

Phaeon Molecular

Simulation flüssigen Wassers in einem erhaltenden Energiegraphen

Marcel Langjahr

Pantareon

Pantareon Foundations

langjahr@pantareon.io · <https://pantareon.io/>

Juli 2026

Zusammenfassung

Wir stellen *Phaeon Molecular* vor, den molekularen Modus der Engine der Emergent Graph Theory (EGT): dieselbe erhaltende Operatorgrammatik, die im kosmologischen Modus baryonische Struktur und im Sprachmodus linguistische Struktur erzeugt, angewandt auf Materie der kondensierten Phase. Ein Wassermolekül ist kein starrer Körper mit tabellierter Geometrie — es ist ein gebundener Teilgraph, dessen Form ein gemessenes Resultat ist. Der H–O–H-Winkel ist emergent, nicht auferlegt.

Die resultierende Flüssigkeit erreicht Qualität der TIP4P/2005-Klasse in *Struktur und Dynamik* an einem einzigen validierten Arbeitspunkt: Tetraederordnung $q_{\text{tet}} = 0,556$ gegen eine Referenz von 0,55, Koordinationszahl 4,8 gegen 4,5, erster g_{OO} -Peak bei 2,62 Å gegen 2,78, Selbstdiffusion $3,0 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ gegen einen experimentellen Wert von $2,3 \times 10^{-9}$, und ein Virialdruck, der bei realer Flüssigkeitsdichte statistisch nicht von null zu unterscheiden ist — d. h. NPT-Selbstkonsistenz. Die Elektrostatik ist volles Ewald mit vergrabener TIP4P-M-Site, beschleunigt durch eine Smooth-Particle-Mesh-Ewald-Implementierung, die gegen die direkte Summe als *exaktes Orakel* getestet wird, sowohl in der Energie als auch in den Kräften je Site.

Die auszeichnende Eigenschaft der Engine ist Verifikation als Konstruktionsprinzip. Jeder Kraftterm wird per Finite-Differenzen-Test gegen $-\nabla V$ geprüft; die Nachbarschaftsliste wird durch exakte Gleichheit der Paarmenge gegen Brute Force getestet; Impulsbilanz, Ladungserhaltung und Bit-Reproduzierbarkeit bei gesetztem Seed sind automatisierte Tests. Vierunddreißig solcher Tests laufen bei jedem Build. Diese Schicht hat sich bezahlt gemacht: Sie deckte eine systematische Verzerrung im projektierten Schätzer des Potentials der mittleren Kraft (PMF) auf — einen ausgelassenen entropischen Jacobi-Term von +0,83 bis

+1,00 kcal/mol, genau die Größe des gemessenen Effekts —, die still durch vier Messkampagnen propagiert war und ein publiziertes negatives Ergebnis hervorgebracht hatte. Dieses Ergebnis wird hier zurückgezogen, und die korrigierte Neuanalyse der identischen Rohdaten liefert Kontaktminima von −0,68 und −0,67 kcal/mol mit der kanonischen Form der Solvationskurve.

Die bindende Beschränkung des Programms ist quantifiziert, nicht behauptet. Die Hydrophobie-Kampagne sampelte 0,72 Pikosekunden pro Umbrella-Fenster gegen einen Fachstandard von 1–10 Nanosekunden — ein Defizit von drei bis vier Größenordnungen, das allein jede bislang berichtete ungeklärte Observable erklärt. Eine direkte Einteilchen-Messung bestätigt, dass die treibende Kraft vorhanden ist: Das Wasser verlangt +3,72 kcal/mol an Kavitätsarbeit gegen ein Solut an dessen physikalischem Ausschlussradius. Die Durchsatzmauer zu beseitigen ist Ingenieursarbeit mit benannten Mechanismen; 5,63× sind bei $N = 512$ bereits gehoben (Skalierungsexponent $2,04 \rightarrow 0,84$), und ein weiterer Faktor der Größenordnung 30 ist identifiziert — eingegrenzt, nicht ausgeweitet, durch einen Parallelisierungsversuch, der 1,06× ergab und den Engpass von der Arithmetik zur Allokation pro Schritt verschob. Was offen bleibt, ist Rechenzeit, nicht Architektur.

Verfügbarkeit des Quellcodes: Die Engine (Rust-Kern mit Python-Orchestrierung) ist proprietäres Eigentum von Pantareon und wird nicht als Open Source veröffentlicht. Zugang kann auf begründete Anfrage für technische Due Diligence oder wissenschaftliche Verifikation gewährt werden, vorbehaltlich einer Vertraulichkeitsvereinbarung. Lizenzierung, Erwerb und finanzierte Mitentwicklung der Technologie stehen zur Diskussion.

Umfang dieses Papers: Dieser Bericht stellt den molekularen Modus der EGT-Engine und seine bislang gemessenen Ergebnisse vor. Dies ist ein

technischer Statusbericht für Partner und Investoren mit wissenschaftlichen Ansprüchen; er ist nicht zur Begutachtung eingereicht. Alle Zahlen stammen aus deterministischen, reproduzierbaren Läufen, sind an einem einzigen angegebenen Arbeitspunkt angeführt und gegen publizierte Referenzwerte für flüssiges Wasser verglichen. Wo das Modell eine Referenz nicht erreicht, wird das in §6 ausdrücklich gesagt. Der theoretische Rahmen wird im Begleitpaper *Emergent Graph Theory (EGT)* dargestellt; die Engine teilt ihre Operatorgrammatik und Erhaltungsdisziplin mit dem kosmologischen und dem Sprachmodus, die andernorts berichtet werden.

1 Einleitung

Molekulardynamik kondensierter Materie ist ein reifes Feld mit exzellenten Werkzeugen. Allein für Wasser gibt es Dutzende Parametrisierungen, und die besten von ihnen — TIP4P/2005 und seine Verwandten — reproduzieren Struktur, Dynamik, die Dichteanomalie und die Solvationsthermodynamik auf einem Niveau, das drei Jahrzehnte der Verfeinerung gekostet hat. Ein neues Wassermolekül braucht einen Grund zu existieren.

Der Grund ist hier nicht das Wasser. Er ist, dass das Wasser nicht gebaut wurde. Es ist *gewachsen*, durch eine Operatorgrammatik, die nicht für Chemie entworfen wurde.

Phaeon Molecular ist einer von drei Modi einer einzigen Engine. Dieselben fünf erhaltenden Operatoren, die im Sprachmodus Text ingestieren und im kosmologischen Modus baryonische Struktur erzeugen, erzeugen auch eine wasserstoffbrückengebundene Flüssigkeit. Nichts am Operatorsatz ist molekular. Molekular ist der Keim: ein Graph aus Knoten für Sauerstoff, Wasserstoff und freie Elektronenpaare mit einem Energiebudget, entlassen in dieselbe Physik.

Das hat eine unmittelbare und ungewöhnliche Konsequenz. In einem konventionellen Wassermolekül ist die Molekülgeometrie eine Eingabe: der H–O–H-Winkel wird auf seinen experimentellen Wert gesetzt und dort per Zwangsbedingung festgehalten. Hier ist der Winkel eine *Messung*. Die Asymmetrie der freien Elektronenpaare und die Domänenabstoßung bestimmen ihn, und das Modell ist nur so gut, wie sich diese emergente Geometrie herausstellt. Dasselbe gilt für das Wasserstoffbrücken-Netzwerk: am unten berichteten Arbeitspunkt ist der phänomenologische Wasserstoffbrücken-Term vollständig abgeschaltet, und das tetraedrische Netzwerk ist das, was die Elektrostatik von selbst aufbaut.

Die Frage des Programms ist daher enger und

schärfer als „können wir Wasser simulieren“. Sie lautet: *wie weit kommt ein allgemeines erhaltendes Substrat bei einem Problem, für das es nicht entworfen wurde, und was bedeutet das für die Probleme, auf die es als nächstes gerichtet werden könnte?*

1.1 Was die Engine strukturell bietet

Drei Eigenschaften folgen aus der Konstruktion, statt nachträglich aufgesetzt zu werden. Es sind dieselben drei, die den Sprachmodus kennzeichnen, und sie sind das, was ein Lizenznehmer tatsächlich kauft.

Verifikation als Konstruktionsprinzip. Jeder Potentialterm ist mit einer analytischen Kraft gepaart, und jedes Paar wird per Finite-Differenzen-Test gegen $-\nabla V$ auf $< 10^{-4}$ geprüft. Wo ein Finite-Differenzen-Test strukturell blind ist — eine Nachbarschaftsliste kann Paare verlieren, ohne irgendeinen Gradienten zu verletzen — ist der Test stattdessen exakte Mengengleichheit gegen Brute Force. Die reziproke Summe von Smooth PME wird überhaupt nicht gegen Finite Differenzen validiert; sie wird gegen die direkte Ewald-Summe als exaktes Orakel validiert, in der Energie *und* in den Kräften je Site, weil eine aliasierte oder fehlende Mode beide konsistent verfälschen und einen Gradiententest bestehen würde. Vierunddreißig solcher Tests laufen bei jedem Build.

Determinismus. Ein Lauf mit gesetztem Seed ist in seiner Anfangskonfiguration bit-identisch; Replikate sind unabhängig durch Konstruktion und nicht durch Hoffnung. Genau das sorgt dafür, dass Fehlerbalken in diesem System bedeuten, was sie sagen.

Eine Grammatik, drei Domänen. Der Operatorsatz wird über den kosmologischen, den Sprach- und den molekularen Modus hinweg geteilt. Ein Lizenznehmer, der den molekularen Modus erwirbt, erwirbt ein Substrat, das an zwei unverwandten Problemklassen erprobt wurde — was das praktische Argument dafür ist, dass es eine allgemeine Engine ist und kein angepasster Spezialfall.

2 Der molekulare Modus

2.1 Das Molekül als Teilgraph

Ein Wassermolekül ist ein Sauerstoffknoten, der Masse trägt, zwei daran gebundene Wasserstoffknoten und zwei Massenpunkte der freien Elektronenpaare. Die Bindungen sind harmonisch; die Gestalt des Moleküls ergibt sich aus dem Wettstreit zwischen Bindungssteifigkeit, der Domänenabstoßung zwischen den vier Elektronendomänen und der deklarierten

Asymmetrie der freien Elektronenpaare. Der H–O–H-Winkel wird ausgelesen, nicht hineingeschrieben.

Das Einheitensystem ist durch drei physikalische Referenzen verankert und durch nichts sonst: die Topftiefe der Wasserstoffbrücke im Wasserdimer (5 kcal/mol) legt die Energie fest, die O–H–Länge in der Gasphase (0,9572 Å) legt die Länge fest, und die Sauerstoffmasse (15,999 amu) schließt das System und legt damit die Zeitskala fest. Jede berichtete Größe in SI-Einheiten — Diffusion in m²/s, Druck in bar, freie Energien in kcal/mol — folgt aus diesen drei Ankern. Es wird keine vierte Skala eingeführt, damit eine Zahl richtig herauskommt.

2.2 Elektrostatik

Partiellladungen sitzen auf den beiden Wasserstoff (+ q) und auf einer masselosen virtuellen M-Site, die entlang der H–O–H-Winkelhalbierenden verschoben ist (–2 q), der TIP4P-Konstruktion. Die negative Ladung sitzt bewusst *nicht* auf den exponierten Massenpunkten der freien Elektronenpaare: vergraben im Ausschlussvolumen des Sauerstoffs ist sie abgeschirmt, und genau das verhindert, dass leichte Sites unter starker Anziehung durch einander hindurchgezogen werden.

Die Summe ist volles Ewald — Realraum mit komplementärer Fehlerfunktion, Selbstenergie, einer expliziten intramolekularen Ausschlusskorrektur und reziprokem Raum — mit Tin-Foil-Randbedingungen. Der Coulomb-Vorfaktor tritt über die bestehenden Einheitenanker ein; es wird keine neue Skala eingeführt. Intramolekulare Bindungen werden am Arbeitspunkt durch SHAKE/RATTLE starr gehalten.

Wir haben verifiziert, dass die Gesamtenergie gegenüber dem Ewald-Aufspaltungsparameter α über einen Faktor 3,3 in α invariant ist (Abweichung 0,0002–0,017 kcal/mol pro Molekül), was die schärfste verfügbare Prüfung dafür ist, dass Selbstenergie- und Ausschluss-term einzeln korrekt sind.

2.3 Smooth Particle Mesh Ewald

Die direkte reziproke Summe ist $O(k_{\max}^3 N)$ und wird bei den Systemgrößen, die für Solvatationsarbeit nötig sind, zur Mauer. Der Modus implementiert Smooth PME (Essmann et al., 1995): B-Spline-Ladungsverteilung auf ein Gitter, FFT, Faltung mit dem reziproken Kernel und Kraftsammlung, mit $O(N \log N)$.

Kräfte werden *je Ladungssite* zurückgegeben, so dass der Aufrufer die Kraft der vergrabenen M-Site genau wie bei der direkten Summe auf O/H₁/H₂ umverteilt — das reziproke Verfahren bleibt von der Geometrie der virtuellen Site entkoppelt. Das Git-

ter wird aus der Abschirmbreite gewählt und nicht aus der Box allein: die reziproke Genauigkeit wird von αh bestimmt, und eine Gitterregel, die für α blind ist, verliert still an Genauigkeit, sobald der Realraum-Cutoff verkürzt wird.

3 Gemessene Ergebnisse

Alle Zahlen unten sind an einem Arbeitspunkt angegeben — M-Site-Gewicht $a = 0,20$, Wasserstoffladung $q = 0,60$, reale Teilchendichte der Flüssigkeit, 300 K, starre Bindungen, phänomenologischer Wasserstoffbrücken-Term *aus* — auf einer einzelnen Desktop-CPU.

3.1 Struktur und Dynamik

Observable	Diese Arbeit	Referenz
Tetraederordnung q_{tet}	0,556	0,55
Koordinationszahl	4,8	4,5
Erster g_{OO} -Peak (Å)	2,62	2,78
Selbstdiffusion (m ² /s)	$3,0 \times 10^{-9}$	$2,3 \times 10^{-9}$
Virialdruck (bar)	-128 ± 383	≈ 0

Tabelle 1: Flüssiges Wasser am validierten Arbeitspunkt. Druck bei $N = 128$ mit konvergiertem reziprokem Cutoff; der Fehlerbalken ist die physikalische Fluktuation des Schätzers, keine systematische Unsicherheit.

Zwei davon verdienen einen Kommentar. Der Tetraederordnungsparameter — der schärfste einzelne Diskriminator zwischen einer echt tetraedrischen Flüssigkeit und einer bloß dichten — trifft den Referenzwert, und zwar bei abgeschaltetem Wasserstoffbrücken-Term. Das Netzwerk wird allein von der Elektrostatik aufgebaut. Und der Virialdruck ist bei *realer* Flüssigkeitsdichte statistisch nicht von null zu unterscheiden, was bedeutet, dass das Modell NPT-selbstkonsistent ist: Es muss nicht auf die richtige Dichte gepresst werden.

Diesen Punkt zu erreichen erforderte, einen dritten geometrischen Freiheitsgrad zu identifizieren. Ladung q und Ausschlussradius σ allein sind bei fester Dichte zu stark gekoppelt, um Diffusion und Druck gleichzeitig zu erfüllen; die M-Site-Verschiebung a bewegt die Ladungsgeometrie unabhängig vom Dipol und löst die Blockade, indem sie den Druck von –3337 bar auf null bringt und dabei die Tetraederordnung *verbessert*.

3.2 Skalierung der Elektrostatik

N (Wasser)	ms/Schritt	Speedup
128	14,94 $\rightarrow$ 14,62	1,0 $\times$
216	36,77 $\rightarrow$ 18,51	1,99 $\times$
512	214,3 $\rightarrow$ 38,07	5,63$\times$

Tabelle 2: Vor und nach den in §5 beschriebenen Arbeiten an Kurzreichweite und Gitter. Der gemessene Skalierungsexponent fällt von 2,04 auf 0,84; der Fehler der elektrostatischen Energie beträgt 5×10^{-4} kcal/mol pro Molekül, d. h. 0,08% von $k_B T$.

3.3 Solvationsthermodynamik

Weil die Solut-Wasser-Wechselwirkung in der Alt-Einstellung rein abstoßend ist, *ist* die Arbeit zum Öffnen einer Kavität exakt die freie Hydratationsenergie, und eine Widom-Testteilchen-Einsetzung misst sie direkt — eine Einteilchen-Observable, weit besser konditioniert als das Zweiteilchen-Potential der mittleren Kraft. Gemessen mit $1,2 \times 10^7$ Einsetzungen bei $N = 216$:

Solut-Wasser-Form	ΔG_{hyd}	Referenz
Durchdringbarer kubischer Kern	$+2,23 \pm 0,01$	—
WCA (nur Abstoßung)	$+3,72 \pm 0,04$	$\sim +5$
Lennard-Jones 12-6 (voll)	$+0,36 \pm 0,03$	$+2,0$

Tabelle 3: Methan-Hydratation, kcal/mol. Die Referenz für das volle Potential ist der experimentelle FreeSolv-Wert; die WCA-Referenz ist der konventionelle Kavitätsterm. Alle drei Arme auf identischen Konfigurationen gemessen.

Drei Dinge folgen daraus. Das Wasser *ist* hydrophob: Es verlangt echte freie Energie für eine Kavität. Der Dispersionsbeitrag ist korrekt: Die Differenz zwischen dem rein abstoßenden und dem vollen Potential beträgt $-3,36$ kcal/mol gegen einen physikalischen Wert nahe $-3,5$. Und der Kavitätsterm ist rund ein Viertel zu billig, was die Lücke zur experimentellen freien Hydratationsenergie ist und in §6 auch so benannt wird.

Das Ersetzen eines durchdringbaren Weichkerns durch eine echte abstoßende Wand am physikalischen Ausschlussradius des Soluts hob die Kavitätsarbeit um 67% an und bestätigt damit, dass ein wesentlicher Teil des früheren Fehlbetrags die Solut-Darstellung war und nicht die Physik des Lösungsmittels.

4 Verifikation: ein durchgerechneter Fall

Eine Verifikationsschicht ist nur dann glaubwürdig, wenn sie etwas gefangen hat. Diese hier hat es, und der Fall ist lehrreich genug, um ihn vollständig zu berichten.

Das Programm maß Methan–Methan-Potentiale der mittleren Kraft per Umbrella-Sampling: das Paar nahe einem Fenstermittelpunkt zurückhalten, die Rückhaltekraft mitteln, integrieren. Über vier Kampagnen hinweg — mit variierter Boxgröße, Dreikörper-Kooperativität, Solutgröße und einer replizierten Kettenkollaps-Kontrolle — fiel die freie Kontaktenergie nicht-anziehend aus, und das Programm schloss daraus und publizierte, dass das Modell keine aufgelöste hydrophobe Anziehung erzeugt.

Der Schätzer war verzerrt. Die Rückhaltung wirkt auf den *skalaren* Abstand, daher trägt die gesampelte Dichte das dreidimensionale Volumenelement, $p(r) \propto r^2 \exp(-\beta[W + U_b])$. Die exakte Stationaritätsidentität lautet daher

$$M = \frac{2k_B T}{r} - W'(r),$$

$$W(r) = \int_r^{r_{\text{max}}} M dr' - 2k_B T \ln \frac{r_{\text{max}}}{r},$$

und der zweite Term war ausgelassen worden. Er ist rein entropisch — bei größerem Abstand gibt es schlicht mehr Konfigurationsraum — und der Schätzer liest ihn als Abstoßung. Sein Betrag am Kontakt liegt bei $+0,83$ bis $+1,00$ kcal/mol, gegen einen Literatureffekt von $-0,5$ bis $-0,9$. Verzerrung und Signal waren gleich groß, deshalb blieb das Versagen still.

Es wurde auf drei Wegen bestätigt. Ein Potential der mittleren Kraft mit einem Kontaktminimum von $-0,70$ kcal/mol, analytisch eingepflanzt und durch exakte Quadratur bei unendlichem Sampling durch die Pipeline geschickt, wird als $+0,21$ berichtet. Eine Nullkontrolle ($W \equiv 0$) wird als $+0,828$ berichtet, gegen eine analytische Vorhersage von $+0,827$. Und ein zweiter, rückhaltefreier Kraftschätzer, der in der Engine bereits vorhanden ist — und der keiner solchen Korrektur bedarf —, erfüllt die vorhergesagte Differenz $2k_B T/r$ auf 0,3 und 0,5 Standardabweichungen bei zwei Abständen.

Die Neuanalyse der identischen Rohdaten kostet keine Rechenzeit und liefert:

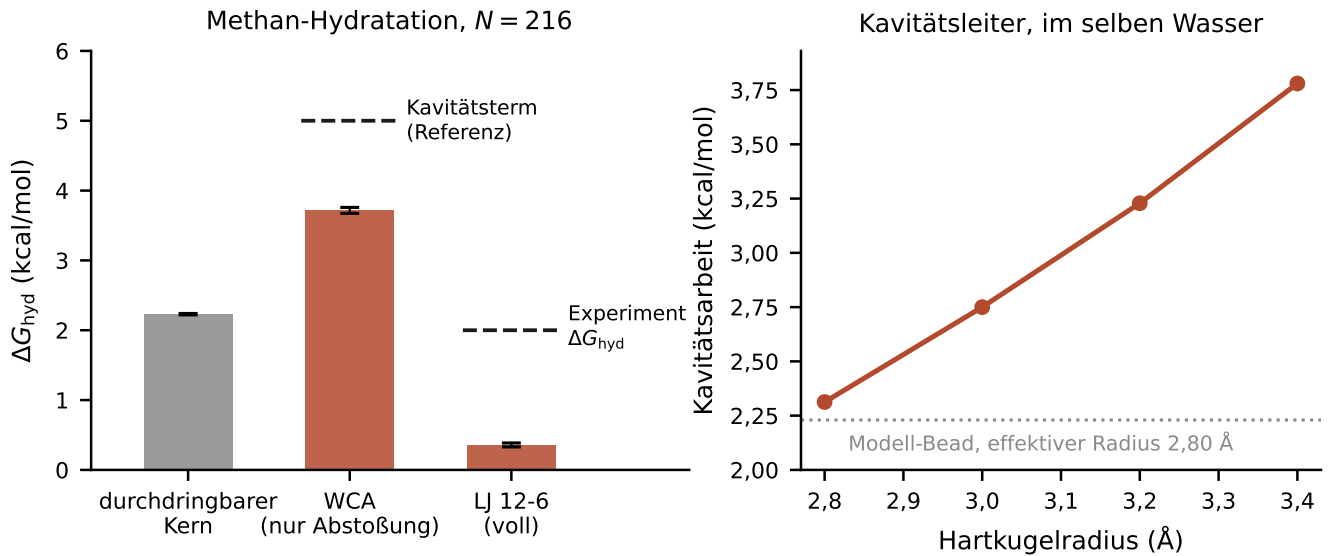


Abbildung 1: **Links:** freie Hydratationsenergie von Methan für die drei Solut-Wasser-Formen, gemessen auf identischen Konfigurationen bei $N = 216$ mit $1,2 \times 10^7$ Testeinsetzungen. Das Ersetzen des durchdringbaren Weichkerns durch eine abstoßende Wand am physikalischen Ausschlussradius hebt die Kavitätsarbeit um 67%; die verbleibende Lücke zum experimentellen Wert liegt beim Lösungsmittel, nicht beim Solut. **Rechts:** Kavitätsarbeit gegen den Hartkugelradius im selben Wasser. Die gemessene Hydratationsenergie des Alt-Beads verortet seinen effektiven Ausschlussradius bei 2,80 Å, gegen Methans physikalische $\sim 3,3$ –3,4 Å.

Kampagne	Publiziert	Korrigiert
Methan, $N = 150$	$+0,15 \pm 0,56$	-0,68
Methan, $N = 320$	$+1,15 \pm 1,05$	$+0,15$
Größeres Solut, $N = 360$	$+0,20 \pm 0,91$	-0,67

Tabelle 4: Freie Kontaktenergie, kcal/mol. Beide führenden Kampagnen stellen die kanonische Solvatationskurve wieder her — Kontaktminimum, Desolvationsbarriere, Abfall auf null —, die die publizierte Fassung nicht zeigte.

Ein zweites Artefakt fiel aus derselben Neuanalyse heraus. Die Diskrepanz zwischen den Kampagnen $N = 150$ und $N = 320$ war als Beleg für das negative Ergebnis gelesen worden. Fenster für Fenster sind die beiden Läufe statistisch identisch ($\chi^2 = 7,12$ bei 7 Freiheitsgraden, $p = 0,42$): es gibt keinen Boxgrößen-Effekt in der Physik. Der größere Lauf setzte lediglich sein äußerstes Referenzfenster bei 81% der halben Box, wo die Solute ihre eigenen periodischen Bilder spüren, und integrierte die daraus resultierende Restabstoßung in den Kontaktwert. Auf denselben Fensterbereich eingeschränkt, geben dieselben Daten $-0,429$ statt $+0,148$. Die Kampagne, die eine Finite-Size-Sorge ausräumen sollte, hatte ein eigenes Finite-Size-Artefakt eingeführt, am Referenzpunkt statt in der Box.

Was dies belegt und was nicht. Es belegt

keine hydrophobe Anziehung: die Fehlerbalken sind unverändert, die korrigierten Kontaktwerte liegen bei rund $1,2\sigma$, und zwei von vier Kampagnen bleiben nach der Korrektur nicht-anziehend. Was es belegt, ist, dass die Messung keine Information über die Frage trug — und dass es die in §1.1 beschriebene Disziplin war, die es zutage förderte, aus dem Projekt heraus, gegen die eigene publizierte Schlussfolgerung des Projekts.

5 Die bindende Beschränkung ist Rechenzeit

Die Retraktion in §4 wirft eine naheliegende Frage auf: Wenn der Schätzer das Problem war, warum waren die Fehlerbalken dann so groß, dass sich nichts in die eine oder andere Richtung auflösen ließ? Die Antwort ist quantifiziert.

Die Kampagne sampelte 0,72 Pikosekunden pro Umbrella-Fenster. Der Fachstandard für ein Methan-Paar-Potential der mittleren Kraft liegt bei einer bis zehn Nanosekunden pro Fenster — ein Defizit von $1400\times$ bis $14000\times$. Die vollständige Produktionskurve, sieben Fenster und sechs Replikate, ergibt insgesamt 30 ps. Bei diesem Sampling sind die beobachteten Fehlerbalken von $\pm 0,5$ kcal/mol kein Missgeschick; sie sind Arithmetik. Jedes „nicht aufgelöst“ in der Geschichte dieses Programms geht

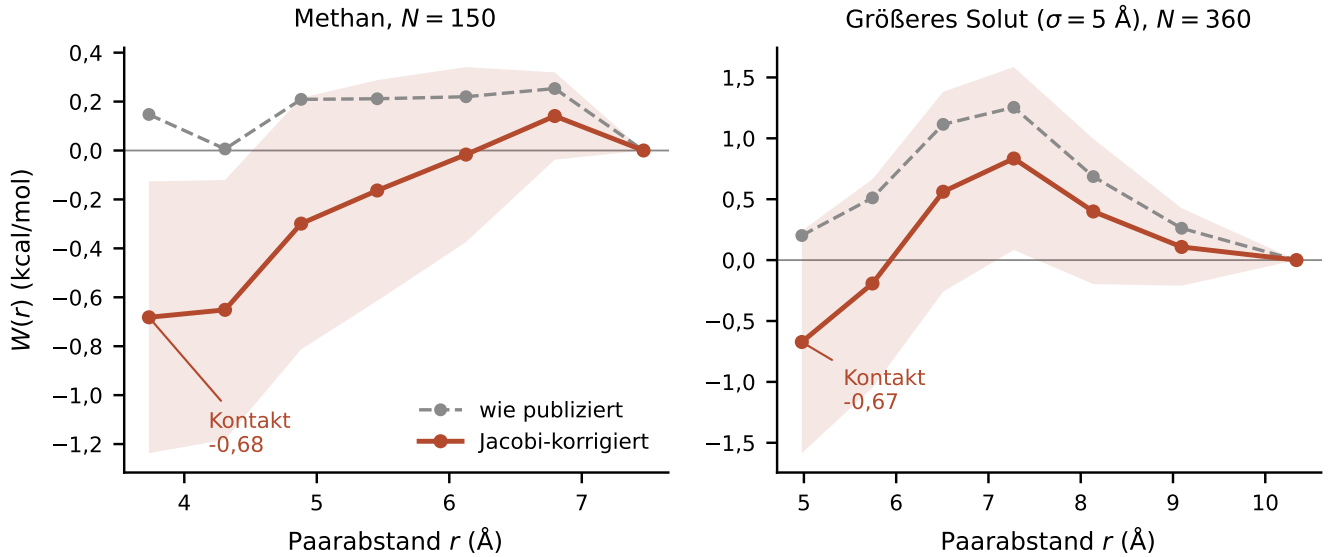


Abbildung 2: Die Schätzer-Korrektur, angewandt auf identische Rohdaten, für die beiden führenden Kampagnen. Grau: das Potential der mittleren Kraft wie publiziert, aus $W(r) = \int M dr'$. Rot: dieselbe Messung mit wiederhergestelltem entropischem Jacobi-Term, schattiert nach ihrem propagierten Standardfehler. Die Korrektur ist keine Umskalierung — sie stellt die kanonische Solvationsform (Kontaktminimum, Desolvationsbarriere, Abfall auf null) wieder her, die die publizierten Kurven nicht zeigten. Die Fehlerbalken sind unverändert, dies ist also eine korrigierte Messung, kein positives Ergebnis.

auf diese eine Zahl zurück.

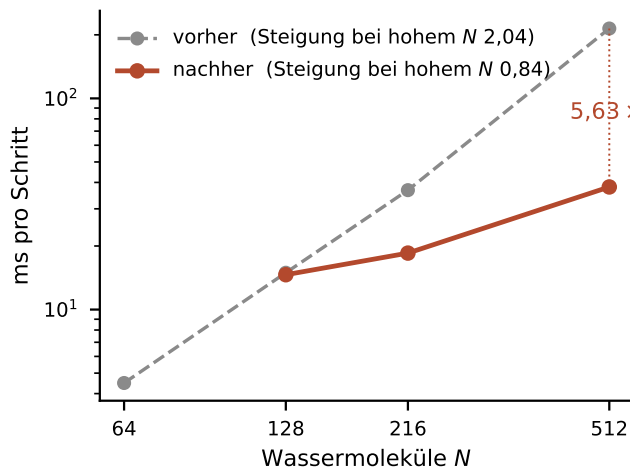


Abbildung 3: Kosten pro Integrationsschritt gegen die Systemgröße, eine Desktop-CPU, gleicher Arbeitspunkt. Das Aktivieren der Nachbarschaftsliste, das Umstellen der kurzreichweitigen Schleife auf sie, das Absichern einer toten Wasserstoffbrücken-Schleife und die Kopplung der Gitterdichte an die Abschirmbreite senken die Skalierungssteigung bei hohem N von 2,04 auf 0,84. Der Gewinn wächst mit der Systemgröße — und das ist die Richtung, auf die es ankommt, denn die offenen Fragen erfordern allesamt größere Boxen.

Vier Ursachen wurden gemessen, keine davon ar-

chitektonisch:

Skalierung. Der gemessene Kostenexponent lag trotz PME bei 2,04. Die reziproke Summe war auf $O(N \log N)$ gebracht worden, aber die Nachbaraufzählung im Realraum war nie aktiviert worden — der voreingestellte Cutoff betrug die halbe Box, was das Aktivwerden der verketteten Zelliste strukturell verhindert.

Serielle Ausführung. Die Physik lief single-threaded auf einer 24-Kern-Maschine.

Datenlayout. Der Knotenzustand liegt in Hash-Maps statt in flachen Arrays, sodass jeder Zugriff in der Kraftschleife ein Hash-Lookup und eine Zeigerverfolgung ist.

Zeitschritt. Der Integrator läuft bei 0,181 fs. Standardmäßige zwangsbedingte Molekulardynamik läuft bei 2 fs — eine Größenordnung Spielraum, die seit der Einführung starrer Bindungen nie nachjustiert wurde.

Von diesen ist die erste behoben: das Aktivieren der Nachbarschaftsliste, das Umstellen der kurzreichweitigen Sauerstoffschleife auf sie, das Absichern einer Wasserstoffbrücken-Schleife, die auf jedem Produktionsschritt für exakt null Beitrag ausgeführt wurde, und die Kopplung der Gitterdichte an die Abschirmbreite. Das Ergebnis sind die 5,63× und der Abfall des Exponenten, die in §3 berichtet werden, bei einem elektrostatischen Fehler von 0,08% von $k_B T$.

Die zweite wurde daraufhin angegangen, und das Ergebnis ist berichtenswert, weil es die Diagnose korrigiert hat. Die Kraftakkumulation im Realraum in einen dichten Puffer pro Site zu verlegen und zu parallelisieren, brachte $1,06\times$. Ein Thread-Sweep erklärt, warum: 42,8 ms auf einem Thread, 34,3 auf vieren, 34,0 auf vierundzwanzig. Die Sättigung bei vier Threads verortet die parallelisierte Arithmetik bei etwa 9 von 43 ms, also sind rund 80% des Schritts seriell — und dieser serielle Rest wird nicht von Berechnung dominiert, sondern von *Allokation*. Die Kandidaten-Paarliste, rund $2,5 \times 10^5$ Einträge, wird bei jeder Kraftauswertung neu materialisiert, und die Ladungs-site-Tabelle wird daneben aus Hash-Maps neu aufgebaut.

Dies ist das dritte Mal in diesem Programm, dass ein Engpass durch Schlussfolgern falsch zugeordnet und durch Messung korrigiert wurde, und es ist der Grund, warum die verbleibende Projektion eng gefasst angegeben wird. Die Beseitigung der Allokation pro Schritt (das Verschmelzen des Cutoff-Tests mit der Aufzählung, das Persistieren der Site- und Zelltabellen über Schritte hinweg) und die Rückkehr zu einem Standard-Zeitschritt von 2 fs sind die beiden Mechanismen mit gemessener oder lehrbuchgestützter Berechtigung; ein Datenlayout aus flachen Arrays ist ein dritter mit kleinerem und weniger sicherem Faktor. Zusammen liegen diese in der Größenordnung von $30\times$ statt der $100\times$, die ein naives Produkt aller vier Ursachen nahelegen würde — was ein System aus 512 Molekülen in den unteren Zehnerbereich von ns/Tag bringt. Das ist eine gewöhnliche moderne Größe, und es ist das Niveau, auf dem die Hydrophobie-Frage zu einer Routinemessung statt zu einem Grenzfall wird.

Der parallele Pfad bleibt erhalten: Er ist korrekt, er entfernt die Hash-Map aus der inneren Schleife, und er ist die Voraussetzung dafür, irgendetwas anderes zu parallelisieren, sobald der serielle Rest verschwunden ist. Er ist für sich genommen schlicht kein Speedup.

6 Wo das Modell nicht hinreicht

Schlicht gesagt, weil ein Leser bei technischer Due Diligence binnen einer Stunde danach fragt.

Die freie Hydratationsenergie ist zu schwach. Mit einem physikalisch parametrisierten Solut liefert das Modell $+0,36$ kcal/mol für Methan gegen experimentelle $+2,0$. Die Zerlegung lokalisiert dies: Der Dispersionsterm stimmt, der Kavitätsterm ist rund ein Viertel zu billig. Der Defekt sitzt daher im Widerstand des Lösungsmittels gegen das Öffnen einer Kavität, nicht in der Beschreibung des Solut

— eine frühere Zuschreibung allein an das Solut hat eine größere Box nicht überstanden und wird hier korrigiert.

Keine aufgelöste Dichteanomalie. Eine Kampagne mit hoher Statistik bei $N = 128$ und eine zweite bei $N = 256$ mit PME fanden kein inneres Minimum in $P(T)$ um 277 K; die Kurve ist im Kern monoton. Zwei Lesarten bleiben offen — dem Modell fehlt tatsächlich eine starke Anomalie, oder die Finite-Size-Unterdrückung besteht bei diesen Größen fort, da TIP4P/2005-Studien typischerweise $N \geq 256$ –500 verwenden. Die Entscheidung darüber erfordert größere Systeme, und das ist eine Frage der Rechenzeit.

Hydrophobe Paaranziehung ist nicht belegt. Nach Korrektur des Schätzers sind die Kontaktwerte mit dem Literaturbereich verträglich, liegen aber bei $\sim 1,2\sigma$. Dies ist eine offene Messung, kein Ergebnis in der einen oder anderen Richtung.

Proteinfaltung und Bindungskonstanten sind nicht demonstriert. Die Multiskalen-Maschinerie existiert und ist gradientengetestet — ein in explizitem Wasser gemessenes Solvationspotential der mittleren Kraft kann als *abgeleitetes* Paarpotential in billige implizite Kettenläufe eingesetzt werden, ohne eine Anziehung von Hand zuzufüttern. Die Maschinerie ist validiert; das physikalische Ziel, für das sie gebaut wurde, ist nicht erreicht.

Die ehrliche Zusammenfassung: Die Flüssigkeit ist in Struktur und Dynamik von TIP4P/2005-Klasse und erreicht diesen Standard in der Solvationsthermodynamik und im anomalen Verhalten noch nicht. Der Abstand zu diesen Standards ist gemessen, und der dominante Term darin ist das Sampling.

7 Anwendungsfläche

Das Programm tritt bewusst nicht in Konkurrenz zur Strukturvorhersage. Gelernte Modelle sagen gefaltete Strukturen aus der Sequenz außerordentlich gut voraus, und dieser Wettstreit ist entschieden. Das komplementäre Gelände ist dynamisch und thermodynamisch — freie Energien, Solvation, Assoziation — und es ist datenarm, mechanistisch, und dort hat ein transparentes erhaltendes Substrat etwas zu bieten, was ein gefittetes Modell nicht hat.

Freie Solvations- und Transferenergien. Das in §3 berichtete Widom-Instrument misst die freie Hydratationsenergie direkt und billig. Mit abgeschlossenem Durchsatz-Programm wird der systematische Vergleich gegen kuratierte experimentelle Datensätze Routine statt Kampagne.

Bindungsaffinität. Freie Assoziationsenergien werden von Elektrostatik und Desolvation domi-

niert, und beides bildet die Engine explizit ab. Dies ist die kommerziell bedeutsame Observable des Fachs und das natürliche Ziel, sobald die Solvationsthermodynamik abgeschlossen ist.

Multiskalen-Coarse-Graining mit abgeleitetem Potential. Ein effektives Paarpotential in explizitem Lösungsmittel zu messen und es in einen billigen impliziten Lauf einzusetzen, ist ein legitimes Coarse-Graining — das Potential ist abgeleitet, nicht geraten. Die Maschinerie ist gebaut und gradientengetestet.

Auditierbare Simulation. Deterministische, seed-reproduzierbare, ledger-exakte Molekulardynamik, in der jeder Kraftterm getestet ist, für Kontexte, in denen ein Ergebnis reproduzierbar und zurechenbar sein muss statt bloß plausibel.

Pantareon bietet die Technologie zur Lizenzierung, zum Erwerb oder zur finanzierten Mitentwicklung an.

8 Fazit

Eine erhaltende Operatorgrammatik, die weder für Chemie noch für Sprache geschrieben wurde, erzeugt in ihrem molekularen Modus eine wasserstoffbrückengebundene Flüssigkeit mit Tetraederordnung auf dem Referenzwert, mit Koordination und Diffusi-

on nahe am Experiment und mit einem Virialdruck von null bei realer Dichte — wobei die Molekülgeometrie emergent statt vorgegeben ist und das Wasserstoffbrücken-Netzwerk allein von der Elektrostatik aufgebaut wird. Sie tut dies deterministisch, mit jedem Kraftterm gegen seinen eigenen Gradienten getestet und mit einem Verfahren im reziproken Raum, das gegen ein exaktes Orakel validiert ist.

Dieselbe Disziplin hat eine der eigenen publizierten Schlussfolgerungen des Programms zurückgezogen, und die Messung, die an ihre Stelle trat, zeigte, dass die Triebkraft die ganze Zeit da gewesen war, unterhalb eines Rauschbodens, den ein Sampling drei Größenordnungen unter dem Fachstandard gesetzt hatte. Dieser Boden ist nun eine gemessene Größe mit benannten Ursachen, von denen eine für einen Faktor 5,63 beseitigt wurde und der Rest Ingenieursarbeit ist.

Dies ist kein fertiges Wassermolekülmodell, und es wird auch nicht als solches angeboten. Es ist ein allgemeines erhaltendes Substrat, das auf einem Problem, für das es nicht entworfen wurde, Struktur von TIP4P/2005-Klasse erreicht hat, auf einer einzigen Desktop-CPU, in einem Programm, dessen sämtliche offenen Fragen nun instrumentiert sind und dessen begrenzende Ressource gemessen ist. Was es als Nächstes braucht, ist keine neue Idee.