

KLT-MATDES + ARBD: состояния и события

SE1. 11 сентября 2026. Автор проекта: Курпишев Иван Борисович. Программный модуль и рабочий формализм подготовлены с помощью Codex по поручению автора. CP2B2 сохранена как предыдущая контрольная точка. Замороженные тома не редактировались.

Область реализации

SE1 реализует StateSpec и EventSpec для одного скалярного свойства материала: band gap или bulk modulus. Одна запись свойства задаёт один паспорт; наблюдения разных методов автоматически не объединяются. Это ветвь подготовки событийного анализа, а не выпуск предсказывающей модели и не закрытие прежних обязательств химического корпуса.

StateSpec хранит идентификаторы материала, структуры и фазы; область и метод; свойство; температуру и абсолютное давление; время на общей относительной шкале процесса; ссылки на источник и снимок. Для каждой скалярной координаты указаны значение, единица и uncertainty. В SE1 uncertainty имеет строго ограниченный смысл: заявленная неотрицательная абсолютная полуширина интервала. Стандартную ошибку, доверительный интервал или стандартное отклонение нельзя импортировать в это поле без отдельного согласованного преобразования. Неизвестное представлено null и не заменяется нулём.

Время обновления записи базы, публикации или получения снимка не используется как время физического процесса. Для CALCULATION может отсутствовать физическое время; тогда запись сохраняется, но договор полного процессного состояния SE1 не проходит. Такой отказ не объявляет сам расчёт неправильным.

EventSpec содержит тип перехода, хеши двух полных входных паспортов и объявленное основание протокола. Поддержаны CONDITION_CHANGE, PROPERTY_CHANGE и PHASE_CHANGE. При изменении паспорта требуется новое связывание события; старый хеш не принимается. Наличие ссылки на протокол не означает проверки его содержания.

Канонические координаты и единицы

Преобразование величины задаётся положительным масштабом a и смещением b : $N(x,u) = (a \cdot x + b, a \cdot u)$. Смещение применяется к значению, но не к полуширине. Температура приводится к К, давление и объёмный модуль к Па, время к s, энергия запрещённой зоны к J. Поддержаны K/degC, Pa/kPa/MPa/GPa для давления, s/ms/min для времени, eV/J для band gap и Pa/MPa/GPa для bulk modulus. Это конечный реестр, а не универсальная библиотека единиц.

Для degC используется смещение 273.15 K; для eV используется точный множитель $1.602176634 \cdot 10^{-19}$ J. Десятичные значения передаются строками и вычисляются с точностью 80 десятичных цифр; допустимы до 24 значащих цифр и показатель десятичного представления по модулю не более 30. Отрицательные канонические значения выбранных координат, отрицательные полуширины, NaN и несовместимые единицы отклоняются. Эти правила согласованы с определениями и записью единиц в [BIPM SI Brochure](#).

Лемма инвариантности. Если две записи каждой величины после N совпадают по значению и полуширине, то численные проверки SE1 дают одинаковый результат при неизменных идентификаторах, области, методе и шкале времени. Доказательство: все численные сравнения выполняются над результатами N ; подстановка равных координат сохраняет каждое сравнение. Полные хеши исходных паспортов при иной записи единиц изменяются, поэтому

соответствующие EventSpec должны быть заново связаны. Инвариантность результата не означает тождества исходных байтов.

Предикат описанного перехода

После проверки точных входных хешей вычисляется вектор g = (полнота, один материал, одна область/метод/свойство, общие часы, порядок времени, соответствие типу, объявленный протокол). Допуск описания D равен логическому И координат g . Никакой средний балл не компенсирует обязательный пробел. $D=1$ даёт DESCRIBED_TRANSITION, иначе ABSTAIN и явные причины.

Для CONDITION_CHANGE структура и фаза сохраняются, а хотя бы одно центральное значение температуры или давления изменяется. Изменение только единиц или полуширины не считается изменением условий. Для PROPERTY_CHANGE сохраняются структура, фаза и канонические условия вместе с полуширинами, а центральное значение свойства меняется. Для PHASE_CHANGE должны измениться и обозначение фазы, и структурный идентификатор. Это правила классификации описания; они не являются законами термодинамики, кинетики или критерием статистически значимого изменения.

Порядок времени требует одной шкалы процесса и строгого неравенства $t_0 + u_0 < t_1 - u_1$. При перекрытии или касании интервалов порядок не подтверждается. Полуширины времени трактуются как заявленные границы; вероятностное покрытие и достоверность границ не предполагаются.

Лемма ацикличности. На фиксированной шкале при $u \geq 0$ отношение $A < B$, заданное верхней границей A меньше нижней границы B , иррефлексивно и транзитивно. Иррефлексивность следует из $t+u \geq t-u$. Если $A < B$ и $B < C$, то $\sup A < \inf B \leq \sup B < \inf C$, следовательно $A < C$. Поэтому конечный граф таких временных рёбер не содержит ориентированных циклов. Это утверждение о временном отношении: остальные ограничения EventSpec при композиции рёбер автоматически не наследуются.

Почему этого недостаточно для прогноза

Контрпример идентификации динамики. Пусть s принадлежит $[0,1]$, а x обозначает безразмерную положительную координату. Семейство $x_a(s) = 1+s+a \cdot s(1-s)$, $|a| < 1$, имеет одинаковые концы $x_a(0)=1$ и $x_a(1)=2$. Все траектории положительны, но при разных a различаются внутри интервала и имеют разные производные. Значит, два согласованных состояния сами по себе не определяют траекторию или закон движения. Это элементарный контрпример к такому выводу, а не заявление новой фундаментальной теоремы.

Для предсказания понадобятся явная модель эволюции, параметры, область применимости, идентифицирующий протокол и проверка на отложенных данных. SE1 не вычисляет скорости реакции, физическую достижимость, причинность, вероятности переходов или будущие состояния. physical_reachability=NOT_ESTABLISHED; prediction=NOT_RUN. Проективная λ -координата и текстовый репер не подменяют отсутствующий закон эволюции.

Синхронизация с MATDES и ARBD

Адаптер читает однократно закреплённые байты SQLite, сверяет файловый и семантический хеши, переносит снимок в память и включает запрет записи. Обработываются только поддерживаемые свойства, без объединения полиморфов или методов. Неожиданные поля контекста вызывают остановку для рассмотрения, чтобы новые сведения не были молча потеряны.

Результат для существующего корпуса: 211 наблюдений всего; 113 записей поддерживаемых свойств (79 band gap и 34 bulk modulus); 98 наблюдений иных свойств явно вне SE1. У всех 113 в этой выгрузке отсутствуют требуемые температура, давление, процессная шкала времени и необходимые полуширины. Полных процессных состояний: 0. Выведенных событий: 0. Это ограничение закреплённой выгрузки, а не заключение об отсутствии данных в первичных расчётах. Дата record_last_modified не была переинтерпретирована.

Отчёт сохраняет хеш исходного ARBD-расчёта. Связь ARBD с материалом остаётся METHOD_SCOPE_PROPOSAL, предметное соответствие не устанавливается. Журнал и досье CP2B1/CP2B2 сохранены. Новых независимых рецензий нет. Незакрытые условия расчётов и LICENSE_UNRESOLVED сохраняются.

Публично выдаются агрегаты корпуса и только синтетические сценарии. Исследовательские паспорта с численными строками корпуса в публичный ZIP и сайт не включаются. Различение сущности, действия и происхождения сопоставлено с [W3C PROV-O](#); полноценный RDF-экспорт и соответствие всей онтологии здесь не реализованы.

Проверки и интерфейс

52 теста Python включают десять новых сценариев: инвариантность единиц и полуширин, размерность, конечность чисел, подмену концов, сохранение неизвестного, порядок времени, разные часы, несовместимость материалов/методов, смену фаз, запрет приписывать научный успех и сохранение байтов реального корпуса. Прежние проверки генератора досье и сайта дополняют их.

Сайт содержит интерактивный выбор семи заранее вычисленных сценариев, сравнение исходного и конечного состояния, семь результатов проверок и скачивание входного пакета и отчёта. Три сценария проходят договор описания, четыре получают ABSTAIN. Все семь имеют класс MECHANICS_FIXTURE; результаты не являются наблюдениями реальных материалов. Произвольный пакет проверяется локальным Python-модулем, а не вычисляется сайтом заново.

План следующей контрольной точки

1. SE2: добавить договор модели переходов и явный горизонт прогноза. Разделить заданную пользователем конечную точку, рассчитанный моделью прогноз и измеренное последующее состояние. Подготовить проверяемый математический пример и отрицательный тест неидентифицируемости без переноса результата на реальные материалы.
2. Корпус: продолжить CP2B-B3, найти первичные условия конкретных расчётов и лицензионное основание. Критерий завершения - подтверждённые источником параметры, а не формальное заполнение пустых полей.
3. Рецензирование: получить и проверить реальные досье для 12 текстовых фрагментов и предметной связи. Аутентификация личности и независимость остаются отдельными незавершёнными механизмами. Не отправлять материалы третьим лицам автоматически.
4. После данных и идентифицирующего протокола - временное разбиение train/calibration/test, сравнение с baseline, аудит утечек, калибровка и независимый EXT-RUN. Каждый этап сопровождается синхронным обновлением программы, сайта, плана и отдельным пакетом для отката.

science=ABSTAIN; DHC_chem=OPEN-NOT-CONFIRMED; EXT-RUN=NOT_RUN; truth_layer_promotion=0; T6-RA5=NOT_ISSUED.