

Sachbericht zu dem SCALEXA-Projekt MExMeMo Teil II

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 Überblick

Die funktionale Leistungsfähigkeit moderner Materialien wird häufig durch ein komplexes Zusammenspiel zwischen chemischer Struktur und Herstellungsprozess bestimmt, das sich über verschiedene Längen- und Zeitskalen erstreckt. Häufig müssen gleichzeitig mehrere, teilweise konkurrierende Materialeigenschaften optimiert werden, was die rationale Entwicklung neuer Materialien und Prozessstrategien erheblich erschwert. Multiskalenmodellierung eröffnet hier die Möglichkeit eines simulationsgestützten Material- und Prozessdesigns, stößt jedoch aufgrund der enormen rechnerischen Anforderungen schnell an die Grenzen aktueller Hochleistungsrechner.

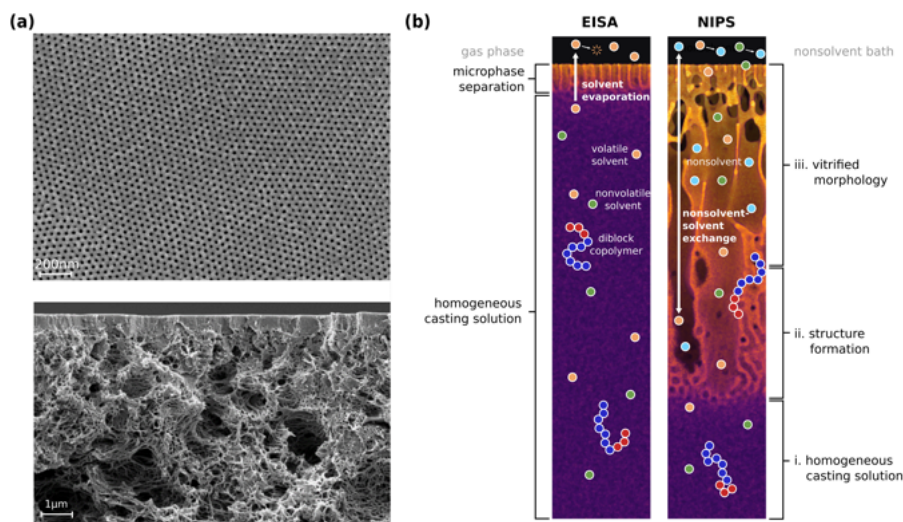


Abbildung 1: (a) Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen einer integralen asymmetrischen Polystyrol-block-Poly(4-vinylpyridin)-Diblockcopolymermembran in Aufsicht (oben) und Querschnittsansicht (unten). (b) Schematische Darstellung des zweistufigen Herstellungsprozesses integraler asymmetrischer Blockcopolymermembranen: Im ersten Schritt – Evaporation-Induced Self-Assembly (EISA) – verdunstet das Lösemittel aus der Gießlösung, wodurch sich an der Filmoberfläche eine dünne mikrophasenseparierte Deckschicht ausbildet. Im zweiten Schritt – Nonsolvent-Induced Phase Separation (NIPS) – wird der Film in ein Nichtlösemittelbad überführt, was einen Austausch von Lösemittel und Nichtlösemittel auslöst. Dieser Prozess führt zur Ausbildung der dargestellten dreischichtigen Membranstruktur. Adaptiert aus Ref. [13].

Isoporöse Blockcopolymermembranen stellen ein prototypisches Beispiel für solche multiskaligen Systeme dar; ihre hierarchische Nichtgleichgewichtsmorphologie entsteht während des Self-assembly and Nonsolvent-Induced Phase Separation (SNIPS)-Prozesses (siehe [Abbildung 1](#)), einer Abfolge aus lösemittelinduzierter Selbstorganisation (EISA) und nichtlösemittelinduzierter Makrophasenseparation (NIPS). Während der Verdampfung eines flüchtigen Lösemittels bildet sich zunächst eine dünne, mikrophasenseparierte selektive Deckschicht mit vertikal orientierten Poren. Anschließend führt der Lösemittel–Nichtlösemittel-Austausch zu einer Makrophasenseparation im darunterliegenden Bereich, deren Vergrößerung durch Vitrifizierung der polymerreichen Phase eingefroren wird. Diese Schicht verleiht der Membrane mechanische Stabilität ohne die

Permeabilität signifikant zu verringern.

Eine prädiktive Beschreibung dieses Prozesses erfordert die simultane Berücksichtigung von Verdampfung, diffusivem Transport, Mikro- und Makrophasenseparation sowie Glasbildung über stark getrennte Skalen hinweg. Die Simulation solcher Herstellungsprozesse auf technischen Skalen von Mikrometern und Sekunden stellt weiterhin eine zentrale Herausforderung der computergestützten Materialwissenschaft dar. Trotz stetig wachsender Rechenressourcen erfordern hochaufgelöste Polymersimulationen typischerweise mehrtägige Laufzeiten und einen erheblichen Energieverbrauch. Eine Reduktion der Time-to-Solution bei gleichzeitig erhaltener Modelltreue ist daher eine Schlüsselvoraussetzung für nachhaltiges High-Performance-Computing (HPC) zwecks systematischer digitaler Materialoptimierung.

In unserem SCALEXA-Projekt MExMeMo adressieren wir diese Herausforderung durch die konkurrente Kopplung zweier komplementärer Polymermodelle: des Uneyama–Doi-Modells (UDM) und der Simulation eines vergrößerten Teilchenmodells mittels des Programms SOft coarse-grained Monte carlo Acceleration (SOMA). Das Uneyama-Doi model (UDM) beschreibt die makroskopische Dynamik von Konzentrationsfeldern mit Hilfe von partiellen Differentialgleichungen und ermöglicht effiziente Simulationen großer Domänen, berücksichtigt jedoch weder explizite thermische Fluktuationen noch molekulare Kettenstatistik [11, 12].¹ SOMA hingegen liefert durch Monte-Carlo (MC)-Sampling eine molekular aufgelöste Beschreibung der Polymerkonfigurationen mit hoher physikalischer Genauigkeit, ist jedoch mit einem sehr hohen Rechenaufwand verbunden [1-4]. Die beiden Modelle werden in [Unterunterabschnitt 2.3.2](#) genauer beschrieben.

Das UGOE-Team war im Rahmen des SCALEXA-Projekt MExMeMo maßgeblich für die teilchenbasierte Simulation mittel SOMA verantwortlich und bringt seine Erfahrung bei der Modellierung der Struktur, Thermodynamik und Ordnungskinetik von Blockcopolymersystemen in dieses Verbundprojekt ein.

2 Wissenschaftliche Ergebnisse: Arbeitspakete und Meilensteine unter der Federführung von UGOE

2.1 Arbeitspaket 1: Teilchensimulation auf der Mesoskala

2.1.1 Ziel und Ansatz

AP1 verfolgte die folgenden 3 Ziele: (i) Erweiterung der Funktionalität und Optimierung des Simulationsprogramms SOMA, (ii) erste (kurze) Teilchensimulationen mit unterschiedlichen Modellparametern zum Vergleich mit Experiment und Kontinuumsmodell und (iii) Verwaltung von Rechenzeit.

2.1.2 Meilenstein 1.1 – Erweiterung der Funktionalität und Single-GPU-Optimierung des Anwenderprogramms SOMA auf dem JUWELS Booster

Erweiterung der Funktionalität: Die Funktionalität des SOMA-Codes wurde folgendermaßen erweitert:

- Nichtperiodische Randbedingungen, welche den Fluss von Lösemitteln durch eine Umwandlung von Lösemitteln S oder C zu Gas G oder Nichtlösemittel N vorgeben. Dies ermöglicht (i) die Simulation von Lösemittelverdampfung und Löse-Nichtlösemittel-Austausch sowie (ii) die Implementation von Fluss-Randbedingungen in einer kleinen, von dem Teilchenmodell beschriebenen Subdomäne (siehe Ref. [13])
- effiziente Erzeugung von Startkonfigurationen
- Erweiterung des SOMA-Programms, um die Orientierung der Zylindermorphologie in einem elektrischen Feld während des EISA-Prozesses zu modellieren [2]

¹Referenzen beziehen sich auf die Publikationsliste in [Unterabschnitt 4.1](#)

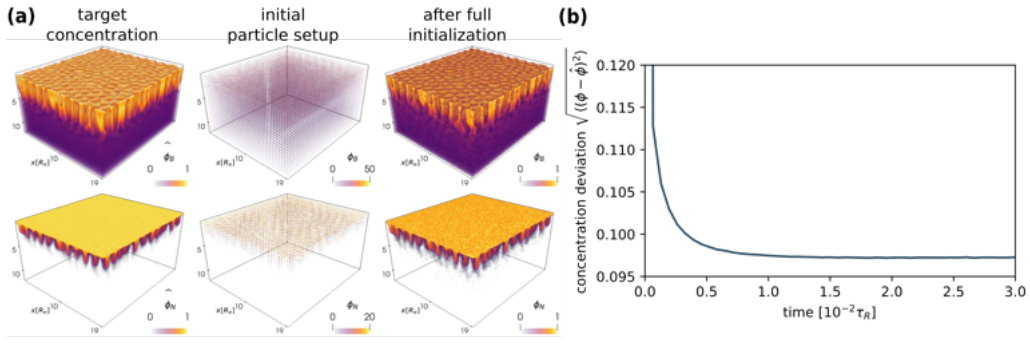


Abbildung 2: Initialisierung der Teilchenkoordinaten beim Start einer neuen Teilchensimulation. (a) Vergleich eines beispielhaften Ziel-Konzentrationsfeldes (linke Spalten), dargestellt durch die Konzentration des Mehrheitsblocks $\phi_B(\mathbf{r})$ (oben) sowie die Nichtlösemittelkonzentration $\phi_N(\mathbf{r})$ (unten), mit den entsprechenden Teilchenkonzentrationen vor (Mitte) und nach (rechts) der Initialisierung mittels Umbrella-Feld. (b) Abweichung der lokalen Konzentrationsfelder der Teilchensimulation von den vorgegebenen Kontinuumsfeldern, quantifiziert durch die L_2 -Norm, als Funktion der Simulationszeit in Einheiten der Polymer-Relaxationszeit τ_R . Adaptiert aus Ref. [13].

- Implementation des Informationsaustauschs mit dem Koordinator (siehe [Abbildung 6](#)) via Message-Passing Interface (MPI)-Kommunikation eines hdf5-Datei-Bilds

Im Folgenden beschreiben wir den zweiten Aspekt, nämlich die effiziente Erzeugung von Startkonfigurationen. Das Teilchenmodell erhält vom Koordinator die Zusammensetzungsfelder der einzelnen Komponenten und muss daraus eine kompatible Teilchenkonfiguration erzeugen. Um langreichweitigen Teilchentransport zu vermeiden, wird die Teilchen-Subdomäne in kleine kubische Zellen mit einer Kantenlänge von $R_e/2$ diskretisiert, und für jede Zelle wird die Anzahl der Moleküle jeder Spezies bestimmt. Diese Teilchenzahlen werden konsistent auf ganze Zahlen gerundet, sodass die Gesamtzahl der Moleküle im gesamten Teilchen-Teilgebiet mit den vom Kontinuumsmodell vorgegebenen Werten übereinstimmt. Die so bestimmten Molekülzahlen werden anschließend in die jeweiligen kubischen Zellen eingesetzt, sodass Diffusion über Distanzen kleiner als R_e ausreicht, um die räumlich inhomogenen Konzentrationsfelder auszubilden.

Mithilfe eines feldtheoretischen Umbrella-Potentials

$$\frac{\mathcal{H}_{\text{fup}}}{\sqrt{N}k_B T} = \int \frac{d\mathbf{r}}{R_e^3} \sum_{\alpha} \frac{\lambda_{\alpha} N}{2} [\hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{r}) - \phi_{\alpha}(\mathbf{r})]^2 \quad (1)$$

das lokale Abweichungen der teilchenbasierten Konzentrationsfelder $\hat{\phi}_{\alpha}(\mathbf{r})$ von den vorgegebenen Kontinuumsfeldern $\phi_{\alpha}(\mathbf{r})$ bestraft, wird eine Teilchenkonfiguration äquilibriert. Wie in [Abbildung 2](#) gezeigt, wird bereits nach einer kurzen Äquilibration von 2500 Monte-Carlo steps (MCS) $\approx 0.08\tau_R$ im Umbrella-Feld eine mit den Zielkonzentrationen konsistente Teilchenkonfiguration erzeugt.

Single-GPU-Optimierung: In Zusammenarbeit mit Adel Dabah und Andres Herten (JSC) wurde das Simulationsprogramm SOMA hinsichtlich der rechnerischen und energetischen Kosten für GPU-Architekturen optimiert. Bei SOMA verbesserten GPU-basierte Initialisierung und Validierung, optimierte Speicherzugriffe sowie verstärkte Datennutzung die Rechenleistung um etwa 80 % und reduzierten den Energieverbrauch über mehrere GPU-Generationen hinweg um den Faktor Drei. Damit wurde das Optimierungsziel „Verbesserung Single-GPU-Leistung um 15%“ deutlich übertroffen.

Die Ziele des Meilensteins wurden vollständig und planmäßig erreicht und sind als [Concurrently coupling particle and continuum simulation to study block copolymer membrane fabrication](#), G. Häfner, M. Busch, A. Dabah, J. Xie, N. Blagojevic, S. Das, S. Happ, S. Pickartz, L. Großmann, M.

2.1.3 Meilenstein 1.2 – Simulation der Mikrophasenseparation nach Lösemittelverdampfung (EISA)

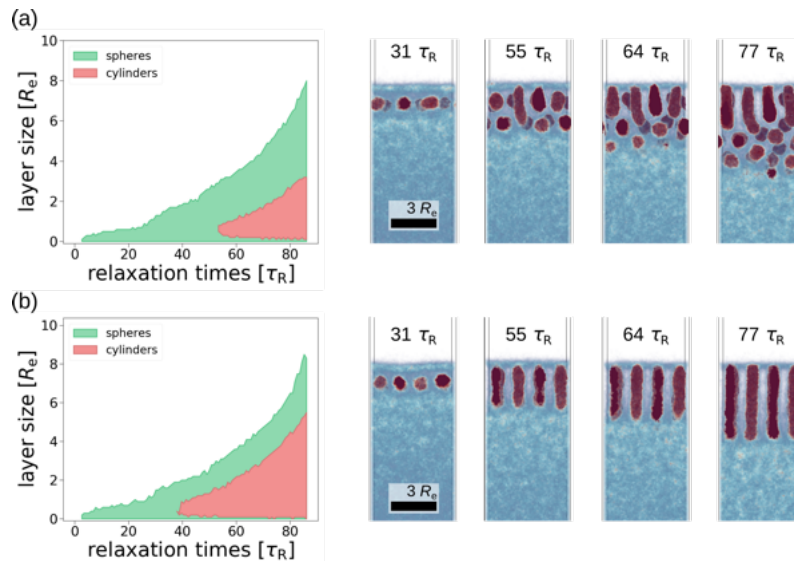


Abbildung 3: Simulationen der Lösemittelverdampfung (a) ohne und (b) mit angelegtem elektrischem Feld. Die linken Diagramme zeigen das Wachstum (zeitliche Entwicklung) der sphärischen (grün), l_{sph} , sowie der zylindrischen Schichten (rot), l_{cyl} . Die absoluten Positionen der einzelnen Schichten innerhalb der flüssigen Phase werden relativ zur Filmoberfläche bei $z = 0$ bestimmt. Rechts sind ergänzende Simulationsschnappschüsse zu verschiedenen Zeitpunkten, angegeben in Einheiten der Relaxationszeit τ_R , dargestellt. Adaptiert aus Ref. [2].

Lösemittelmoleküle, die über die Filmoberfläche in die Gasphase verdampfen, werden in einem Abstand d_{vap} oberhalb der Filmoberfläche in Gasteilchen umgewandelt. Ein kleinerer Wert von d_{vap} entspricht einer höheren Verdampfungsrate. Da die Gasphase – im Gegensatz zum Nichtlösemittel während der NIPS – nicht in den Film eindringt, nimmt das Volumen des Polymerfilms ab und die Filmoberfläche bewegt sich nach unten.

Während der Lösemittelverdampfung nimmt die Lösemitteldichte nahe der Filmoberflächen ab, während die Polymerdichte entsprechend zunimmt, d. h. es bildet sich eine polymerreiche Haut. Mit zunehmender Polymerdichte steigt die effektive, durch Lösemittel verdünnte Inkompatibilität zwischen den Copolymerblöcken A und B gemäß $\chi_{eff}N = \chi_{AB}N(1 - \phi_S)$. Somit wächst mit zunehmender Dichte — bzw. beim Annähern an die Filmoberfläche — die Inkompatibilität zwischen A und B . Folglich zeigt das Polymer-Lösemittel-Gemisch in großer Entfernung von der Filmoberfläche zunächst eine ungeordnete Phase, gefolgt von sphärischen Mizellen und schließlich Zylindern der Minderheitskomponente A innerhalb der Polymerhaut.

In Übereinstimmung mit früheren Arbeiten beobachten wir, dass (i) schnelle Verdampfung (z. B. durch Verringerung von d_{vap} oder Absenken von Unverträglichkeit von G mit S sowie (ii) ein flüchtiges Lösemittel, das selektiv für den Mehrheitsblock B ist (erzielt durch Verringerung von $\chi_{BS}N$ bzw. Erhöhung von $\chi_{AS}N$), die Bildung senkrecht orientierter Zylinder begünstigen. Zur Erklärung dieses Verhaltens wurden zwei Mechanismen vorgeschlagen: (i) die Unterdrückung der Strukturbildung in der ungeordneten Region vor den nach unten wachsenden senkrechten Zylindern sowie (ii) eine hydrodynamische Ausrichtung durch Lösemittelströmung. Ersteres wurde durch Berechnungen mittels selbstkonsistente Feldtheorie (SCFT) vorgeschlagen, bei denen aufgrund der Vernachlässigung thermischer Fluktuationen bereits minimale Zusammensetzungsmodulationen als Vorlage für die spontane Strukturbildung dienen können. Dieser Effekt ist jedoch vernachlässigbar, sofern der invariante Polymerisationsgrad \bar{N} nicht außergewöhnlich groß

ist. Der zweite Mechanismus – hydrodynamische Ausrichtung – ist in unseren Simulationen nicht vorhanden und kann daher unsere Beobachtungen nicht erklären.

Alternativ schlagen wir das Layer-Evolution-Model (LEM) vor. Die grundlegende Idee besteht darin, dass das komplexe Zusammenspiel von Gas-/Lösemittel-Selektivität und Verdampfungsrates die Strukturbildung nur indirekt beeinflusst, nämlich über die Schichtdicken l_{sph} und l_{cyl} jener Bereiche, in denen sich Mizellen aus der ungeordneten Lösung bilden und anschließend in zylindrische Domänen umwandeln. Mit anderen Worten bestimmt die zeitliche Entwicklung der Schichtdicken l_{sph} und l_{cyl} , in denen sich sphärische Mizellen bzw. Zylinder thermodynamisch bilden können, die Morphologieentwicklung des Blockcopolymer.

Zur Untersuchung eines zusätzlichen Ausrichtungsmechanismus wurde SOMA erweitert, sodass während der Lösemittelverdampfung ein externes elektrisches Feld berücksichtigt werden kann. In diesen Simulationen wird die Diblockcopolymerlösung als ladungsneutral angenommen, jedoch werden den einzelnen Polymerblöcken unterschiedliche dielektrische Permittivitäten zugewiesen. Dadurch weisen die während der Mikrophasenseparation entstehenden *A*- bzw. *B*-reichen Domänen einen dielektrischen Kontrast auf. Frühere Gleichgewichtsstudien an Diblockcopolymer-Schmelzen und -Lösungen zeigten, dass elektrische Felder Grenzflächen parallel zur Feldrichtung ausrichten. Diesen Effekt nutzen wir durch parallele Plattenelektroden, die ein homogenes elektrisches Feld senkrecht zur Filmoberfläche erzeugen und so die Bildung gleichmäßig senkrecht orientierter, zylindrischer Mikrostrukturen fördern.

Neben der ausrichtenden Wirkung beobachten wir, dass das elektrische Feld zusätzlich das Wachstum der zylindrischen Morphologie verstärkt. Dies stimmt mit einer früheren experimentellen Arbeit in der Abetz-Gruppe (UHH) überein, die jedoch lediglich über den Ursprung dieses Effekts spekulieren konnte. Unsere Simulationen erlauben hingegen eine Aufklärung der zugrunde liegenden kinetischen Prozesse und zeigen, dass das LEM den entscheidenden Mechanismus für das Wachstum zylindrischer Domänen beschreibt.

Analog zu früheren Gleichgewichtsstudien zur Stabilität sphärischer Diblockcopolymer-Mizellen destabilisieren die in unseren Simulationen verwendeten elektrischen Feldstärken sphärische Mikrostrukturen, die anschließend in die energetisch bevorzugte zylindrische Morphologie übergehen. Somit verschiebt ein elektrisches Feld den Ordnungs-Ordnungsübergang (d. h. den Kugel-zu-Zylinder-Übergang) zu höheren Lösemittelkonzentrationen, während die Ordnungs-Unordnungsübergang nur geringfügig beeinflusst wird.

Im Rahmen des LEM (siehe [Abbildung 3](#)) entspricht dies einer deutlichen Zunahme der Zylinderschichtdicke l_{cyl} unter Einfluss eines elektrischen Feldes, während die Dicke der sphärischen Schicht l_{sph} weitgehend unverändert bleibt. Ein verstärktes Wachstum zylindrischer Domänen wird daher beobachtet, wenn sich sphärische Mikrostrukturen unter bereits etablierten senkrechten Zylindern befinden. In diesem Fall führt das elektrische Feld zu einer Ausdehnung von l_{cyl} auf Kosten von l_{sph} , wodurch die Zylinderbildung in einem größeren Parameterbereich ermöglicht wird.

Weitere Details zur Implementierung des elektrischen Feldes in SOMA sowie zur elliptischen Deformation sphärischer Mizellen und deren Umwandlung in Zylinder bei zunehmender Feldstärke sind in Ref. [2] beschrieben. Über den praktischen Nutzen hinaus zeigt diese Studie der EISA im elektrischen Feld, dass das LEM verallgemeinerbar ist und einen robusten Rahmen zur Rationalisierung der Bildung senkrechter Zylinder mittels EISA bereitstellt.

Die Ziele des Meilensteins wurden vollständig und planmäßig erreicht und in [Evaporation-induced self-assembly of diblock copolymer films in an electric field: a simulation study](#), O. Dreyer, L. Schneider, M. Radjabian, V. Abetz, und M. Müller, *Macromolecules* **56**, 6880 (2023) veröffentlicht.

2.1.4 Meilenstein 1.3 – Simulation von nichtlösemittelinduzierter Phasenseparation (NIPS)

Die Abfolge des SNIPS-Prozesses, bestehend aus EISA gefolgt von NIPS, wird anhand von Simulationsschnappschüssen in [Abbildung 4](#) illustriert. Nach unserem Kenntnisstand handelt es sich hierbei um die erste Simulation des kombinierten Membranherstellungsprozesses innerhalb

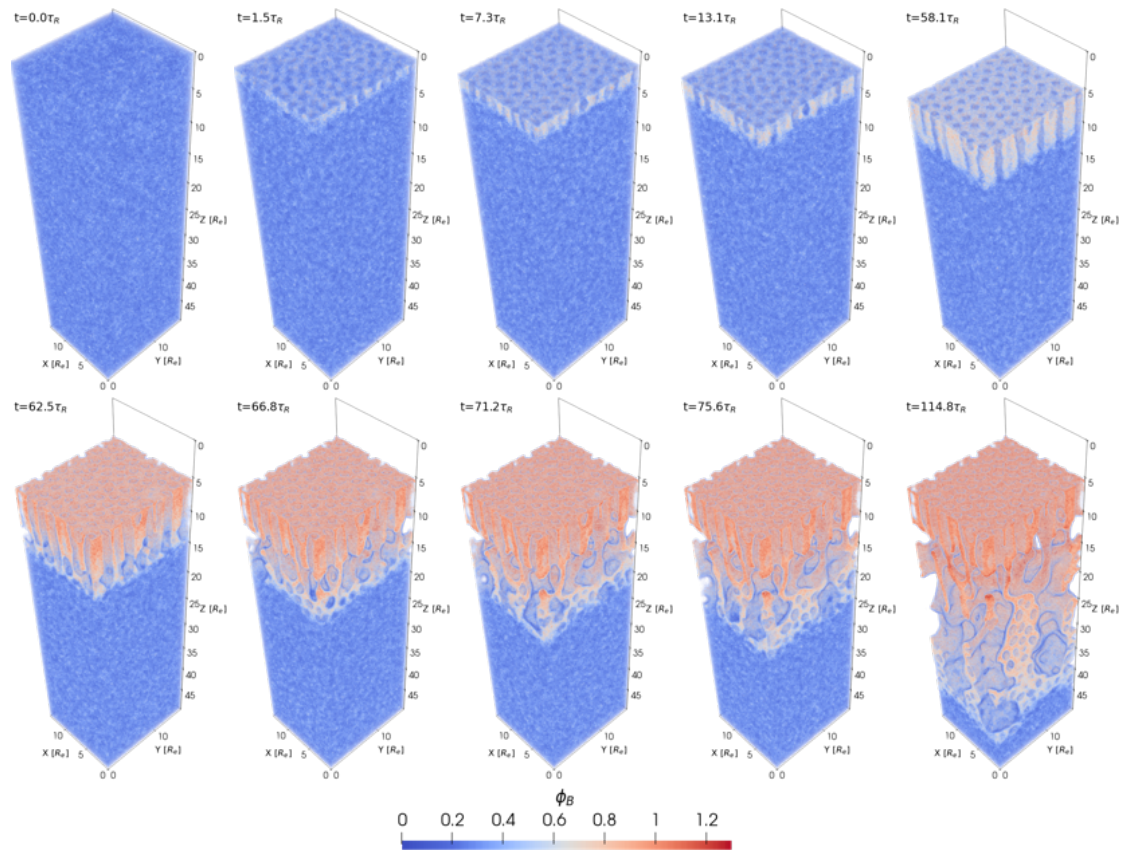


Abbildung 4: Schnappschüsse der Dichte des Mehrheitsblocks, ϕ_B , während des SNIPS-Prozesses zu verschiedenen Zeitpunkten. Der EISA-Schritt verläuft bis $t = 58.1, \tau_R$; anschließend beginnt der NIPS-Prozess. Systemgeometrie: $13.8 \times 16 \times 50 R_e^3$. Adaptiert aus Ref.[1].

eines einheitlichen Modells. Während des EISA-Prozesses (obere Reihe in [Abbildung 4](#)) bildet sich an der Filmoberfläche eine Schicht vertikal orientierter zylindrischer Domänen. Diese Zylinder einheitlicher Größe verleihen der Membran ihre Selektivität, wobei ihr Durchmesser über das Molekulargewicht des Copolymers eingestellt werden kann.

Besonders hervorzuheben ist, dass die Verwendung zweier Lösemittel – eines flüchtigen Lösemittels S und eines nichtflüchtigen Lösemittels C – (i) eine ausgeprägte Grenzfläche zwischen der dichten Polymerhaut, in der sich das Diblockcopolymer selbst organisiert, und der Gießlösung erzeugt, in der das Copolymer ungeordnet bleibt, sowie (ii) nur geringe Polymerkonzentrationsgradienten innerhalb der Gießlösung bewirkt. Die Polymerhaut entsteht daher hauptsächlich durch das Zurückweichen der Filmoberfläche nach unten, wodurch Polymerketten gewissermaßen „aufgekehrt“ werden. Beide Effekte erweitern das Parameterfenster, in dem während der EISA vertikal orientierte Zylinder entstehen, im Vergleich zu EISA-Prozessen mit nur einem Lösemittel deutlich.

Der anschließende NIPS-Prozess (untere Reihe in [Abbildung 4](#)) erzeugt eine makroporöse Stützstruktur, die der funktionalen oberen Schicht der Membran mechanische Stabilität verleiht. Der Kontakt des Films mit dem Nichtlösemittelbad führt zu einem schnellen Austausch von Lösemitteln und Nichtlösemittel an der Filmoberfläche. Mit abnehmender Konzentration von S und C stabilisiert die einsetzende Verglasung des Polymers die selbstorganisierte Polymerhaut. Sobald das Nichtlösemittel durch die A -Zylinder der oberen Schicht dringt und die darunterliegende homogene Gießlösung erreicht, beginnt eine Makrophasenseparation zwischen Diblockcopolymer und Nichtlösemittel. Während der Phasentrennung verlässt das plastifizierende Lösemittel aufgrund seiner Mischbarkeit mit dem Nichtlösemittel die polymerreichen Domänen. Dadurch steigt die Polymerdichte an, Mikrophasenseparation setzt ein, und das Polymer erstarrt in einem unbeweglichen, glasartigen Zustand. Diese Verglasung stoppt die Makrophasenseparation und bestimmt die resultierende Porengrößenverteilung.

Aus den Simulationsergebnissen ergibt sich eine intuitive Dreischichtstruktur (siehe auch [Abbildung 1](#)), die die physikalische Grundlage für die Kopplung von Teilchensimulationen und Kontinuumsmodellierung bildet:

- **Glasartig erstarrte EISA–NIPS-Region:** Ab einer tiefenabhängigen Zeit ändert sich die Polymerdichte weder in der hexagonal geordneten Polymerhaut nahe der Oberfläche noch im oberen Bereich der makroporösen Struktur wesentlich. In dieser Region ist die Lösemitteldichte in den polymerreichen Domänen gering, was zur Verglasung der Morphologie führt. Die Dynamik wird hauptsächlich durch den Austausch zwischen Nichtlösemittel N sowie den Lösemitteln S und C bestimmt und kann als Transport durch ein poröses Medium mit komplexer, jedoch statischer Geometrie aufgefasst werden.
- **NIPS-Strukturbildungsregion:** Die eigentliche Strukturbildung findet unterhalb der erstarrten EISA-NIPS-Region statt. Die obere Grenze wird durch die Verglasungsfront bestimmt, während die untere Grenze die Strukturbildungsfront kennzeichnet. Hier ist die Nichtlösemitteldichte ausreichend hoch, um Makrophasenseparation auszulösen und die Lösemitteldichte ausreichend niedrig, um Selbstorganisation zu induzieren. Für die gewählten Parameter fallen Makro- und Mikrophasenseparationsfront zusammen.
- **Lateral homogene lösemittelreiche Region:** In größeren Tiefen bleibt die Lösung lateral homogen, d. h. es tritt weder Makro- noch Mikrophasenseparation auf, und es existieren lediglich schwache Konzentrationsgradienten. Die Dynamik wird durch den Austausch zwischen Nichtlösemittel N sowie den Lösemitteln S und C bestimmt und kann als eindimensionaler Transport durch ein homogenes Medium beschrieben werden. Trotz ihrer Einfachheit muss diese Region berücksichtigt werden, um Artefakte durch die untere Randbedingung zu vermeiden, da die Gießlösung zu späteren Zeiten nicht mehr als Reservoir wirkt.

Die Regionen 1 und 3 – erstarrte EISA/NIPS-Region sowie homogene Lösung – lassen sich direkt durch Kontinuumsmodelle beschreiben, da dort ausschließlich Transportprozesse auftreten und weder Mikro- noch Makrophasenseparation stattfinden. Langfristig wäre es interessant, in diesen Bereichen auch hydrodynamische Strömungen zu berücksichtigen. Im vorliegenden Projekt konzentrieren wir uns darauf, die Strukturbildung in der zweiten Schicht – der NIPS-Strukturbildungsregion – durch rechenaufwendige Teilchensimulationen mittels SOMA zu behandeln. Der Volumenanteil V_{SOMA}/V im gekoppelten Teilchen-Kontinuumsansatz ist dabei zu minimieren.

Die Ziele des Meilensteins wurden vollständig und planmäßig erreicht und in [Simulation of membrane fabrication via solvent evaporation and nonsolvent induced phase separation](#), N. Blagojevic und M. Müller, ACS Appl. Mater. Interfaces **15**, 57913 (2023) veröffentlicht.

2.1.5 Verwaltung von Rechenzeit am JSC

UGOE hat für das SCALEXA-Projekt MExMeMo Rechenzeit auf dem modularen Supercomputer Juwels und Jedi am Jülich Supercomputer Centre (Projektname: MExMeMo (memm)) erfolgreich eingeworben und verwaltet:

- 1. November 2022 – 31. Oktober 2023
JUWELS Cluster Module GPU: 1.64 million core-h
JUWELS Booster Module: 1.22 million core-h
- 1. November 2023 – 31. Oktober 2024
JUWELS Cluster Module CPU: 3.480.000 core-h
JUWELS Cluster Module GPU: 1.600.000 core-h
JUWELS Booster Module GPU: 900.000 core-h
- 1. November 2024 – 31. Oktober 2025
JUWELS Cluster Module CPU: 0.83 million core-h

JUWELS Cluster Module GPU: 2.67 million core-h

JUWELS Booster Module: 1.75 million core-h

- November 2025 – 18-seitiger Abschlussbericht für das Gauss Centre for Supercomputing

Ferner hat unser teilchenbasiertes Simulationsprogramm SOMA erfolgreich an JUREAP, dem JUPITER Research and Early Access Program teilgenommen.

2.2 Arbeitspaket 2: Kontinuumsmodell auf der Makroskala

2.2.1 Ziel und Ansatz

Ziel des AP2 war die Entwicklung, High Performance Computing (HPC)-fähige Implementierung, Validierung und Parametrisierung des Uneyama-Doi Kontinuumsmodells.

2.2.2 Entwicklung und HPC-fähige Implementierung der Kontinuumsbeschreibung

Der ursprüngliche Plan sah die Implementierung des Kontinuumsmodells mittels der Finite-Elemente-Methode (FEM) im Rahmen der deal.II-Bibliothek vor, basierend auf einer peridynamischen Operatorformulierung. Dies stellte sich jedoch leider als unpraktikabel dar.

Zusammen mit der Hereon-Gruppe entschlossen wir uns daraufhin, das UDM zu verwenden, welches das Wechselspiel von Mikro- und Makrophaseseparation erfolgreich beschreiben kann und im Grenzfall schwacher Segregation und Abwesenheit von Lösemitteln auf das Standardmodell für Blockcopolymerer, wie es z.B. in selbstkonsistenter Feldtheorie verwendet wird, übergeht [11].

Gregor Häfner implementierte dieses Kontinuumsmodell; in Zusammenarbeit mit Adel Dabab und Andreas Herten (JSC) wurde das Modell für den JUWELS Booster optimiert. Kernel-Fusion, Überlappung der Zufallszahlgenerierung und reduzierte globale Speicherzugriffe führten zu einer Verringerung der Speicheroperationen um bis zu 87 % und einer Laufzeitverkürzung um etwa 70 %.

2.2.3 Validierung und Parametrisierung des Uneyama-Doi Kontinuumsmodells

Wie in [Tabelle 1](#) erläutert, verwendet das UDM die gleichen Parameter wie die Teilchensimulation. Dies vereinfacht die Parameterisierung erheblich. Mögliche Renormierungseffekte der Parameter und die Ultraviolett-Divergenz des Modells (d. h. Abhängigkeit von Diskretisierungseffekten) wurden in Ref. [11] untersucht. In unserer gekoppelten Simulationsstrategie können wir das UDM jedoch ohne thermische Fluktuationen verwenden, so dass Renormierungseffekte nicht auftreten und wir die gleichen numerischen Werte für die Unverträglichkeiten in dem Teilchen- und dem Kontinuumsmodell verwenden.

Die Ziele des AP2 wurden vollständig und planmäßig erreicht und in [On efficient simulation of self-assembling diblock copolymers using a peridynamic-enhanced Fourier spectral method](#), F. Mossaiby, G. Häfner, A. Hermann, C. Cyron, M. Müller, S. Silling, und A. Shojaei, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **439**, 117878 (2025) und [GPU-accelerated continuum dynamics of block copolymer blends and solutions](#), G. Häfner and M. Müller, *J. Chem. Phys.* **164**, 024906 (2026) veröffentlicht.

2.3 Arbeitspaket 3: Scale-Bridging

2.3.1 Ziel und Ansatz

Die Spezifikation und Implementation eines maschinellen Lernmodells für ein optimiertes Kopp lungsschema war das Ziel von AP3. Die Kernidee ist (i) den notwendigen Datenaustausch zwischen dem Teilchen- und dem Kontinuumsmodell zu definieren und (ii) ein Machine-Learning (ML)-Modell zu entwickeln, das basierend auf dem aktuellen Systemzustand vorhersagt, wo die Abweichung zwischen den beiden Modellen am größten wäre.

Aufbauend auf der Implementation, Optimierung und Validierung der beiden Modelle wurden diese über ein Koordinator-Framework gekoppelt. Dies ermöglicht eine parallele Ausführung auf mehreren GPUs sowie einen konsistenten Datenaustausch zwischen Kontinuums- und Teilchen-

beschreibung. Sobald erhöhte Modellfehler oder starke strukturelle Änderungen detektiert werden, startet der UDM-Prozess eine hochaufgelöste SOMA-Simulation in einer lokalisierten Unterdomäne; deren Ergebnisse werden anschließend in das Kontinuumsmodell zurückgeführt.

2.3.2 M3.1 – Abgeschlossene Spezifizierung der Gesamtarchitektur und der Schnittstellen, mit welcher die Koordination zwischen den einzelnen Rechensystemen und den darauf laufenden Simulationsmethoden realisiert wird

In beiden komplementären rechnerischen Ansätzen — dem feldtheoretischen Kontinuumsmodell und dem vergrößerten Teilchenmodell — betrachten wir ein AB-Diblockcopolymer, gelöst in einer Mischung aus einem flüchtigen Lösemittel S und einem nichtflüchtigen Cosolvent C . Während des EISA-Prozesses steht der Film in Kontakt mit einer Gasphase G , während er im NIPS-Prozess mit einem Nichtlösemittelbad N in Kontakt steht, wie in [Abbildung 1](#) dargestellt.

Ein wesentlicher Vorteil der gewählten Kontinuums- und Teilchenmodelle besteht in der erheblichen Überlappung ihrer physikalischen Parameter. Diese gemeinsame Parameterbasis gewährleistet Konsistenz und ermöglicht direkte, quantitative Vergleiche zwischen den Vorhersagen beider Modellansätze. Im Folgenden verzichten wir daher auf zusätzliche Parametermappings oder Kalibrierungsverfahren (siehe [Unterunterabschnitt 2.2.3](#)) [11].

	particle model	continuum description
equilibrium	explicit bead-spring chains with pairwise interactions DoF: explicit particle coordinates, $\{\mathbf{r}_{m,s}\}$	Uneyama-Doi free-energy functional, $\mathcal{F}[\{\varphi_\alpha\}]$ DoF: collective composition fields, $\{\varphi_\alpha(\mathbf{c})\}$
molecular architecture	number, n_α , of molecules of species $\alpha = P(A,B), S, C, G/N$ number of particles per molecule, N_α (molecular-contour discretization, $N = N_{\text{copolymer}}$)	coefficients, A , in front of ∇^{-2} terms coefficients, C , accounting for entropy
bonded interactions	fraction, f_A , of A-particles of copolymer	
nonbonded interactions	mean-squared end-to-end distance, R_e^2 (unit of length) symmetric matrix of Flory-Huggins parameters, $\chi_{\alpha\beta} N$	
system geometry	inverse compressibility κN	incompressibility condition
dynamics	volume $V = L_x \times L_y \times L_z$ collocation grid with $l_x \times l_y \times l_z$ cells	
	overdamped MC motion of particles, $\{\mathbf{r}_{m,s}\}$ density-dependent friction, $\zeta_\alpha(\{\rho_\alpha\})$ distance of conversion zone, Δz_c , above the film surface	model-B dynamics of composition, $\{\varphi_\alpha\}$ Onsager coefficients, $\Lambda_{\alpha\beta}(\{\varphi_\alpha\})$

Tabelle 1: Vergleich des Teilchenmodells und der Kontinuumsbeschreibung der Polymer-Lösemittel-Mischung zur Untersuchung von EISA und NIPS. Parameter, die für die Kopplung zwischen Teilchenmodell und Kontinuumsbeschreibung erforderlich sind, sind rot hervorgehoben. Die zusammensetzungsabhängige Reibung und der Onsager-Koeffizient parametrisieren vergleichbare physikalische Information, jedoch in unterschiedlicher Darstellung.

Das Copolymer besteht aus N_P Segmenten, wobei f_A den Volumenanteil des zylinderbildenden A -Blocks bezeichnet. Alle niedermolekularen Spezies S , C , G und N werden als Ketten aus jeweils N_S -Segmenten modelliert. Die Wechselwirkungen zwischen Segmenten werden durch Flory-Huggins-Parameter $\chi_{\alpha\beta}$ beschrieben, wobei die griechischen Indizes über alle Segmenttypen A , B , S , C , G und N laufen. Die mittlere quadratische End-zu-End-Distanz R_e des Copolymers im ungeordneten Zustand definiert die Längenskala des Modells. Energien werden in Einheiten von $k_B T \sqrt{\bar{N}}$ gemessen, wobei k_B die Boltzmann-Konstante, T die Temperatur und $\bar{N} = (\rho R_e^3 / N_P)^2$ der invariante Polymerisationsgrad ist; hierbei bezeichnet ρ / N_P die Polymeranzahldichte in einer reinen Copolymerschmelze.

Die Zeit wird in Einheiten der Diffusionszeit τ_R gemessen, definiert als die Zeit, die ein Copolymer benötigt, um in Abwesenheit von Vitrifizierung eine Strecke R_e zu diffundieren. Da die Polymerdynamik dem Rouse-Modell folgt, ist τ_R um den Faktor $3\pi^2$ größer als die Rouse-Zeit des Copolymers. Die Lösemittel wirken als Plastifizierer des Polymers, sodass die Segmentmobilitäten/Reibung von der lokalen Zusammensetzung abhängen.

Wir betrachten ein Simulationsgebiet der Größe $L_x \times L_y \times L_z$ mit periodischen Randbedingungen in den lateralen Richtungen x und y . Entlang der z -Richtung wird der Film durch undurchdringliche Wände begrenzt. Die Verdampfung während des EISA-Prozesses wird mit Hilfe einer alchemistischen Transformation $S \rightarrow G$, innerhalb einer Konversionszone modelliert, die sich in einem Abstand d_{vap} oberhalb der Filmoberfläche befindet. Beim Übergang zum NIPS-Prozess

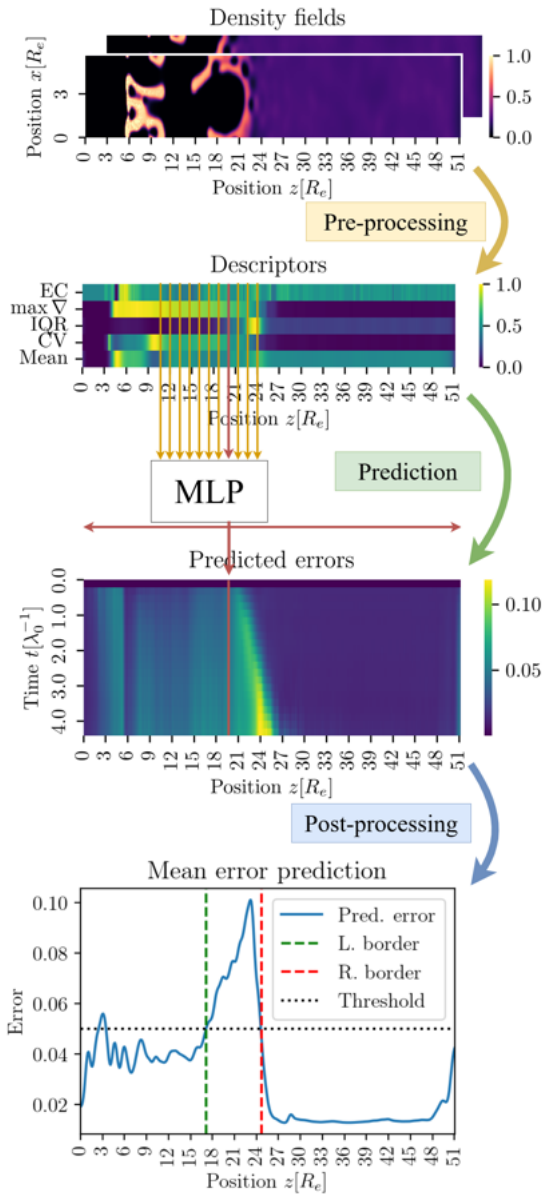


Abbildung 5: Übersichtsdiagramm des Entscheidungsmodells. Dargestellt sind die einzelnen Schritte der Datenverarbeitung einschließlich der jeweiligen Zwischenergebnisse. Im Vorverarbeitungsschritt werden Deskriptoren aus dem Zusammensetzungsfeld extrahiert (fünf pro z -Schicht; Abkürzungen: CV — Variationskoeffizient; IQR — Interquartilsabstand der finiten Differenzen; $\max \nabla$ — maximale Gradientenstärke; Mean — Schichtmittelwert; EC — Euler-Charakteristik). Der IQR wird aus den finiten Differenzen zweier zeitlich aufeinander folgender Kompositionsfelder berechnet. Die Vorhersage erfolgt mittels eines Multi Layer Perceptron (MLP), das die Deskriptoren mehrerer z -Schichten als Eingabe verwendet und die prognostizierten Fehler für eine einzelne z -Schicht zu mehreren zukünftigen Zeitpunkten ausgibt. Im Nachverarbeitungsschritt werden die Fehler über das betrachtete Zeitintervall aggregiert und die größte zusammenhängende Region identifiziert, in der der Fehler einen vorgegebenen Schwellenwert überschreitet. Adaptiert aus Ref. [13].

werden die Gasmoleküle G durch Nichtlösemittel N ersetzt. Der NIPS-Prozess wird implementiert, indem die Lösemittel S und C innerhalb der Konversionszone in das Nichtlösemittel N umgewandelt werden. Ein ähnliches Schema wird verwendet, um Lösemittelflüsse an der Oberfläche der Subdomänen des Teilchenmodells zu implementieren.

Die Ziele des Meilensteins wurden vollständig und planmäßig erreicht und sind als 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, und R.C Aydin, <https://arxiv.org/abs/2510.19051> verfügbar und zur Veröffentlichung eingereicht.

2.3.3 *K.ent* – ML-basierte Auswahl der Subdomäne, in der Teilchensimulationen notwendig sind

Die Auswahl der teilchenaufgelösten Subdomäne erfolgt durch ein Machine-Learning (ML)-basiertes Entscheidungsmodell (siehe [Abbildung 5](#)). Zusammen mit Matthias Busch und Roland Aydin (Heron) wurde dazu ein Multi Layer Perceptron (MLP)-Netzwerk entwickelt, welches aus Charakteristika lateraler xy -Schichten zu zwei aufeinanderfolgenden Zeiten die zukünftige Ungenauigkeit des Kontinuumsmodells entlang der Filmtiefe vorhersagt. Die Vorhersagen des trainierten MLPs sind sowohl zeitlich als auch räumlich invariant und lassen sich somit für Systeme unterschiedlicher Querschnitte und zu unterschiedlichen Zeiten anwenden. Überschreitet der prognostizierte

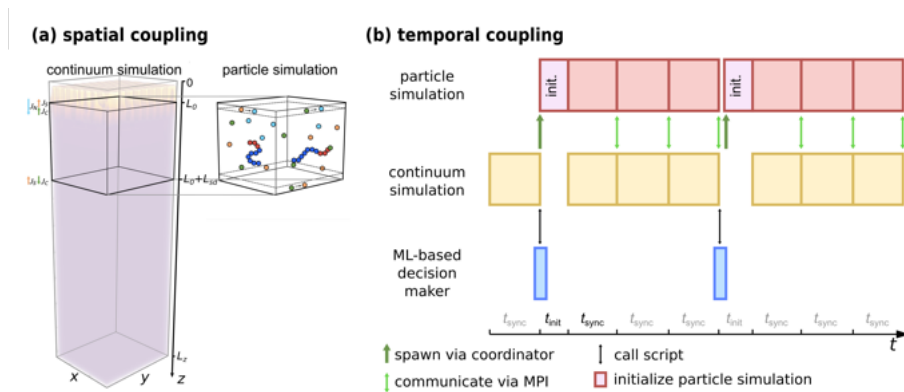


Abbildung 6: Räumlich-zeitliche Kopplung zwischen Kontinuums- und Teilchensimulation. (a) Räumliche Kopplung: Das Kontinuumsmodell wird auf die gesamte Simulationsdomäne angewendet, während die Teilchensimulation auf eine ausgewählte Subdomäne beschränkt ist. Die Kontinuität der Massenflüsse über die obere und untere Grenze dieser Subdomäne wird in der Teilchensimulation durch molekulare Konversionen sichergestellt. (b) Zeitliche Kopplung: Der Machine Learning (ML)-basierte Koordinator entscheidet, welche räumlich-zeitlichen Bereiche eine hochaufgelöste Teilchensimulation erfordern, koordiniert den konsistenten Informationsaustausch zwischen den Modellen und steuert das Starten der hochaufgelösten Teilchensimulationen mittels MPI. Adaptiert aus Ref. [13].

Fehler einen definierten Schwellenwert, wird in diesem Bereich eine Teilchensimulation aktiviert. Dadurch wird die hochaufgelöste Beschreibung gezielt auf die kleine Subdomäne schneller Strukturbildung beschränkt, während große Bereiche effizient durch das Kontinuumsmodell behandelt werden. Eine zusätzliche Bedingung ist, dass der Polymerfluss an den Rändern der Subdomäne verschwindend klein ist.

Die Ziele des AP3 wurden vollständig und planmäßig erreicht und sind als 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, und R.C Aydin, <https://arxiv.org/abs/2510.19051> verfügbar und zur Veröffentlichung eingereicht.

2.4 Arbeitspaket 4: High-Performance Computing

2.4.1 Ziel und Ansatz

Ziel von AP4 war die Implementierung der Kopplung der beiden komplementären Modelle auf dem JUWELS Booster, die Optimierung des gekoppelten Simulationschemas und Produktionsläufe der Anwendung mit Skalenwechselfunktionalität.

2.4.2 *K.sch* – Implementierung der Kopplung der beiden komplementären Modell auf JUWELS Booster

Das Multiskalen-Simulationsframework basiert auf dem in [Abbildung 1](#) eingeführten Dreischichtmodell (siehe auch [Unterunterabschnitt 2.1.4](#)) sowie auf dem quantitativen Vergleich zwischen hochauflösender Teilchensimulation und dem recheneffizienten Kontinuumsmodell. Die raumzeitliche Kopplungsstrategie ist in [Abbildung 6](#) dargestellt. Das Kontinuumsmodell fungiert als Parent-Anwendung und wird auf das gesamte Simulationsgebiet angewendet.

Der ML-basierte Koordinator bewertet die lokale prädiktive Gültigkeit der Kontinuumsbeschreibung, identifiziert die kleinen raumzeitlichen Bereiche, die eine hochauflösende Modellierung durch die Child-Anwendung SOMA erfordern, startet die entsprechenden Teilchensimulationen mittels MPI und orchestriert den bidirektionalen Informationsaustausch zwischen beiden Modellen. Die Teilchensimulationen müssen zunächst initialisiert werden (siehe [Unterunterabschnitt 2.1.2](#)), und die Randbedingungen an der Schnittstelle zwischen beiden Modellen müssen während der anschließenden Zeitentwicklung sorgfältig kontrolliert werden. In Synchronisationsintervallen der Länge t_{sync} erhält die Kontinuumsimulation die teilchenbasierten Zusammensetzungsfelder und

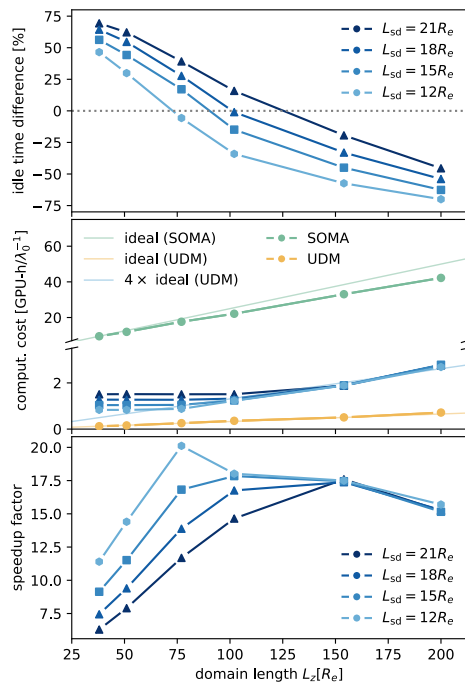


Abbildung 7: Lastverteilung und Performance der konkurrent gekoppelten Simulation im Vergleich zum alleinstehenden Kontinuumsmodell (UDM) und zur vollständigen Teilchensimulation (SOMA) als Funktion der vertikalen Domänenlänge L_z . Alle Messungen wurden auf einem einzelnen Rechenknoten durchgeführt, wobei UDM auf einer GPU und SOMA auf drei GPUs ausgeführt wurde. (a) zeigt die Differenz der relativen Leerlaufzeiten zwischen den UDM- und SOMA-Prozessen und liefert damit ein direktes Maß für das Lastungleichgewicht. (b) stellt die Rohperformance der Einzelmodelle sowie der konkurrent gekoppelten Simulationen für mehrere feste Subdomänenhöhen L_{sd} dar. (c) zeigt den Speed-up der gekoppelten Simulation relativ zur Referenz einer reinen Teilchensimulation als Funktion der vertikalen Domänenlänge L_z . In allen Teilbildern kodieren die Symbole der gekoppelten Simulation zusätzlich die Anzahl der gestarteten Teilchensimulationen: Dreiecke entsprechen der minimalen Anzahl von drei SOMA-Starts, Quadrate vier und Hexagone sechs oder mehr SOMA-Starts. Adaptiert aus Ref. [13].

ersetzt die entsprechenden Felder innerhalb der gekoppelten Subdomäne, während die Teilchensimulation aktualisierte Flussrandbedingungen erhält. Zusätzlich wird ein boolesches Abbruchsignal an die Teilchensimulation übermittelt, welches anzeigt, ob die SOMA-Simulation vorzeitig beendet werden soll. Falls kein Abbruch erfolgt, werden Propagation und Datenaustausch für eine vorgegebene Anzahl von Synchronisationsschritten n_{sync} fortgesetzt, bevor der Evaluierungs- und Kopplungsprozess erneut ausgeführt wird.

In den späten Stadien der NIPS wird die dreidimensionale, auf dem UDM-basierende Beschreibung des Lösemittel-Nichtlösemittelaustauschs durch die verglaste Morphologie der oberen Schicht durch ein effektives eindimensionales Diffusionsmodell ersetzt – Trunkierung (siehe [Abbildung 8](#)). Diese Reduktion verkleinert das aktive Simulationsgebiet (des UDMs) und beschleunigt die Berechnung der nachfolgenden morphologischen Entwicklung zusätzlich.

2.4.3 Optimierung des gekoppelten Simulationschemas

Leistungsanalysen von Adel Dabah und Andreas Herten mit NVIDIA Nsight Systems zeigen einen vernachlässigbaren Kommunikations-Overhead und die verbleibenden Synchronisationslücken konnten durch adaptive Domänenpartitionierung reduziert werden (siehe [Abbildung 7](#)).

Der resultierende gekoppelte UDM-SOMA-Ansatz reproduziert die physikalische Genauigkeit vollständiger Teilchensimulationen, erreicht jedoch auf vier A100-GPUs einen Speed-up von bis zu 20fach (siehe [Abbildung 7](#)) bei gleichzeitig etwa 95% reduziertem Energieverbrauch. Dies zeigt, dass energieeffizientes wissenschaftliches Rechnen nicht allein durch Hardwareoptimierung, sondern insbesondere durch intelligente modellübergreifende Kopplungsstrategien erreicht werden kann. Das Ziel eines Speed-up-Faktors 5 im Vergleich zur alleinigen teilchenbasierten Simulation wurde somit signifikant übertroffen.

2.4.4 Anwendung mit Skalenwechselfunktionalität

In [Abbildung 8](#) zeigen wir zwei repräsentative Simulationen des NIPS-Prozesses: eine ohne Trunkierung und eine mit Trunkierung der verglasten Morphologie im oberen Bereich des Simulations-

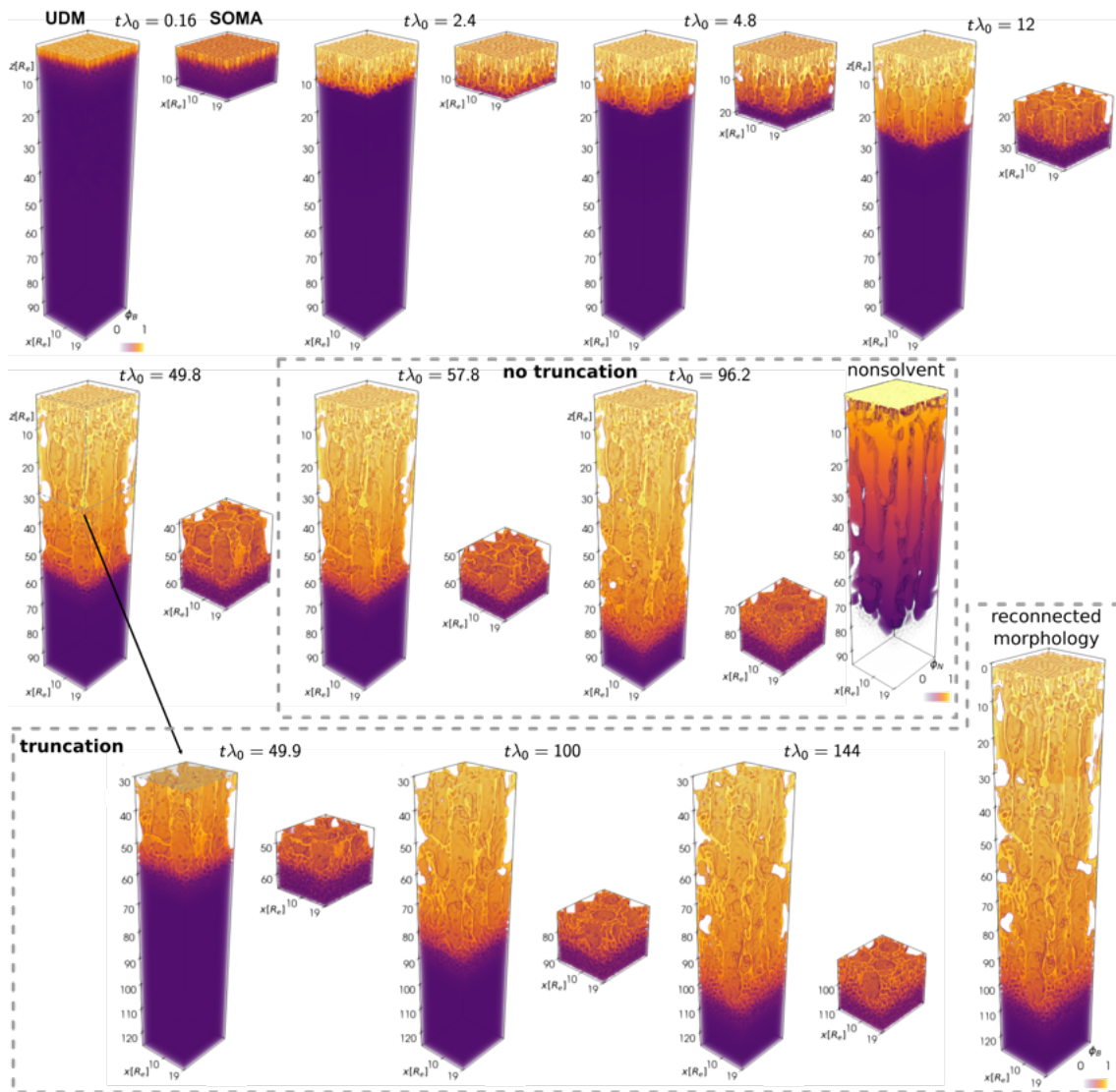


Abbildung 8: Zeitentwicklung des B -Block-Konzentrationsfeldes $\phi_B(\mathbf{r})$, bestimmt aus der Kontinuumsimulation (links) und der Teilchensimulation (rechts); die jeweiligen Simulationszeiten sind in den einzelnen Teilbildern angegeben. Für die späten Stadien werden zwei Szenarien gegenübergestellt: ohne Domänen-trunkierung (oberer gestrichelter Kasten) und mit Domänen-trunkierung (unterer gestrichelter Kasten). Im ersten Fall ist zusätzlich das Nichtlösemittel-Konzentrationsfeld $\phi_N(\mathbf{r}, t)$ im finalen Schnappschuss dargestellt. Im trunkierten Szenario ist der zum Zeitpunkt der Trunkierung entfernte Domänenbereich bei $t\lambda_0 = 49.76$ markiert. Für den finalen Schnappschuss wurde das B -Block-Konzentrationsfeld wieder ergänzt, um die vollständige Domäne zu visualisieren. Adaptiert aus Ref. [13].

gebiets.

Zu ausgewählten repräsentativen Zeitpunkten zeigt [Abbildung 8](#) das Konzentrationsfeld des B -Blocks im gesamten Gebiet gemäß dem Kontinuumsmodell, zusammen mit den entsprechenden Feldern in der gekoppelten Subdomäne, die aus den Teilchensimulationen gewonnen wurden. Zum initialen Kopplungszeitpunkt $t = t_{\text{sync}} = 0.16/\lambda_0$ erstreckt sich die hochauflösende Subdomäne von der mit dem Nichtlösemittelbad in Kontakt stehenden Filmoberfläche bis in die lateral homogene Region der ursprünglichen Gießlösung. Damit umfasst es vollständig die hexagonal geordnete Mikrophase, durch die zu Beginn des NIPS-Prozesses ein schneller Nichtlösemittel–Lösemittel-Austausch stattfindet.

Sobald das Nichtlösemittel die lateral homogene Gießlösung unterhalb der mikrophasenseparierten Deckschicht erreicht, induziert es eine Makrophasenseparation vom Polymer und erzeugt

eine Strukturbildungsfront, die sich rasch nach unten ausbreitet. Am Ende der ersten Teilchensimulation bei $t = 2.4/\lambda_0$ hat die Strukturbildung nahezu die gesamte Teilchen-Subdomäne durchlaufen und nähert sich dessen unterer Grenze. Zu diesem Zeitpunkt wird die Teilchensimulation beendet und eine neue Simulation in einer aktualisierten, tiefer in die Lösung reichenden Subdomäne gestartet.

Im weiteren Verlauf führt der fortgesetzte Nichtlösemittel–Lösemittel-Austausch zur Ausbildung größerer, fingerartiger Poren, die tiefer in den Film hineinwachsen. Die Strukturbildungszone – entsprechend der zweiten Schicht in [Abbildung 1](#) – bewegt sich nach unten, und die periodisch aktualisierte Teilchen-Subdomäne folgt dieser Region zuverlässig, sodass die Zone schneller Strukturbildung bis zur lateral homogenen Lösung kontinuierlich abgedeckt wird.

Ohne Trunkierung wird die gekoppelte Simulation bis $T = 92.2/\lambda_0$ fortgeführt. Zu diesem Zeitpunkt hat die Strukturbildungsfront eine Tiefe von $z = 75R_e$ erreicht, wie aus der Nichtlösemittel-Konzentrationsaufnahme in [Abbildung 8](#) ersichtlich ist. Die obere Polymermorphologie ist zu diesem Zeitpunkt verglast, wodurch sich eine integral-asymmetrische Membran mit einer wohlgeordneten isoporösen Deckschicht, getragen von fingerartigen Makroporen, ausbildet.

Die Simulation mit Trunkierung wird aus der untrunkierten Simulation zum Zeitpunkt $t = 49.96/\lambda_0$ gestartet. Die verglaste Morphologie im oberen Bereich wird entfernt und durch eine Randbedingung ersetzt, welche den Lösemittel-Nichtlösemittelaustausch mittels eines effektiven, eindimensionalen Diffusionsprozesses erfasst. Durch die reduzierte Gebietsgröße der trunkierten Kontinuumsimulation kann die Simulation bis $T = 144/\lambda_0$ fortgesetzt werden, wobei die Strukturbildungsfront eine Tiefe von etwa $z = 100R_e$ erreicht. Die letzte Momentaufnahme in [Abbildung 8](#) zeigt das vollständige System zur Zeit $T = 144/\lambda_0$, wobei die zuvor entfernte B-Block-Zusammensetzung bei $t = 49.96/\lambda_0$ wieder eingesetzt wurde. Die Lage der Trunkierung ist nur schwach erkennbar, was eindeutig zeigt, dass die Polymermorphologie in dieser Höhe zum Zeitpunkt der Trunkierung bereits verglast war.

Die hohe rechnerische Effizienz ermöglichte die bislang weltweit größte Simulation der Membranherstellung mit molekularer Auflösung [1, 3, 13]. Diese Entwicklungen bringen uns einen entscheidenden Schritt näher an die Realisierung eines digitalen Zwillings für die Herstellung von Diblockcopolymermembranen.

Die Ziele des AP4 wurden vollständig und planmäßig erreicht und sind als [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. Herten, R. C. Aydin, and M. Müller, <https://chemrxiv.org/doi/full/10.26434/chemrxiv.15000555/v1> verfügbar und zur Veröffentlichung eingereicht.

2.5 Arbeitspaket 5: Membranherstellung

2.5.1 Ziel und Ansatz

Die Ziele des AP5 waren (i) die experimentelle Bestimmung relevanter Parameter für die Simulationen und die Parametrisierung des Teilchenmodells durch Experimente, (ii) die Validierung des gekoppelten Simulationsframeworks und (iii) den Vorschlag neuer Experimente, basierend auf den Simulationsergebnissen.

2.5.2 Parameterisierung des Teilchenmodells

Wie in [Unterunterabschnitt 2.3.2](#) and [Tabelle 1](#) beschrieben, benötigen beide Simulationsmodelle Informationen zur molekularen Architektur, die thermodynamische Unverträglichkeit $\chi_{\alpha\beta}N_P$ zwischen den verschiedenen Segmenttypen, Zusammensetzungsabhängigkeit der Segmenttreibung, Dauer und Geschwindigkeit der Lösemittelverdampfung und Dauer des Lösemittel-Nichtlösemittelaustausches. In diesem hochdimensionalen Parameterraum ist es eine Herausforderung, geeignete Parameterkombinationen zu finden und somit ist es notwendig, die Parameterstudien auf den technisch relevanten Bereich zu begrenzen. Aus dem Experiment konnten wir die Selektivität der Lösemittel und Nichtlösemittel für die einzelnen Segmenttypen abschätzen und die Lö-

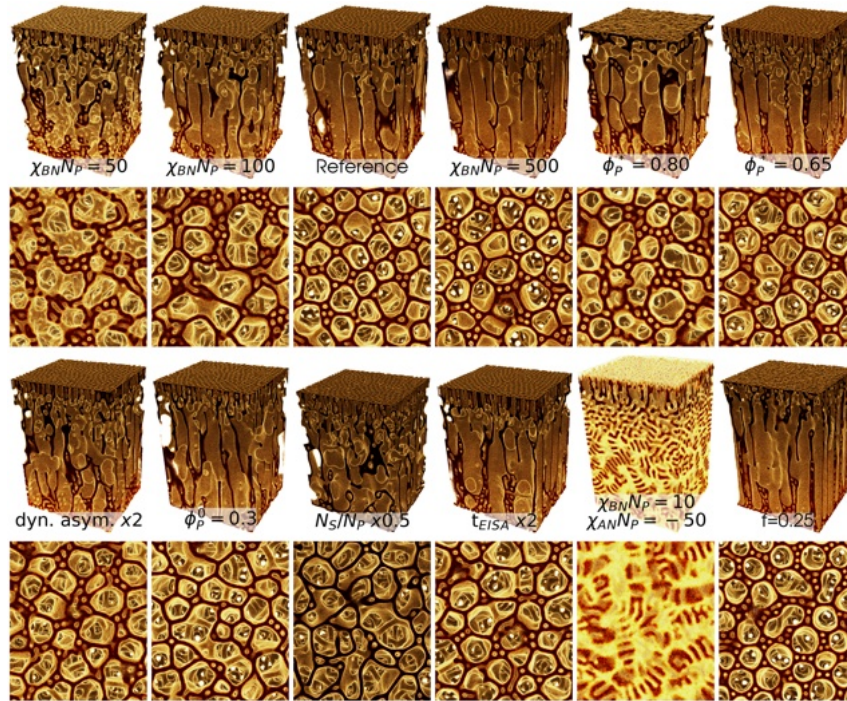


Abbildung 9: Momentaufnahmen des Konzentrationsfeldes des Mehrheitsblocks, $\phi_B(\mathbf{r})$, aus SNIPS-Simulationen für verschiedene Parametervariationen relativ zum Referenzsystem. Oben: Dreidimensionale Darstellung des Konzentrationsfeldes des matrixbildenden B -Blocks des Diblockcopolymers. Unten: Ansicht vom Membranboden bei $z = 40R_e$ in Richtung der Filmoberfläche bei $z = 0R_e$. Das Referenzsystem ist durch $\chi_{BN}N_P = 150$, $\chi_{AN}N_P = 10$, $\phi_P^* = 0.72$, $\phi_P^0 = 0.33$ und $f = 0.3125$ definiert. Adaptiert aus Ref. [3].

semitteldichte bestimmen, bei der das Polymer glasartig erstarrt. Dies ermöglichte uns in Ref. [1] erstmals, den gesamten SNIPS-Prozess mit einem konsistenten Parametersatz zu simulieren.

2.5.3 Validierung des gekoppelten Simulationsframeworks

Mithilfe großer Teilchensimulationen auf dem JUWELS Booster (siehe [Abbildung 9](#)) haben wir beobachtet, dass (i) eine geringe Inkompatibilität zwischen dem matrixbildenden Block B des Copolymers und dem Nichtlösemittel, (ii) eine glasartige Erstarrung, die bereits bei geringerer Polymerkonzentration einsetzt, oder (iii) ein größerer dynamischer Kontrast zwischen Polymer und Lösemittel zur Ausbildung einer feineren, schwammartigen Substruktur führt. Im Gegensatz dazu bewirkt die jeweils entgegengesetzte Parameterwahl größere Makroporen mit einer länglichen Form, die senkrecht zur Filmoberfläche orientiert sind. Diese Beobachtungen werden durch experimentelle Ergebnisse aus der Gruppe von Volker Abetz (Universität Hamburg) an Polystyrol (PS)-*block*-Poly(4-vinylpyridin) (P4VP)-Diblockcopolymermembranen bestätigt, bei denen die chemische Natur des Koagulanten sowie die Temperatur des Koagulationsbads systematisch variiert wurden [3].

2.5.4 Vorschlag neuer Experimente, basierend auf den Simulationsergebnissen

Das in diesem Projekt entwickelte effiziente Multiskalen-Simulationsframework eröffnet neue Möglichkeiten zur Verknüpfung rechnergestützter Modellierung mit der experimentellen Membranherstellung. Durch die Vorhersage der Strukturentwicklung über mehrere Längen- und Zeitskalen hinweg, die Validierung anhand experimenteller Ergebnisse sowie die Optimierung von Herstellungsprozessen etablieren wir einen robusten Rahmen für das rechnergestützte Materialdesign. Die Integration effizienter Simulationen mit maschinellem Lernen (ML) auf modularen Supercomputerarchitekturen – kombiniert mit gezielter experimenteller Validierung – zeigt, wie digitale Zwillinge die Materialentwicklung beschleunigen und das rationale Design von Copolymermembranen für spezifische Trennanwendungen ermöglichen können.

Als anschauliches Beispiel zeigen wir, dass die Zugabe eines zweiten Diblockcopolymers zur

Formulierung eine systematische Kontrolle der Porengröße der isoporösen Deckschicht der Membran ermöglicht. Mithilfe einer Kombination aus SCFT und Teilchensimulationen untersuchen wir das Phasenverhalten und die Selbstorganisation binärer Mischungen linearer Diblockcopolymerer A_1B_1 und A_2B_2 , sowohl im Gleichgewicht als auch unter verschiedenen Prozessbedingungen. Der Fokus liegt auf Systemen, in denen das kürzere Copolymer A_1B_1 zylindrische Domänen bildet. Die Gleichgewichtsphasendiagramme zeigen breite Bereiche der Makrophasenseparation, sobald die Längenasymmetrie zwischen den beiden Diblockcopolymeren ausreichend groß wird. Darüber hinaus führt das Beimischen von A_2B_2 zu einer A_1B_1 -Schmelze zu einer Vergrößerung des Gleichgewichtszylinderradius um mehr als einen Faktor Drei, bevor Makrophasenseparation einsetzt [4].

Unsere Teilchensimulationen zeigen zudem eine ausgeprägte Abhängigkeit der resultierenden Morphologie von der Prozesshistorie, selbst wenn derselbe thermodynamische Zustand innerhalb des Makrophasenseparationsregimes angestrebt wird. Schnelles Abschrecken führt zu einer homogenen Mischung mit enger Zylindergrößenverteilung und ausgeprägter hexagonaler Ordnung, während langsame Änderung des thermodynamischen Zustands lokale Entmischung begünstigt und eine bimodale Größenverteilung sowie eine geringere Fernordnung hervorruft. Darüber hinaus beobachteten wir, dass das Beimischen von A_2B_2 in SNIPS-basierte Membran-Herstellungprozessen eine effektive Strategie zur Einstellung der Porengröße darstellt: Die Zugabe eines um den Faktor 2,25 längeren Copolymeren erhöht die Porendurchmesser um bis zu 70%, und weitere Optimierungen könnten eine mehr als zweifache Vergrößerung ermöglichen, ohne die Membranqualität zu beeinträchtigen. Insgesamt zeigen die Arbeiten [4, 5], wie Zusammensetzung der Mischung, molekulare Asymmetrie und Prozesspfad gemeinsam die Morphologiebildung bestimmen und liefert damit Designprinzipien zur gezielten Einstellung nanoskaliger Strukturen sowie zur Weiterentwicklung rationaler Prozessstrategien für maßgeschneiderte Blockcopolymermembranen.

Die Ziele des AP5 wurden vollständig und planmäßig erreicht und in [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, and M. Müller, *Adv. Mater.* **36**, 2404560 (2024), [Process-directed self-assembly of copolymer blends: I. Micro- and macrophase separation](#), J. Xie und M. Müller, *Macromolecules* **58**, 11523 (2025), und [Process-directed self-assembly of copolymer blends: II. Continuous tuning of structure size](#), J. Xie and M. Müller, *Macromolecules* **58**, 11539 (2025) veröffentlicht.

3 Der während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordenen Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Während der Durchführung des Vorhabens wurden dem Zuwendungsempfänger keine unmittelbar konkurrierenden Arbeiten Dritter auf dem Gebiet der ML-basierten Kopplung von Teilchen- und Kontinuumssimulationen für die Membranherstellung bekannt.

Simulationen der Membranherstellung im Rahmen eines einzelnen Modells (insbesondere dynamischer SCFT) wurden in der Gruppe von Glenn Fredrickson (UCSB) durchgeführt und wurden in den Veröffentlichungen [Modeling microstructure formation in block copolymer membranes using dynamical self-consistent field theory](#), D.J. Grzetic, A.J. Cooper, K.T. Delaney und G.H. Fredrickson, *ACS Macro Lett.* **12**, 8, (2023) und [Investigating microstructure evolution in block copolymer membranes](#), A.J. Cooper, D.J. Grzetic, K.T. Delaney und G. H. Fredrickson, *J. Chem. Phys.* **160**, 074903 (2024) publiziert. Diese Simulationen betrachten häufig nur zwei-dimensionale Systeme, können nicht die Kombination von EISA und NIPS in einem Modell beschreiben, und können nur signifikant kleinere Zeit- und Längenskalen untersuchen. Dies unterstreicht die Bedeutung und Leistungsfähigkeit unseres konkurrenz gekoppelten Ansatzes.

Nach seiner Dissertation erhielt Niklas Blagojevic das Angebot einer Postdoktorandenstelle und arbeitet nun in der Fredrickson-Gruppe am Departments of Chemical Engineering and Materials der University of California in Santa Barbara, U.S.A..

4 Publikationen und Präsentationen auf Konferenzen

4.1 Publikationen mit Danksagung an das Projekt 16ME0658K

- [1] Simulation of membrane fabrication via solvent evaporation and nonsolvent induced phase separation, N. Blagojevic and 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, and M. Müller, *Macromolecules* **56**, 6880 (2023)
- [3] Towards predicting the formation of integral-asymmetric, iso-porous diblock copolymer membranes, N. Blagojevic, S. Das, J. Xie, O. Dreyer, M. Radjabian, M. Held, V. Abetz, and M. Müller, *Adv. Mater.* **36**, 2404560 (2024)
- [4] Process-directed self-assembly of copolymer blends: I. Micro- and macrophase separation, J. Xie and M. Müller, *Macromolecules* **58**, 11523 (2025)
- [5] Process-directed self-assembly of copolymer blends: II. Continuous tuning of structure size, J. Xie and M. Müller, *Macromolecules* **58**, 11539 (2025)
- [6] Hollow droplets and capsules formed by nonsolvent-induced phase separation, N. Blagojevic, Z. Liu, C. Lang, and M. Müller, *Adv. Phys. Res.* **4**, e00037 (2025)
- [7] On efficient simulation of self-assembling diblock copolymers using a peridynamic-enhanced Fourier spectral method, F. Mossaiby, G. Häfner, A. Hermann, C. Cyron, M. Müller, S. Silling, and A. Shojaei, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **439**, 117878 (2025)
- [8] Membrane fabrication via EISA and NIPS: Insights into the spatiotemporal evolution from simulations, N. Blagojevic, S. Das, G. Häfner, J. Xie, and M. Müller, *NIC Symposium 2025*, *NIC Series* **52**, 255 (2025)
- [9] Heat Flow in solvent-free, dense amorphous and semi-crystalline cellulose derivatives, D. Mukherji, T. de Oliveira, N. Chowdhury, D. Cahill, and M. Müller, *Macromolecules* **59**, 575 (2026)
- [10] Thermal conductivity of commodity polymers under high pressures, O.H.M. de Alencar, J. Wu, M. Müller, and D. Mukherji, *J. Chem. Phys.* **164**, 024905 (2026)
- [11] GPU-accelerated continuum dynamics of block copolymer blends and solutions, G. Häfner and M. Müller, *J. Chem. Phys.* **164**, 024906 (2026)
- [12] 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>
- [13] 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. Herten, R. C. Aydin, and M. Müller, <https://chemrxiv.org/doi/full/10.26434/chemrxiv.15000555/v1>

4.2 Vorträge

Die Projektarbeiten wurden auf zahlreichen Konferenzen vorgestellt. Besonders hervorzuheben ist die Sitzung *High Performance Computing Multiscale Modeling* des CECAM Flagship Workshop Virtual Materials Design: AI, Simulation, and Workflows am 3. Juni 2025 mit Glenn H. Fredrickson (UCSB) and Kurt Kremer (MPI für Polymerforschung, Mainz) als eingeladene Sprecher. Daran war das MExMeMo-Team mit folgenden Vorträgen beteiligt:

1. V. Abetz: Formation of Integral-Asymmetric Isoporous Block Copolymer Membranes: Experimental Studies
2. G. Häfner: Formation of isoporous block copolymer membranes: particle-based simulations and continuum modeling

3. M. Busch: Formation of Isoporous Block Copolymer Membranes: Machine learning based decision model
4. A. Herten: Enabling and Optimizing Polymer Simulations Through Modular Supercomputing
5. S. Pickartz: Coupling of Continuum and Particle-based Models with ML-based Decision Making using HPC Resources

Weiterhin wurde die Projektergebnisse in folgenden Vorträgen präsentiert:

1. 24.02.23 Diblock copolymer membranes: What can we learn from computer simulation, Chemistry Department, Athens, GA, USA
2. 27.03.23 N. Blagojevic Simulation of diblock-copolymer membrane fabrication, DPG-Frühjahrstagung, Dresden
3. 01.06.23:MExMeMo: Virtuelles skalenübergreifendes Design zur Teilchensimulation mittels Modularem Supercomputing, HPC- Statuskonferenz der Gauss-Allianz 2023, Karlsruhe
4. 20.07.23 Membrane fabrication via SNIPS: Insights from computer simulation, ICP2023, Sapporo, Japan
5. 07.08.23 Membrane fabrication via SNIPS: Insights from computer simulation CCP 2023 34th IUPAP Conference on Computational Physics, Kubo, Japan
6. 15.08.23 Membrane fabrication via SNIPS: Insights from computer simulation, 31st Intl. Materials Research Congress, Cancun, Mexico
7. 13.09.23 Simulation of block copolymer membrane formation, CECAM workshop honoring Kurt Binder, Mainz, Germany
8. 19.11.23 Fabrication of block copolymer membrane: What can be learned from coarse-grained models? Compflu23, Chennai, India
9. 04.03.24 Simulation of block-copolymer-membrane fabrication, APS March meeting 2023, Minneapolis, USA
10. 25.04.24 MEExMeMo: Virtuelles skalenübergreifendes Design zur Teilchensimulation mittels modularem Supercomputing, HPC Status Konferenz, Dresden
11. 20.05.24 Membrane Fabrication via EISA and NIPS: Insights into the Spatiotemporal Evolution from Computer Simulation (invited), Computational Modelling of Molecular Systems: from Atoms to the In-silico Design of Materials, Cyprus Institute, Nicosia, Cyprus
12. 14.06.24 Top-Down Modelling of Polymer Systems: What can be learned from simulations of highly coarse-grained models? (invited), Nanjing, Southeast University, China
13. 17.06.24 Membrane Fabrication via EISA and NIPS: Insights into the Spatiotemporal Evolution from Computer Simulation (invited), International Symposium on Soft Matter Science and Engineering 2024, Guangzhou, China
14. 19.08.24 Simulating the formation of integral-asymmetric, isoporous diblock copolymer membranes, ACS Fall meeting, Denver, CO, USA
15. 10.09.24 Simulating the formation of copolymer membranes, NHR Konferenz, Darmstadt
16. 04.10.24 Membrane Fabrication via EISA and NIPS: Insights into the Spatiotemporal Evolution from Computer Simulation, INTEMA, Mar del Plata, Argentina
17. 11.11.24 Process-directed self-assembly on the molecular scale, School of Emergent Soft Matter, South China University of Technology, Guangzhou, China
18. 17.03.25 Harnessing Metastability: Process-Directed Formation of Nonequilibrium Structures in Diblock Copolymers, APS March meeting, Anaheim, CA, USA
19. 19.03.25 G. Häfner: Simulation of the fabrication of integral-asymmetric membranes using continuum modeling, DPG Spring meeting, Regensburg
20. 18.03.25 J. Xie: Tuning Pore Size in Integral-Asymmetric, Isoporous Membranes via Bidisperse Diblock Copolymers, DPG Spring Meeting, Regensburg
21. 20.03.25 Process-directed formation of nonequilibrium structures in copolymer materials, DPG March Meeting 2025, Regensburg
22. 11.04.25 G. Häfner: Coupling continuum modeling to particle-based simulations, 2nd Biophysics Symposium "New directions in Biophysics", Göttingen
23. 08.09.25 Membrane Fabrication via EISA and NIPS: Insights into the Spatiotemporal Evolution from Computer Simulation, KU, Seoul, Korea

24. 24.09.25 Multi-skalen Codes mit gekoppelten Ebenen: MExMeMo, HPC Status-Tagung 25, Göttingen
25. 29.09.25 Membrane Fabrication via EISA and NIPS: Insights into the Spatiotemporal Evolution from Computer Simulation, Fudan University, Shanghai, China
26. 29.09.25 J. Xie: Tuning Pore Size in Integral-Asymmetric, Isoporous Membranes via Bidisperse Diblock Copolymers, 9th International Soft Matter Conference (ISMC), Crete, Greece
27. 30.09.25 G. Häfner: Optimizing the fabrication of isoporous block copolymer membranes by coupled particle-based and continuum modelings, 9th International Soft Matter Conference (ISMC), Crete, Greece
28. 09.10.25 Membrane Fabrication via EISA and NIPS: Insights into the Spatiotemporal Evolution from Computer Simulation, GRK 2516, Mainz
29. 24.10.25 N. Blagojevic, Simulation of diblock-copolymer membrane fabrication, M-WET – Center for Materials for Water and Energy System, USA
30. 03.02.26 Coarse-grained simulations of polymers: from rheology to membrane fabrication, 4th Intl. ESPCI-Michelin workshop on Multiscale dynamics of Soft Heterogeneous and Polymeric Materials, Paris, France
31. 19.03.26 Block copolymer membrane fabrication via EISA and NIPS, APS March meeting, Denver, USA
32. 19.03.26 J. Xie: Process-directed micro- and macrophase separation in diblock copolymer blends, APS March meeting, Denver, USA

5 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten

Die in diesem Projekt durchgeführten Arbeiten stellten einen erheblichen Mehraufwand dar, welcher nur mit Hilfe zusätzlicher Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter zu bewältigen war und nicht aus der Grundausstattung der Arbeitsgruppe finanziert werden konnte.

Die in den Arbeitspaketen erzielten Ergebnisse sind in [Abschnitt 2](#), den Meilensteinberichten und Veröffentlichungen detailliert beschrieben. Sämtliche Meilensteinziele (M1.1, M1.2, M1.3, und M3.1) wurden vollständig und planmäßig erreicht.

6 Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Nach dem Ausscheiden von Dr. Mossaiby aus Hereon Ende 2024 aus persönlichen (nicht projektbezogenen) Gründen wurde eine kostenneutrale Übertragung der verbleibenden Mittel von Hereon an UGOE veranlasst. Dr. Gregor Häfner (UGOE) übernahm nahtlos diesen Teil des Projekts. Diese Lösung wurde dem Projektträger (Dr. Baki) am 12. September 2024 mitgeteilt und der formale Antrag wurde am 10. Oktober 2024 über Easy-Online eingereicht und genehmigt.

Die im Projekt angefallenen Kosten entfallen überwiegend auf Personalmittel (97%), die für die Bearbeitung der Arbeitspakete eingesetzt wurden. Dadurch konnten wissenschaftliche Ergebnisse von hoher Qualität und internationaler Sichtbarkeit erzielt werden, wie in [Unterabschnitt 4.1](#) dargelegt wird.

Darüber hinaus entstanden Reisekosten (3%) im Zusammenhang mit Projekttreffen, Besuchen bei Kooperationspartnern sowie der Teilnahme an wissenschaftlichen Konferenzen.

7 Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplanes

7.1 Wirtschaftliche Anschlussfähigkeit

Die Georg-August-Universität Göttingen hat keine wirtschaftliche Verwertung geplant.

7.2 Wissenschaftliche-technische Anschlussfähigkeit

Die in diesem Projekt MExMeMo erzielten Ergebnisse wurden auf zahlreichen internationalen Fachtagungen präsentiert und intensiv mit der wissenschaftlichen Community diskutiert, darunter als Plenarvortrag auf der Frühjahrstagung 2025 der Deutschen Physikalischen Gesellschaft in Regensburg.

Die zentralen methodischen und konzeptionellen Neuerungen wurden in mehreren wissenschaftlichen Publikationen veröffentlicht oder sind derzeit zur Veröffentlichung eingereicht (siehe [Unterabschnitt 4.1](#)).

8 Zusammenfassung und Ausblick

Während frühere konkurrenz gekoppelte Teilchen-Kontinuums-Ansätze überwiegend auf einkomponentige Fluide sowie den Austausch von Massen-, Impuls- und Energieflüssen beschränkt waren, erweitert unsere SCALEXA-Projekt MExMeMo dieses Paradigma auf räumlich inhomogene, multikomponentige Systeme mit diffusivem Transport, gekoppelter Mikro- und Makrophasenseparation sowie Vitrifizierung. Damit wird ein neuer methodischer Zugang zur prädiktiven Simulation komplexer Nichtgleichgewichtsprozesse in weicher Materie geschaffen und ein entscheidender Schritt hin zu digitalen Zwillingen realer Membranherstellungsprozesse ermöglicht.

Drei konkrete Aspekte der Projektarbeiten möchten wir in der Zukunft weiterverfolgen:

- Automatisierung des Workflows der ML-gestützten Kopplung von multiskaligen Simulationsmethoden auf modularen Supercomputern
- Berücksichtigung des hydrodynamischen Flusses und der Viskoelastizität bei der simulationsbasierten Optimierung von Herstellungsprozessen Nichtgleichgewichts-Polymermaterialien; Betrachtung von nichtisothermen Systemen mit einer inhomogenen Temperaturverteilung aufgrund der Verdampfungswärme
- Erweiterung auf Polymermembrane mit unterschiedlichen Poren in der funktionalen Ober-schicht

Das Prinzip der skalenübergreifenden Modellierung auf Supercomputern ist ebenso auf andere anspruchsvolle wissenschaftlich-technische Fragestellungen in der Polymerforschung, den Materialwissenschaften und in verwandten Bereichen, wie z. B. der Biotechnologie, übertragbar sein, um ein besseres Verständnis von Struktur-Prozess-Eigenschafts-Beziehungen zu erlangen. In all diesen Gebieten beeinflussen molekulare Eigenschaften (wie z. B. Fusionsproteine) das Verhalten auf größeren Skalen (wie z. B. Transport auf der Skala von Organellen oder Zellen). Beispielsweise wurde das UDM erfolgreich auf die reaktionsgetriebene Selbstorganisation von Biomolekülen und Transportmechanismen von biomolekularen Kondensaten angewandt – siehe [Reaction-Driven Assembly: Controlling Changes in Membrane Topology by Reaction Cycles](#), G. Häfner und M. Müller, *Soft Matter* **19**, 7281 (2023) und [Reaction-driven Diffusiophoresis of Liquid Condensates: Potential Mechanisms for Intracellular Organization](#), G. Häfner und M. Müller, *ACS Nano* **18**, 16530 (2024). Die in diesem Projekt gesammelten Erfahrungen haben auch zur Herstellung von funktionellen Filmen aus Biomaterialien beigetragen – siehe [One-step-processed bilayer biomass-derived ethyl cellulose for full-color sub-ambient daytime radiative cooling](#), Y. Liu, N. Blagojevic, Q. Xuan, J. Liu, Y. Liao, Y. Fu, Y. Fang, P. Cheng, X. Xu, T. Wang, N. Yi, W. Li, M. Müller, J.-G. Dai, R. Yang, und D. Lei, *Nat. Energy* accepted (2026). Wir erwarten, dass die Entwicklungen und Ergebnisse aus diesem SCALEXA-Projekt MExMeMo auch in Zukunft einen signifikanten Beitrag zum Materialdesign auf Supercomputern leisten werden.