

Критерий сходимости и происхождение протокола

Курпишев Иван Борисович / Ivan Borisovich Kurpishev

01 / Результат и границы

Продолжение В3.4. Разделены три вопроса: проверка опубликованного конечного ряда, поведение конкретной программы и подтверждение протокола исторического расчёта. Эти вопросы требуют разных оснований. Инженерный аудит завершён; научный допуск остаётся закрытым.

Получен и закреплён исходный код JARVIS-Tools по коммиту от 7 мая 2022 года [S1]. В функции `converg_encut` воспроизведены ранний выход после неудачной дополнительной проверки, повтор одного параметра и совпадение имени задания при разных параметрах. Все три прогона используют только синтетические энергии и имитации расчётных операций.

Установлено поведение именно закреплённой функции. Не установлено, что она сформировала JVASP-114724: нет версии исторического запуска, его входных файлов и журналов. Это не доказательство ошибки физического расчёта и не объяснение происхождения опубликованного ENCUT.

Проверяемое утверждение	Статус
Поведение закреплённого кода на имитации	REPRODUCED_SYNTHETIC
Связь кода с историческим пилотом	UNVERIFIED
Полные протоколы каналов #11, #12, #13	NOT_OBTAINED
Замечание по ENCUT из В3.4	OPEN_PROTOCOL_BINDING_REQUIRED

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

02 / Математический критерий

Пусть $y_1, \dots, y_N$ - наблюдаемый конечный хвост, $r = \max(j \geq 1) |y_j - y_{j-1}|$, n - положительное целое число единиц нормировки, $\epsilon > 0$ - допуск на одну такую единицу. В определении участвуют только наблюдаемые точки.

$$r/n \leq \epsilon \Leftrightarrow r \leq n\epsilon; n_{\min} = \max(1, \text{ceil}(r/\epsilon)).$$

Доказательство. Умножение на $n > 0$ сохраняет неравенство. Наименьшее положительное целое n , не меньшее r/ϵ , равно правой части. При $y \rightarrow ay + b$ радиус умножается на $|a|$. Для $a \neq 0$ эквивалентный критерий требует одновременно $\epsilon \rightarrow |a|\epsilon$. Замена делителя при прежнем численном допуске меняет критерий, а не подтверждает прежний.

В закреплённом XML есть разные размеры представления структуры. Условная подстановка этих размеров в нормировку даёт разные решения конечной проверки. Ни один из них не привязан к энергетическому ряду первичным протоколом. Нельзя выбирать делитель по желательному PASS. Точные сценарии находятся в исследовательском отчёте; численные ряды не включены в публичный пакет.

Логическое условие двухэтапного допуска

$$C = A \wedge B; \text{continue} = \neg C = \neg A \vee \neg B.$$

Здесь A - основная проверка, B - дополнительная. Условие продолжения $\neg A \wedge \neg B$ прекращает цикл уже при $A = \text{true}$, $B = \text{false}$. Это непосредственно следует из таблицы истинности и закона де Моргана; новым математическим законом результат не объявляется. Наша реализация проверяет все четыре комбинации.

Ни нормировка, ни исправная логика цикла не устанавливают бесконечную сходимость. Граница ошибки band gap или упругого свойства по одному ряду энергии по-прежнему не выведена.

03 / Воспроизводимые трассы программы

Из неизменённого файла [S1] извлекается только `converg_encut`. Перед выполнением проверяется SHA-256. `VaspJob`, `Incar`, `Kpoints` и запись `EXTRA_ENCUT` заменены локальными имитациями в памяти. Вызовы ограничены 32; внешние расчёты и реальные записи файлов отсутствуют. Код всего модуля не импортируется.

Сценарий	Наблюдение
Пологая синтетическая энергия; без кэша	Возврат 550 после <code>EXTRA_ENCUT</code>
Та же энергия; кэш по имени задания	500 и 550 используют одно имя; второй вызов читает кэш
Крутая синтетическая энергия; без кэша	Запросы 500, 550, 550: шаг повторён

В коде внешний цикл проверяет `not convg_encut2` and `not convg_encut1`; флаг первой проверки уже установлен перед дополнительной. Внутренний цикл вычисляет `encut1=encut+50`, но не продвигает `encut`; имя задания сохраняет старый параметр. Это точные локальные привязки к строкам 1003-1209 [S1], а не заключение обо всех версиях JARVIS.

`runjob` возвращает `final_energy` без действующего деления на число атомов. Поведение имитированного кэша согласовано только с выбранной ветвью: существующая запись по имени и успешная проверка OUTCAR. Реальный OUTCAR пилота не получен. Классы MBJ и упругости имеют отдельные настройки; общий параметр сходимости не переносится на них автоматически [S1, S2].

Для собственной программы добавлен ключ полного заявленного протокола: хеши структуры, INCAR, KPOINTS, набора псевдопотенциалов и процедуры, версия ПО, метод, величина энергии и нормировка. Ключ - техническая идентичность заявленных входов при обычном предположении стойкости SHA-256; он не удостоверяет их происхождение или полноту физической модели.

04 / Источник, проверка и продолжение

Действующий химический корпус KLT-CHEM-CONSOLIDATED-20260924-v1.0 получен целиком: 55 068 559 байт, 2197 маркеров разделов. SHA-256 совпал с паспортом сборки: 782371776cf8d3dc9ec87cc4c8652614772ab67d4521d8388c5aa18473f23a0c. Проведён целевой поиск упоминаний пилота и расчётных протоколов. Это не полная научная экспертиза корпуса.

Операционная проблема наличия химического TXT закрыта новой авторизованной компиляцией. Тождество утраченному старому A7 не заявляется. Хеш доступного 1438-страничного PDF совпал с указанным в паспорте. Замороженные тексты не изменены; первичные файлы расчётов пилота этим поиском не получены.

Проверки: 25 тестов RESEARCH; PUBLIC выполняет 21 тест и явно пропускает 4 интеграционных, требующих исследовательских байтов. Три трассы синтетические. Повторная сборка отчёта детерминирована. Форматы RU/EN/ZH: PDF, HTML, Markdown, XeLaTeX; PDF создаётся ReportLab, XeLaTeX не компилировался.

B3.6: получить версию реально использованного кода и входы/выходы трёх каналов; проверить нормировку, соответствие имени задания параметрам и дополнительные точки; установить условия использования конкретных данных и независимое соответствие KLT-структуры. Подготовлен перечень запроса; внешние сообщения не отправлялись. Сохраняются 37 исторических блокеров, снято 0; обучение CLOSED, прогнозы NOT_RUN.

S1 · [JARVIS-Tools: pinned VASP workflow \(2022-05-07\)](#)

S2 · [JARVIS-Tools: workflow documentation](#)

S3 · [NIST: retained pilot XML, JVASP-114724](#)

S4 · [JARVIS-Tools: software terms of use](#)