

Расчётные каналы и достаточность свидетельств

Курпишев Иван Борисович / Ivan Borisovich Kurpishev

01 / Результат и границы

Рабочее развитие проекта «ЛОГИКА КУРПИШЕВА 2»: слой достаточных оснований для ARBD → химическое наблюдение → KLT-MATDES. Этот выпуск продолжает B3.3 от 20 сентября и текущую редакцию сайта 23, включая последующую синхронизацию проектов. Том VI, замороженные тексты, прежние исходники и научные статусы не изменяются.

Проверка	Результат
Паспорт расчётного канала	3 паспорта: #11, #12, #13
Записи официального индекса	144 895; совпадений пилота 0
Повторно полученный XML	Совпадает с закреплённым SHA-256
Исходные расчётные файлы пилота	0 получено и удостоверено
Проверки нового модуля	21 тест пройден
Исторические блокеры	37 сохранено; снято 0

Проверены все 9 групп опубликованного индекса raw_files, указанного в JARVIS-Tools. Это индекс 2020 года, а не полная инвентаризация современного хранилища. Отсутствие JVASP-114724 ограничено этим конкретным файлом. Соседний материал не использован вместо пилота. [S2-S4]

Повторная загрузка XML 24 сентября дала те же байты, что B3.3. Старый адрес HTML вернул HTTP 404. Поле download_files в закреплённом XML пусто. Все шесть HTTP-попыток записаны с URL, статусом и SHA-256; пять вернули 200. Локальное время не является независимой временной аттестацией. [S1]

Условия использования имеют область действия

Метаданные Figshare указывают CC BY 4.0 для файла индекса 25295732; идентификатор и computed_md5 совпали с полученным файлом. Это подтверждает связь лицензионной записи с индексом. Перенос этой лицензии на снимок OPTIMADE, XML или исходные расчёты пилота не обоснован. Страница Terms of Use не дала применимого разрешения для нашего снимка. [S3-S5]

Публичный комплект содержит код, синтетические проверки, паспорта без исходных файлов и метаданные аудита. Численные ряды, свойства, координаты и тела ответов остаются в исследовательском комплекте.

02 / Расчётный канал как объект проверки

$c = (\text{record_id}, \text{observation_id}, \text{method_class}, \text{xml_path}, \text{source_sha256})$.

Три канала различаются методом и способом получения свойства: #11 DFT-OptB88vdW; #12 DFT-TBmBJ; #13 DFT-OptB88vdW-Voigt-bulk. Каждый связан со своим XML-путём В3.3. Равенство опубликованного значения не заменяет воспроизводимость расчёта.

Для каждого с требуется	Текущий статус
Входы и версия программы: INCAR либо эквивалент	Не получены / не привязаны
к-сетка: KPOINTS и способ её построения	Не получены / не привязаны
Идентификаторы или хеши псевдопотенциалов	Не получены / не привязаны
Выходы: OUTCAR / vasprun либо эквивалент	Не получены / не привязаны
Извлечение целевого свойства из выхода	Не получено / не привязано
Критерий сходимости целевого канала	Не подтверждён

Модуль принимает JSON-паспорт и локальную папку свидетельств. Он проверяет запись, канал, метод, контрольные суммы, обязательные роли и допустимость пути. При полном комплекте возвращает BYTES_COMPLETE_REVIEW_REQUIRED. Это техническая готовность к содержательной проверке; научный допуск остаётся BLOCKED.

URL источника и связь файла с каналом в поданном паспорте являются заявлениями подающего. Совпадение хеша удостоверяет только полученные байты относительно указанного хеша. Истинность заявления, смысл файла, независимость рецензента и достаточность расчёта проверяются отдельно.

$\text{admit}(c) \text{ requires } B(c) \wedge C(c) \wedge L(c) \wedge K(c) \wedge V(c)$.

В — привязка байтов; С — проверенный расчётный контекст; L — применимые условия использования; K — независимое соответствие структуры KLT; V — отдельное решение о допуске. Это необходимые условия, а не реализованная команда допуска. Ни один паспорт автоматически не открывает обучение. Новая схема описывает происхождение свидетельств; она не конструирует отсутствующую химическую KLT-структуру.

03 / Конечная устойчивость и предел вывода

Для строго возрастающих настроек $x_1 < \dots < x_N$ и энергий E_i определим диагностический радиус и диаметр наблюдаемого хвоста. Все операции модуля используют десятичные числа; бинарное округление не меняет сравнение с порогом.

$$r_N(i) = \max_{\{i \leq j \leq N\}} |E_j - E_i|; d_N(i) = \max_{\{j \geq i\}} E_j - \min_{\{j \geq i\}} E_j.$$

$$\text{PASS}(i) \Leftrightarrow N - i + 1 \geq m \text{ and } r_N(i) \leq \varepsilon; m = 3, \varepsilon = 0.001.$$

ε задан в единицах ряда; eV используется как общая конвенция энергетических данных VASP, но единицы конкретного запуска не удостоверены первичным журналом. Это редакционный диагностический критерий B3.4. Он не объявлен историческим критерием поставщика.

Лемма 1. Смена единиц и сдвиг нуля

При $E'_j = a E_j + b$, $a \neq 0$, и $\varepsilon' = |a|\varepsilon$ имеем $r'_N(i) = |a|r_N(i)$, $d'_N(i) = |a|d_N(i)$. Следовательно, PASS сохраняется. Доказательство: разности уничтожают b , модуль выносит $|a|$; число точек неизменно. Утверждение относится к точной арифметике; округление входов может изменить граничный случай.

Лемма 2. Диаметр и радиус

$r_N(i) \leq d_N(i) \leq 2r_N(i)$, так как E_i принадлежит хвосту, а любая разность двух энергий ограничена суммой их расстояний до E_i . При фиксированном N диаметр не возрастает с увеличением i : множество уменьшается. Для радиуса такая монотонность не утверждается, поскольку его центр меняется.

Ряд при опубликованной настройке	Диагностика B3.4
k-параметр: 11 точек	PASS_FINITE_TAIL
ENCUT: 6 точек	FAIL_FINITE_TAIL

Последняя точка не считается доказательством: для неё $r_N(N)=0$ тождественно, но условие $m=3$ не выполнено. Диагностика выявляет недостаточность подтверждения выбранным критерием; она не доказывает ошибку поставщика. Общий ряд пока не привязан ни к одному из трёх каналов.

04 / Неидентифицируемость, воспроизводимость, B3.5

Контрпример: наблюдаемый хвост не определяет предел

Для любого конечного набора $E_1, \dots, E_N$ и любого числа L можно продолжить последовательность значениями $L, L, \dots$; её предел равен L . Другое продолжение можно сделать расходящимся. Поэтому никакая проверка только конечного префикса без дополнительного класса моделей не даёт универсальной оценки предела.

Аналогично одинаковая последовательность полной энергии совместима с двумя формальными выходами свойства $q_j=0$ и $q_j=M$ при произвольном M , если связь $E \rightarrow q$ не задана. Это математический контрпример выводу из недостаточных предпосылок, а не модель двух реальных веществ. Для оценки band gap или упругости нужны собственные ряды либо доказанная оценка переноса ошибки.

Значение для реперного метода

В проекте Курпишева достаточное основание D должно относиться к тому же наблюдению, методу и области применимости. Источник и число позволяют задать проверяемый репер-кандидат; они не заменяют смысловую и физическую связь. Философски устойчивость записи — свойство свидетельства, а истина утверждения о веществе требует отдельного основания.

Проверка и воспроизведение

21 тест: 18 синтетических и 3 интеграционных на закреплённых входах. Проверены смена единиц, пустая гарантия последней точки, произвольное продолжение, подмена канала, изменённые байты, выход пути за папку, дубли JSON и повышение статуса. В PUBLIC три интеграционных теста явно пропускаются. Повторный запуск audit даёт те же JSON; вывод записывается только в новую папку.

Следующий этап B3.5: (1) получить протоколы именно #11/#12/#13, (2) объяснить расхождение ENCUT и задать проверяемый критерий по каждому свойству, (3) установить права на закреплённые данные, (4) независимо построить KLT-структуру и её соответствие, (5) пересмотреть допуск отдельным решением. Обращение к поставщику подготовлено как перечень требований; сообщения никому не отправлялись.

science=ABSTAIN; DHC_chem=OPEN-NOT-CONFIRMED; EXT-RUN=NOT_RUN; truth_layer_promotion=0; T6-RA5=NOT_ISSUED; axiom_promotion=DISABLED. Обучение CLOSED; реальные прогнозы NOT_RUN; physical_reachability=NOT_ESTABLISHED; parameter_identification=NOT_PERFORMED.

S1 · NIST JARVIS: JVASP-114724 XML

S2 · JARVIS-Tools: raw_files catalogue declaration

S3 · Figshare: raw-file index metadata

S4 · Figshare: article metadata API

S5 · JARVIS: Terms of Use