

收敛判据与计算协议的来源

Курпишев Иван Борисович / Ivan Borisovich Kurpishev

01 / 结果与适用范围

本阶段承接 B3.4。有限已发布序列的检查、特定程序的行为以及历史计算协议的来源是三个不同问题，不能以同一种证据替代。工程审计已完成，科学准入仍然关闭。

已固定 JARVIS-Tools 于2022年5月7日提交的源码 [S1]。对 `converg_encut` 的三次受控重放复现了：附加检查失败后仍返回、重复请求同一参数、不同参数共用任务名称。全部能量和计算操作均为合成模拟。

结果只证明固定函数的行为。尚未证明该版本曾用于 JVASP-114724，因为历史软件版本、输入文件和运行日志仍缺失。因此，这既不是物理计算错误的证明，也未解释已发布 `ENCUT` 值的来源。

待核查命题	状态
固定源码在模拟环境中的行为	REPRODUCED_SYNTHETIC
与历史试点的绑定	UNVERIFIED
#11、#12、#13 通道完整协议	NOT_OBTAINED
B3.4 ENCUT 问题	OPEN_PROTOCOL_BINDING_REQUIRE D

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

02 / 数学判据

设 $y_i, \dots, y_N$ 为已观测的有限尾部, $r = \max(j \geq i) |y_j - y_i|$, n 为正整数归一化计数, $\varepsilon > 0$ 为每个归一化单位的容差。定义只使用已经观测的点。

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

证明：乘以 $n > 0$ 保持不等号方向。不小于 r/ε 的最小正整数就是上述取整式。在 $y \propto ay + b$ 下，半径变为 $|a|r$ ；当 $a \neq 0$ 时，等价判据还必须同时采用 $\varepsilon \propto |a|\varepsilon$ 。仅改变除数而保留容差数值，会改变判据，不能证明原判据成立。

固定 XML 包含不同的结构表示尺寸。将这些计数作为条件代入，会得到不同的有限尾部判定。目前没有原始协议把其中任何一个计数与能量序列绑定。不能为得到 PASS 而选择除数。精确情景保存在研究报告中；公开包不含原始数值序列。

两阶段准入逻辑

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

A 表示主检查，B 表示附加检查。若只在 $\neg A \wedge \neg B$ 时继续，则 $A=\text{true}$ 、 $B=\text{false}$ 已足以终止循环。这是标准真值表与德摩根律的应用，不宣称新的数学定律。程序检查全部四种布尔组合。

归一化和正确的循环逻辑都不能证明无限收敛，也不能从一个能量序列推出独立带隙或弹性性质的误差界。

03 / 可复现的程序轨迹

在核验 SHA-256 后，仅从未修改的 [S1] 提取 `converg_encut`。VaspJob、Incar、Kpoints 以及 EXTRA_ENCUT 写入均由内存模拟替代。调用上限为32次，不执行物理计算或真实文件写入，也不导入整个模块。

模拟情景	观测结果
平缓合成能量；无缓存	写入模拟 EXTRA_ENCUT 后返回550
相同能量；按任务名缓存	500与550共用名称；第二次读取缓存
陡峭合成能量；无缓存	请求500、550、550：参数重复

外层循环条件为 `not convg_encut2 and not convg_encut1`，但附加检查之前第一个标志已设为真。内层计算 `encut1=encut+50`，却不推进 `encut`；任务名仍保留旧参数。结论仅针对 [S1] 第1003-1209行，不推广到 JARVIS 的所有版本。

runjob 返回 `final_energy`，没有实际执行按原子数除法。缓存模拟只表示存在同名记录且 OUTCAR 检查通过的分支；试点的真实 OUTCAR 尚未取得。MBJ 与弹性计算有各自的设置，不能由一个共用收敛参数自动确认 [S1, S2]。

本项目新增申报协议键，包含结构、INCAR、KPOINTS、赝势集合和工作流的哈希，以及软件版本、方法、能量量纲和归一化。在通常的 SHA-256 抗碰撞假设下，它标识申报输入；它不认证来源，也不证明物理模型完备。

04 / 来源连续性、验证与后续

已完整取得现行化学语料 KLT-CHEM-CONSOLIDATED-20260924-v1.0: 55,068,559字节, 2197个章节标记。SHA-256 与来源档案一致: 782371776cf8d3dc9ec87cc4c8652614772ab67d4521d8388c5aa18473f23a0c。本阶段核查来源元数据并定向检索试点及协议, 不等于完整科学审查。

经作者授权的汇编解决了 TXT 可用性; 不声称恢复旧 A7 的原始字节。现有1438页化学 PDF 的哈希也与档案一致。冻结文本没有改变; 本次检索未取得试点原始计算文件。

RESEARCH 共25项测试。PUBLIC 通过21项, 明确跳过4项需要研究源字节的集成测试。三条轨迹均为合成; 重复生成报告得到一致字节。提供 RU/EN/ZH 的 PDF、HTML、Markdown 与 XeLaTeX 源码。PDF 由 ReportLab 生成, 未编译 XeLaTeX。

B3.6: 取得三个通道实际使用的代码版本及原始输入输出; 核验归一化、任务标识和附加点; 确定具体数据的使用条款及独立 KLT 映射。已准备请求清单, 没有向外部发送消息。37项历史阻塞全部保留, 解除0项; 训练 CLOSED, 真实预测 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](#)