

计算通道与证据充分性

Курпишев Иван Борисович / Ivan Borisovich Kurpishev

01 / 结果与范围

本工作继续伊万·鲍里索维奇·库尔皮舍夫的“库尔皮舍夫逻辑 2”项目，为 ARBD → 化学观测 → KLT-MATDES 建立充分依据层。继承 9 月 20 日 B3.3 和网站第 23 版，保留后续项目同步内容。第六卷、冻结文本、已有源字节和科学状态保持不变。

核查	结果
计算通道档案	3 个: #11、#12、#13
官方索引条目	144895; 试点匹配 0
重新取得的 XML	与固定 SHA-256 一致
已认证的原始试点计算文件	0 份
新模块测试	21 项通过
历史阻塞	保留 37 项; 解除 0 项

已检查 JARVIS-Tools 所指 raw_files 索引的全部 9 组。这是 2020 年索引，并非当前存储的完整清单。JVASP-114724 未出现的结论仅限该文件，没有用其他材料代替试点。[S2-S4]

9 月 24 日取得的 XML 与 B3.3 字节完全一致; 旧 HTML 地址返回 HTTP 404, 固定 XML 的 download_files 为空。六次 HTTP 尝试记录了 URL、状态及 SHA-256, 其中五次返回 200。本地时间不构成独立时间认证。[S1]

使用条件具有明确范围

Figshare 元数据为索引文件 25295732 标注 CC BY 4.0; 文件标识及 computed_md5 与取得文件一致。这把许可记录绑定到索引, 但不足以把许可扩展到 OPTIMADE 快照、XML 或试点计算。Terms of Use 页面未确立适用于本快照的许可。[S3-S5]

PUBLIC 包含代码、合成测试、空证据模板及审计元数据。数值序列、性质值、坐标和响应体保留在 RESEARCH 中。

02 / 以计算通道为核查对象

```
c = (record_id, observation_id, method_class, xml_path, source_sha256).
```

三个通道的方法及性质提取方式不同：#11 DFT-OptB88vdW；#12 DFT-TBmBJ；#13 DFT-OptB88vdW-Voigt-bulk。各自绑定 B3.3 的独立 XML 路径。已发布字段一致并不等于计算可复现。

每个通道需要	当前状态
输入参数和软件版本：INCAR 或等价物	未取得或未绑定
KPOINTS 网格及生成方式	未取得或未绑定
赝势标识或摘要	未取得或未绑定
OUTCAR / vasprun 或等价输出	未取得或未绑定
目标性质的提取过程	未取得或未绑定
该通道的收敛判据	未确认

模块接收 JSON 档案和本地证据目录，检查记录、通道、方法、摘要、必要角色及路径范围。完整文件包返回 BYTES_COMPLETE_REVIEW_REQUIRED，仅表示可进入内容审查；科学准入继续 BLOCKED。

来源 URL 及文件与通道的关系仍是提交者声明。摘要一致只核对收到的字节与给定摘要。归属、文件含义、审查者独立性及计算依据是否充分均须另行检查。

```
admit(c) requires B(c) ∧ C(c) ∧ L(c) ∧ K(c) ∧ V(c).
```

B 为字节绑定；C 为已验证计算上下文；L 为适用使用条件；K 为独立 KLT 结构映射；V 为单独准入决定。这些是必要条件，不是已实现的准入命令。档案不会自动开启训练，证据来源层也不构建缺失的化学 KLT 结构。

03 / 有限稳定性与推断边界

设参数严格递增 $x_1 < \dots < x_N$ ，能量为 E_i 。定义已观测尾部的半径和直径。模块使用十进制运算，避免二进制舍入改变阈值比较。

$$r_N(i) = \max_{\{i \leq j \leq N\}} |E_j - E_i|; d_N(i) = \max_{\{j \geq i\}} E_j - \min_{\{j \geq i\}} E_j.$$
$$\text{PASS}(i) \Leftrightarrow N - i + 1 \geq m \text{ and } r_N(i) \leq \epsilon; m = 3, \epsilon = 0.001.$$

阈值使用序列单位。eV 是 VASP 能量的一般约定，但具体运行的单位尚无已认证原始日志。本判据是 B3.4 编辑诊断，不声称是提供方当时采用的判据。

引理 1：单位变换和零点平移

若 $E'_j = aE_j + b$, $a \neq 0$, $\epsilon' = |a|\epsilon$, 则 $r'_N(i) = |a|r_N(i)$, $d'_N(i) = |a|d_N(i)$, PASS 不变。证明：作差消去 b ，绝对值提出 $|a|$ ，点数不变。结论属于精确运算；输入舍入可能影响边界情形。

引理 2：直径与半径

$r_N(i) \leq d_N(i) \leq 2r_N(i)$ 。因为中心 E_i 属于尾部，任意两值的距离不超过各自到中心距离之和。固定 N 时，随 i 增加集合缩小，直径不增；半径的中心会移动，因此不主张相同的单调性。

已发布参数处的序列	B3.4 诊断
k 参数: 11 个点	PASS_FINITE_TAIL
ENCUT: 6 个点	FAIL_FINITE_TAIL

最后一个点不能证明收敛： $r_N(N)=0$ 恒成立，但不满足 $m=3$ 。本诊断表明当前判据下支持不足，并未证明提供方出错。两个序列均未绑定到三个性质通道。

04 / 不可识别性、复现与 B3.5

反例：有限尾部不能确定极限

任意有限序列 $E_1, \dots, E_N$ 都可接上 $L, L, \dots$ ，得到任意极限 L ；也可接上发散序列。因此，没有附加模型类别，仅凭有限前缀无法给出通用极限误差界。

同样，若未指定 $E \rightarrow q$ 关系，相同总能量序列可对应形式输出 $q_j=0$ 或 $q_j=M$ ，其中 M 任意。这是针对前提不足的数学反例，不是两个真实材料的模型。带隙及弹性性质的误差界需要各自序列或已证明的误差传递估计。

对参照标架方法的意义

在库尔皮舍夫框架中，充分理由 D 必须针对相同观测、方法和适用域。来源与数值构成可核查的候选参照点，但语义联系及物理联系仍须独立建立。从认识论看，记录稳定性属于证据性质；关于物质的命题为真还需要进一步依据。

验证与复现

21 项测试包括 18 项合成测试及 3 项固定输入集成测试，覆盖单位变换、最后一点的空保证、任意延拓、通道替换、字节改动、目录越界、重复 JSON 键及状态提升。PUBLIC 明确跳过 3 项私有输入测试。重复 audit 产生相同 JSON，只允许写入新目录。

B3.5：取得 #11/#12/#13 协议；解释 ENCUT 诊断并确定各性质判据；核实固定数据的使用条件；独立构建 KLT 结构及映射；以单独决定重新评估准入。已准备来源请求清单，未向任何人发送消息。

science=ABSTAIN; DHC_chem=OPEN-NOT-CONFIRMED; EXT-RUN=NOT_RUN; truth_layer_promotion=0; T6-RA5=NOT_ISSUED; axiom_promotion=DISABLED。训练 CLOSED; 真实预测 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