

# Sachbericht zu dem SCALEXA-Projekt MExMeMo Teil I

## Virtuelles skalenübergreifendes Design zur Teilchensimulation mittels modularem Supercomputing

Fördermaßnahme	Neue Methoden und Technologien für das Exascale-Höchstleistungsrechnen (SCALEXA)
Förderkennzeichen	16ME0658K
Zuwendungsempfänger	Prof. Dr. Marcus Müller, Georg-August-Universität, Göttingen
Bearbeitungszeitraum	01.09.2022 – 31.12.2025

## 1 Ursprüngliche Aufgabenstellung

Übergeordnetes Ziel des SCALEXA-Projekts MExMeMo war das digitale Design funktionaler Materialien am anspruchsvollen Beispiel isoporöser Diblock-Kopolymermembranen sowie die nachhaltige Etablierung von High-Performance Computing (HPC) als integrales Werkzeug der Polymerforschung und technologischen Wertschöpfung.

Die Membranherstellung stellt ein ausgeprägtes Nichtgleichgewichtsproblem dar, bei dem gekoppelte Strukturbildungsprozesse simultan auf molekularen und makroskopischen Skalen ablaufen und daher mit einzelnen Simulationsmethoden nur eingeschränkt prädiktiv zugänglich sind. Zur Überbrückung der Skalen – von der molekularen Architektur im Nanometerbereich bis zur makroporösen Membranstruktur im Mikrometermaßstab – wurden zwei komplementäre Modellierungsansätze – molekular aufgelöste Teilchensimulationen mit SOMA und Kontinuumsmodellierung auf Basis des Uneyama-Doi-Modells (UDM) – zu einem digitalen Zwilling gekoppelt. Das Teilchenmodell beschreibt Mikro- und Makrophasenseparation einschließlich thermischer Fluktuationen und Vitrifizierung auf molekularer Ebene, während das Kontinuumsmodell die prozessgetriebene Dynamik der Nichtgleichgewicht-Membranmorphologien auf großen Längen- und Zeitskalen rechnerisch effizient erfasst. Die explizite Auflösung der molekularen Skala ist entscheidend, um chemische Spezifität und eine belastbare Materialauswahl sicherzustellen. Die makroskopische Skala hingegen bestimmt die funktionalen Leistungsparameter der Membran, insbesondere Selektivität/Porengröße, Permeabilität und mechanische Stabilität. Erst die konsistente Kopplung beider Ebenen ermöglicht eine quantitative Verknüpfung zwischen molekularer Struktur und funktionalen Membraneigenschaften.

Die folgenden spezifischen Projektziele wurden verfolgt:

- Ziel 1: Kopplung der Teilchensimulation mit einem Kontinuumsmodell
- Ziel 2: Erweiterung der Funktionalität und Optimierung von SOMA
- Ziel 3: Virtuelles skalenübergreifendes Design von Blockcopolymermembranen
- Ziel 4: Vereinfachung des Zugangs zu modularen Supercomputerarchitekturen (MSA) und Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchts

## 2 Projektablauf, Kooperationen und wesentliche Ergebnisse

Gemeinsam mit den Gruppen von V. Abetz (UHH), R. Aydin und C. Cyron (Hereon), A. Herten (JSC) sowie S. Happ und S. Pickartz (ParTec) wurde ein konkurrent gekoppeltes Multiskalen-Simulationsframework für die SNIPS-basierte Membranherstellung entwickelt. Simulationen erfolgten auf dem modularen Supercomputer JUWELS sowie dem (Test-)Exascale-System JEDI am Jülich Supercomputing Centre (JSC) [1–5]; die Details des Kopplungsschemas und eine Anwendung sind in Ref. [8] zu finden. Ziel 1 wurde damit vollständig erreicht.

Die Funktionalität der Simulationssoftware wurde substantiell erweitert und die Ressourceneffizienz signifikant gesteigert: SOMA kann nun mehrere molekulare Komponenten ohne signifikanten Performanceverlust behandeln und nicht-periodische Randbedingungen wurden implementiert. In Zusammenarbeit mit A. Debah und A. Herten (JSC) wurde die Single-GPU-Leistung um den Faktor 1.6 (SOMA) bzw. 1.7 (UDM) gesteigert (vgl. Fig. 2 in [8]). Der Erfolgsindikator „Verbesserung Single-GPU-Leistung um 15%“ wurde damit deutlich übertroffen. Der Indikator „Ausführung auf mind. 20 GPUs mit  $\geq 70\%$  Skalierungseffizienz“ wurde mittels 4 GPUs pro MPI-Prozess ebenso erfüllt (Meilenstein M4.3). Ziel 2 wurde vollständig erreicht.

Eine gemeinsam mit ParTec entwickelte Koordinator-Bibliothek [8] ermöglicht die adaptive Ressourcensteuerung. Dabei fungiert die UDM-Simulation als Parent-Modell, das die hochaufgelösten, rechenintensiven Teilchensimulation SOMA in einer dynamisch ausgewählten Unterdomäne initiiert und steuert. Dieses hierarchische Parent-Child-Prinzip ermöglicht eine adaptive, ressourceneffiziente Steuerung der Simulation komplexer Multiskalenprozesse und bildet die algorithmische Grundlage für den KI-gestützten Simulationsworkflow. Ein gemeinsam mit M. Busch

und R. Aydin (Hereon/UHH) entwickeltes neuronales Netzwerk prognostiziert den lokalen Modellfehler des Kontinuumsmodells und aktiviert Teilchensimulationen ausschließlich in physikalisch relevanten Raum-Zeit-Bereichen [7]. Dadurch konnte der Ressourcenbedarf drastisch reduziert und ein bis zu 17facher Speed-up gegenüber rein teilchenbasierten Simulationen erzielt werden [8], womit das angestrebte Ziel eines 5fachen Speed-ups deutlich übertroffen wurde.

Durch systematische Parametrisierung und Abgleich mit Experimenten von L. Großmann, M. Radjabian und V. Abetz (UHH) wurde ein konsistenter Parametersatz für Teilchen- und Kontinuumsmodell etabliert. Im digitalen Zwilling können thermische Fluktuationen auf die Teilchensimulation beschränkt werden; Renormierungseffekte in dem UDM sind für die Anwendung daher von untergeordneter Bedeutung [6].

Simulationen erlaubten erstmals eine systematische Analyse des Einflusses struktureller und prozessspezifischer Parameter auf die resultierende Membranomorphologie [1–5]. Hervorzuheben sind die Publikation in *Advanced Materials* [3] sowie Arbeiten zur kontinuierlichen Einstellung der Porengröße durch Copolymer-Mischungen [4, 5]. Ziel 3 wurde damit vollständig erreicht.

Neben 2 Dissertationen und 3 Bachelorarbeiten wurde unter Federführung von C. Cyron (Hereon) eine Special Session zu High-Performance Multiscale Modeling im CECAM-Flagship Workshops „Virtual Materials Design: AI, Simulation, and Workflows“ organisiert. Hierbei wurde unsere gekoppelte Simulationsstrategie mittels 5 Vorträgen einem breiten internationalen Publikum vorgestellt, womit Ziel 4 erreicht wurde.

### 3 Fazit und Ausblick

Neben der Optimierung der einzelnen Programme ist die, über eine Koordinator-Bibliothek implementierte, Machine-Learning-gestützte adaptive Kopplungsstrategie ein zentrales methodisches Element. Das ML-Modul dient hierbei nicht als Ersatz physikalischer Modellierung, sondern zur datengetriebenen Identifikation jener räumlich-zeitlichen Bereiche, in denen eine Teilchenauflösung erforderlich ist. Auf dieser Grundlage werden Rechenressourcen durch die neu entwickelte Koordinator Library dynamisch auf dem JUWELS Supercomputer zugewiesen, sodass die hochaufgelöste Teilchensimulation gezielt auf Regionen rascher Strukturbildung konzentriert wird.

Bisherige Arbeiten zu gekoppelten Teilchen-Kontinuums-Simulationen beschränkten sich überwiegend auf einkomponentige Flüssigkeiten sowie auf den Austausch von Massen-, Impuls- und Energieflüssen. Der hier entwickelte Ansatz geht deutlich über den bisherigen Stand der Forschung hinaus, indem erstmals räumlich inhomogene, multikomponentige Systeme mit diffusivem Transport, gekoppelter Mikro- und Makrophasenseparation sowie Vitrifizierung innerhalb einer konkurrent gekoppelten Multiskalensimulation behandelt werden. Dadurch wird eine zentrale methodische Lücke geschlossen und prädiktive Simulationen komplexer Nichtgleichgewichtsprozesse in weichen Materialien auf experimentell und technologisch relevanten Längen- und Zeitskalen bis in den Bereich von Mikrometern und Minuten ermöglicht.

Aufgrund seiner allgemeinen Formulierung ist das Framework nicht auf den SNIPS-Prozess beschränkt, sondern eröffnet eine übertragbare Methodik zur Untersuchung von Strukturbildungsprozessen in komplexen mehrkomponentigen Systemen der weichen Materie. Damit schafft der Ansatz neue Perspektiven für simulations- und datengetriebenes virtuelles Materialdesign und stärkt langfristig die technologische Souveränität und Wettbewerbsfähigkeit Deutschlands im Bereich hochskaliger Simulationsmethoden auf Supercomputern.

1. Simulation of membrane fabrication via solvent evaporation and nonsolvent induced phase separation, N. Blagojevic, M. Müller, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 15, 57913 (2023) Err 16, 12115 (2024)
2. Evaporation-induced self-assembly of diblock copolymer films in an electric field: a simulation study, O. Dreyer, L. Schneider, M. Radjabian, V. Abetz, M. Müller, *Macromolecules* 56, 6880 (2023)
3. Towards predicting the formation of integral-asymmetric, isoporous diblock copolymer membranes, N. Blagojevic, S. Das, J. Xie, O. Dreyer, M. Radjabian, M. Held, V. Abetz, M. Müller, *Adv. Mater.* 36, 2404560 (2024)
4. Process-directed self-assembly of copolymer blends: I. Micro- and macrophase separation, J. Xie, M. Müller, *Macromolecules* 58, 11523 (2025)
5. Process-directed self-assembly of copolymer blends: II. Continuous tuning of structure size, J. Xie, M. Müller, *Macromolecules* 58, 11539 (2025)
6. GPU-accelerated continuum dynamics of block copolymer blends and solutions, G. Häfner, M. Müller, *J. Chem. Phys.* 164, 024906 (2026)
7. Machine-learned domain partitioning for computationally efficient coupling of continuum and particle simulations of membrane fabrication, M. Busch, G. Häfner, J. Xie, M. Tacke, M. Müller, C.J. Cyron, R.C. Aydin, <https://arxiv.org/abs/2510.19051>
8. Concurrently coupling particle and continuum simulation to study a block copolymer membrane fabrication, G. Häfner, M. Busch, A. Dabah, J. Xie, N. Blagojevic, S. Das, S. Happ, S. Pickartz, L. Großmann, M. Radjabian, V. Abetz, C.J. Cyron, A. Hertel, R. C. Aydin, M. Müller, <https://chemrxiv.org/doi/full/10.26434/chemrxiv.1>