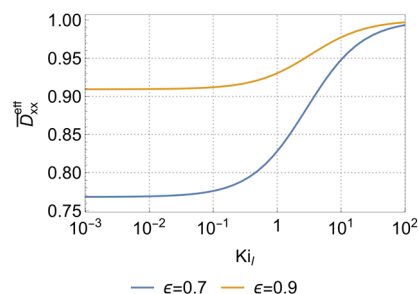


Abb. 2. Simulierte Kurven der effektiven Diffusivität in Abhängigkeit von verschiedenen kinetischen Zahlen für zwei verschiedene Elektrodenporositäten.

- [1] Project website: <https://www.flowcamp-project.eu/>  
 [2] Project website: <https://www.sonar-redox.eu/>  
 [3] S. Whitaker, The Method of Volume Averaging, vol. 13. Dordrecht: Springer Netherlands, 1999. doi: 10.1007/978-94-017-3389-2.

## 2.3 3-D-Modell des Wasser- und Wärmetransports in PEMFCs bei Verdunstungskühlung und Befeuchtung

Es wurde gezeigt, dass Verdampfung in Gasdiffusionsschichten (GDL) mit hydrophilen Linien eine gleichzeitige Kühlung und Befeuchtung in Protonenaustauschmembran-Brennstoffzellen (PEMFCs) ermöglicht. Das Ziel dieser Studie ist es, unser Verständnis der Verdunstungskühlung und -befeuchtung durch numerische Modellierung zu verbessern. Wir untersuchen die dominanten Wärme- und Wassertransportprozesse und analysieren die lokale Sensitivität der Simulationsresultate auf Änderungen der Betriebsbedingungen und Modellparametrierungen.

Mitwirkende: R. Herrendörfer, J. O. Schumacher  
 Partner: SCCER Mobility: Swiss energy competence center: Efficient technologies and systems for mobility, Paul Scherrer Institute (PSI)  
 Finanzierung: Innosuisse  
 Dauer: 2014–2021

Die Verdunstungskühlung ist ein vielversprechendes Konzept, um das Wasser- und Wärmemanagement in PEMFCs zu optimieren und dadurch die Kosten zu senken. Es basiert auf der Verdampfung von Wasser direkt in der Zelle, um eine gleichzeitige Befeuchtung und Kühlung zu ermöglichen [1-2].

Am ICP haben wir ein 3-D, makrohomogenes, nicht-isothermes Zweiphasenmodell entwickelt, um die dominanten Wärme- und Wassertransportprozesse während der Verdunstungskühlung und -befeuchtung zu untersuchen (Abbildung 1). Wir lösen Transportgleichungen für Gas, flüssiges Wasser, gelöstes Wasser, Wärme, Elektronen und Protonen.

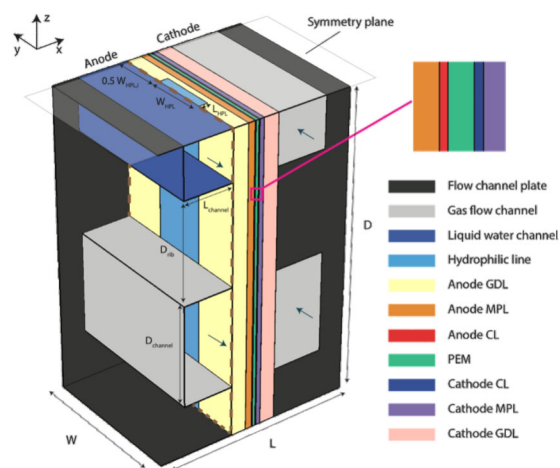


Abbildung 1: 3-D-Modellaufbau. Anodenströmungsfeld mit je einem Gas- und Flüssigwasserkanal, ein Kathodenströmungsfeld mit zwei Gaskanälen. Die Membranelektrodenanordnung umfasst die hydrophobe Anoden-Gasdiffusionsschicht mit einer hydrophilen Linie.

Die mit dem Basismodell erzielten Ergebnisse sind in Abbildung 2 dargestellt. Das Modell gibt den Wasser- und Wärmehaushalt einer verdunstungsgekühlten PEMFC wieder.

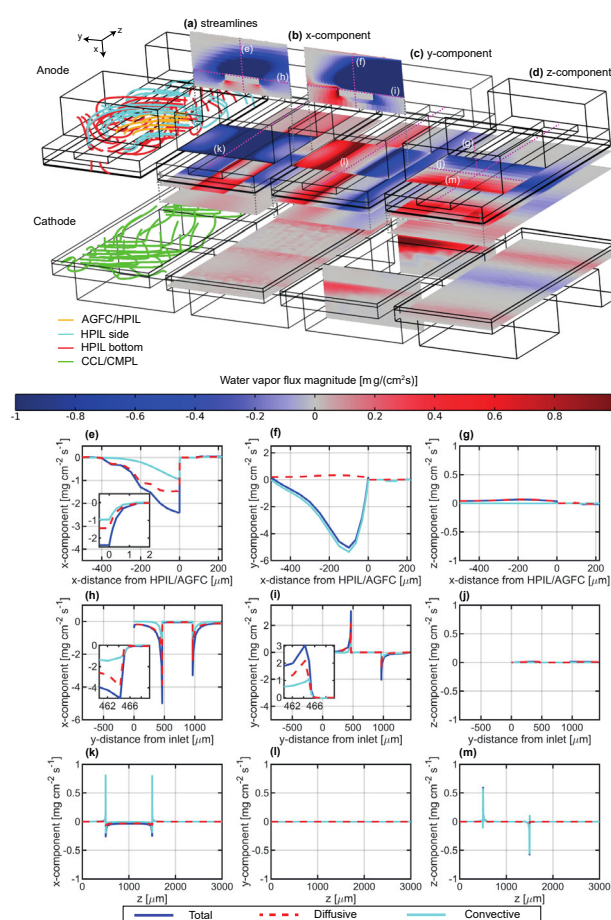


Abbildung 2: Ergebnisse des Basismodells: (a) Stromlinien des Wasserdampftransports, die an verschiedenen Domängengrenzen entstehen, wie in der Legende angegeben; Gesamtwasserdampf-Fluss in (b) x-Richtung (durch die Ebene), (c) y-Richtung (parallel zum Kanalfloss) und (d) z-Richtung (senkrecht zum Kanalfloss). (e-m) Profile der Wasserdampf-Flusskomponenten. Die magentafarbenen gestrichelten Linien in (a-b) zeigen die Lage der einzelnen Profile an.

[1] Cochet, M., A Forner-Cuenca, V. Manzi, M. Siegwart, D. Scheuble, and P. Boillat. Fuel Cells 18 (5): 619–26, 2018

[2] Cochet, M., A Forner-Cuenca, V. Manzi, M. Siegwart, D. Scheuble, and P. Boillat. JEC, 67 (8): 084518, 2020

[3] R. Herrendörfer, M. Cochet, J. O. Schumacher, special issue on proton exchange membrane fuel cells, accepted for publication in Energies.

# 3 Organische Elektronik und Photovoltaik

Organische Halbleiter erfreuen sich grosser Aufmerksamkeit seit 1987, als organische Leuchtdioden (OLEDs) von führenden Wissenschaftlern bei Kodak in den USA erfunden wurden. Nach mehr als 30 Jahren Forschung und Entwicklung und weltweiten Anstrengungen bei der Kommerzialisierung dieser Technik sind wir nun Zeugen einer grossen Bandbreite an OLED-Displays in Alltagsprodukten, die von Mobiltelefonen bis zu 77-Zoll-Fernsehern reichen.

Die besonderen Vorteile der OLED-Technik liegen in ihrer dünnen Bauweise, dem grossen Betrachtungswinkel, der Farbskala und hohen Effizienz bei der Energieumwandlung. OLEDs bestehen aus einer Sequenz von dünnen organischen Halbleiter-Schichten, die zwischen zwei metallischen Elektroden angebracht werden. Organische Halbleiter finden auch Beachtung als starke Lichtabsorber und Ladungstransportmaterialien in organischen Solarzellen, mit denen flexible PV-Module gebaut werden können. In den letzten Jahren waren organische Halbleiter auch der Schlüssel für die bahnbrechende Perowskit-Solarzelle, eine organisch-anorganische Hybrid-Technologie, welche die bedeutendste sich in Entwicklung befindende Photovoltaik-Technologie ist und auch ein grosses Potenzial bei LED-Anwendungen und Memristoren hat. Lumineszierende Quantenpunkte sind wichtige Bestandteile neuartiger Bildschirme, die wir ebenfalls charakterisieren. Tiefer in der unsichtbaren Bandbreite der elektromagnetischen Wellen ist die Terahertz-Photonik, ein wachsendes technisches Feld für nicht-invasive Diagnose-Anwendungen.

Das ICP betreibt Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der OLEDs, OPV, Perowskit-PV und nicht linearen optischen Kristalle für Terahertz-Photonik-Messsysteme. Im ICP-Labor stellen wir zu Forschungs- und Entwicklungszwecken OLEDs und neuartige Solarzellen in einem kleinen Rahmen her, zusätzlich haben wir ein neuartiges Terahertz-Photonik-Messsystem aufgebaut. Im unsichtbaren Spektralbereich der elektromagnetischen Wellen ist die Terahertz-Photonik angesiedelt als ein wachsendes technisches Feld für nicht invasive Diagnose-Anwendungen. Nebst numerischen Methoden zur Lösung von Modellgleichungen haben wir auch Erfahrungen gesammelt mit maschinellem Lernen. Dieses Kapitel gibt einen Überblick über die laufenden Forschungs- und Entwicklungsprojekte, die auf diesem interdisziplinären Forschungsgebiet des ICP ausgeführt werden.



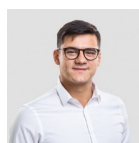
M. Auer



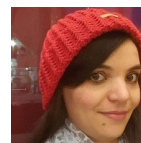
A. Bachmann



M. Battaglia



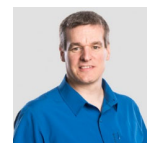
E. Comi



F. Ebadi



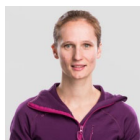
M. Jazbinsek



C. Kirsch



G. Kissling



E. Knapp



M. Mohammadi



K. Pernstich



U. Puc



M. Regnat



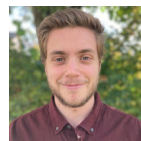
B. Ruhstaller



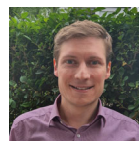
A. Sachan



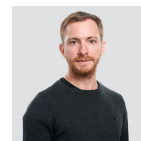
A. Schiller



M. Torre



W. Tress



O. Zbinden



S. Züfle



### 3.1 Neuartige Halbleiterbauelemente

**Wir arbeiten an der Bauteilphysik verschiedener neuartiger Halbleiterbauelemente. Dazu gehören organische und Perowskit-Solarzellen und LEDs. Unser Fokus liegt auf der Entwicklung neuartiger Charakterisierungstechniken Hand in Hand mit speziellen Simulationsansätzen. Das Ziel unserer Aktivitäten ist es, leistungsbegrenzende Prozesse besser zu verstehen, um bessere und langzeitstabile Bauelemente zu ermöglichen. Aktuell interessieren wir uns für die gemischt ionisch-elektronische Leitfähigkeit, die eine Besonderheit der Perowskit-Halbleiter darstellt. Neben der Zusammenarbeit mit Gruppen, die auf die Chemie und die Herstellung von Bauelementen spezialisiert sind, stellen wir eigene Solarzellen her und entwickeln Perowskit-Memristoren.**

Mitwirkende: F. Ebadi, M. Mohammadi, H. Moumine, A. K. Sachan, M. Torre, O. Zbinden, W. Tress  
 Partner: EPFL, LMU, LiU  
 Finanzierung: ERC Starting Grant  
 Dauer: 2020–2025

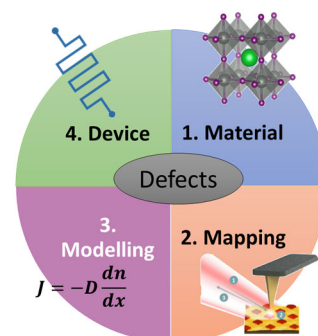
Metallhalogenid-Perowskite sind faszinierende Halbleiter, an denen erst seit zehn Jahren für Anwendungen in Solarzellen und LEDs geforscht wird. In dieser Zeit wurden Wirkungsgrade von Solarzellen erreicht, die mit den etablierten Solarzellentechnologien mithalten können. Aufgrund der einfachen und energiearmen Herstellungsprozesse arbeiten Startup- und etablierte Unternehmen an einer Kommerzialisierung von Perowskit-Solarzellen. Allerdings ist die Langzeitstabilität immer noch eine Herausforderung, die teilweise durch Verkapselungstechnologien angegangen werden kann. Andererseits hängen gewisse Schwachstellen mit eher Perowskit-inhärenten Eigenschaften zusammen, wie beispielsweise mobile Ionengitterdefekte, die sich im Betrieb bewegen und das elektrische Feld im Bauelement beeinflussen.

In diesem Projekt beabsichtigen wir, solche Defekte besser zu charakterisieren, zu modellieren, zu kontrollieren und nutzbar zu machen. Dafür stellen wir Solarzellen im Labormassstab her. Zur Charakterisierung verwenden wir optoelektronische Messungen wie Strom-Spannungs-Kurven und Impedanzspektroskopie in Abhängigkeit von Lichtintensität und Temperatur. In einem optischen Aufbau führen wir Photo- und Elektrolumineszenzmessungen an dünnen Schichten und kompletten Bauelementen durch. Über diese makroskopischen Messungen hinaus entwickeln wir Messungen auf der Nanoskala, die auf spitzenverstärkter Spektroskopie beruhen. Um die Daten dieser Experimente zu reproduzieren, wird Modellierung eingesetzt. Hier verwenden wir verfügbare Drift-Diffusions-Simulationen, wie sie in Setfos der Fluxim AG implementiert sind. Zusätzlich wollen wir, auch im Rahmen des DIZH, untersuchen, wie maschinelle Lernansätze unsere physikalischen Modelle ergänzen können.

Mit Hilfe unserer Simulationen werden wir memristive Bauelemente entwerfen und herstellen, die als Kandidaten für zukünftiges neuromorphes Computing gelten. Im Gegensatz zu den Solarzellen befinden

sich diese neuartigen Bauelemente noch im Stadium der Grundlagenforschung.

Zum jetzigen Zeitpunkt charakterisieren wir Solarzellenproben von Partnern an der EPFL. Unser Ziel ist es, die Auswirkungen von Oberflächenbehandlungen besser zu verstehen, die eingesetzt werden, um Leistungsverluste aufgrund von Defekten zu verringern und die Langzeitstabilität zu verbessern. Neben der Stabilität sind Perowskit-Solarzellen mit einem weiteren Problem konfrontiert, nämlich der Toxizität des verwendeten Elements Blei. Hier arbeiten wir mit Chemikern der LMU (Ludwig-Maximilians-Universität) in München zusammen. Sie entwickeln alternative Perowskit-Materialien, bei denen das Bleikation durch zwei andere Metallkationen ersetzt wird, wodurch sogenannte Doppelperowskite entstehen. Allerdings weisen diese Bauelemente bisher einen Wirkungsgrad von nur wenigen Prozent auf. Durch spannungsabhängige Messungen der spektralen Empfindlichkeit konnten wir feststellen, dass ein wesentlicher Verlustmechanismus an den Kontakten liegt, die nicht ladungsselektiv sind. Das bedeutet, dass bei hohen Spannungen sowohl negative als auch positive Ladungsträger am selben Kontakt gesammelt werden, was zu Strömen führt, die sich gegenseitig kompensieren und die Ausgangsleistung reduzieren.



sammelt werden, was zu Strömen führt, die sich gegenseitig kompensieren und die Ausgangsleistung reduzieren.

Abb. 1: Projektübersicht.

#### Weitere Informationen:

<https://www.zhaw.ch/de/engineering/institute-zentren/icp/organische-elektronik-und-photovoltaik/novel-semiconductor-devices/>



### 3.2 Neue Tools für die Charakterisierung von Quantenpunkt-Displays

Eine vielversprechende Technologie für den Einsatz in LCD-Bildschirmen sind sogenannte Quantenpunkte (Quantum Dots). Mit Hilfe von Quantenpunkten lässt sich die Hintergrundbeleuchtung verbessern, wodurch brillantere Farben entstehen und sich gleichzeitig der interne Aufbau vereinfacht. In diesem Projekt erweitern wir bestehende Simulationssoftware und entwickeln neue Messgeräte, um die Forschung und Entwicklung in diesem Bereich zu unterstützen.

Mitwirkende: K. P. Pernstich, M. Frioud, A. Bachmann, C. Kirsch, M. Regnat, B. Ruhstaller  
 Partner: Fluxim AG  
 Finanzierung: Innosuisse  
 Dauer: 2021–2024

In neueren LCD-Bildschirmen besteht die Hintergrundbeleuchtung nicht mehr aus einer Lichtquelle, die weisses Licht abgibt, z. B. einer weissen LED, sondern aus einer Kombination aus blauer LED und einem Quantenpunkt-(QD)-Film. Der QD-Film nimmt das blaue Licht auf und gibt es in einer der anderen Grundfarben, also rot oder grün, wieder ab, womit sich eine brillantere Farbwiedergabe ergibt.

Neben LCD-Bildschirmen haben sich auch organische Leuchtioden (OLEDs) als marktreife Technologie etabliert. Neben gewissen anderen Vorteilen bieten OLED-Bildschirme eine bessere Bildqualität als LCDs. Neueste Entwicklungen möchten nun die Vorteile beider Technologien nutzen und QD-Filme zusammen mit blauen OLEDs als neue Technologie einsetzen. Abbildung 1 illustriert diesen neuen Trend in der Display-Branche.

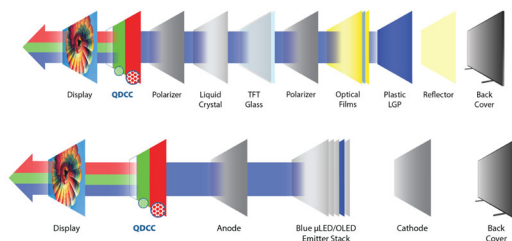


Abbildung 1: QD-Film in einem LCD-Bildschirm (oben) sowie in einem OLED Bildschirm (unten). Quelle: Nanosys Inc.

Um von dieser neuen Technologie profitieren zu können, haben sich koreanische und Schweizer Partnerorganisationen in diesem internationalen Innosuisse-Projekt zusammengeschlossen. Die schweizerische Partnerfirma Fluxim AG erweitert ihre Produkte im Bereich Messgeräte und Simulationssoftware. Die koreanische Partnerfirma entwickelt ein Verfahren, um die Quantenpunkte zu verkapseln und so haltbarer zu machen. Die akademischen Partner in Korea beschäftigen sich mit der Herstellung und Optimierung von blauen OLEDs und mit einem Tintenstrahl-Druckverfahren um die QD-Filme gezielt über einzelnen OLEDs anzubringen.

Am ICP beteiligen wir uns an der Weiterentwicklung eines Modells, um die Lichtausbreitung im Raum auch in Abhängigkeit von der Polarisationsrichtung des Lichts berechnen zu können und auch an der

Entwicklung eines Messgeräts zur detaillierten Untersuchung der QD-Filme bzw. der QD-OLEDs. Abbildung 2 zeigt den CAD-Entwurf dieses Geräts, mit dem die Schädigung von QD-Filmen bei verschiedenen Temperaturen und unter unterschiedlichen Umgebungsbedingungen wie einer inerten Stickstoffatmosphäre oder trockener/feuchter Luft gemessen werden kann. Abbildung 3 zeigt ein Beispielszenario des neuen Software-Prototyps für Lichtausbreitung.

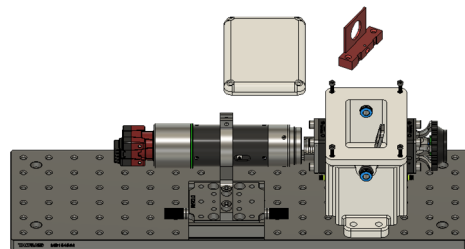


Abbildung 2: CAD Entwurf des Messgeräts mit Klimakammer, Probenhalter, Objektiv und Kamera.

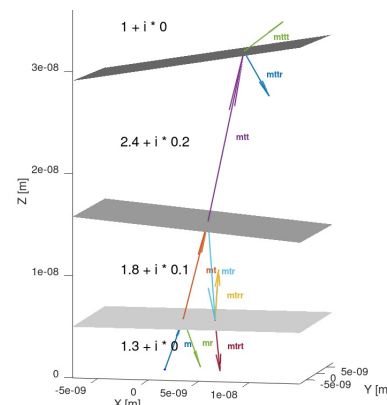


Abbildung 3: Rechenbeispiel für Lichtausbreitung durch eine Schichtfolge mit absorbierenden Medien mit Verfolgung des Polarisationszustands. Ein unpolarisierter Mutterstrahl (blau, beschriftet 'm') wird lanciert in einem nicht absorbierenden, untersten Medium. Die angegebenen komplexen Zahlen sind die zugehörigen Brechungsindizes der Medien. Für diesen Fall beträgt die Intensität des nach oben ausgekoppelten Strahls (grün, beschriftet 'mttt') 67 % der Intensität des Mutterstrahls und hat eine partielle p-Polarisation von 28 %.

### 3.3 Untersuchung des Ladungstransports in organischen Halbleitern mit elektrochemischen Methoden und theoretischen Modellen

Organische Halbleiter werden heutzutage in vielen verschiedenen technologischen Gebieten verwendet. Um hergestellte Produkte zu verbessern, müssen diese Materialien aber vollumfänglich verstanden werden. In unserem Projekt streben wir an, die organischen Halbleiter anhand elektrochemischer Messungen in Kombination mit Computersimulationen besser zu charakterisieren.

Mitwirkende: G. Kissling, E. Knapp, K. Pernstich  
 Partner: Fluxim AG  
 Finanzierung: Schweizerischer Nationalfonds (SNF)  
 Dauer: 2020–2022

Organische Halbleiter werden im Bildschirm- und Beleuchtungsbereich (OLED TVs und Lichtmodule) eingesetzt und kommen auch in neuartigen Transistoren, Sensoren, Computerspeicherelementen und Solarzellen zur Anwendung. Um die Anwendungen weiter zu optimieren, benötigt man ein besseres Verständnis der physikalischen Vorgänge und genauere Materialparameter.

In diesem multidisziplinären Projekt untersuchen wir organische Halbleiter mittels elektrochemischer Methoden und theoretischer multiphysikalischer Modelle. Das Projekt vereint die Modellier-Expertise des ICP mit elektrochemischer Grundlagenforschung. Ziel des Projekts ist es, eine Methode zu entwickeln, welche es ermöglicht, einige Eigenschaften und Materialparameter organischer Halbleiter zuverlässig zu eruiieren. Experimente werden es uns erlauben, einige Materialparameter der Halbleiter zu bestimmen, die enorm wichtig für eine detaillierte Modellierung sind und bisher gar nicht – oder nur sehr aufwendig – messbar waren. Gängige numerische Modelle können dann mit diesen Erkenntnissen verbessert werden.

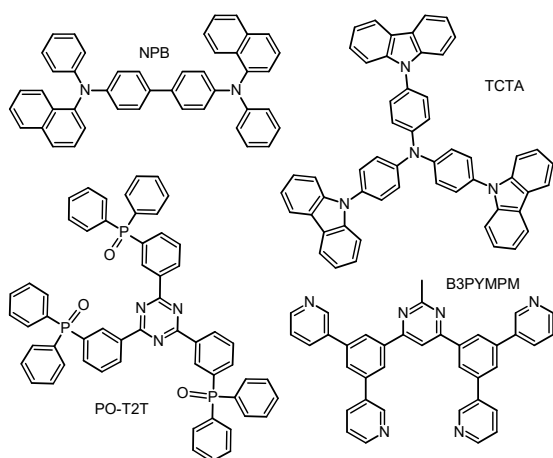


Abbildung 1: Darstellung der Molekularstrukturen von vier gängigen OLED Materialien.

In unserer Arbeit charakterisieren wir organische Halbleiter, bestehend aus Molekülen, wie zum Beispiel den in **Abbildung 1** dargestellten Materialien,

mittels elektrochemischer Messmethoden. Die Moleküle werden entweder in Lösung oder als Dünnschichten elektrochemisch charakterisiert und auf ihre Stabilität und Halbleitereigenschaften (z. B. die Eigenschaften des Valenz- (VB) und Leitbandes (LB) und die Anwesenheit von Störstellen) geprüft.

Die Positionen des Valenz- und Leitbandes wurden durch elektrochemische Experimente in Lösung ausführlich analysiert, wie in **Abbildung 2** illustriert wird, und stimmen gut mit den Literaturwerten überein, wie in **Abbildung 3** zu erkennen ist.

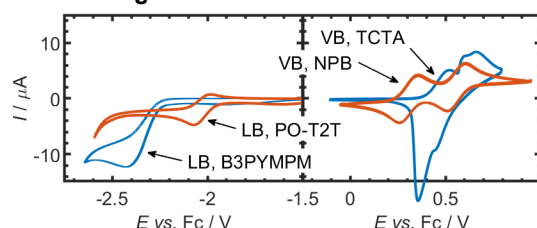


Abbildung 2: Zyklische Voltammetrie Messungen der verschiedenen OLED-Materialien.

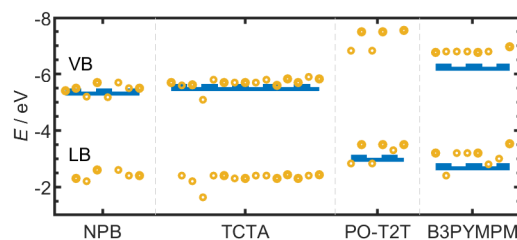


Abbildung 3: Valenz- und Leitbandpositionen der untersuchten OLED-Materialien (blaue Linien) im Vergleich mit Literaturwerten (gelbe Punkte).

Die Forschung im kommenden Jahr wird sich auf den Vergleich der Messungen in Lösung mit Messungen an Dünnschichten fokussieren und könnte Impulse liefern, die dazu beitragen, die gängigen Methoden der organischen Halbleiterforschung zu verbessern, indem genauere Modelle für die Materialcharakterisierung entwickelt werden können.

### 3.4 Multispektrale Bildanalyse und maschinelles Lernen für PV-Qualitätssicherung

**Für die Untersuchung von Solarzellen im Labormassstab und zur Gewinnung räumlich aufgelöster Informationen über die Zellqualität wird ein multispektraler Bildgebungsaufbau entwickelt. Mithilfe von maschinellem Lernen (ML) werden Parameter für ein physikalisches FEM-Modell ermittelt, das als digitaler Zwilling für weitere Optimierungen dient.**

Mitwirkende: M. Battaglia, E. Comi, C. Kirsch, E. Knapp, B. Ruhstaller  
 Partner: Fluxim AG, Solaronix AG  
 Finanzierung: Innosuisse  
 Dauer: 2022–2024

An Solarzellentechnologien der nächsten Generation wird intensiv geforscht, um die Effizienz weiter zu steigern und die Kosten der photovoltaischen Energieerzeugung zu senken. Bei der Herstellung großflächiger Solarzellen steigt die Wahrscheinlichkeit des Auftretens von Defekten aufgrund der Inhomogenität der abgeschiedenen Schichten. Um den Übergang von der Zellforschung im Labormassstab zur Entwicklung und Produktion von Modulen im industriellen Massstab zu beschleunigen, sind zuverlässige Charakterisierungsmethoden entscheidend. Mit ihren räumlich aufgelösten Informationen ermöglichen bildgebende Verfahren eine detailliertere Charakterisierung von Defekten und Ungleichmässigkeiten in neuartigen Solarzellen. Bestehende bildgebende Verfahren werden oft nicht gleichzeitig durchgeführt und korreliert, um eine bestimmte Zelle zu untersuchen. Darüber hinaus erfolgt die Verarbeitung der Bilder selten mit einem physikalischen Modellierungsansatz, sondern mit traditionellen Routinen zur Erkennung von Merkmalen.

Unser Ziel ist es, einen störungsfreien Messaufbau zu schaffen, der Elektrolumineszenz (EL), Dark-Lock-Infrarot-Thermografie (DLIT), Photolumineszenz (PL) und visuelle Bildgebung (Vis) in einem Gerät kombiniert und mit einer Simulationspipeline verbindet, die einen digitalen Zwilling der Zelle erzeugt. Die zugrundeliegenden Modellparameter werden mit Hilfe von maschinellem Lernen aus den Bildern geschätzt.

Die Solaronix AG als Hersteller von Solarzellen und -modulen auf Perowskit-Basis hat ein großes Interesse daran, ein Werkzeug für die zerstörungsfreie Analyse von Solarzellen zur Verfügung zu haben, sei es für die Entwicklung oder die Qualitätskontrolle. Die Aufgabe der Solaronix AG in diesem Projekt wird es sein, Solarzellen und Mini-Module verschiedener Typen und Größen für die Validierung des Messaufbaus und die weitere Analyse ihrer Zellen bereitzustellen.

Eine neue Geschäftsmöglichkeit für die Fluxim AG besteht in der Erweiterung bestehender Simulationssoftware und der Entwicklung eines neuen Messaufbaus im Rahmen ihres Angebots an Werkzeugen für die PV-Forschung und Entwicklung. Die Fluxim AG verfügt über profunde Erfahrung in der Entwicklung von All-in-one-Messplattformen, die durch Simulationen ergänzt werden, und möchte mit diesem Projekt in den Bereich der fortgeschrittenen Bildgebung einsteigen.

Das Projekt baut auf den vielversprechenden Ergebnissen eines Vorgängerprojekts auf, in dem die 2D+1D-Simulationssoftware Laoss den Bereich der elektrischen und thermischen Kleinsignale erweitert, und Modelle des maschinellen Lernens (ML) der Solarzelle mit Trainingsdaten entwickelt wurde. Die synthetischen Trainingsbilder, wurden mit dem physikalischen Modell hinter Laoss berechnet. In diesem Nachfolgeprojekt wollen wir einen Prototyp eines multispektralen Bildgebungssystems mit integrierter Modellierung entwickeln.

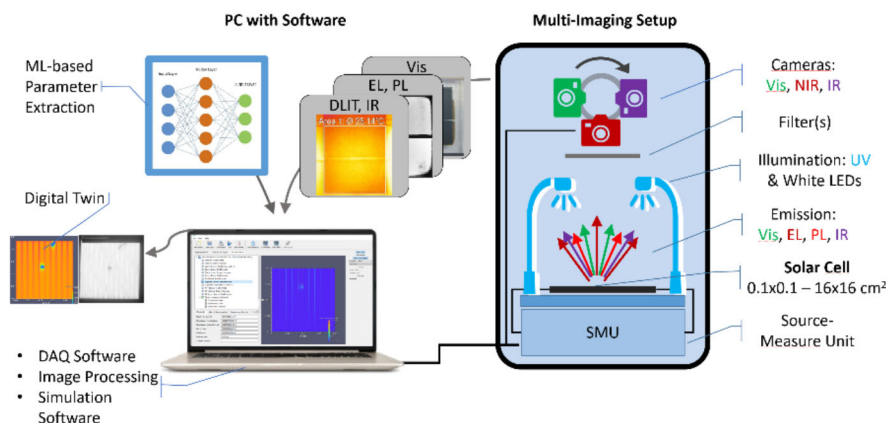


Abbildung 1: Konzeptskizze zur Veranschaulichung der Komponenten für den geplanten multispektralen Messaufbau, einschließlich Datenerfassung, Nachbearbeitung und der Simulationssoftware mit ML-basierter Parameterextraktion, die einen digitalen Zwilling erzeugt.

### 3.5 Organische Terahertz-Photonik

**Das Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung eines voll-organischen und lückenfreien Ansatzes zur Erzeugung und Detektion von Breitband-Terahertz-(THz)-Wellen. Die Resultate werden von grossem Wert für eine Vielzahl von Anwendungen, die von grundlegenden Studien von THz-Wechselwirkungen zwischen Licht und Materie bis hin zu industrieller THz-Spektroskopie und Bildgebung reichen.**

Mitwirkende: U. Puc, M. Auer, M. Jazbinsek  
 Partner: Universität Aiou, Südkorea  
 Finanzierung: Schweizerischer Nationalfonds (SNF) Bilaterale Programme  
 Dauer: 2020–2023

Terahertz-Quellen auf der Basis organischer elektro-optischer Kristalle haben in den letzten Jahren für die THz-Photonik zunehmend an Bedeutung gewonnen. Dies liegt an ihren einzigartigen Möglichkeiten, extrem hohe elektrische THz-Felder zu erzeugen, die für die Untersuchung von Licht-Materie-Wechselwirkungen benötigt werden, sowie an ihrer ultra-breiten Abdeckung des gesamten THz-Bereichs von 0.1 THz bis über 20 THz, die benötigt wird, um bestimmte Grundmodi der Materie zu untersuchen und zu kontrollieren. Dies macht organische elektrooptische Kristalle einerseits essentiell für das aufkommende Feld der nichtlinearen THz-Photonik, andererseits bieten organische Kristalle eine einzigartige Möglichkeit, die THz-Spektroskopie und Bildgebungsanwendungen über die Bandgrenze der meisten derzeit verwendeten Quellen hinaus zu erweitern.[1] Allerdings besitzen diese Materialien selbst intrinsische Schwingungsmoden im THz-Bereich, was zu unerwünschten Modulationen bis hin zu kompletten Lücken im erzeugten THz-Spektrum führt. Diese Modulation stellt eine fundamentale Grenze für die THz-Photonik auf der Basis organischer elektro-optischer Kristalle dar, die wir in diesem Projekt überwinden wollen. In dieser interdisziplinären internationalen Projektkollaboration entwirft und synthetisiert die koreanische Seite (Universität Aiou) neuartige organische Molekulkristalle mit grosser makroskopischer optischer Nichtlinearität und kontrollierten Kristalleigenschaften.

Die Schweizer Seite (ZHAW) evaluiert theoretisch und experimentell die optischen und THz-Eigenschaften dieser Kristalle und setzt sie für breitbandige THz-Anwendungen ein.

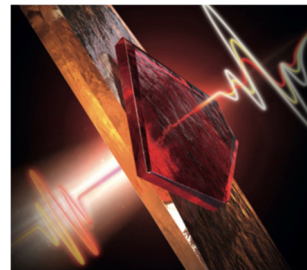


Abb. 1: In diesem Projekt werden organische elektrooptische Kristalle und ihre Kombinationen für die Erzeugung von Ultra-breitband-THz-Wellen verwendet. Abbildung: Universität Aiou [DOI: 10.1002/adfm.201707195].

Schliesslich werden wir unter Ausnutzung der Vorteile des neu entwickelten THz-Photonik-Ansatzes verschiedene neuartige organische Transportmaterialien untersuchen, die für eine Vielzahl von Anwendungen interessant sind, wie beispielsweise organische Solarzellen, organische Feldeffekttransistoren, organische Fotodetektoren und Gas-Sensoren.

#### Literatur:

- [1] Puc, Bach, Günter, Zgonik, Jazbinsek; Adv. Photonics Res. 2, <https://doi.org/10.1002/adpr.202000098> (2021).  
 [2] Kim, Kang, Puc, Jazbinsek, Rotermund, Kwon; Adv. Optical Mater. 9, <https://doi.org/10.1002/adom.202101019> (2021).

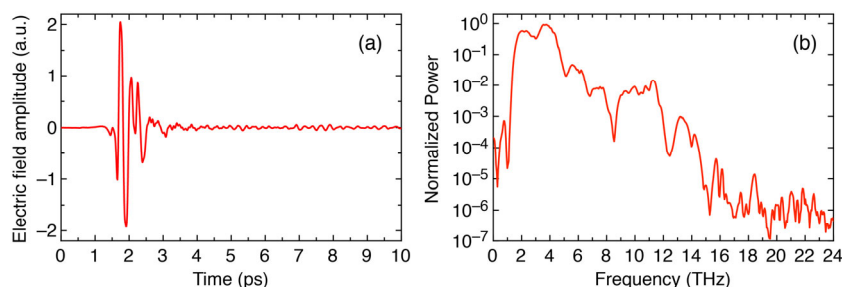


Abb. 2: THz-Zeitbereichssignal (a) und das entsprechende Leistungsspektrum (b) des THz-Aufbaus auf der Basis organischer Kristalle. Das Ziel dieses Projekts ist es, die Modulation des in (b) gesehenen Signals zu reduzieren, um eine flache spektrale Antwort über den gesamten Frequenzbereich zu erreichen.

### 3.6 Dynamik von Ladungstransferzuständen in organischen Halbleiterbauelementen: Kombination von Experiment und Simulation (CTDyn)

In diesem schweizerisch-deutschen Projekt werden die Ladungstransferzustände (CT-Exzitonen), die eine entscheidende Rolle für das Verständnis und die weitere Verbesserung der Effizienz von organischen elektronischen Bauelementen wie OLEDs und organischen Solarzellen spielen, untersucht. Unser Ansatz kombiniert optische und elektronische Messungen mit numerischen Simulationen, wobei im Projekt die zugrunde liegenden physikalischen Modelle und numerischen Methoden verbessert werden sollen.

Mitwirkende: M. Regnat, S. Züfle, B. Ruhstaller  
 Partner: Prof. W. Brütting, Universität Augsburg  
 Finanzierung: Schweizerischer Nationalfonds (SNF) / Deutsche Forschungsgemeinschaft  
 Dauer: 2020–2023

In diesem Projekt untersuchen wir die Dynamik von Exzitonen und das Zusammenspiel zwischen verschiedenen Exzitonspezies sowie zwischen Exzitonen und Ladungsträgern, sowohl im Bulk einzelner Schichten (intra-molekular) als auch an Grenzflächen von mehrschichtigen organischen Halbleiterbauelementen (inter-molekular). Wir werden den etablierten 1D-Drift-Diffusions-Ansatz [1] erweitern und mit einem neuartigen 3D-Master-Gleichungsmodell [2] kombinieren sowie mit analytischen 0D-Formeln vergleichen.

Abbildung 1 zeigt Exzitonen- und Ladungstransferprozesse, die sowohl in organischen Leuchtdioden (OLEDs) als auch in organischen Solarzellen auftreten können.

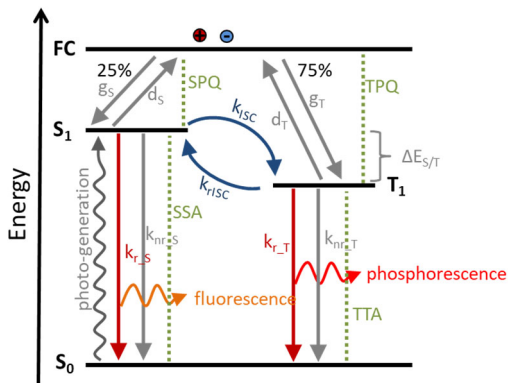


Abbildung 1: Allgemeine Exzitonen- und Ladungstransferprozesse. FC bezeichnet die freien Träger, S1 das Singlett und T1 das Triplett-Exziton und S0 den Grundzustand.

In einem ersten Teil dieses Projekts verwenden wir fortschrittliche Simulationen, um den Einfluss verschiedener Exzitonen-Auslöschprozesse wie Triplett-Polaron-Auslöschung (TPQ) und Triplett-Triplett-Annihilation (TTA) auf die Effizienz einer OLED mit verschiedenen Emittierkonzentrationen besser zu verstehen.

Abbildung 2 zeigt die Daten der Lebensdauer der angeregten Zustände  $\tau^*$  (direkt proportional zur Effizienz der OLED) eines grün phosphoreszierenden OLED-Aufbaus mit einer Emittierkonzentration von

2 % und 16 %. Aus dem Fit der Daten mit analytischen 0D-Formeln ergibt sich, dass der zugrundeliegende Exzitonen-Auslöschungsmechanismus für die Reduzierung der Lebensdauer der angeregten Zustände bei steigenden Stromdichten entweder TPQ oder TTA ist.

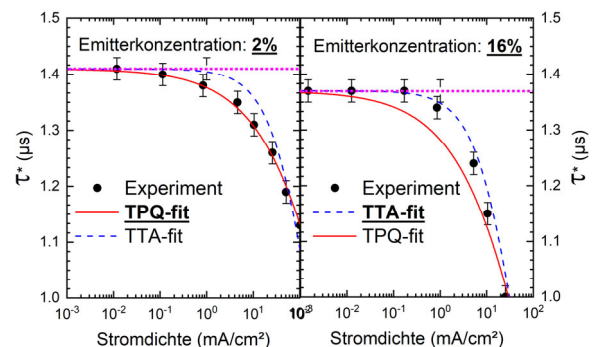


Abbildung 2: Lebensdauer angeregter Zustände für steigende Stromdichten einer OLED mit einer Emittierkonzentration von 2 % (links) und 16 % (rechts). Der Fit an die experimentellen Daten zeigt deutlich, dass die Abnahme für steigende Ströme für den Fall mit 2 % von TPQ besser beschrieben wird, während für 16 % von TTA.

Mit der Kombination aus 3D-Mastergleichung und 1D-Drift-Diffusions-Ansatz sollte es möglich sein, ein elektro-optisches Modell aufzustellen, das beide Fälle mit einem Parametersatz nachbilden kann und uns damit erlaubt, die Exzitonenprozesse in dieser OLED besser zu verstehen.

Am Ende sollte es möglich sein, die Emittierkonzentration für die höchste Effizienz und die geringste Reduktion für steigende Stromdichten vorherzusagen.

#### Quellen:

- [1] Simulation software Setfos, [www.fluxim.com/setfos-intro](http://www.fluxim.com/setfos-intro) (April 2021).
- [2] Zeder et al. „Coupled 3D Master Equation and 1D Drift-Diffusion Approach for Advanced OLED Modeling“. Journal of the Society for Information Display 28, Nr. 5 (2020): 440–49. <https://doi.org/10.1002/jsid.903>.



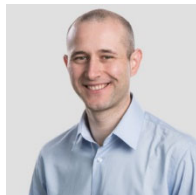
## 4 Sensorik und Messsysteme

Unser Team von talentierten Ingenieuren und Wissenschaftlern der ZHAW wendet seit mehr als zehn Jahren etablierte und neue Messmethoden auf relevante medizinische und biologische Probleme an. Wir arbeiten mit Startups, internationalen Unternehmen sowie führenden akademischen Partnern zusammen und bringen unser Ingenieurwissen in Projekte ein, die den neuesten Stand der technischen Entwicklung erfordern.

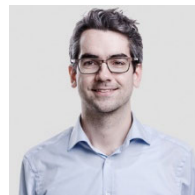
Wir kultivieren eine unternehmerische Denkweise, die über das akademische Publizieren hinausgeht, indem wir uns auf den Technologietransfer vom Labor zur Industrie konzentrieren. Zu unseren Finanzierungsquellen gehören die Schweizerische Agentur für Innovationsförderung (Innosuisse), die EU (Eurostars, Horizon 2020), der Schweizerische Nationalfonds (SNF) und verschiedene private Stiftungen sowie die direkte Finanzierung durch die Industrie.

Unsere Kernkompetenz ist die Entwicklung neuer Sensoren und Messverfahren in der Biomedizintechnik. Insbesondere haben wir Erfahrung in der Hautwissenschaft und -technologie: künstliche Hautmodelle, Computersimulationen, Entwicklung neuer Sensoren usw.

Wir profitieren von der hochmodernen Infrastruktur des Optoelektronischen Forschungslabors (OLAB), welches die Entwicklung anspruchsvoller Prototypen ermöglicht.



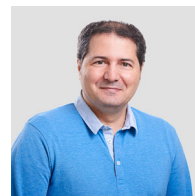
M. Bonmarin



D. Fehr



R. Hagen



F. Spano

## 4.1 Entwicklung eines Thermotherapiegeräts für die Behandlung der kutanen Leishmaniose

Die kutane Leishmaniose ist eine Krankheit, die in mehreren Ländern mit niedrigem Einkommen endemisch vorkommt. Neben der medikamentösen Behandlung basiert die derzeitige Behandlung auf einer Wärmetherapie: Die Läsion wird auf bis zu 50° C erhitzt, um den verantwortlichen Parasiten abzutöten. Leider sind die derzeit auf dem Markt erhältlichen Geräte noch zu teuer und für die betroffenen Länder unerschwinglich. In diesem Projekt war es unser Ziel, eine kostengünstige Version eines solchen Thermotherapiegeräts zu entwickeln und zu bauen.

Mitwirkende: A. Bachmann, R. Hagen, D. Fehr, F. Spano, M. Bonmarin  
 Partner: Drugs for Neglected Diseases DNDi  
 Finanzierung: Direkte Finanzierung & Studentenprojekte  
 Dauer: 2020–2022

Die handelsüblichen Thermotherapiegeräte arbeiten mit Radiofrequenzerwärmung, um für einige Sekunden (in der Regel etwa 30 Sekunden) eine Temperatur von 50° C zu erreichen. Sie bestehen aus zwei separaten Teilen: einer Handelektrode, die auf die Hautläsion aufgelegt wird, und einer Basis, die das Handgerät steuert. Das Gerät sollte sicher, tragbar und batteriebetrieben sein. Außerdem sollte es robust sein, damit es leicht an entlegene Orte transportiert werden kann.

Auf der Grundlage dieser Anforderungen entwickelte die Abteilung Sensorik und Messsysteme ein neues Thermotherapiegerät (Abbildung 1 und 2). Das Gerät besteht aus einem Handgerät (siehe Abbildung 1), das mit einer Basis (siehe Abbildung 2) verbunden ist. Die Temperatur wird über einen Sensor gesteuert, der in die Elektrode eingeführt wird, um sicherzustellen, dass die gewünschte Temperatur erreicht wird.



Abbildung 1: Bild des Gerätekopfes mit Elektroden und Startknopf. Alle Teile wurden im Haus 3D-gedruckt.

Jede Komponente wurde sorgfältig ausgewählt, um die Produktionskosten so niedrig wie möglich zu halten, ohne die Leistung zu beeinträchtigen.



Abbildung 2: Abbildung der Basisstation des Geräts. Die Benutzeroberfläche besteht lediglich aus einem Drehgeber, einer Starttaste und einem OLED-Display.

Grundlegende Validierungstests an Schweinehaut und künstlichen Phantomen wurden bereits durchgeführt. Das Gerät wurde für weitere Tests an DNDi geliefert. Ein Folgeprojekt ist vorgesehen, um den Prototyp weiter zu verbessern.

## 4.2 Eine neue thermografische Methode zur Quantifizierung der Schweissdrüsenaktivität in vivo

Die quantitative Untersuchung von Schweissdrüsen ist für die Diagnose oder die Überwachung verschiedener Krankheiten von Bedeutung. Derzeitige Methoden basieren meist auf Absorbern, die in Kontakt mit der Haut gebracht werden, aber keine Überwachung einzelner Schweissdrüsen oder der Dynamik ermöglichen. Wir haben eine neue Technologie vorgeschlagen, die auf passiver Wärmebildtechnik basiert und mehrere Schweissdrüsen parallel überwachen kann, wobei die zeitabhängige Schweissrate quantifiziert wird.

Mitwirkende: V. Vescoli, T. Wehrmüller, A. Schmid, R. Hagen, D. Fehr, F. Spano, M. Bonmarin  
A. Drexelius (UC Cincinnati), J. Heikenfeld (UC Cincinnati)  
Partner: Novel Device Lab, UC Cincinnati  
Finanzierung: Studentische Projekte  
Dauer: 2020–2022

Eine IR-Kamera wird zur Überwachung der Hautoberflächentemperatur verwendet (siehe Abbildung 1). Schweissdrüsen erscheinen als dunkle/kalte Flecken auf den IR-Bildern (siehe Abbildung 2).

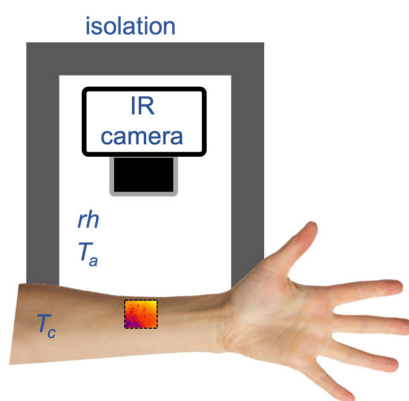


Abbildung 1: Versuchsaufbau. Eine IR-Kamera überwacht die Hautoberfläche.

Mittels mathematischer Modellierung kann aus dem Temperaturunterschied zwischen den Schweissdrüsen und der Haut sowie der Umgebungsfeuchtigkeit und -temperatur eine Schweissrate ermittelt werden (siehe Abbildung 2).

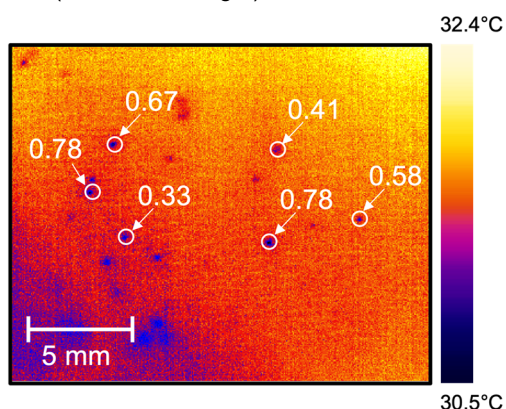


Abbildung 2: Die Schweissdrüsen sind als dunkler Fleck gut sichtbar. Dank einer mathematischen Modellierung wird der Temperaturunterschied in eine Schweissrate (in nL/min) umgerechnet.

Ein weiterer Vorteil der Methode besteht darin, dass sie es ermöglicht, die Dynamik der Schweissdrüsen zu verfolgen (siehe Abbildung 3).

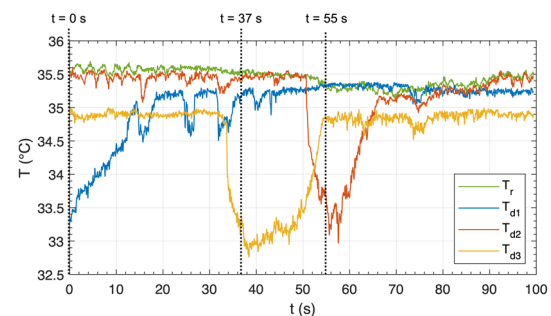


Abbildung 3: Dynamik von 3 Schweissdrüsen zusammen mit einer Referenz über 100 Sekunden.

Dank mehrerer Studentenprojekte wurde ein erster Prototyp gebaut, der in mehreren klinischen und nicht-klinischen Studien in der Schweiz und in Deutschland getestet werden wird.

### Quelle:

A. Drexelius, D. Fehr, V. Vescoli, J. Heikenfeld and M. Bonmarin, "A simple non-contact optical method to quantify in-vivo sweat gland activity and pulsation," in *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, doi: 10.1109/TBME.2022.3151938.

## 4.3 Design und Entwicklung von künstlichen Hautmodellen für taktile Sensoranwendungen

Mitwirkende: F. Spano, D. Fehr, M. Bonmarin, J. Blunsch, R. Sassenburg  
Dauer: 2019–2021

Trotz der bevorstehenden Einführung von vollständig zellbasierten Hautmodellen ist die Entwicklung der künstlichen Hautmodelle immer noch im Gange und relevant. Die zellbasierten Hautmodelle sind noch weit davon entfernt, die Eigenschaften der menschlichen Haut zu reproduzieren und die Bedürfnisse der Anwender abzudecken. Insbesondere besteht nach wie vor ein Bedarf an reproduzierbaren und stabilen künstlichen Hautmodellen, die verschiedene Eigenschaften der menschlichen Haut nachahmen. Darüber hinaus, und glücklicherweise werden Tierversuche aufgrund neuer Vorschriften und ethischer Probleme nicht mehr toleriert. Daher werden künstliche Hautmodelle entworfen und entwickelt, die verschiedene Aspekte der menschlichen Haut emulieren können, wie beispielsweise die mechanischen, thermischen, transpirativen und taktilen Eigenschaften der menschlichen Haut [1-2].

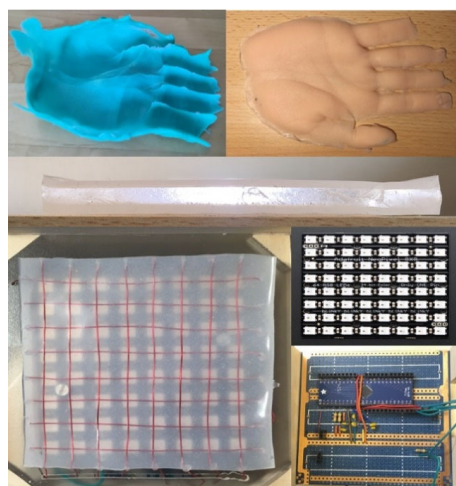


Abb. 1: Illustrationen der verschiedenen Herstellungsphasen: Materialentwicklung und Handflächen-Nachbildung; Mehrschichtiges Hautmodell mit der kapazitiv-sensorischen Matrix und der LED-Matrix, gesteuert durch die Versuchs-Elektronik.

Die künstlichen Hautmodelle bestehen im Allgemeinen aus einer mehrschichtigen Kombination von Materialien, um die reale menschliche Haut und ihre verschiedenen Schichten (Stratum corneum, Epidermis, Dermis und Subdermis) nachzuahmen. Die zur Imitierung der physikalischen Eigenschaften der menschlichen Haut benutzten Materialien sind vielfältig [3]. Oft werden Materialien auf Silikonbasis verwendet, wie beispielsweise Polydimethylsiloxan (PDMS) oder gelatinöse Materialien [4]. Sie werden in Abhängigkeit von den zu simulierenden Eigenschaften ausgewählt. Hinsichtlich der Herstellungsprozesse verwenden wir klassische Ablagerungs-

techniken wie Drop-Casting und Bar-Coating. Darüber hinaus implementieren wir neue Technologien, wie beispielsweise das 3D-Bioprinting.

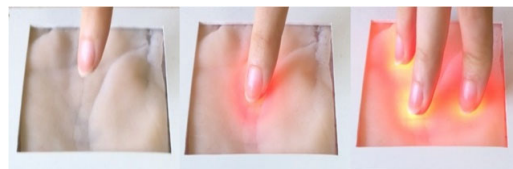


Abb. 2: Illustrationen der taktilen Fähigkeiten des künstlichen Hautmodells, das die reale menschliche Textur und die mechanischen Eigenschaften sowie die Farbveränderung in Abhängigkeit von der angewandten Kraft und der kapazitiven Mehrpunkt-Sensorik implementiert.

In Rahmen einer Bachelorarbeit konzentrierten wir uns auf Design und Herstellung einer künstlichen taktilen Haut. Das Hautmodell kombiniert die mechanischen Eigenschaften und die Textur der menschlichen Haut mit einem kapazitiven Sensor und einer LED-Matrix (Abb. 1), wodurch es die Berührungspunkte und die angewandten Kräfte durch einfache Farbwechsel visualisieren kann (Abb. 2).

Die mechanischen Eigenschaften wurden durch schichtweises Erzeugen eines mehrschichtigen Materials aus verschiedenen, silikonbasierten Polymeren (Dragonskin FX Pro und Ecoflex) erzielt. Darüber hinaus wurde eine Nachbildung einer echten menschlichen Handfläche realisiert, die die Handtextur genau reproduziert und das Gefühl erhöht, mit einer menschlichen Hand zu interagieren. Unabhängig davon wurde ein flexibler kapazitiver Sensor entworfen und hergestellt, indem eine Matrix aus Drähten in die Polymerschicht eingebettet wurde. Im nächsten Schritt wurde eine LED-Matrix mit der kapazitiven Sensor-Matrix verbunden und programmiert. Die taktilen Haut ist in der Lage, auf Mehrpunktberührungen zu reagieren und die Variation des ausgeübten Drucks durch Farbwechsel anzuzeigen. Solche Hautmodelle können beispielsweise als Schnittstelle für von Menschen umgebene Roboter oder für interaktive Geräte zur Kommunikation in intelligenten Städten ins Auge gefasst werden.

### Literatur:

- [1] M. Guan et al., Development of a sweating thermal skin simulant for heat transfer evaluation of clothed human body under radiant heat hazard, *Applied Thermal Engineering* 166, 114642 (2020).
- [2] L. Zhai et al., Development of a multi-layered skin simulant for burn injury evaluation of protective fabrics exposed to radiant heat, *Fire and Materials* 43 (2), 144-152 (2019).
- [3] A. K. Dabrowska et al., Materials used to simulate physical properties of the human skin, *Skin Research and Technology* 2016; 22: 3-14.
- [4] A. Dabrowska et al., A water-responsive, gelatine-based human skin model, *Tribology International* 113 (2017) 316-322.



## 4.4 Tragbares Gerät zur Frühdiagnose von Lymphödemen

Mitwirkende: D. Fehr, A. Bachmann, M. Bonmarin  
 Partner: Institut für Pharmazeutische Wissenschaften, ETH Zürich  
 Klinik für Plastische Chirurgie und Handchirurgie, Universitätsspital Zürich  
 SKINTEGRITY  
 Finanzierung: Innosuisse  
 Dauer: 2018–2021

Die Wahrscheinlichkeit, bis ans Lebensende ein Lymphödem zu entwickeln, liegt nach einer Brustkrebsbehandlung bei ca. 30 % – und das ist nur einer der möglichen Risikofaktoren. Millionen von Menschen müssen daher mit einem erhöhten Risiko rechnen, an einem Lymphödem zu erkranken. Bei dieser Krankheit ist die Funktion des Lymphsystems dauerhaft gestört, wodurch beispielsweise die Arme irreversibel anschwellen, wenn nicht rechtzeitig eine geeignete Behandlung eingeleitet wird. Diese verlangsamt die Schwellung oder stoppt sie sogar komplett. Eine frühe Diagnose der Krankheit ist somit zentral. Dennoch gibt es zurzeit keine standardisierte, breit verfügbare Methode, die bei Menschen mit erhöhtem Risiko ein regelmässiges und zuverlässiges Monitoring erlaubt.

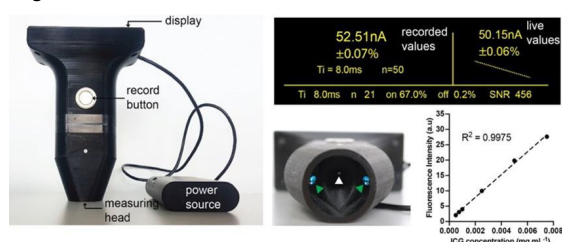


Abb. 1: Links: Autarkes Handgerät mit Batterie. Oben rechts: Display. Mitte: Messöffnung. Unten rechts: Gemessener Wert versus tatsächlicher Marker-Konzentration.

In dieser Arbeit wurde, zusammen mit dem Institut für Pharmazeutische Wissenschaften der ETH Zürich, eine geeignete Methode zur Frühdiagnose von Lymphödemen entwickelt. Sie besteht aus einem fluoreszierendem Marker, der in die Haut des Patienten injiziert wird, und aus einem für medizinische Verhältnisse einfachen Messgerät, welches die Abbaurates des Markers mittels der Fluoreszenzintensität bestimmen kann. Bei einer reduzierten Abbaurates besteht der Verdacht auf ein sich entwickelndes Lymphödem. Im Idealfall werden die Patienten mit dieser Methode ihr Lymphsystem selbständig und regelmässig überwachen können und im Verdachtsfall frühzeitig einen Spezialisten aufsuchen können. In verschiedenen Vorprojekten wurde ein geeigneter fluoreszierender Marker und ein erstes portables Messgerät mit optischer Sensorik zur Quantifizierung des Fluoreszenzsignals entwickelt. Dazu wurde die bestehende Optik (Abb. 2) um eine autarke Steuer-elektronik und Bedienelemente ergänzt und in einem kompakten Gehäuse verbaut (Abb. 1). Mit diesem Handgerät konnte die Methode bereits in verschiedenen Versuchen validiert werden [1].

Das Ziel der nächsten Etappe war, das Konzept in einer klinischen Studie zu validieren. Dazu wurde das Messgerät um eine Bluetooth-Schnittstelle erweitert ein darauf aufbauendes Programm LymphData entwickelt, das die automatisierte Erfassung der Messdaten und deren Export in das Case Report Form (e-CRF) ermöglicht. Dieses dient der formellen Dokumentation der Studie. Damit könnte das Konzept erfolgreich *in vivo* validiert werden [2].

Das Messgerät wurde auch als tragbarer Sensor in Grösse einer Armbanduhr realisiert. Dazu musste es von Grund auf neu entwickelt werden, weil die ursprüngliche Optik prinzipbedingt nicht weiter verkleinert werden kann. Bei vergleichbarer Empfindlichkeit konnte die Optik beträchtlich miniaturisiert werden. Parallel wurde eine passende Smartphone-App implementiert, über die der Messprozess gesteuert, überwacht und Daten exportiert werden können.

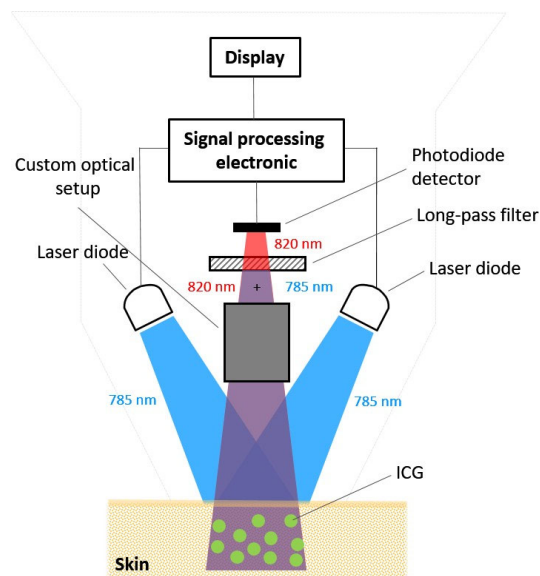


Abb. 2: Optische und elektronische Komponenten des Handgeräts.

### Literatur:

- [1] A. Polomska et al., "Minimally invasive method for the point-of-care quantification of lymphatic vessel function," *JCI Insight*, 4(4), Feb. 2019. <https://doi.org/10.1172/jci.insight.126515>
- [2] A. Polomska et al., "Development and Clinical Validation of the LymphMonitor Technology to Quantitatively Assess Lymphatic Function," *Diagnostics*, vol. 11, no. 10, Oct. 2021. <https://doi.org/10.3390/diagnostics11101873>



# 5 Gebäudesimulation

Gebäude beeinflussen unser Wohlbefinden, unsere Produktivität und vielfältige soziale Interaktionen. Ein grosser Teil unserer Energie wird im Gebäude umgesetzt, und mit der Nutzung von Sonnenenergie und Umweltwärme sind moderne Gebäude auch zum Energieproduzenten geworden. Grosse Mengen an Informationen, Gütern und Menschen bewegen sich in den Gebäuden. Damit in einer vermehrt digitalen Welt all diese Abläufe optimal unterstützt werden können, werden mit Sensorik und Messtechnik laufend Daten erfasst und mit Simulations- und Regeltechnik in das Geschehen eingegriffen.

Am ICP unterstützen wir die Digitalisierung im Gebäudebereich mit Computersimulationen für die physikalisch-technischen Zusammenhänge. Unsere Beiträge erstrecken sich von der frühen Planungsphase über die Detailplanung bis zum Betrieb der Gebäude. Dabei haben wir Zugriff auf eine grosse Anzahl Simulationstools und implementieren wo nötig auch eigene Algorithmen. Mit Messtechnik validieren wir die Simulationen, bestimmen Materialparameter und generieren Ausgangsdaten für vorausschauende Simulationen.



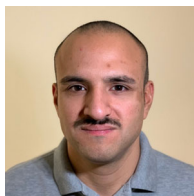
D. Kempf



F. Leuppi



M. Schmid



C. Tello



A. Witzig

## 5.1 Simulation von Personenströmen und der damit verbundenen Ausbreitung von Infektionskrankheiten

**Wie können öffentliche Räume gestaltet werden, um die Infektionsgefahr während einer Epidemie zu minimieren? Wir diskutieren diese Fragestellung anhand von Simulationen, welche die Bewegung von Fussgängern beschreiben und mit einem epidemiologischen Modell gekoppelt sind. Dies ermöglicht die Analyse des Epidemiegeschehens auf kleinem Raum, wie beispielsweise Bildungseinrichtungen oder Fussgängerzonen.**

Mitwirkende: M. Schmid, D. Bernhardsgrütter  
 Partner: HTWG Konstanz, FH Vorarlberg, ASE AG, PerEx GmbH, Inatura GmbH  
 Finanzierung: Interreg Alpenrhein-Bodensee-Hochrhein  
 Dauer: 2021–2023

In einer Pandemiesituation sind schützende Massnahmen erforderlich, welche das soziale Leben und die Wirtschaft stark einschränken. Die Folgen der Massnahmen sind oft schwierig abzuschätzen und es fehlt an Kenntnissen, um ein optimales Mass der Einschränkungen festzulegen. Es stellt sich die Frage, ob beispielsweise Geschäftsschliessungen vermeidbar sind, wenn durch optimale Raumgestaltung die Ausbreitungswahrscheinlichkeit einer Infektionskrankheit verringert werden kann.

Ziel des Projektes ist die Entwicklung eines Softwaretools, mit dessen Hilfe Personenströme und die damit verbundene Ansteckungswahrscheinlichkeit verschiedener Infektionskrankheiten simuliert werden können (Abbildung 1). Die Grundlage bildet die Simulationssoftware pFlow, welche Personenströme eines Evakuierungsszenarios berechnet. pFlow wurde in den vergangenen Jahren am ICP und an der HTWG entwickelt [1].

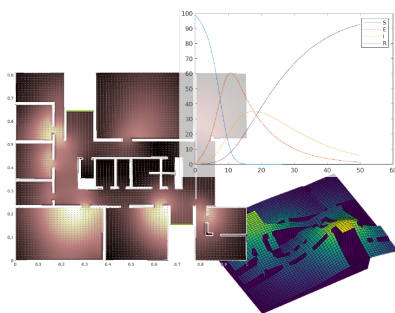


Abb. 1: Die Software pFlow simuliert Personenströme (z. B. die Evakuierung eines Stockwerks in einem Schulhaus). Die Resultate werden neu mit einem epidemiologischen Modell gekoppelt.

Die Beschreibung von Fussgängerströmen wird nun im aktuellen Projekt mit einem Infektionsmodell gekoppelt. Typische Infektionsmodelle sind sogenannte SIR-Modelle (susceptible, infected, removed) [2]. Mit der Möglichkeit, die Ausbreitung von Infektionen in einer sich bewegenden Menschenmassen zu simulieren, erhalten wir ein neuartiges Werkzeug, mit dessen Hilfe Räume in epidemiologischem Sinne optimal gestaltet werden können. Wir zeigen dies exemplarisch anhand eines einfachen Szenarios.

Wir betrachten einen quadratischen Raum mit einem Ausgang, in welchem sich Personen befinden, die alle gleichzeitig den Raum verlassen wollen. Wie verläuft aus epidemiologischer Sicht die Evakuierung eines leeren Raumes im Vergleich zum selben Raum, der mit Tischreihen gefüllt ist? Die Resultate unseres Modells sind in Abbildung 2 ersichtlich.

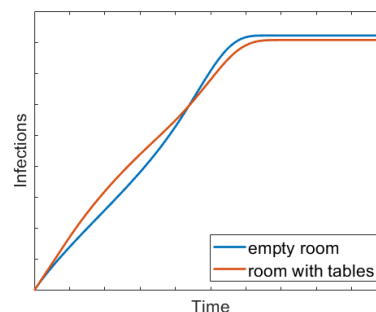


Abb. 2: Anzahl Infektionen bei einer Evakuierung eines leeren Raumes verglichen mit demselben Raum gefüllt mit Tischen.

Zu Beginn der Evakuierung ist ein leerer Raum vorteilhaft, da sich die Menschenmenge im Raum gleichmässiger verteilt. Die Evakuierung führt zu einem Stau am Ausgang mit lokal hohen Personendichten. Daher schnell im leeren Raum die Zahl der Ansteckungen am Ende der Evakuierung hoch.

In einem Raum, der mit Tischreihen gefüllt ist, ist anfänglich die Zahl der Infektionen höher. Dies kann mit höheren Personendichten zwischen den Tischreihen begründet werden. Da sich die Personen langsamer zwischen den Tischen bewegen, ist der Stau am Ausgang weniger ausgeprägt, was für die gesamte Evakuierung insgesamt vorteilhaft ist.

### Literatur:

- [1] R. Axthelm, "Finite Element Simulation of a Macroscopic Model for Pedestrian Flow", Traffic and Granular Flow '15, Springer, 2015.
- [2] W. Kermack und A. McKendrick, "A contribution to the mathematical theory of epidemics", Proc. R. Soc. Lond., 1927.

## 5.2 ThermoPlaner3D - Detaillierte Energiebeurteilung von Gebäuden aus grossflächiger 3D-Thermografie

**ThermoPlaner3D entwickelt grossflächige, detaillierte 3D-Gebäude-Energiebeurteilungen aus multiperspektivischen Thermografieaufnahmen und schafft damit neue quantitative Planungsgrundlagen sowie ein Marketingtool für Energieversorgungsunternehmen.**

Mitwirkende: M. Battaglia, E. Comi, M. Bonmarin, E. Knapp  
 Partner: FHNW, Considerate AG, BSF Swissphoto AG  
 Finanzierung: Innosuisse  
 Dauer: 2021–2023

Die Dekarbonisierung der Heizungssysteme ist eine zentrale Herausforderung für die Wohnungswirtschaft. Das Projekt ThermoPlaner3D entwickelt ein innovatives Produkt, welches es Energieversorgungsunternehmen (EVUs) ermöglicht, die Energieverbräuche im Gebäude zu unterstützen und gleichzeitig davon zu profitieren.

Das ThermoPlaner3D-Projekt liefert mit grossflächigen, detaillierten 3D-Gebäude-Energiebeurteilungen aus multiperspektivischen Thermografieaufnahmen die nötigen quantitativen Grundlagen für Investitionsentscheide. EVUs können damit neue, nachhaltige Wärmelösungen planen und Risiken minimieren. Zusätzlich bietet es für ihre bisherigen und neuen Kunden die Möglichkeit, den Ist-Zustand der eigenen Liegenschaft mit einem erläuterten, interaktiven 3D-Gebäude-Energiemodell zu evaluieren, mit eigenem Wissen zu präzisieren sowie Sanierungspotentiale und zukünftige Einsparungen zu untersuchen. Heute werden zum gleichen Zweck oft nur lückenhaft zur Verfügung stehende Statistiken, Verbrauchsdaten und Auswertungen einzelner Gebäude entnommen. Bei einer Thermalanalyse wird oft nur die Wärmeabstrahlung der Dächer oder der Fassaden untersucht. Mit SWG, dem EVU von Grenchen, ist ein Pilotkunde für Feedback involviert. ThermoPlaner3D wird von einem Joint Venture der Considerate AG (Ingenieurwesen Energietechnik) mit der BSF Swissphoto AG

(luftgestützte Geodatenerfassung) kommerzialisiert werden.

Die Forschungspartner FHNW (Geodatenanalyse/-visualisierung) und ZHAW (Thermografiesensorik, Gebäudeenergiemodellierung) entwickeln validierte, modulare und automatisierte Auswerteprozesse für grossflächige, multiperspektivische 3D-Thermografiedaten in Kombination RGB-, Nahinfrarot- (NIR) und Laserstrahltaufnahmen (LiDAR), die Integration der Resultate in 3D-Gebäude-Energiemodelle sowie geeignete interaktive Visualisierungen für die EVUs und deren Kunden.

Die Daten werden mittels Befliegung mit mehreren Kameras in rund 1 km Höhe erhoben. Durch eine präzise Georeferenzierung können die zur Verfügung stehenden Datensätze für eine Temperaturkorrektur der Gebäudematerial- und Umwelteigenschaften kombiniert werden. Grundsätzlich erscheinen schlecht isolierte Gebäudehüllen wärmer als Gebäude mit einem besseren Isolationsstandard. Abbildung 2 zeigt ein Minergie-zertifiziertes Einfamilienhaus mit einem verhältnismässig kühlen Dach im Vergleich zu dessen Nachbargebäuden.

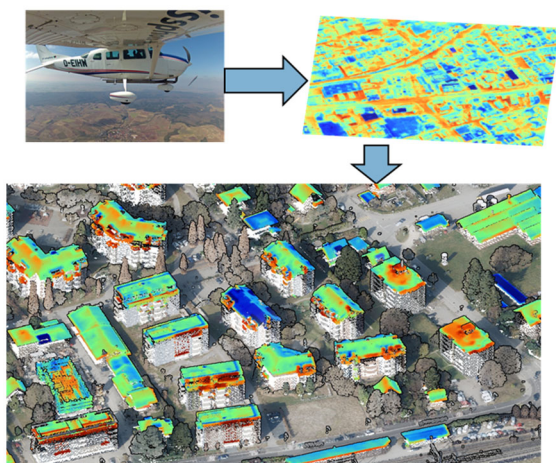


Abbildung 1: Kombination der RGB-, LiDAR- und Thermaldaten zu einer 3D-Visualisierung der Dachtemperaturen.

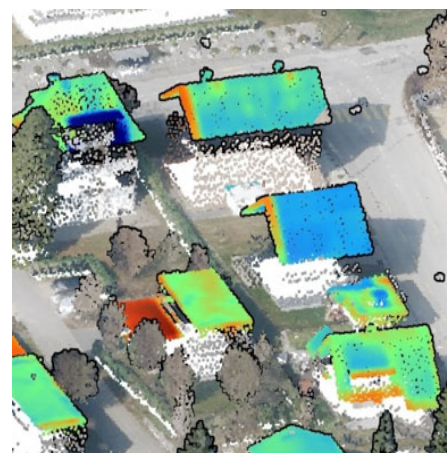


Abbildung 2: Im Vergleich zu dessen Nachbarn, hat das Minergie-Haus ein kühleres Dach und verliert somit weniger Wärme an die Umgebung.

### 5.3 3D-Architektenpläne für Gebäudesimulation zugänglich gemacht

Die Baubranche verändert sich durch die Digitalisierung rasant. Während früher Architektenpläne ausschliesslich in 2D gezeichnet wurden, werden mit den modernen Entwurfswerkzeugen 3D-Pläne erarbeitet und zusätzliche Informationen digital erfasst. Grundsätzlich ist damit viel Datenmaterial vorhanden, das man auch für die Gebäudesimulation nutzen kann. Das Problem besteht jedoch darin, dass die Datenstrukturen für die Simulation oft ungeeignet sind. Einerseits ist der Detailgrad der Pläne zu hoch und andererseits sind Räume und Mauern für eine automatische Weiterverarbeitung nicht erkennbar. In dieser Vorstudie wurde ein Workflow für Building Information Modeling entwickelt.

Mitwirkende: A. Witzig, C. Tello  
Partner: S. Dilhas, Abstract AG  
Finanzierung: Innosuisse  
Dauer: 2021–2022

Die Digitalisierung hat die Baubranche erst in den letzten Jahren zu einem echten Paradigmenwechsel gezwungen. Lange waren 2D-Pläne auch für komplexere Bauvorhaben ausreichend, und erst in den letzten 2–3 Jahren wurde auf eine echte 3D-Planungsmethodik umgestellt. Während die Softwarewerkzeuge die 3D-Planung schon länger unterstützt hatten, findet derzeit ein Umdenken statt und vom Entwurf über die Grob- bis zur Detailplanung werden 3D-Datenstrukturen aufgebaut und gepflegt. Mit Building Information Modelling (BIM) werden nun auch Materialparameter und Daten zur künftigen Nutzung erfasst.

Aufbauend auf der Technologie der Firma Abstract AG [1] möchte man den verschiedenen Akteuren im BIM-Prozess die Simulationen zugänglich machen und die neue Methodik unterstützen mit dem Ziel, dass die Abläufe flüssiger laufen und die Qualität des Planungsprozesses besser wird. Primär stehen die Technologien zur Verbesserung des Wärmeschutzes im Fokus (z. B. Energieeinsparpotenzial aufzeigen, Varianten bezüglich des Primärenergiebedarfs bewerten etc.). Die Ergebnisse lassen sich aber auf andere simulationsbasierte Entscheidungshilfen ausweiten (z. B. Akustik, Optimierung der Personenströme, Entrauchungsnachweis etc.).

In dieser Vorstudie wurden die aktuellen Schnittstellen getestet und es darf festgehalten werden, dass es AbstractBIM derzeit gut gelingt, die BIM-Pläne zu vereinfachen und die Struktur der Daten zu verbessern. Es bleibt eine Kommunikationsaufgabe, so dass beim erstmaligen Erstellen der BIM-Pläne die derzeit noch nötigen Zusatzanforderungen bekannt sind und umgesetzt werden.

Im Projekt wurde exemplarisch aufgezeigt, wie ausgehend von realen BIM-Daten im IFC-Format eine vereinfachte Geometrie erstellt werden kann, die für eine Simulation mit der Methode der finiten Elemente (FEM) mit der Software Comsol Multiphysics [2] zugänglich ist. Dies ergänzt die Beispiele, die Abstract-

BIM bereits anbietet, für die nachfolgende Verwendung der Simulationssoftware IDA ICT [3]. Die neue Methode hat das Potenzial, dass sie einen einfacheren Zugang zum Thema Energie erlaubt als der Ansatz, der in heutigen Softwaretools und in den Normen (z.B. SIA 380/1) gewählt wird. Auf der einen Seite wird dadurch der Rechenaufwand grösser. Auf der anderen Seite bietet dieser Ansatz den Vorteil, dass die Berechnungsmethodik viel einfacher zu verstehen ist. Die Approximationen, die in der Vergangenheit eingeführt wurden, um den Rechenaufwand klein zu halten, lassen die Methodik der Simulation wesentlich komplizierter werden und sind nur einer spezifisch ausgebildeten Expertengruppe vorbehalten.

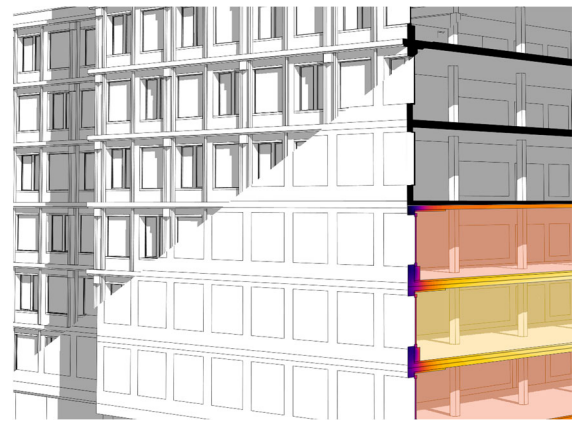


Abb.: Vom Architekturplan zur Gebäudesimulation. Links oben wird der Architekturplan dargestellt, wobei der Plan kleingliedrige Details zu den Fenstern enthält. Im mittleren Abschnitt ist die vereinfachte Gebäudestruktur dargestellt, wie sie aus dem Portal von AbstractBIM resultiert. Rechts unten sind die Simulationsergebnisse abgebildet, wobei die Farben die Temperatur darstellen von gelb = 22° C (beheizte Räume) über rot = 18° C (unbeheizte Räume) bis zu violett = 4° C (Aussentemperatur). Die Simulation wurde in Comsol Multiphysics durchgeführt und umfasst das Strahlungsgleichgewicht zwischen den Innenwänden, ein Kompaktmodell für die Konvektion und die Wärmeleitung in der Gebäudestruktur.

#### Referenzen:

- [1] Abstract AG, Onlineservice *AbstractBIM*, [www.abstractbim.com](http://www.abstractbim.com)
- [2] Equa SA, *Simulationsool IDA ICE*, [www.equa.se/ida-ice](http://www.equa.se/ida-ice)
- [3] Comsol Multiphysics, [www.comsol.com](http://www.comsol.com)



## 5.4 Raumklima-Optimierung aus dem digitalen Zwilling

Für grosse Bürogebäude ist die Verwaltung von Gebäudeinformationen eine grosse Herausforderung. Im digitalen Zwilling laufen alle Information zusammen. Im gemeinsamen Projekt mit der Leicom AG und der ZHAW wird aufgezeigt, wie die Kombination dieser Informationen in verschiedenen Anwendungsfällen einen Mehrwert generiert. In diesem Teilprojekt geht es konkret darum, dass aus der Information von Raumtemperatursensoren und des Zustands in der Energiezentrale Heizung, Lüftung und Kühlung optimiert werden. Dabei soll die Behaglichkeit in den Innenräumen jederzeit gewährleistet sein und Energie eingespart werden.

Mitwirkende: A. Witzig, M. Battaglia, C. Tello Fachin  
 Partner: Leicom AG, ZHAW: InES, ZPP, IFM  
 Finanzierung: Innosuisse  
 Dauer: 2021–2023



Abb. 1: 3D-Repräsentation des in diesem Projekt untersuchten Bürogebäudes.

Auf der Grundlage der Informationen des digitalen Zwillings wird ein schneller Algorithmus für eine intelligente Überwachung des Raumklimas und des HLK-Systems entwickelt. Der Algorithmus läuft auf einem Server und verwendet Konfigurationsdaten im Installationsprozess und Echtzeit-Messdaten während des Betriebs als Eingabe. Das vorgeschlagene Verfahren ist robust in dem Sinne, dass es mit unvollständigen Daten sowohl bei der Einrichtung als auch während des Betriebs umgehen kann. Fehlende Daten werden durch die Anwendung einer vollwertigen Gebäudesimulation ergänzt und anhand von Wetterdaten und des statistischen Nutzerverhaltens optimiert (Ensemble-Modellierung).

Im laufenden Forschungsprojekt wird eine zweistufige Modellhierarchie aufgebaut: Ein rechenintensives Modell simuliert das Innenraumklima im Detail und ein kompaktes Modell läuft im Betrieb als integraler Bestandteil des digitalen Zwillings mit.

Das Projekt schlägt die Brücke von der Technologie des Internet of Things (IoT) zu den Anforderungen des Facility Managements, die im Tagesgeschäft einen Mehrwert aus dem digitalen Zwilling erhalten müssen. Der Industriepartner Leicom AG ist mit der Plattform eliona bereits heute eine treibende Kraft in der Digitalisierung im Gebäudesektor.

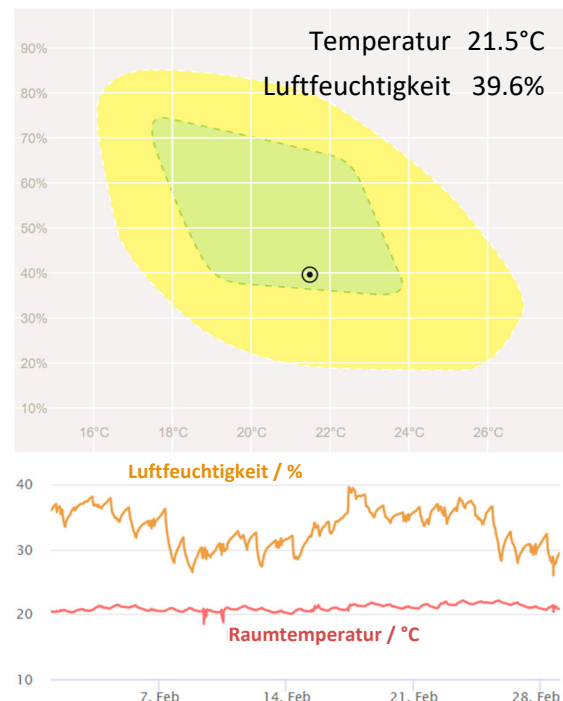


Abb. 2: IoT-Daten im Dashboard des digitalen Zwillings. Neben der Überwachung der Behaglichkeit werden im Projekt auch zusätzliche Parameter wie die Raumbelastung oder die Helligkeit erfasst.

Quellenangabe:

<https://www.leicom.ch/smart-building/>



## 5.5 Digitaler Zwilling II: Livedaten in der Mivune Building Cloud

Eine Vielzahl von Sensoren sammelt weltweit immense Mengen an Daten; nur ein Bruchteil davon wird derzeit ausgewertet. Die Mivune-Gebäude-IoT-Plattform aggregiert diese Daten, bietet ein detailliertes Monitoring und ermöglicht den Remotezugriff auf die Gebäude-Regelungstechnik. Man spricht vom *digitalen Zwilling*, der in anderen Anwendungsgebieten (wie z. B. in der Wartung, Reparatur und Instandhaltung von Flugzeugen) bereits etabliert ist. In der Gebäudetechnik sind verschiedene Akteure auf der Suche nach gewinnbringenden Anwendungsfeldern. Die Branche ist im Wandel und in den zukünftigen Abläufen werden sich entsprechende digitale Serviceangebote durchsetzen. Im Projekt wurde anhand einer konkreten Anlage der Use Case *Gebäudedoktor* genauer untersucht und ein Vorschlag zur Integration von Simulationsresultaten erarbeitet.

Mitwirkende: A. Witzig, F. Leuppi, T. Söndergaard  
 Partner: A. Horni, D. Charypar, Mivune AG  
 Finanzierung: Innosuisse  
 Dauer: 2021–2022

In einer ersten Projektphase wurde im Kontext eines grösseren Konsortiums der Fokus auf Building Information Modeling (BIM) gelegt und die Integration von Datenströmen aus dem Internet of Things (IoT) in den Entwicklungsprozess untersucht. Die Mivune Building Cloud ist dabei als Plattform vorgesehen, um gemessene Daten zu sammeln und zu visualisieren. Wichtige Anwendungen sind dabei die Untersuchung, ob die energetische Performance einer energetischen Anlage die guten Werte aus der Planung auch real erreicht (Performance-Gap-Analyse) und das frühzeitige Erkennen von defekten Geräten (automatische Anomaliedetektion). In einem nächsten Schritt wurde die Integration von Simulation in der Building Cloud untersucht und konkret für eine im Jahr 2017 fertiggestellte Siedlung mit einem fortschrittlichen Energiekonzept eingesetzt. Spezifisch wurden dabei Anwendungsfälle angeschaut, die sich im Betrieb einer Anlage ergeben. Die von den installierten Sensoren ermittelten Zeitreihen können in der Mivune Building Cloud komfortabel dargestellt werden, was bei der Datenmenge (hohe Auflösung über lange Zeiträume) nicht selbstverständlich ist. Auch der nahtlose Direktvergleich von verschiedenen Messdaten sowie die Darstellung von Wetterdaten oder Ventilpositionen in derselben Graphik sind für die Analyse essenziell. Es wurde eine Referenzsimulation aufgesetzt, die den Wärmeverbund korrekt abbildet und die für die Analyse in Ergänzung zu den Messdaten zur Verfügung steht. Die Simulation hat dabei das Potential, offene Fragen zu analysieren, die sich aus den Messkurven ergeben. In der numerischen Rechnung können beispielsweise Informationen ergänzt werden für Systemgrößen, die nicht durch die installierte Sensorik abgedeckt sind. Es wurden verschiedene Simulationsansätze verglichen und für die Eignung zur Integration in die Mivune Building Cloud geprüft. In einem ersten Schritt muss diese Zusammenführung der Analysemethoden nicht

vollumfänglich softwaretechnisch unterstützt werden, auch schon ein Beschrieb der konkreten Vorgehensweise und die Identifikation der Fragestellungen, zu der ein kombinierter Einsatz von Simulation und Messdaten vielversprechende Antworten liefern kann, ist ein nützlicher Beitrag für die Umsetzung in der Praxis.

Um die Sensordaten wirkungsvoll und effizient nutzen zu können, ist es von Vorteil, wenn der ganze Prozess, angefangen von der Planung (bereits erstmals mit Einsatz von Simulationswerkzeugen) über die Begleitung des Bauprozesses bis zur Inbetriebnahme durchgängig unterstützt wird. Somit fließen die vorhandenen Daten aus dem BIM schon früh in das System ein und können dann auch in der Betriebsphase genutzt werden, ohne dass ein Zusatzaufwand entsteht.

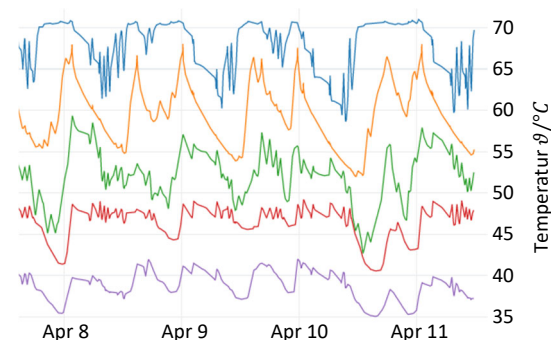


Abb.: Darstellung von Messdaten in der Mivune Building Cloud. Mit *drag&drop* lassen sich Temperaturpunkte auf verschiedenen Höhen in einem technischen Speicher darstellen. Dabei ist ersichtlich, wie im oberen Bereich des Speichers eine vordefinierte Solltemperatur immer gehalten wird, während in den unteren Schichten des Speichers auch tiefere Wassertemperaturen möglich sind.

### Referenzen:

Mivune AG, BuildingCloud,  
<https://mivune.com/buildingcloud.html>

## 5.6 Digitaler Zwilling III: Messtechnik in Cloudanwendungen

Das Thermolabor des ICP wurde in den letzten Jahren kontinuierlich ausgebaut und bietet inzwischen umfassende Analysemöglichkeiten für gebäudetechnische Energiesysteme. Eine Spezialität ist dabei, dass die Messtechnik in der Regel durch Simulationen unterstützt wird. Ausserdem lohnt es sich in vielen Fällen, die Daten systematisch in einer Cloud-Anwendung abzuglegen – man spricht dabei oft vom *digitalen Zwilling*. Dieser kann zur weiteren Bearbeitung der Daten nützlich sein und beispielsweise den Fernzugriff für Wartungsarbeiten oder die Anwendung digital unterstützter Analysemethoden ermöglichen.

Mitwirkende: A. Witzig, F. Leuppi, T. Hocker, D. Kempf, S. Ehrat  
 Partner: Naef Energietechnik AG, GreenTEG AG  
 Finanzierung: Innosuisse  
 Dauer: 2020–2022

Im ICP-Thermolabor werden neben den verschiedensten Arten von Temperatursensoren auch die entsprechenden Systeme zur Messung von Wärmefluss in Rohrleitungen oder Wärmetransport in Mauern und Fenstern abgedeckt. Zudem wurden umfassende Untersuchungsmöglichkeiten zur Bestimmung des Feuchtigkeitsgehalts in der Luft und in Baustoffen aufgebaut.

Während früher vor allem industrielle Anwendungen bedient wurden, sind nun auch gebäudetechnische Energiesysteme in den Fokus gerückt. In enger Zusammenarbeit mit Praktikern werden aktuelle Fragestellungen für die Optimierung von Regelstrategien, die Entwicklung und Verbesserung von Produkten vorangetrieben oder in konkreten Bauprojekten Analysen durchgeführt.

Die Messungen mit moderner Sensorik sind naturgemäss eine Hardwareanwendung. Im Zusammenhang mit dem digitalen Zwilling ist für eine nützliche Anwendung die Anbindung an das Internet und eine geeignete Datenverarbeitung eine weitere Voraussetzung. Letztlich – und dies ist eine Spezialität des ICP-Thermolabors – wird ein direkter Bezug geschaffen zur Simulation von physikalischen Vorgängen. Meist müssen in den untersuchten Vorgängen nämlich mehrere gekoppelte physikalische Effekte verstanden und in der Messanordnung berücksichtigt werden. So ist beispielsweise der Wärmedurchgangskoeffizient (im Bauwesen oft  $U$ -Wert genannt) von der Feuchtigkeit der Baustoffe abhängig. Neben dem Wärmetransport und der Wärmespeicherfähigkeit der Wände interessiert in einer detaillierten Untersuchung folglich auch der Wassergehalt und der Feuchtigkeitstransport. Oft stehen auch die Systemgrenzen zur Disposition: Meist müsste die unmittelbare Umgebung der Sensorik in die Analyse einbezogen werden, was in vielen Praxisanwendungen vernachlässigt wird. Auch der zeitliche Verlauf spielt eine Rolle: Welche Auswirkung hat es, wenn während einer  $U$ -Wert Messung die Sonne auf die Aussenwand scheint? Wie kann die Betonkonstruktion eines Gebäudes zur Optimierung der Behaglichkeit und Reduktion des Primärenergieverbrauchs genutzt

werden? Wie kann eine Bodenheizung zur Regeneration von Erdwärmesonden beitragen?

Die Kombination zwischen Messtechnik und Physik-Simulation erfordert oft eine Modellreduktion auf Seiten der numerischen Analyse. Somit können Datenmenge und Komplexität des Messsystems reduziert werden.



Abb. 1: Messsystem zur Bestimmung des Wärmedurchgangskoeffizienten ( $U$ -Wert). Die Installation wurde zu Testzwecken am Gebäude TK auf dem Campus der School of Engineering der ZHAW durchgeführt. In der Abbildung wird ein Temperaturmessung an der Aussenwand dargestellt. Wichtig ist dabei, dass Wand-Oberflächen-temperatur und Lufttemperatur separat erfasst werden.



Abb. 2: An der Innenseite der Wand werden in der beheizten Zone des Gebäudes ebenfalls Wand-Oberflächen-temperatur und Lufttemperatur gemessen. Zusätzlich werden noch der Wärmefluss und die Luftfeuchtigkeit erfasst. Die Daten werden kabellos via Basisstation an einen Server übermittelt.



Abb. 3: Der Ultraschall-Durchflussmesser ermittelt die Fließgeschwindigkeit von Heizungswasser in einer Rohrleitung, ohne dass diese dazu aufgetrennt werden muss. Zusammen mit zwei Temperaturmesspunkten kann man dann den in den Leitungen transportierten Wärmestrom bestimmen.

## 5.7 Vergleich zwischen Konvektions- und Strahlungsheizung in Bezug auf die Feuchtigkeit in einer Backsteinwand mit EPS-Dämmung

Bei der Beurteilung der Behaglichkeit spielt neben der Raumtemperatur auch die Luftfeuchtigkeit eine entscheidende Rolle. In dieser Arbeit wird der Einfluss von zwei Heizungssystemen auf den Feuchtigkeitsgehalt in den Wänden untersucht.

Mitwirkende: F. Leuppi, A. Witzig  
 Partner: ZIM Netzwerk Klimaneutraler Gebäudebestand  
 Finanzierung: Bachelorarbeit  
 Dauer: 2021–2022

Im Rahmen einer Bachelorarbeit [1] wurde für Versuchszwecke eine Backsteinwand mit EPS-Dämmung gebaut. Danach wurden zwei Heizungssysteme verglichen, eine Strahlungsheizung (1 kW Infrarotheizplatte) und eine Konvektionsheizung (1 kW Heizlüfter). Ziel war es, den Unterschied der beiden Heizungssysteme auf den Feuchtigkeitsgehalt der Wand zu untersuchen.

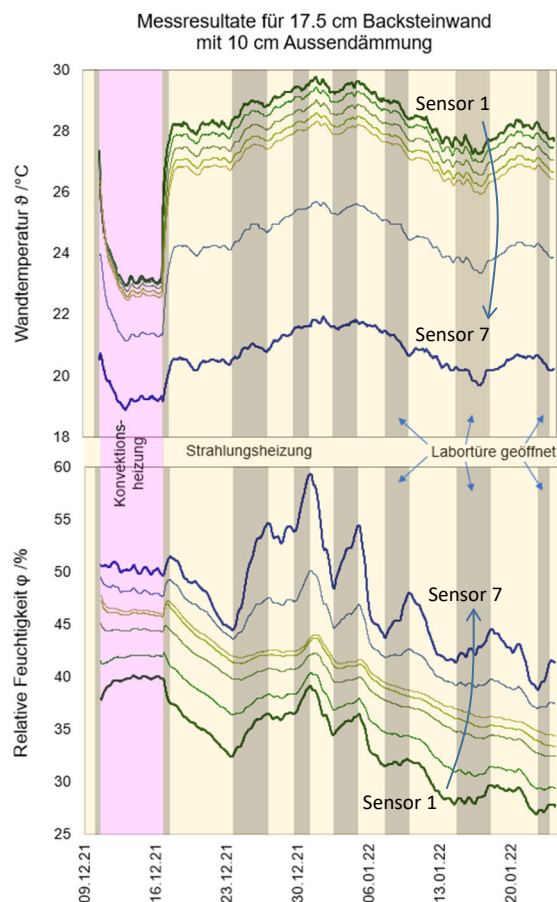


Abb. 1: Sieben Sensoren zeichnen im Innern der Wand den Feuchtigkeitsgehalt und die Temperatur auf. Die Sensoren 1-5 sind in Backstein; Sensoren 6-7 in der EPS-Dämmung platziert. Während einer Woche wurde konvektiv geheizt, in der restlichen Zeit mit Strahlungsheizung mit unterschiedlichen Randbedingungen.

Für die Messung wurden sieben Almemo FHAD 46-C2 Luftfeuchtesensoren von Ahlborn [2] eingesetzt, wobei fünf im Backstein und zwei in der EPS-Dämmung verbaut sind. Im Innern der Wand gibt es um

die Sensoren einen kleinen Hohlraum, wobei angenommen wird, dass sich dort die Temperatur und Luftfeuchtigkeit über kurze Zeit dem umliegenden Material angleicht. Das Feuchteverhalten innerhalb der Wand wurde dann unter drei Zuständen untersucht. Beheizung des Raumes mit einer Konvektionsheizung (Heizlüfter mit 1000 W) und einer Strahlungsheizung (Infrarotheizung mit 1000 W) sowie sporadische Öffnung des Laborraumes für unterschiedliche Zeiträume.

Wie auf Abb. 1 ersichtlich, vermag die Konvektionsheizung die Wand nicht gleichermassen erhitzen wie die Strahlungsheizung, was durch die Geometrie der Anordnung erklärbar ist. Der Raum und die Wand wurden bereits vor dem 10.12.2021 mit der Strahlungsheizung temperiert, weshalb die Lufttemperaturkurven von einem höheren Niveau starten. Die Strahlungsheizung verändert die Temperatur in den vorderen Schichten (Backsteinseite) stärker als gegen die hinteren, kälteren Schichten (EPS-Dämmung), weshalb die Differenz von Innen- zu Aussen-seite von  $\Delta\vartheta_{\text{max-min}} = 3.4$  °C auf 7.8 °C ansteigt. Die relative Luftfeuchtigkeit innerhalb der Wand bleibt mit Konvektionsheizung auf einem konstanten Niveau und sinkt ab, wenn die Strahlungsheizung bei geschlossenem Raum verwendet wird. Sobald die Aussenluft zur Mauer gelangt, steigt der Feuchtigkeitsgehalt erneut an. Über die gesamte Messreihe kann erkannt werden, dass die Feuchtigkeit in der Wand mit dem Einsatz der Strahlungsheizung abnimmt. Eine vertiefte Forschungsarbeit soll nun die Hypothese klären, ob das Austrocknen der Wände durch Strahlungsheizung zu einem besseren U-Wert führt und wie dieser Effekt im Planungsprozess für Sanierungen und Neubauten berücksichtigt werden muss.

### Quellenangabe

- [1] Natalie Stalder und Fabian Leuppi: Energiesimulation im BIM-Kontext. ZHAW School of Engineering  
[Bachelorarbeit](#) 2021  
 [2] ALMEMO. Digitaler Fühler für Luftfeuchte, Temperatur, Luftdruck FHAD 46-Cx ([Link](#))

## 5.8 Schlanke Gebäudetechnik mit Simulation unterstützen

**Ein bereits mehrfach erfolgreich umgesetztes neues Konzept für Gebäudesanierungen kommt mit weniger Gebäudetechnik aus und erzielt erwiesenermassen bessere Resultate als Sanierungen mit dem aktuellen Stand der Technik. Anhand von Simulationen soll das Vertrauen in das neue Konzept gestärkt und der Weg für eine breite Kommunikation geebnet werden.**

Mitwirkende: A. Witzig, C. Tello  
 Partner: B. Kegel, Firma Kegel Klimasysteme; M. Mettler, Mettiss AG.  
 Finanzierung: Innosuisse  
 Dauer: 2021–2022

Der Schweizer Gebäudepark verbraucht jährlich etwa 100 TWh oder rund 45 % des Endenergiebedarfs der Schweiz. Durch Sanierungen wird eine massive energetische Verbesserung erzielt und ein wichtiger Teil der Energiewende realisiert. Damit die Ziele der Schweizer Energiestrategie erreicht werden können, muss die Sanierungsrate erhöht werden. Neben Anreizprogrammen und gesetzlichen Rahmenbedingungen wird auch die öffentliche Hand als Bauherrin aktiv und forciert entsprechende Umbauprojekte.

Aus wissenschaftlicher Sicht muss heute aber darauf aufmerksam gemacht werden, dass der heutige Stand der Technik in der energetischen Sanierung die potenziell möglichen Einsparungen bei weitem nicht ausschöpft. Die geltenden Normen begünstigen Lösungen mit übermässigem Einsatz von Gebäudetechnik, sie enthalten grosse Sicherheitsmargen und sind auf veraltete analoge Planungsprozesse ausgelegt. Falls jetzt flächendeckend so umgebaut wird, wird man bereits in 10 Jahren die laufende Bauphase als grossen Fehlschlag beurteilen.

Zum Glück lassen die Normen bessere Lösungen zu, wobei in der Planungsphase der Nachweis über die erzielten Effizienzgewinne erbracht werden muss. Einzelne vorbildlich sanierte Geschäfts- und Wohnhäuser beweisen, dass bessere Resultate erzielt werden können. Die energetischen Einsparungen wurden dort anhand von Messungen konkret überprüft und bestätigt. Insbesondere das in [1] dargestellte Konzept – wir nennen es in der Folge *Konzept der schlanken Gebäudetechnik (KSG)* – setzt auf eine minimalistische Haustechnik, die konsequente Nutzung der betrieblichen Abwärme und die Ausnutzung der thermischen Dynamik in den tragenden Gebäudestrukturen [2].

In unserer Vorstudie haben wir aufgrund von physikalischen Simulationen aufgezeigt, wie die Einsparungen gegenüber den geltenden Normen entstehen. Die Vorteile der schlanken Gebäudetechnik und das Funktionieren des Konzepts können erst mit der entsprechenden Zeitbereich-Simulation aufgezeigt werden. Leider sind diese Effekte in den aktuell verfügbaren Planungswerkzeugen noch nicht ausreichend detailliert abgebildet.

Das KSG bietet nicht nur eine Energieeinsparung. Aufgrund der im Konzept vorgesehenen Reduktion der Haustechnik-Installation (Heizungsrohre, Lüftungskanäle, Datenleitungen etc..) kann die Sanierung sogar noch wesentlich kostengünstiger und mit massiv reduziertem Materialaufwand (graue Energie!) durchgeführt werden. Die etablierten Akteure in der Baubranche begegnen diesem Ansatz mit Skepsis, da gemäss der SIA-Honorarberechnung [7] eine kleinere Vergütung der Fachplaner resultiert und mit einem innovativen Konzept zusätzliche Risiken entstehen. Sogar die Anbieter der gängigen Simulationswerkzeuge sehen zu wenig Anreize, da die Nachfrage nach den neuen Features noch klein ist. Ihre Softwareprodukte finanzieren sich aktuell zum grösseren Teil durch das Abbilden der Normen und weniger durch die eigentliche Nachweisführung. Derzeit erkennen nur wenige Immobilienbesitzer die Chancen des neuen Ansatzes:

1. Kostenersparnis für die Sanierung und kürzere Umbauzeiten
2. Jährliche Kostenersparnis während der ganzen zukünftigen Betriebszeit
3. Wesentlich bessere Ökobilanz; sehr grosse Energieeinsparungen über die ganze Betriebszeit

Die am ICP durchgeführten Simulationen unterstützen die Argumentation bei der Aufklärungsarbeit, die im Moment nötig ist. Zusammen mit den effektiv realisierten Sanierungen und der Validierung durch Messung kann damit hoffentlich den überlegenen Lösungen zum Durchbruch verholfen werden.



Abbildung: Lüftungsanlage und Innendämmung im Konzept der schlanken Gebäudetechnik.

### Referenzen:

- [1] Rosenbergstrasse 30 in St. Gallen (Factsheet)
- [2] Erklärungsvideo: <https://vimeo.com/405928818>



# 6 Multiphysik-Simulationen für Gebäude und Quartiere

Die Gebäudesimulation hat im akademischen Bereich bereits vor einigen Jahren eine erste Blütezeit durchlaufen. Viele relevante Fragestellungen, wie beispielsweise der durch freie Konvektion oder Wind angetriebene Luftwechsel durch Fenster [1-3] oder der Wärme- und Feuchtigkeitstransport durch Wände [4,5], wurden gelöst. Auch die Solarenergienutzung beziehungsweise die ungewollte Überhitzung durch Solareinstrahlung ist gut verstanden [6,7]. Entsprechende Computersimulationen wurden mit Messungen validiert, die Resultate wurden wissenschaftlich publiziert, die Methoden und Lösungswege detailliert beschrieben.

Aus diesen Ergebnissen sind auch einige Simulationsprogramme spezifisch für Anwendungen im Gebäude entstanden [8-12]. Für andere Aufgabenstellungen wurden die universellen Numerik-Löser verwendet oder erweitert [13-16], oder die in der Baubranche gut etablierten CAD-Programme wurden um die entsprechende Funktionalität erweitert.

Mit allen diesen Aktivitäten hat man allerdings im Bausektor bis vor kurzem keinen grossen Einfluss erlangt. Simulationsstudien werden in realen Bauprojekten auch heute noch oft in der Offerte nur als Option mitgeführt und in Sparrunden regelmässig in Frage gestellt. In den entsprechenden Projekten wird dedizierte Ingenieurdienstleistung angeboten, die auch die Fragestellung mit dem Auftraggeber diskutiert und Empfehlungen für Entscheidungen ausformuliert. Das volle Potenzial der Gebäudesimulation wird dadurch oft noch nicht ausgeschöpft.

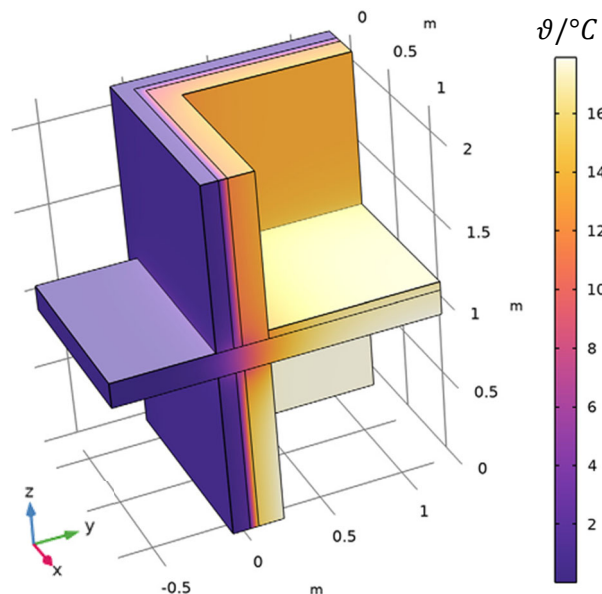


Abbildung: Temperaturverteilung  $\vartheta(\vec{r})$  auf den Wandoberflächen eines Ausschnittes aus einem Gebäude mit Bodenplatte als Wärmebrücke (ISO 10211:2007 test case 3). Beispiel aus der Comsol-Datenbank [14].

Seit wenigen Jahren wird die Baubranche nun durch zwei Megatrends stark beeinflusst:

- 1) **Klimawandel:** Aufgrund der Herausforderungen der Energiewende ist es unabdingbar, dass Gebäude bezüglich ihres Energiebedarfs optimiert werden und dass die Gebäudehülle zur Nutzung von Solarenergie und Umweltwärme eingesetzt wird. Mit numerischer Simulation kann in der Planung quantifiziert werden, wie viel erneuerbare Energie im Betrieb geerntet werden kann und wie man damit zuerst den Eigenverbrauch deckt und – falls die lokale Energiebilanz sogar positiv ausfällt – in einen Energieverbund eingespeist werden kann. Auch für das wichtige Thema der Energiespeicherung leistet die Simulation ihre Beiträge. Das Versprechen der Simulation ist dabei auch, dass die Energiesysteme bereits in der Planung optimiert werden und dass Entscheidungen im Sinne der Ökologie positiv beeinflusst werden.
- 2) **Digitalisierung:** Eine neue Welle der Digitalisierung hat in den letzten Jahren die Baubranche erfasst. Damit wurden die Voraussetzungen geschaffen, dass Gebäudesimulation breit zur Anwendung kommt. Viele Teilsysteme, die früher noch nicht an die digitale Welt angeschlossen waren, kommunizieren inzwischen mit einem zentralen Server. Den digitalen Zwilling verstehen wir als heterogene Sammlung von Mess- und Simulationsdaten, der die Basis bietet für (digitale) Services, welche die Planung, den Bau und den Betrieb des Gebäudes verbessern.



Die neue Relevanz der Energiethemen und die angestrebte Durchgängigkeit der digitalen Planung ebnen nun den Weg für den vermehrten Einsatz von physikalischer Simulation im Baubereich. Als Fachhochschule sind wir ideal positioniert, um die Gebäudesimulation nahe an den Anwendungsprojekten zu platzieren und die in der akademischen Welt bekannten Algorithmen in einen Kontext zu bringen, der Nutzen generiert. Ein grosser Hebel liegt darin, die Algorithmen in der Branche zu verankern, so dass nicht mehr wie bisher Personal mit höchster Qualifikation benötigt wird und Simulationen nur in Ausnahmefällen durchgeführt werden.

### **Sensorik und Messsysteme**

Aus mehreren Gründen ist die Messtechnik ein Schlüssel für den erfolgreichen Einsatz der numerischen Algorithmen im Bausektor:

- Validierung der Modelle
- Ergänzung von Materialdaten, wo diese noch fehlen
- Bestimmung von effektiven Materialparametern für Simulationen mit Modellreduktion
- Ermitteln von Ausgangsdaten für die vorausschauende Simulation

Das Institute of Computational Physics ist vor 20 Jahren aus dem Projektteam *Numerische Modellierung von Sensor- und Aktorsystemen* entstanden und hat den Bezug zur Sensorik immer aufrechterhalten. Im neu etablierten *Thermolabor* werden nun auch Messgeräte für den Gebäudebereich mit dem entsprechenden Anwendungs-knowhow gepflegt, so beispielsweise spezifische Messsysteme zur Bestimmung des U-Wertes von Wänden (Wärmeflussensor + Temperatursensoren) [17], Energietransport in Rohrleitungen (Ultraschall-Durchflussmesser + Temperatursensoren) [18] oder Feuchtigkeitsmessung in Bauteilen [19].

### **Digitaler Zwilling**

Mit dem Aufkommen des Internet of Things (IoT) wächst die Zahl der Sensoren, die laufend Daten erheben und an einen zentralen Speicherort weiterleiten. Verschiedene Akteure sehen einen Wert in der Kombination dieser Informationen, pflegen diese Daten und vermarkten sie als digitalen Zwilling. Bei der Ergänzung für fehlende Messpunkte, bei der Analyse von Szenarien und bei der Interpretation der Daten haben Simulationen bereits ihren Nutzen bewiesen [20]. Mit unseren numerischen Algorithmen tragen wir dazu bei, dass der digitale Zwilling einen Nutzen generiert.

### **Die wichtige Rolle der Feuchtigkeit in Innenräumen und Wänden**

Bei der Beurteilung der Behaglichkeit spielt neben der Raumtemperatur auch die Luftfeuchtigkeit eine entscheidende Rolle. Auch in der Analyse des Energieumsatzes im Gebäude ist die Feuchtigkeit wichtig, da die in Wänden und in der Luft gespeicherte Latenzwärme die Bilanzen wesentlich beeinflusst. Damit erlangt ein klassisches Multiphysik-Thema hohe Wichtigkeit: Wärme- und Feuchtigkeitstransport im Gebäude beeinflussen sich gegenseitig und werden als eng gekoppelte physikalische Vorgänge numerisch abgebildet. Dabei muss nicht in jeder Analyse die umfangreiche Simulation gemacht werden, aber bei der Definition der Anwendungsfälle müssen die Effekte mitberücksichtigt werden, so dass die Randbedingungen und Wertebereiche für eine valide Voraussage bewusst gewählt werden können.

### **Erhöhung der Energieeffizienz durch Berücksichtigung der Tagesdynamik**

Statische Betrachtungen erlauben eine Komplexitätsreduktion. In der Gebäudetechnik hat sich als Konsequenz der U-Wert als wichtiges Mass für die Wärmedurchlässigkeit der Gebäudehülle etabliert. Leider ist das Modell aber zu einfach, da die Gebäude in unseren Breitegraden in der Regel eine thermische Zeitkonstante haben, die in der Grössenordnung der tageszeitlichen Temperaturschwankungen liegt. Die Phasenverschiebung zwischen der Aussentemperatur, dem Erwärmen/Auskühlen der Gebäudemasse und der Innentemperatur kann in einer intelligenten Heizungssteuerung produktiv genutzt werden. In konkreten Sanierungen wurde gezeigt [21], dass die Berücksichtigung der Tagesdynamik dazu führen kann, dass mit weniger Materialaufwand gebaut werden kann. Man könnte dabei auch von einer

schlanken Gebäudetechnik sprechen. Mit entsprechend aufeinander abgestimmten Massnahmen lässt sich nachweislich ein mehrfacher Gewinn realisieren:

- In der kalten Jahreszeit wird Heizenergie eingespart, in der warmen Jahreszeit Kühlenergie
- Senkung der Kosten für die Bereitstellung und Verteilung der Heiz-/Kühlleistung
- Senkung der grauen Energie
- Verkürzte Bauzeiten
- Erhöhter Komfort und reduzierte Mieterklagen, da die Gebäudetragheit für einen natürlichen Temperatenausgleich sorgt

Die Beachtung der zeitlichen Dynamik bereits im Planungsprozess wird aber ein langer Veränderungsprozess sein. Ein Teil der einfachen Faustregeln muss ersetzt werden, andere behalten ihre Gültigkeit. In der Aus- und Weiterbildung müssen die neuen Konzepte erklärt werden. Es muss eine Methodik entworfen werden, die ähnlich einfach ist wie das Rechnen mit U-Werten, möglicherweise digital unterstützt. Skepsis gegenüber einem angepassten Entwurfsprozess kann auch von Akteuren kommen, die vom heute etablierten Regelwerk finanziell profitieren. Der Beweis, dass Gebäudetechnik-Geräte und Dämmmaterial eingespart werden kann, lässt jetzt schon vermuten, welcher Zweig der Industrie zu den Gegnern der schlanken Gebäudetechnik zählen wird.

### Schlussfolgerung und Ausblick

Mit dem neuen thematischen Schwerpunkt Gebäudetechnik am Institute of Computational Physics schlagen wir die Brücke zwischen der akademisch ausgerichteten Gebäudesimulation und den Anwendungen in konkreten Sanierungs- und Neubauprojekten. Wir orientieren uns am physikalisch Machbaren und erwarten aufgrund der Erfahrung, dass damit ökologisch noch signifikant bessere Gebäude entstehen werden als bei Anwendung des heutigen Minimalstandards, der in der kantonalen Gesetzgebung und in den Normen festgehalten ist. Es ist wichtig, die Ergebnisse durch Messung zu validieren und Aufklärung zu betreiben. Die gute Nachricht: Es wird weniger Material verbaut, Bauprojekte werden kostengünstiger und Betriebskosten werden sinken. Der Mehraufwand liegt im Engineering, eine Veränderung wird in den Prozessen geschehen. Wir unterstützen gerne und sehen in unserer Rolle als Fachhochschule die Prioritäten beim Knowhow-Transfer, bei der wissenschaftlichen Begleitung und letztlich darin, innovativen neuen Ansätzen zum Durchbruch zu verhelfen.

Andreas Witzig

Winterthur, Mai 2022

<https://www.zhaw.ch/de/engineering/institute-zentren/icp/gebaeudesimulation/>

### Referenzen

- [1] N. Rajaratnam, Turbulent Jets, Elsevier 1976
- [2] P. Heiselberg, K. Svidt, P. Nielsen, Characteristics of airflow from open windows, Building and Environment 36, pp. 859-869, 2001
- [3] A. Anthony, T. Verma, Numerical Analysis of Natural Convection in a Heated Room and its Implication on Thermal Comfort, Journal of Thermal Engineering, vol. 7, no. 1, pp. 37-53, 2021
- [4] H. Künzle, Simultaneous Heat and Moisture Transport in Building Components One- and two-dimensional calculation using simple parameters. Doctoral dissertation. 1995
- [5] F. Antretter, F. Sauer, T. Schöpfer, A. Holm A, 2011 Validation of a hygrothermal whole building simulation software. Fraunhofer-Institut für Bauphysik, Holzkirchen, Germany Ashrae Stand. 14-6
- [6] J. Duffie, W. Beckmann, *Solar Engineering of Thermal Processes*, John Wiley, 1<sup>st</sup> ed. 1980, 2<sup>nd</sup> ed. 1991

- [7] S. Stevanovic, Optimization of Passive Solar Design Strategies: A Review, Renewable and Sustainable Energy Reviews, vol. 25, pp. 177.196, 2013
- [8] Transol as a commercial interface to the TRNSYS engine, provided by the company Aiguasol in Barcelona, Spain, <https://aiguasol.coop/design-of-solar-thermal-systems-with-transol/>
- [9] DesignBuilder as a commercial interface to the Energy-Plus engine, provided by the company DesignBuilder Ltd in Gloucestershire, UK, <https://designbuilder.co.uk/software/product-overview>
- [10] Polysun provided by Vela Solaris in Winterthur, Switzerland, <https://www.velasolaris.com/software/polysun-designer/>
- [11] IDA ICE provided by Equa Simulation AB in Stockholm, Sweden, <https://www.equa.se/ida-ice>
- [12] WUFI provided by the Fraunhofer Institut für Bauphysik (IBP) in Stuttgart, Germany, <https://wufi.de/de/software/wufi-pro/>
- [13] Carnot Toolbox for Matlab, provided by the Solar-Institut Jülich, <https://www.fh-aachen.de/forschung/solar-institut-juelich/carnot>
- [14] Comsol Multiphysics provided by Comsol AB in Sweden, <https://www.comsol.com>
- [15] Fluent by Ansys, <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-fluent>
- [16] OpenFoam provided by the world wide open source community which is managed by OpenCFD, Bracknell, UK, <https://www.openfoam.com/documentation/overview>
- [17] U-Value Kit by greenTEG AG in Rümlang, Switzerland <https://www.greenteg.com/cases/u-value-insulation/>
- [18] Wärmemengenzähler bestehend aus Clamp-On Durchflussmessung und Temperatursensoren. [www.molline.de](http://www.molline.de).
- [19] Almemo, digitaler Fühler für Luftfeuchte, Temperatur, Luftdruck FHAD 46-Cx. <http://www.ahlborn.com/download/pdfs/kap08/fhad46d.pdf>
- [20] F. Hengel et. al., Building Model Calibration Methods for Building Operation Applications, in the proceedings of BauSIM 2020, <http://www.ibpsa.org/bausim-2020/>
- [21] B. Kegel, Von der Energieschleuder zum Passivhaus, Prix Watt d'Or 2021 des Schweizer Bundesamtes für Energie, <https://kegel-klimasysteme.ch/wp-content/uploads/2021/06/Poster-Projekt-Rosenbergstrasse.pdf>

# Anhang

## A.1 Studierendenprojekte

M. AUER, *Development of a terahertz reflection system*, Betreuerin: M. Jazbinsek, Vertiefungsarbeit 2 im Masterstudiengang.

M. AUER, *Characterization of semiconductors with ultra-broadband THz time-domain spectroscopy and imaging*, Betreuerin: M. Jazbinsek, Vertiefungsarbeit 1 im Masterstudiengang.

L. BAPTISTA, M. WÜEST, *Transdermal Bilirubin Measurement - Optical Setup and Hardware Development*, Betreuer: F. Spano, M. Bonmarin, D. Fehr, Projektpartner: SpectraPad GmbH, Bachelorarbeit in Systemtechnik.

B. BENDER, Y. MEIER, *Long high-precision opto-mechanical delay line for spectroscopy applications*, Betreuer: M. Jazbinsek, U. Puc, Bachelorarbeit in Maschinentechnik.

R. BERTSCHINGER, L. MEIER, *Web-community basierte Datenbank zum Austausch von Materialdaten für die OLED-Entwicklung*, Betreuer: B. Ruhstaller, B. Seeliger, Projektpartner: Fluxim AG, Bachelorarbeit in Informatik.

R. BERTSCHINGER, L. MEIER, *Design einer Datenbank-Applikation für OLED Simulation*, Betreuer: B. Ruhstaller, B. Seeliger, Projektpartner: Fluxim AG, Projektarbeit in Informatik.

A. BOSSHART, R. HEFTI, *Real-time emulation of electrically interfaced mechanical resonators*, Betreuer: F. Spano, M. Bonmarin, D. Fehr, Projektpartner: Rheonics AG, Bachelorarbeit in Elektrotechnik.

A. BOSSHART, R. HEFTI, *Hochsensitiver berührungsloser Berührungssensor*, Betreuer: F. Spano, M. Bonmarin, D. Fehr, Projektpartner: Rieter AG, Projektarbeit in Elektrotechnik.

S. DELBARI, *Introduction to & Computational Performance Analysis of CoatSim: A Simulation Software for Powder Coating Applications*, Betreuer: G. Boiger, Vertiefungsarbeit 2 im Masterstudiengang.

I. HÄUSLER, D. PAPARO, *Development of a New Thermotherapy Device for the Treatment of Cutaneous Leishmaniasis*, Betreuer: F. Spano, M. Bonmarin, D. Fehr, Projektpartner: DNDi Drug for Neglected Diseases initiative, Bachelorarbeit in Systemtechnik.

I. HÄUSLER, D. PAPARO, *Development of a New Thermotherapy Device for the Treatment of Cutaneous Leishmaniasis*, Betreuer: M. Bonmarin, D. Fehr, Projektpartner: DNDi Drug for Neglected Diseases initiative, Projektarbeit in Systemtechnik.

J. HIRSBRUNNER, M. ZOLLER, *Development of a point of care device to measure ammonia in blood - Electronic and Software implementation*, Betreuer: F. Spano, M. Bonmarin, D. Fehr, Bachelorarbeit in Elektrotechnik.

J.-P. KUNTZER, *Aerodynamic database of the JAXA Hayabusa capsule*, Betreuer: G. Boiger, Vertiefungsarbeit 1 im Masterstudiengang.

G. MANFIOLETTI, *Thermisches Design des Akkumulatorcontainers für einen Formula Student Elektrorennwagen*, Betreuer: T. Hocker, Projektarbeit in Maschinentechnik.

Y. MEIER, *Entwicklung eines neuartigen Prozessventils*, Betreuer: G. Boiger, M. Boldrini, Projektpartner: Peter Meyer AG, Projektarbeit in Maschinentechnik.

J. MICHEL RIVERO, *Automated test system for Cloud-based Computational Fluid Dynamics (CFD) simulations*, Betreuer: G. Boiger, Vertiefungsarbeit 2 im Masterstudiengang.

A. NUREDINI, *Berechnung der Leistungsaufnahme von OLED Bildschirmen / Calculation of OLED Display Power Consumption*, Betreuer: C. Kirsch, R. Ruhstaller, Projektpartner: Fluxim AG, Bachelorarbeit in Energie- und Umwelttechnik.

- A. NUREDINI, *Vergleich von simulierten mit realen Energieerträgen an neuartigen Solarzellen*, Betreuer: B. Ruhstaller, H. Nussbaumer, Projektpartner: Fluxim AG, Projektarbeit in Energie- und Umwelttechnik.
- N. OERTLE, *Entwicklung eines neuartigen Magnetventils*, Betreuer: G. Boiger, Projektarbeit in Maschinentechnik.
- P. PREISIG, J. ZWICKY, *Development of a sensitive optical detection system for the measurement of ammonia in blood - System engineering*, Betreuer: F. Spano, M. Bonmarin, D. Fehr, Projektpartner: Versantis AG, Bachelorarbeit in Systemtechnik.
- P. PREISIG, J. ZWICKY, *Development of a New Point of Care Device for the Measurement of Ammonia Concentration in Blood*, Betreuer: M. Bonmarin, D. Fehr, F. Spano, Projektpartner: Versantis AG, Projektarbeit in Systemtechnik.
- C. RUPPERT, *Detection and Classification of Lesions in Breast Ultrasound using a Deep Convolutional Neural Network*, Betreuer: M. Bonmarin, Projektpartner: b-rayZ, Masterarbeit.
- A. SCHMID, T. WEHRMÜLLER, *Transdermal Bilirubin Measurement - Electronic and Software Development*, Betreuer: F. Spano, M. Bonmarin, D. Fehr, Projektpartner: SpectralPad GmbH, Bachelorarbeit in Elektrotechnik.
- A. SCHMID, T. WEHRMÜLLER, *Non Contact Quantitative Assessment of Sweat Glands Activity - Development of a New Prototype*, Betreuer: M. Bonmarin, D. Fehr, F. Spano, Projektpartner: University of Cincinnati, College of Engineering and Applied Science, Projektarbeit in Elektrotechnik.
- T. SÖNDERGAARD, *Simulationen für nachhaltige Gebiets- und Arealentwicklung mit Sektorkopplung*, Betreuer: A. Witzig, Bachelorarbeit in Energie- und Umwelttechnik.
- T. SÖNDERGAARD, *Vorlagen für nachhaltige Gebiets- und Arealentwicklung mit Sektorkopplung*, Betreuer: A. Witzig, Projektarbeit in Energie- und Umwelttechnik.
- J. STOLL, *Physikalische 3D-Simulationen von Heissluftballonfahrten basierend auf realen Wetterdaten*, Betreuer: T. Hocker, Masterarbeit.
- M. YASSIN, *Regulatory requirements to manufacture medical devices in a University-lab setting*, Betreuer: M. Bonmarin, Vertiefungsarbeit 1 im Masterstudiengang.
- D. VAN OERLE, *Simulationsbasierte Aerodynamische Optimierung von Flugobjekten*, Betreuer: G. Boiger, Projektpartner: Kaleidosim Technologies AG, Bachelorarbeit in Maschinentechnik.
- D. VAN OERLE, *Cloud-Based Simulation for Aerodynamic Characterization of Futuristic Spaceships under Atmospheric Conditions*, Betreuer: G. Boiger, Projektpartner: Kaleidosim Technologies AG, Projektarbeit in Maschinentechnik.

## A.2 Wissenschaftliche Publikationen

- S. BABITY, F. COUTURE, E. V. R. CAMPOS, S. HEDTRICH, R. HAGEN, D. FEHR, M. BONMARIN, D. BRAMBILLA, *A naked eye-invisible ratiometric fluorescent microneedle tattoo for real-time monitoring of inflammatory skin conditions*, Advanced Healthcare Materials, S. e2102070, 2021, DOI: 10.1002/adhm.202102070.
- M. BONMARIN, S. LÄUCHLI, A. NAVARINI, *Augmented and virtual reality in dermatology : where do we stand and what comes next?*, 2(1), S. 1–7, 2022, DOI: 10.3390/dermato2010001.
- M. BONMARIN, L. STEINMETZ, F. SPANO, C. GEERS, *Using lock-in thermography to investigate stimuli-responsive nanoparticles in complex environments*, IEEE Instrumentation & Measurement Magazine, 24(4), S. 3–10, 2021, DOI: 10.1109/MIM.2021.9448265.



- B. BÖSCH, D. FEHR, R. ROSSI, M. BONMARIN, L. BOESEL, F. SPANO, *Optical tactile skin: development of an optical electronic skin for pressure sensing applications* [Paper], In: Progress in Biomedical Photonics, The yearly meeting of the Biomedical Photonics Network 2021, 9 December 2021.
- X.-K. CHEN, D. QIAN, Y. WANG, T. KIRCHARTZ, W. TRESS, et al., *A unified description of non-radiative voltage losses in organic solar cells*, Nature Energy, 6(8), S. 799–806, 2021, DOI: 10.1038/s41560-021-00843-4.
- Z. CHEN, J. WANG, H. JIN, J. YANG, Q. BAO, Z. MA, W. TRESS, Z. TANG, *An underestimated photoactive area in organic solar cells based on a ZnO interlayer*, Journal of Materials Chemistry C, 9(35), S. 11753–11760, 2021, DOI: 10.1039/D1TC00745A.
- E. COMI, E. KNAPP, W. WEIDMANN, C. KIRSCH, S. JENATSCH, R. HIESTAND, B. RUHSTALLER, *Sinusoidal small-signal (AC) and steady-state (DC) analysis of large-area solar cells*, Solar Energy Advances, 1(100003), 2021, DOI: 10.1016/j.seja.2021.100003.
- A. DREXELIUS, D. FEHR, V. VERSCOLI, J. HEIKENFELD, M. BONMARIN, *A simple non-contact optical method to quantify in-vivo sweat gland activity and pulsation*, IEEE Transactions on Biomedical Engineering, 2022, DOI: 10.1109/TBME.2022.3151938.
- A. DREXELIUS, D. FEHR, V. VESCOLI, J. HEIKENFELD, M. BONMARIN, *Investigating sweat glands activity using thermal imaging and computational modelling* [Paper], In: Progress in Biomedical Photonics, The yearly meeting of the Biomedical Photonics Network 2021, 9 December 2021.
- F. EBADI GARJAN, B. YANG, Y. KIM, R. MOHAMMADPOUR, N. TAGHAVINIA, A. HAGFELDT, W. TRESS, *When photoluminescence, electroluminescence, and open-circuit voltage diverge: light soaking and halide segregation in perovskite solar cells*, Journal of Material Chemistry A, 9(24), S. 13967–13978, 2021, DOI: 10.1039/D1TA02878B.
- D. FEHR, R. SASSENBURG, J. BLUNSCHI, A. LAY-EKUAKILLE, A. MASSARO, M. BONMARIN, F. SPANO, *A capacitive color-changing electronic skin for touch sensing applications* [Paper], In: Proceedings of the International Symposium on Medical Measurements and Applications, 2021 IEEE International Symposium on Medical Measurements and Applications (MeMeA), Lausanne, Switzerland, 23–25 June 2021, DOI: 10.1109/MeMeA52024.2021.9478674.
- V. N. GORSHKOV, V. V. TERESHCHUK, O. V. BEREZNYKOV, A. S. FALLAH, *Dynamics of quasi-one-dimensional structures under roughening transition stimulated by external irradiation*, Nanomaterials, 12(9), S. 1411, 2022, DOI: 10.3390/nano12091411.
- V. GORSHKOV, P. SAREH, N. NAVADEH, V. TERESHCHUK, A. SOLEIMAN FALLAH, *Multi-resonator metamaterials as multi-band metastructures*, Materials & Design, 202(109522), 2021, DOI: 10.1016/j.matdes.2021.109522.
- T. J. JACOBSSON, A. HULTQUIST, A. GARCÍA-FERNÁNDEZ, A. ANAND, A. AL-ASHOURI, W. TRESS, et al., *An open-access database and analysis tool for perovskite solar cells based on the FAIR data principles*, Nature Energy, 2021, DOI: 10.1038/s41560-021-00941-3.
- L. KELLER, *3D pore microstructures and computer simulation: effective permeabilities and capillary pressure during drainage in Opalinus Clay*, Oil & Gas Science and Technology – Revue d'IFP Energies nouvelles, 76(44), 2021, DOI: 10.2516/ogst/2021027.
- J. KIM, Y. C. PARK, J. H. SEOK, M. JAZBINSEK, O. P. KWON, *Solid-State Molecular Motions in Organic THz Generators*, Advanced Optical Materials 9, 2001521, 2021, DOI: 10.1002/adom.202001521.
- M. KIM, J. JEONG, H. LU, T. K. LEE, W. TRESS, et al., *Conformal quantum dot-SnO<sub>2</sub> layers as electron transporters for efficient perovskite solar cells*, Science, 375(6578), S. 302–306, 2022, DOI: 10.1126/science.abh1885.

- C. KIRSCH, D. FEHR, S. BABITY, A. POLOMSKA, M. DETMAR, M. BONMARIN, D. BRAMBILLA, *Development of a diffusion-weighted mathematical model for intradermal drainage quantification*, 12(4), S. 897–905, DOI: 10.1007/s13346-021-01114-1.
- E. KNAPP, M. BATTAGLIA, T. STADELMANN, S. JENATSCH, B. RUHSTALLER, *XGBoost trained on synthetic data to extract material parameters of organic semiconductors* [Paper], In: Proceedings of the 8th SDS, 8<sup>th</sup> Swiss Conference on Data Science, Lucerne, Switzerland, 9 June 2021, DOI: 10.1109/SDS51136.2021.00015.
- N. K. KUMAWAT, W. TRESS, F. GAO, *Mobile ions determine the luminescence yield of perovskite light-emitting diodes under pulsed operation*, Nature Communications, 12(4899), 2021, DOI: 10.1038/s41467-021-25016-5.
- M. KÜTTINGER, R. RIASSE, J. WŁODARCZYK, P. FISCHER, J. TÜBKE, *Improvement of safe bromine electrolytes and their cell performance in H<sub>2</sub>/Br<sub>2</sub> flow batteries caused by tuning the bromine complexation equilibrium*, Journal of Power Sources, 520(230804), 2022, DOI: 10.1016/j.jpowsour.2021.230804.
- M. KÜTTINGER, R. BRUNETAUD, J. K. WŁODARCZYK, P. FISCHER, J. TÜBKE, *Cycle behaviour of hydrogen bromine redox flow battery cells with bromine complexing agents*, Journal of Power Sources, 495(229820), 2021, DOI: 10.1016/j.jpowsour.2021.229820.
- M. KÜTTINGER, J. K. WŁODARCZYK, D. DAUBNER, P. FISCHER, J. TÜBKE, *High energy density electrolytes for H<sub>2</sub>/Br<sub>2</sub> redox flow batteries, their polybromide composition and influence on battery cycling limits*, RSC Advances, 11(9), S. 5218–5229, 2021, DOI:10.1039/D0RA10721B.
- C. MALNATI, D. FEHR, F. SPANO, M. BONMARIN, *Modeling stratum corneum swelling for the optimization of electrode-based skin hydration sensors*, 21(12), S. 3986, 2021, DOI: 10.3390/s21123986.
- A. MULARCZYK, A. MICHALSKI, M. STRIEDNIG, R. HERRENDÖRFER, T. J. SCHMIDT, F. N. BÜCHI, J. ELLER, *Mass transport limitations of water evaporation in polymer electrolyte fuel cell gas diffusion layers*, Energies, 14(10), S. 2967, 2021, DOI: 10.3390/en14102967.
- N. NAVADEH, P. SAREH, V. G. BASOVSKY, I. M. GORBAN, A. SOLEIMAN FALLAH, *Nonlinear vibrations in homogeneous non-prismatic Timoshenko cantilevers*, Journal of Computational and Nonlinear Dynamics, 16(10), 2021, DOI: 10.1115/1.4051820.
- N. NAVADEH, I. GORSHKO, Y. ZHUK, F. ETMINAN MOGHADAM, A. SOLEIMAN FALLAH, *Finite element analysis of wind turbine blade vibrations*, Vibration, 4(2), S. 310–322, 2021, DOI: 10.3390/vibration4020020.
- A. POLOMSKA, E. GOUSOPOULOS, D. FEHR, A. BACHMANN, M. BONMARIN, M. DETMAR, N. LINDENBLATT, *Development and clinical validation of the LymphMonitor technology to quantitatively assess lymphatic function*, Diagnostics, 11(10), S. 1873, 2022, DOI: 10.3390/diagnostics11101873.
- U. PUC, T. BACH, P. GÜNTHER, M. ZGONIK, M. JAZBINSEK, *Ultra-broadband and high-dynamic-range THz time-domain spectroscopy system based on organic crystal emitter and detector in transmission and reflection geometry*, Advanced Photonics Research 2(4), S. 2000098, 2021, DOI: 10.1002/adpr.202000098.
- F. SADEGH, S. AKIN, M. MOGHADAM, R. KESHAVARZI, V. MIRKHANI, M. A. RUIZ-PRECIADO, E. AKMAN, H. ZHANG, M. AMINI, S. TANGESTANINEJAD, I. MOHAMMADPOOR-BALTORK, M. GRAETZEL, A. HAGFELDT, W. TRESS, *Copolymer-templated nickel oxide for high-efficiency mesoscopic perovskite solar cells in inverted architecture*, Advanced Functional Materials, 31(33), 2021, DOI: 10.1002/adfm.202102237.
- S. SEM, S. JENATSCH, K. STAVROU, A. DANOS, A. P. MONKMAN, B. RUHSTALLER, *Determining non-radiative decay rates in TADF compounds using coupled transient and steady state optical data*, Journal of Materials Chemistry C, 2022, DOI: 10.1039/D1TC05594A.
- J.-H. SEOK, U. PUC, S.-J. KIM, W. YOON, H. YUN, I. C. YU, F. ROTERMUND, D. KIM, M. JAZBINSEK, O.-P. KWON, *High-density organic electro-optic crystals for ultra-broadband THz spectroscopy*, Advanced Optical Materials, 9(17), S. 2100618, 2021, DOI: 10.1002/adom.202100618.

- M. T. SIRTIL, R. HOOIJER, M. ARMER, F. EBADI GARJAN, M. MOHAMMADI, C. MAHEU, A. WEIS, B. T. VAN GORKOM, S. HÄRINGER, R. A. J. JANSSEN, T. MAYER, V. DYAKONOV, W. TRESS, T. BEIN, *2D/3D hybrid Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> double perovskite solar cells : improved energy level alignment for higher contact-selectivity and large open circuit voltage*, *Advanced Energy Materials*, 12(7), S. 2103215, 2022, DOI: 10.1002/aenm.202103215.
- M. T. SIRTIL, F. EBADI, B. T. VAN GORKOM, P. GANSWINDT, R. A. J. JANSSEN, T. BEIN, W. TRESS, *The bottlenecks of Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> solar cells: how contacts and slow transients limit the performance*, *Advanced Optical Materials*, 9(14), S. 2100202, 2021, DOI: 10.1002/adom.202100202.
- L. STEINMETZ, C. GEERS, M. BONMARIN, B. ROTHEN-RUTISHAUSER, A. PETRI-FINK, M. LATTUADA, *Experimental and theoretical validation of plasmonic nanoparticle heat generation by using lock-in thermography*, *The Journal of Physical Chemistry C*, 125(10), S. 5890–5896, 2021, DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c11419.
- P. TENG, S. REICHERT, W. XU, S.-C. YANG, F. FU, Y. ZOU, C. YIN, C. BAO, M. KARLSSON, X. LIU, J. QIN, T. YU, W. TRESS, Y. YANG, B. SUN, C. DEIBEL, F. GAO, *Degradation and self-repairing in perovskite light-emitting diodes*, *Matter*, 4(11), S. 3710–3724, 2021, DOI: 10.1016/j.matt.2021.09.007.
- W. TRESS, M. T. SIRTIL, *Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> Double perovskites as lead-free alternatives for perovskite solar cells?*, *Solar RRL*, 2021, DOI: 10.1002/solr.202100770.
- A. UMMADISINGU, S. MELONI, A. MATTONI, W. TRESS, M. GRÄTZEL, *Crystal-size-induced band gap tuning in perovskite films*, *Angewandte Chemie: International Edition*, 60(39), S. 21368–21376, 2021, DOI: 10.1002/anie.202106394.
- R. WICK-JOLIAT, S. MAUCHLE, R. KONTIC, S. EHRTAT, T. HOCKER, D. PENNER, *MoSi<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/feldspar composites for injection-molded ceramic heating elements*, *Advanced Engineering Materials*, 23(9), S. 2100517, 2021, DOI: 10.1002/adem.202100517.
- J. K. WŁODARCZYK, M. KÜTTINGER, A. K. FRIEDRICH, J. O. SCHUMACHER, *Exploring the thermodynamics of the bromine electrode in concentrated solutions for improved parametrisation of hydrogen-bromine flow battery models*, *Journal of Power Sources*, 508, 2021, DOI: 10.1016/j.jpowsour.2021.230202.
- W. XIANG, S. (F.) LIU, W. TRESS, *A review on the stability of inorganic metal halide perovskites: challenges and opportunities for stable solar cells*, *Energy & Environmental Science*, 14(4), S. 2090–2113, 2021, DOI: 10.1039/D1EE00157D.
- W. XIANG, S. (F.) LIU, W. TRESS, *Interfaces and interfacial layers in inorganic perovskite solar cells*, *Angewandte Chemie: International Edition*, 2021(60), 2021, DOI: 10.1002/anie.202108800.
- S. ZEDER, B. RUHSTALLER, U. AEBERHARD, *Assessment of photon recycling in perovskite solar cells by fully coupled optoelectronic simulation*, *Physical Review Applied*, 17(1), S. 014023, 2022, DOI: 10.1103/PhysRevApplied.17.014023.
- A. ZUBIAGA, C. KIRSCH, G. K. BOIGER, M. BONMARIN, *A simple instrument to measure the thermal transport properties of the human skin* [Paper], In: *Proceedings of the International Symposium on Medical Measurements and Applications*, 2021 IEEE International Symposium on Medical Measurements and Applications (MeMeA), Lausanne (Switzerland), 23–25 June 2021, DOI: 10.1109/MeMeA52024.2021.9478754.
- A. ZUBIAGA, S. MADSEN, H. KHAWAJA, G. K. BOIGER, *Atmospheric contamination of coastal cities by the exhaust emissions of docked marine vessels: the case of Tromsø*, *Environments*, 8(9), S. 88, 2021, DOI: 10.3390/environments8090088.

### A.3 Buchkapitel

D. BRUNNER, G. K. BOIGER, H. KHAWAJA, *Investigation of torsional vibration using weak FSI capabilities*, In: M. Moatamedi, T. Rahulan, H. Khawaja, Hrsg., *Multiphysics Simulations in Automotive and Aerospace Applications*, Academic Press, S. 65–91, 2021, DOI: 10.1016/B978-0-12-817899-7.00007-1.

C. PICKHARDT, H. U. FUCHS, E. DUMONT, K. HÜGEL, A. WITZIG, *Modellieren, Visualisieren und die Simulation dynamischer Systeme als Seamless Learning: ein Beitrag zu diesem Prozess aus der Praxis am Beispiel eines Mathematikmoduls*, In: B. Dilger, J. Erlemann, C. Müller Werder, C. Rapp, Hrsg., *Seamless Learning*, Wiesbaden: Springer, S. 35–63, 2022, DOI: 10.1007/978-3-658-34698-0\_2.

Y. SAFA, A. SOLEIMAN FALLAH, M. MOATAMEDI, *Multiphysics of wind turbines in extreme loading conditions*, Academic Press, 2022.

W. TRESS, *Physics of perovskite solar cells: efficiency, open-circuit voltage, and recombination*, In: T. Miyasaka, Hrsg., *Perovskite Photovoltaics and Optoelectronics: From Fundamentals to Advanced Applications*, Weinheim: Wiley, S. 127–172, 2022, DOI: 10.1002/9783527826391.ch5.

W. TRESS, *Hysteresis in J–V characteristics*, In: H. Fujiwara, Hrsg., *Hybrid Perovskite Solar Cells: Characteristics and Operation*, Weinheim: Wiley, S. 429–461, 2021, DOI: 10.1002/9783527825851.ch16.

A. WITZIG, *Einzelprojekt “Wellen”*, In: B. Dilger, J. Erlemann, C. Müller Werder, C. Rapp, Hrsg., *Seamless Learning*, Wiesbaden: Springer, S. 93–121, 2022, DOI: 10.1007/978-3-658-34698-0\_4.

### A.4 Konferenzen und Workshops

G. K. BOIGER, *A unified approach on teaching and modelling 1D dynamic Multiphysics systems*, NAFEMS World Congress 2021, Salzburg, online, 25–29 October 2021.

G. K. BOIGER, D. SHARMAN, D. DREW, *KaleidoSim: massive simultaneous cloud computing for multiphysics simulations*, International Conference of Multiphysics, online, 9–10 December 2021.

G. K. BOIGER, D. SHARMAN, B. SIYAHHAN, V. LIENHARD, M. BOLDRINI, D. DREW, *A massive simultaneous cloud computing platform for OpenFOAM*, 9th OpenFOAM Conference, online, 19–20 October 2021.

F. EBADI GARJAN, B. YANG, W. TRESS, *In-Operando PL measurements on perovskite solar cells with and without phase-segregation*, EU PVSEC 2021, online, 6–10 September 2021.

R. HERRENDÖRFER, M. COCHET, P. BOILLAT, J. SCHUMACHER, *3-D simulation of heat and water transport in PEFCs during evaporative cooling and humidification*, EFCF 2021 Low-Temperature Electrolysers, Fuel Cells & H<sub>2</sub> Processing, online, 29 June–2 July 2021.

P. MARMET, L. HOLZER, T. HOCKER, G. K. BOIGER, J. HILDEN, S. REEB, M. FINGERLE, *Generation of virtual three-phase structures based on Gaussian random fields: an important option for Digital Materials Design of solid oxide fuel cell electrodes*, 10. GeoDict User Meeting, online, 4.–8. Oktober 2021.

G. MOURUGA, E. BAUDRIN, M. COURTY, T. J. SCHMIDT, J. SCHUMACHER, *Towards rigorous thermodynamics in aqueous flow batteries: measuring activity coefficients with differential scanning calorimetry*, ModVal 17: 17th Symposium on Modeling and Experimental Validation of Electrochemical Energy Technologies, online, 20–22 April 2021.

R. P. SCHÄRER, J. WŁODARCZYK, J. SCHUMACHER, *Towards multiscale modelling of porous electrodes: connecting the meso- to the macroscopic scale*, Applied Mathematics and Simulation for Semiconductors and Electrochemical Systems (AMaSiS), online, 6–9 September 2021.

B. SIYAHHAN, G. K. BOIGER, *A semi-automated Multiphysics simulation software for process design in the powder coating industry*, International Conference of Multiphysics, online, 9–10 December 2021.

B. SIYAHHAN, G. K. BOIGER, *Development of a dynamic Eulerian-Lagrangian particle OpenFOAM solver for the simulation of powder coating processes*, 9th OpenFOAM Conference, online, 19–20 October 2021.

W. TRESS, *Characterizing perovskite solar cells and LEDs*, ICAMD21, online, 6–9 December 2021.

W. TRESS, *Physics of perovskite optoelectronic devices*, nanoGe Fall Meeting, online, 18–22 October 2021.

W. TRESS, *Perovskite solar cells*, XVII encuentro de fisica, Quito, Ecuador, online, 25–29 October 2021.

W. TRESS, *The various effects of ion migration on perovskite devices*, HOPV21, online, 24–28 May, 2021.

J. K. WLODARCZYK, N. BALTES, A. FRIEDRICH, J. SCHUMACHER, *Thermodynamics and diffusional mass transport problems in concentrated electrolytes: an application in H<sub>2</sub>/Br<sub>2</sub> redox flow battery modeling*, 17th Symposium on Modeling and Experimental Validation of Electrochemical Energy Technologies (MODVAL 17), online, 20–22 April 2021.

## A.5 Vorlesungen

T. BERGMANN, T. HOCKER, *Thermische Energiesysteme für Maschinentechnik und Energie- und Umwelttechnik*, Vorlesung, FS22, Bachelor of Science.

D. BERNHARDSGRÜTTER, *Analysis 2 für Aviatik und Verkehrssysteme*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.

D. BERNHARDSGRÜTTER, *Lineare Algebra 2 für Elektrotechnik und Systemtechnik*, Vorlesung, FS22, Bachelor of Science.

D. BERNHARDSGRÜTTER, *Analysis 1 für Aviatik und Verkehrssysteme*, Vorlesung und Praktikum, HS21, Bachelor of Science.

D. BERNHARDSGRÜTTER, *Lineare Algebra 1 für Elektrotechnik und Systemtechnik*, Vorlesung, HS21, Bachelor of Science.

G. BOIGER, *Fluid- und Thermodynamik 1 für Maschinentechnik und Energie- und Umwelttechnik*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.

G. BOIGER, *TSM Two Phase Flow / Heat- and Mass Transfer*, FS22, Master of Science in Engineering.

G. BOIGER, *EVA OpenFoam II - Thermo-Fluid-Dynamic Model Development using OpenFoam*, FS22, Master of Science in Engineering.

G. BOIGER, *TSM Advanced Thermodynamics*, HS21, Master of Science in Engineering.

G. BOIGER, *EVA OpenFoam I - Thermo-Fluid-Dynamic Model Development using OpenFoam*, HS21, Master of Science in Engineering.

M. BONMARIN, *Höhere Mathematik 2 für Informatiker*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.

M. BONMARIN, *Physik 2 für Systemtechnik*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.

M. BONMARIN, D. FEHR, F. SPANO, *Thermal Devices in Medicine für Systemtechnik*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.

M. BONMARIN, *Höhere Mathematik für Informatiker 1*, Vorlesung und Praktikum, HS21, Bachelor of Science.

M. BONMARIN, *Physik 1 für Systemtechnik*, Vorlesung und Praktikum, HS21, Bachelor of Science.



- D. FEHR, *Grundlagen der Elektrotechnik und Digitaltechnik für Informatik*, Praktikum, HS21, Bachelor of Science.
- T. HOCKER, *Aviation Projects 2 für Aviatik*, Praktikum, FS22, Bachelor of Science.
- T. HOCKER, *Physik 2 für Aviatik*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.
- T. HOCKER, *Aviation Projects 1 für Aviatik*, Praktikum, HS21, Bachelor of Science.
- T. HOCKER, *Physik 1 für Aviatik*, Vorlesung und Praktikum, HS21, Bachelor of Science.
- M. JAZBINSEK, *Physik 2 für Maschinentechnik und Energie- und Umwelttechnik*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.
- M. JAZBINSEK, *Physik 1 für Maschinentechnik und Energie- und Umwelttechnik*, Vorlesung und Praktikum, HS21, Bachelor of Science.
- C. KIRSCH, *Analysis 2 für Systemtechnik*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.
- C. KIRSCH, *Numerik für Systemtechnik*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.
- C. KIRSCH, *Analysis 1 für Systemtechnik*, Vorlesung und Praktikum HS21, Bachelor of Science.
- C. KIRSCH, *Analysis 3 für Systemtechnik*, Vorlesung und Praktikum, HS21, Bachelor of Science.
- E. KNAPP, *Numerik für Aviatik*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.
- K. PERNSTICH, *Grundlagenprojekt 2 für Verkehrssysteme*, Praktikum, FS22, Bachelor of Science.
- K. PERNSTICH, *Physik 2 für Aviatik und Verkehrssysteme*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.
- K. PERNSTICH, *Grundlagenprojekt 1 für Verkehrssysteme*, Praktikum, HS21, Bachelor of Science.
- K. PERNSTICH, *Physik 1 für Aviatik und Verkehrssysteme*, Vorlesung und Praktikum, HS21, Bachelor of Science.
- M. ROOS, *Höhere Mathematik 2 für Informatiker*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.
- M. ROOS, *Numerik für Elektrotechnik und Systemtechnik*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.
- M. ROOS, *FTP\_Tensors*, FS22, Master of Science in Engineering.
- M. ROOS, *Höhere Mathematik für Informatiker 1*, Vorlesung und Praktikum, HS21, Bachelor of Science.
- M. ROOS, *Scientific Computing für Informatik*, Vorlesung und Praktikum, HS21, Bachelor of Science.
- B. RUHSTALLER, *Advanced Thin Films*, FS22, Master of Science in Engineering.
- B. RUHSTALLER, *Applied Photonics*, HS21, Master of Science in Engineering.
- B. RUHSTALLER, *EVA Introductory Optics for Photonics*, HS21, Master of Science in Engineering.
- M. SCHMID, *Analysis 2 für Data Science und Wirtschaftsingenieurwesen*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.
- M. SCHMID, *Lineare Algebra 2 für Systemtechnik*, Vorlesung, FS22, Bachelor of Science.
- M. SCHMID, *Analysis 1 für Data Science und Wirtschaftsingenieurwesen*, Vorlesung und Praktikum, HS21, Bachelor of Science.
- M. SCHMID, *Analysis 3 für Systemtechnik*, Vorlesung und Praktikum, HS21, Bachelor of Science.
- M. SCHMID, *Lineare Algebra 1 für Systemtechnik*, Vorlesung, HS21, Bachelor of Science.
- J. SCHUMACHER, *Lineare Algebra 2 für Systemtechnik*, Vorlesung, FS22, Bachelor of Science.
- J. SCHUMACHER, *Multiphysics Modelling and Simulation*, FS22, Master of Science in Engineering.

J. SCHUMACHER, *Lineare Algebra 1 für Systemtechnik*, Vorlesung, HS21, Bachelor of Science.

W. TRESS, *Physik 2 für Energie- und Umwelttechnik*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.

W. TRESS, *Physik 1 für Maschinentechnik und Energie- und Umwelttechnik*, Vorlesung und Praktikum, HS21, Bachelor of Science.

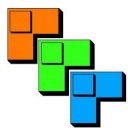
A. WITZIG, *Physik 3 für Systemtechnik*, Vorlesung und Praktikum, FS22, Bachelor of Science.

A. WITZIG, *Physik Engines für Informatik*, Vorlesung, FS22, Bachelor of Science.

A. WITZIG, *Sektorkopplung für Maschinentechnik und Energie- und Umwelttechnik*, FS22, Bachelor of Science.

A. WITZIG, *Physik 3 für Verkehrssysteme*, Vorlesung und Praktikum, HS21, Bachelor of Science.

## A.6 ICP-Spin-off-Firmen



**NM**  
Numerical  
Modelling GmbH

[www.nmtec.ch](http://www.nmtec.ch)

Die Numerical Modelling GmbH arbeitet auf dem Gebiet des Computer Aided Engineering (CAE) und bietet Dienstleistungen und Simulationstools kleinen und mittleren Unternehmen an. Unsere Kernkompetenz ist der Wissenstransfer, indem wir die Lücke zwischen wissenschaftlichem Know-how und seiner Anwendung in der Industrie schliessen. Mit unserem Wissen aus Physik, Chemie und den Ingenieurwissenschaften sind wir in der Lage, Ihren Produktentwicklungszyklus zu unterstützen und uns Ihrem Zeit- und Kostenrahmen anzupassen. Wir schaffen häufig sogenannte kundenspezifische CAE-Tools, in die die wissenschaftlichen Kenntnisse, die für Ihr Produkt nötig sind, eingebettet sind. In dieser Form kann es leicht innerhalb Ihrer F&E-Abteilung eingesetzt werden, aktuelle Projekte unterstützen sowie die Fähigkeiten Ihrer Mitarbeiter verbessern. Fragen Sie uns nach unserem unverbindlichen Beratungsangebot, das alle Gebiete des wissenschaftlichen Wissenstransfers umfasst.



[www.fluxim.com](http://www.fluxim.com)

Fluxim ist ein Anbieter von Simulationssoftware und Messhardware für die Display-, Beleuchtungs- und Photovoltaik-Industrie weltweit. Die Hauptaktivität von Fluxim ist die Entwicklung der Simulationssoftware Setfos und Laoss, ebenso wie der Messsysteme Paios, Phelos und Litos. Die Kombination der Simulationssoftware mit Messdaten erlaubt die Bestimmung von Material- und Bauteilparametern. Die F&E-Tools werden weltweit in industriellen und akademischen Forschungslabors eingesetzt, um neue Bauelemente und Halbleitermaterialien mit verbesserter Leistung zu entwickeln und um die Physik der Bauelemente zu untersuchen.



[www.coatmaster.ch](http://www.coatmaster.ch)

Die coatmaster AG (zuvor Winterthur Instruments) entwickelt Messsysteme für schnelle berührungslose und zerstörungsfreie Prüfung industrieller Beschichtungen. Mit diesen Messsystemen können Beschichtungsdicken und Materialparameter bestimmt werden, etwa die Porosität und die Kontaktqualität, um beispielsweise Delamination zu entdecken. Das System basiert auf optisch-thermischen Messverfahren und lässt sich auf alle Arten von Beschichtungs- und Substratmaterialien anwenden. Unsere Messsysteme bieten die einzigartige Möglichkeit der berührungslosen und zerstörungsfreien Prüfung von beliebigen Beschichtungen auf Substraten.



[www.nanolockin.com](http://www.nanolockin.com)

NanoLockin entwickelt eine neue Benchmark-Technologie für den Nachweis und die Analyse von Nanopartikeln in allen Arten von Produkten. Das Unternehmen hat den Fribourg Innovation Award 2018 gewonnen.



**ZARAWIND** *More than green power*

[www.zarawind.com](http://www.zarawind.com)

Zarawind ist ein Startup mit Sitz in Winterthur, das an der Entwicklung einer in der Luft schwebenden Windenergie-turbine beteiligt ist. Das Ziel der Firma ist es, heute noch ungenutzte erneuerbare Energiequellen zu erschliessen. Die Technologie von Zarawind strebt an, erneuerbare und kostengünstige Elektrizität aus der in grosser Höhe und starken und konsistenten Windkraft zu produzieren. Das kann durch einen Rotor erreicht werden, der durch einen Aerostaten auf mehrere hundert Meter über Grund angehoben wird. Die Windkraft ist eine starke, ständig verfügbare Energiequelle. Das Zarawind-Konzept stellt dauerhaften Betrieb sicher und verhindert Lärmprobleme, flackernde Lichtreflektionen und Vogelkollisionen. Es ist auch für netzferne Regionen geeignet und produziert Strom zu geringen Kosten.



[www.reorbis.ch](http://www.reorbis.ch)

Die Reorbis GmbH mit Sitz in Winterthur hat das Ziel, Dienstleistungen für die verarbeitende Industrie in der Form von Lebenszyklusanalysen (LCA) anzubieten. In der Aluminiumindustrie besteht aufgrund einer neuen Norm (Aluminium Stewardship Initiative, ASI) grosses Interesse für LCA. Das Angebot richtet sich in erster Linie auf die Erreichung der Zertifizierung ASI-Norm. Die Kreislaufwirtschaft wird neben Aluminium auf weitere Rohstoffe angewandt.

## A.7 ICP-Mitarbeitende

| Name                        | Funktion                        | Email                                          |
|-----------------------------|---------------------------------|------------------------------------------------|
| Michael Auer                | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:auei@zhaw.ch">auei@zhaw.ch</a> |
| Andreas Bachmann            | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:bacr@zhaw.ch">bacr@zhaw.ch</a> |
| Mattia Battaglia            | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:batg@zhaw.ch">batg@zhaw.ch</a> |
| David Bernhardsgrütter      | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:bens@zhaw.ch">bens@zhaw.ch</a> |
| Prof. Dr. Gernot Boiger     | Dozent                          | <a href="mailto:boig@zhaw.ch">boig@zhaw.ch</a> |
| Marlon Boldrini             | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:bolm@zhaw.ch">bolm@zhaw.ch</a> |
| Prof. Dr. Mathias Bonmarin  | Dozent                          | <a href="mailto:bmat@zhaw.ch">bmat@zhaw.ch</a> |
| Vincent Buff                | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:buff@zhaw.ch">buff@zhaw.ch</a> |
| Ennio Comi                  | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:comi@zhaw.ch">comi@zhaw.ch</a> |
| Dr. Firouzeh Ebadi Garjan   | Wissenschaftliche Mitarbeiterin | <a href="mailto:ebad@zhaw.ch">ebad@zhaw.ch</a> |
| Sandro Ehrat                | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:ehrd@zhaw.ch">ehrd@zhaw.ch</a> |
| Daniel Fehr                 | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:fehd@zhaw.ch">fehd@zhaw.ch</a> |
| Dr. Max Frioud              | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:friu@zhaw.ch">friu@zhaw.ch</a> |
| Raphael Hagen               | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:hagp@zhaw.ch">hagp@zhaw.ch</a> |
| Prof. Dr. Thomas Hocker     | Dozent                          | <a href="mailto:hoto@zhaw.ch">hoto@zhaw.ch</a> |
| Dr. Lorenz Holzer           | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:holz@zhaw.ch">holz@zhaw.ch</a> |
| Marco Hostettler            | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:hose@zhaw.ch">hose@zhaw.ch</a> |
| Dr. Mojca Jazbinsek         | Dozentin                        | <a href="mailto:jazb@zhaw.ch">jazb@zhaw.ch</a> |
| Dr. Lukas Keller            | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:kelu@zhaw.ch">kelu@zhaw.ch</a> |
| David Kempf                 | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:kemf@zhaw.ch">kemf@zhaw.ch</a> |
| Dr. Christoph Kirsch        | Dozent                          | <a href="mailto:kirs@zhaw.ch">kirs@zhaw.ch</a> |
| Dr. Gabriela Kissling       | Wissenschaftliche Mitarbeiterin | <a href="mailto:kisi@zhaw.ch">kisi@zhaw.ch</a> |
| Dr. Evelyne Knapp           | Dozentin                        | <a href="mailto:hube@zhaw.ch">hube@zhaw.ch</a> |
| Fabian Leuppi               | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:leui@zhaw.ch">leui@zhaw.ch</a> |
| Viktor Lienhard             | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:lied@zhaw.ch">lied@zhaw.ch</a> |
| Philip Marmet               | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:mame@zhaw.ch">mame@zhaw.ch</a> |
| Jhimy Michel Rivero         | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:micr@zhaw.ch">micr@zhaw.ch</a> |
| Mahdi Mohammadi             | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:mohd@zhaw.ch">mohd@zhaw.ch</a> |
| Dr. Kurt Pernstich          | Dozent                          | <a href="mailto:pern@zhaw.ch">pern@zhaw.ch</a> |
| Dr. Uros Puc                | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:pucu@zhaw.ch">pucu@zhaw.ch</a> |
| Dr. Markus Regnat           | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:rega@zhaw.ch">rega@zhaw.ch</a> |
| Prof. Dr. Markus Roos       | Lehrbeauftragter                | <a href="mailto:roor@zhaw.ch">roor@zhaw.ch</a> |
| Prof. Dr. Beat Ruhstaller   | Dozent                          | <a href="mailto:ruhb@zhaw.ch">ruhb@zhaw.ch</a> |
| Dr. Amit Sachan             | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:sach@zhaw.ch">sach@zhaw.ch</a> |
| Dr. Yasser Safa             | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:safa@zhaw.ch">safa@zhaw.ch</a> |
| Dr. Guido Sartoris          | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:srts@zhaw.ch">srts@zhaw.ch</a> |
| Dr. Roman Schäfer           | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:scsl@zhaw.ch">scsl@zhaw.ch</a> |
| Andreas Schiller            | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:scdr@zhaw.ch">scdr@zhaw.ch</a> |
| Dr. Matthias Schmid         | Dozent                          | <a href="mailto:scmi@zhaw.ch">scmi@zhaw.ch</a> |
| Alain Schubiger             | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:scug@zhaw.ch">scug@zhaw.ch</a> |
| Prof. Dr. Jürgen Schumacher | Dozent                          | <a href="mailto:schm@zhaw.ch">schm@zhaw.ch</a> |
| Darren Sharman              | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:shaa@zhaw.ch">shaa@zhaw.ch</a> |
| Bercan Siyahhan             | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:siya@zhaw.ch">siya@zhaw.ch</a> |
| Dr. Fabrizio Spano          | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:span@zhaw.ch">span@zhaw.ch</a> |
| Jessica Stoll               | Wissenschaftliche Assistentin   | <a href="mailto:stlj@zhaw.ch">stlj@zhaw.ch</a> |
| Camilo Tello Fachin         | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:telo@zhaw.ch">telo@zhaw.ch</a> |
| Miguel Torre                | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:torc@zhaw.ch">torc@zhaw.ch</a> |
| Dr. Wolfgang Tress          | Dozent                          | <a href="mailto:trew@zhaw.ch">trew@zhaw.ch</a> |
| Prof. Dr. Andreas Witzig    | Dozent, Institutsleiter         | <a href="mailto:wita@zhaw.ch">wita@zhaw.ch</a> |
| Jakub Wlodarczyk            | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:wlod@zhaw.ch">wlod@zhaw.ch</a> |
| Oliver Zbinden              | Wissenschaftlicher Assistent    | <a href="mailto:zbio@zhaw.ch">zbio@zhaw.ch</a> |
| Dr. Simon Züfle             | Wissenschaftlicher Mitarbeiter  | <a href="mailto:zufe@zhaw.ch">zufe@zhaw.ch</a> |

## A.8 Standort

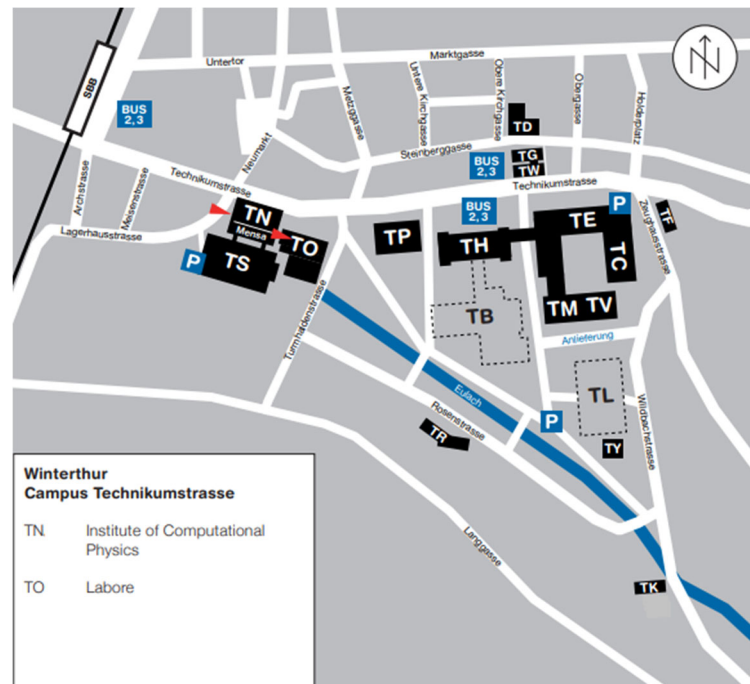
### ICP Institute of Computational Physics

Technikumstrasse 71  
Postfach  
CH-8401 Winterthur

[www.zhaw.ch/icp](http://www.zhaw.ch/icp)

#### Kontakt

Andreas Witzig  
Fon +41 58 934 45 73  
[andreas.witzig@zhaw.ch](mailto:andreas.witzig@zhaw.ch)



TN-Gebäude





Zürcher Hochschule  
für Angewandte Wissenschaften

## **School of Engineering**

ICP Institute of  
Computational Physics

Technikumstrasse 71  
Postfach  
CH-8401 Winterthur

Telefon +41 58 934 71 71  
[info.engineering@zhaw.ch](mailto:info.engineering@zhaw.ch)  
[www.zhaw.ch/icp](http://www.zhaw.ch/icp)