

Происхождение ответов и границы нормализации

Курпишев Иван Борисович / Ivan Borisovich Kurpishev

01 / Что установлено

Получены тела всех девяти ответов JARVIS OPTIMADE, контрольные суммы которых сохранены в исходном снимке. Их SHA-256 совпали с сохранёнными значениями. Все 49 записей совпали со снимком при сравнении точных десятичных чисел и типов. Несогласованные поля состава уже присутствуют в этих ответах; проверяемый экспорт не является источником этих расхождений.

Проверка	Результат
Ответы, совпавшие по SHA-256	9 из 9
Записи, совпавшие со снимком	49 из 49
Каналы пилота, сопоставленные с XML	3 из 3
Исходные файлы расчёта, полученные и проверенные	0
Тесты нового модуля	28 пройдены
Исторические блокиеры / снято	37 / 0

Разница с предыдущей точкой

B3.1 выявил несогласованный состав. B3.2 закрепил экспортёр и проверил его механику, но не располагал телами исходных ответов. B3.3 восполняет этот пробел по сохранённым хешам и добавляет опубликованный XML именно JVASP-114724. Запись JVASP-13829 не подставлялась вместо пилота.

Что означает совпадение хеша

При обычном предположении о стойкости SHA-256 найдено содержимое, связанное с ранее сохранённым хешем. Скачивание выполнено 20 сентября; историческая дата, происхождение самого хеш-обязательства и исполнявшаяся тогда ревизия не получили независимого удостоверения. Внутренняя причина ошибки на стороне поставщика не локализована.

Исходный снимок и полный архив B3.2 сохранены без изменения байтов. Новая производная отделена от них и имеет статус QUARANTINED_NOT_ADMITTED. Полная сертификация API на соответствие OPTIMADE не проводилась. [S1, S2]

02 / Нормализация: определение и доказательство

Область определения ограничена записями с полностью занятыми одноэлементными узлами, известными химическими символами, согласованными `species_at_sites`, `nsites` и формулой. Смешанная занятость, неизвестный вид узла или конфликт формулы приводят к отказу. Корректность исходной геометрии физически не доказывается.

```
E = sort(unique(sites)); c(e) = number of sites labelled e; n = sum c(e).
```

```
N(x): elements := E; nelements := |E|; elements_ratios := [c(e)/n for e in E].
```

Остальные поля копируются. В JSON доли представлены числами с плавающей точкой; точные рациональные значения $c(e)/n$ сохранены в журнале. Следовательно, речь идёт об исправлении метаданных относительно принятого описания узлов, а не о получении нового химического знания.

Утверждение 1. Идемпотентность

$N(N(x)) = N(x)$. Преобразование не меняет список узлов. Поэтому при втором применении `E`, `c` и `n` совпадают с первым применением. Порядок элементов и правило перевода рациональных чисел в JSON детерминированы; три присвоения дают тот же результат.

Утверждение 2. Сохранение и обратимость с журналом

Для $A = \{\text{elements}, \text{nelements}, \text{elements_ratios}\}$ проекция вне A удовлетворяет $P(\text{not } A)(N(x)) = P(\text{not } A)(x)$. Журнал $J(x)$ хранит старые и новые значения A и контрольные суммы записей. После проверки этих сумм восстановление $R(N(x), J(x)) = x$ точно для разобранный JSON-записи. Побайтовый оригинал сохраняется отдельно: восстановление форматирования из JSON не заявляется.

N само по себе необратимо: два описания с одинаковыми узлами и разными ошибочными метаданными могут перейти в один результат. Журнал устраняет эту потерю только для закреплённой пары входа и выхода. Это условное программное утверждение, не доказательство истинности модели KLT.

Изменено поле	Число записей
elements	49
nelements	49
elements_ratios	43
Всего замен полей	141

Во всех 49 исходных записях обнаружены три вида несогласованности. У шести записей массив долей уже совпадал с итоговым массивом: после исправления первых двух полей его повторная замена не требовалась. Производная прошла ограниченную проверку состава, повторное применение и восстановление; обучение остаётся закрытым.

03 / Досье пилота JVASP-114724

Получен XML поставщика для той же записи и фазовой метки. Три значения сопоставлены раздельно, по точным путям. Совпадение опубликованных значений связывает каналы с записью поставщика; оно не подтверждает полный расчётный контекст. Значения свойств и координаты в публичное досье не включены. [S3]

#11 · DFT-OptB88vdW

/basic_info/main_relax_info/scf_indir_gap

OPTIMADE: _jarvis_optb88vdw_bandgap

#12 · DFT-TBmBJ

/basic_info/main_optics_mbj/main_optics_mbj_info/opto_indir_gap

OPTIMADE: _jarvis_mbj_bandgap

#13 · DFT-OptB88vdW-Voigt-bulk

/basic_info/main_elastic/main_elastic_info/voigt_bulk_modulus

OPTIMADE: _jarvis_bulk_modulus_kv

Представление CONTCAR

Вложенное текстовое поле CONTCAR содержит ячейку и пять узлов. При единичном масштабе и декартовых координатах ячейка и мультимножество пар «элемент — позиция» совпали в точной десятичной арифметике. Допущены перестановки одноимённых узлов и равенство $-0 = 0$. Поиск симметрий и произвольных преобразований ячейки не выполнялся. [S5]

Извлечённый текст помечен как представление из XML. Он не удостоверен как исходный файл расчёта и не является независимо полученной структурой KLT. Метки элементов не заменяют проверку использованных псевдопотенциалов.

Данные о сходимости

XML содержит 11 точек ряда по k-параметру и 6 точек по энергетическому обрезанию, а также заявленные поставщиком параметры сходимости. Проверена форма рядов. Критерий сходимости, связь рядов с каждым из трёх каналов и полные протоколы не подтверждены. Расчёты DFT не запускались.

04 / Воспроизводимость и следующий этап

Новый сборщик сохраняет HTTP-тела до разбора, включая полные ответы об ошибке. Квитанция фиксирует URL, статус, размер, SHA-256, локальное время и хеш сборщика. Это полезная нагрузка HTTP, полученная с Accept-Encoding: identity, а не запись TLS-трафика или независимая отметка времени.

28 тестов нового модуля: 20 синтетических и 8 на закреплённом исследовательском входе. Проверены подмена байтов, дубли JSON, точность чисел и типов, неполная выдача, запрет посторонних изменений, восстановление, идемпотентность, отдельные XML-каналы и запрет повышения статуса. В публичном комплекте 8 проверок закрытых входов явно пропускаются. Старые 120 тестов ядра в этой точке заново не запускались; ядро сохранено в родительском архиве.

Условия использования

Страница Terms of Use получена, но применимый идентификатор лицензии для закреплённого снимка не установлен. Это не утверждение об отсутствии прав у поставщика. Публичный комплект содержит код, синтетические примеры и метаданные аудита; тела ответов, координаты, значения свойств и производная доступны только в исследовательском комплекте. [S4]

CP2B-B3.4 — что необходимо получить

1. По каждому каналу — исходный протокол расчёта, INCAR, KPOINTS, идентификаторы или контрольные суммы псевдопотенциалов, OUTCAR/vasprun либо эквивалентное проверяемое свидетельство. 2. Применимые условия использования конкретных данных. 3. Независимое построение структуры KLT и проверяемое соответствие структуре вещества. 4. Только после этого — повторная оценка допуска; обучение и реальные прогнозы пока не запускаются.

Сохранены 37 исторических блокеров, снято 0. Новых соответствий KLT: 0; исходных мутаций: 0. science=ABSTAIN; DHC_chem=OPEN-NOT-CONFIRMED; EXT-RUN=NOT_RUN; truth_layer_promotion=0; T6-RA5=NOT_ISSUED; axiom_promotion=DISABLED. physical_reachability=NOT_ESTABLISHED; parameter_identification=NOT_PERFORMED.

S1 · [JARVIS OPTIMADE](#) · [structures](#)

S2 · [OPTIMADE 1.1.0](#) · [specification](#)

S3 · [NIST JARVIS](#) · [JVASP-114724 XML](#)

S4 · [JARVIS](#) · [Terms of Use](#)

S5 · [VASP Wiki](#) · [POSCAR](#) / [CONTCAR](#)