

Протокол расчёта и определимость решения

Ivan B. Kurpishev / Иван Борисович Курпишев

01 / Полученный результат и область вывода

Продолжение B3.5. Создан локальный приёмщик расчётного пакета: проверяются фактические байты, соответствие структуры и числа атомов, ENCUT входа и выхода, определение энергии и связи в журнале запусков. Инженерный результат готов; исторические протоколы пилота по-прежнему не получены.

Свежая карточка JVASP-114724 [S4] имеет тот же SHA-256, что и закреплённый источник B3.4: bc8d103827a6926e74b1fa20279096fecf37f01c9e96731612a6496d04cb40e0. Поле download_files содержит пустую строку в кавычках. Это не доказательство отсутствия файлов во всех хранилищах поставщика.

Наблюдение и канал	Связь с исходным запуском
#11 / DFT-OptB88vdW	UNVERIFIED
#12 / DFT-TBmBJ	UNVERIFIED
#13 / DFT-OptB88vdW-Voigt-bulk	UNVERIFIED

Поиск по именам OUTCAR, vasprun и 114724 в доступных материалах не дал первичных файлов. Поиск упоминаний пилота вернул ранее подготовленные досье. Проверен также список четырёх файлов приложенного владельческого ZIP. Этот ограниченный поиск не охватывает все возможные архивы и не заменяет запрос первичных записей.

Разделены три уровня: целостность байтов; внутренняя согласованность заявленных связей; независимое подтверждение происхождения. Модель происхождения опирается на различие сущности, деятельности и ответственного агента в PROV-DM [S1]; полная совместимость с PROV не заявляется.

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

02 / Два точных математических утверждения

Определимость на слоях наблюдения

Пусть P - множество протоколов, $ri:P \rightarrow Y$ - отображение доступных сведений, $C:P \rightarrow \{0,1\}$ - проверяемое решение. Существует $c:ri(P) \rightarrow \{0,1\}$, для которого $C=c \circ ri$, тогда и только тогда, когда C постоянно на каждом слое ri .

$$ri(p) = ri(q) \Rightarrow C(p) = C(q).$$

Доказательство. Если $C=c \circ ri$, равные образы дают равные решения. Обратно, определим $c(y)=C(p)$ для любого p с $ri(p)=y$. Постоянство на слое делает определение независимым от представителя. Это стандартный критерий факторизации функции через отображение, применённый к приёме протокола; новая универсальная теорема не заявляется.

Контрпример нормировки: один и тот же наблюдаемый ряд с радиусом $r=0.002$ и допуском $\varepsilon=0.001$ даёт FAIL при $n=1$ и PASS при $n=2$. Если ri не различает эти нормировки, решение из одних наблюдений не определяется. Здесь все числа учебные; пример не утверждает физическую допустимость обоих протоколов пилота.

Устойчивое решение при неполной нормировке

Пусть N - непустое конечное множество положительных целых делителей, $r \geq 0$, $\varepsilon > 0$. Определим $C(n)=[r \leq n\varepsilon]$. Тогда ALL_PASS равносильно $r \leq \varepsilon \min(N)$; ALL_FAIL равносильно $r > \varepsilon \max(N)$; в остальных случаях решение AMBIGUOUS.

$$N=\{2,4\}: \text{ALL_PASS}; N=\{1\}: \text{ALL_FAIL}; N=\{1,2,4\}: \text{AMBIGUOUS}.$$

Доказательство следует из монотонности $n \mapsto n\varepsilon$. При непустом сужении N однозначный исход сохраняется. Неоднозначный исход может стать однозначным после добавления оснований, исключающих часть кандидатов. Пустое N отклоняется, чтобы не получить ложный PASS по пустой универсальной квантификации.

Вывод условен: происхождение, допустимость и полнота N должны быть обоснованы отдельно. Даже ALL_PASS не устанавливает реальную нормировку, предельную сходимость или ошибку свойства. Конечный радиус относится к первой предоставленной точке, а не к пределу ряда.

03 / Исполнимый контракт и отрицательные сценарии

Согласованный учебный пакет содержит 13 файлов и три точки ENCUT. Семь общих оснований: структура, KPOINTS, перечень псевдопотенциалов, процедура, журнал, описание извлечения и условия использования. Для каждой точки отдельно заданы INCAR, OUTCAR и идентификатор запуска. Псевдопотенциалы в комплект не включены.

Проверяются SHA-256 и размер каждого файла; число атомов в POSCAR и OUTCAR; ENCUT в INCAR и OUTCAR; версия в выходе; энергия; точная связь хешей входа и выхода с журналом. Разные настройки не могут ссылаться на один выход. Хеши не удостоверяют автора, время или факт исполнения.

Учебный сценарий	Результат
Полный согласованный пакет	Нужна экспертиза происхождения
Нет выходного файла	FILE_NOT_FOUND
Байты изменены	FILE_DIGEST_MISMATCH
Смешаны #11 и TBmBJ	CHANNEL_METHOD_MISMATCH
Неверное число атомов	STRUCTURE_NATOMS_MISMATCH
Один выход для разных ENCUT	OUTPUT_REUSED_ACROSS_SETTINGS
Подмена связи в журнале	RUN_LOG_BINDING_MISMATCH
Дополнительный этап не пройден	BOTH_STOPPING_CHECKS_REQUIRED

Даже положительная внутренняя проверка возвращает CONSISTENT_DECLARATIONS_REVIEW_REQUIRED; scientific_admission всегда BLOCKED. Метка RESEARCH сама по себе ничего не удостоверяет. Флаги остановки проверяются как заявления; достоверность самих испытаний остаётся предметом экспертизы.

Поддержан ограниченный формат POSCAR с явными символами и координатами [S2], однозначный ENCUT и последняя свободная энергия TOTEN из OUTCAR [S3]. Определение энергии при нулевой температуре, vasprun XML и другие форматы не преобразуются молча: требуется отдельный адаптер по реальным образцам.

04 / Воспроизводимость, ограничения и продолжение

Проверки: 35/35 модульных тестов; восемь воспроизводимых синтетических пакетов. Тесты включают точную границу допуска, изменение единиц вместе с допуском, подмену файлов и журналов, смешение каналов, обход корня через путь, символьные ссылки, дубликаты JSON и недопустимые численные значения. Входы не изменяются; повторный отчёт идентичен.

```
python3 -m unittest discover -s tests -v
```

Для образца: `python3 protocol_binding.py --packet fixtures/complete/packet.json --root fixtures/complete --out my_report.json`. Выходной файл должен быть новым. Нужен Python 3.11+; расчётный модуль использует стандартную библиотеку и не запускает файлы пакета.

Ограничения: смысл метода, корректность KPOINTS и псевдопотенциалов, подлинность журнала, успешное завершение расчёта, условия использования и сходимость конкретного свойства не удостоверяются. Наличие 13 файлов не образует сертификат научной истинности. Связь с независимой KLT-структурой остаётся открытой.

V3.7: получить исходные пакеты трёх каналов и провести независимую проверку происхождения; установить определения энергии и правила извлечения band gap/упругого свойства; расширить адаптер только по полученному образцу. Внешние сообщения владельцам данных не отправлялись. Сохранены все 37 исторических блокеров; снято 0. Обучение CLOSED, реальные прогнозы NOT_RUN.

Действующий химический TXT закреплён в V3.5; новый поиск старого A7 для продолжения не требуется. RESEARCH является добавочным комплектом с выбранными источниками и ссылкой на неизменяемый V3.5; полная сводка не дублируется. PDF созданы ReportLab, LaTeX-исходники предоставлены без компиляции XeLaTeX.

S1 · Moreau L., Missier P. (eds.). PROV-DM: The PROV Data Model. W3C Recommendation, 2013.

S2 · VASP Wiki. POSCAR: structure format and atom counts. Accessed 24 September 2026.

S3 · VASP Wiki. OUTCAR: output information. Accessed 24 September 2026.

S4 · NIST JARVIS-DFT. JVASP-114724: retained published record.

S5 · JARVIS-Tools. Pinned VASP workflow, commit 2c2241dbd47c7d3ec5f0f7a78e7231e7705b43f7.