

计算协议与判断的可识别性

Ivan B. Kurpishev / Иван Борисович Курпишев

01 / 结果与适用范围

本阶段承接 B3.5，建立本地协议接收检查器，核对实际字节、结构与原子数、输入输出 ENCUT、能量定义及运行日志关联。工程实现已完成；尚未取得历史试点的原始协议。

新获取的 JVASP-114724 记录 [S4] 与 B3.4 保留记录具有相同 SHA-256：
bc8d103827a6926e74b1fa20279096fecf37f01c9e96731612a6496d04cb40e0。download_files 字段为带引号的空字符串。这不能证明提供方的所有存储中均不存在文件。

观测及通道	与原始运行的绑定
#11 / DFT-OptB88vdW	UNVERIFIED
#12 / DFT-TBmBJ	UNVERIFIED
#13 / DFT-OptB88vdW-Voigt-bulk	UNVERIFIED

在可访问文件中按 OUTCAR、vasprun 和 114724 名称检索，未找到原始计算文件；试点内容检索返回先前档案。还检查了所附所有者 ZIP 的四个文件名。这是有限范围的检索，并未覆盖一切可能的归档，也不能替代原始记录。

区分三个层面：字节完整性、声明关系的内部一致性以及独立来源核验。PROV-DM 区分实体、活动与责任主体 [S1]；本实现借用这一划分，但不声称完全符合 PROV 标准。

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

02 / 两个精确数学命题

观测纤维上的可识别性

设 P 为协议集合, $\pi_i: P \rightarrow Y$ 为可用信息映射, $C: P \rightarrow \{0,1\}$ 为目标判断。存在 $c: \pi_i(P) \rightarrow \{0,1\}$ 使 $C(p) = c(\pi_i(p))$, 当且仅当 C 在 π_i 的每个纤维上为常数。

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

证明: 若 $C(p) = c(\pi_i(p))$, 则相同像必给出相同判断。反之, 对满足 $\pi_i(p) = y$ 的任意 p 定义 $c(y) = C(p)$ 。纤维上的常值性保证定义不依赖代表元。这是函数通过映射分解的标准判据在协议接收中的应用, 不作为新的普遍定理提出。

归一化反例: 同一观测序列的半径 $r=0.002$ 、容差 $\epsilon=0.001$, 在 $n=1$ 时为 FAIL, 在 $n=2$ 时为 PASS。如果 π_i 不区分两种归一化, 就无法由这些观测唯一确定判断。数值全部是合成示例, 并不证明两种协议对真实试点均具有物理可行性。

归一化不完整时的稳健判断

设 N 是非空有限正整数除数集合, $r \geq 0$, $\epsilon > 0$, 定义 $C(n) = [r \leq n\epsilon]$ 。则 ALL_PASS 等价于 $r \leq \epsilon \min(N)$; ALL_FAIL 等价于 $r > \epsilon \max(N)$; 其余情况为 AMBIGUOUS。

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

证明直接来自 $f(n) = n\epsilon$ 的单调性。将 N 缩小为任意非空子集时, 确定性判断保持不变。额外证据排除候选后, 不确定判断可能变为确定判断。程序拒绝空集合, 避免由于空集上的全称量化而产生虚假的 PASS。

结论具有条件性: N 的来源、可容许性及完备性必须另行论证。即使 ALL_PASS 也不证明实际归一化、渐近收敛或属性误差界。有限半径相对于第一个输入点定义, 不是相对于序列极限。

03 / 可执行契约与拒绝情景

一致的合成数据包包含13个文件和三个 ENCUT 点。七个公共依据为结构、KPOINTS、赝势标识清单、过程、运行日志、提取说明及使用条件。每个点独立引用 INCAR、OUTCAR 和运行标识。包内不含赝势字节。

检查每个文件的摘要和大小；POSCAR/OUTCAR 原子数；INCAR/OUTCAR ENCUT；输出版本；能量；以及运行日志中输入输出摘要的精确关联。不同设置不能复用同一输出引用。摘要不能认证作者、时间或实际执行。

合成情景	结果
完整且一致的数据包	仍需来源审查
缺少输出	FILE_NOT_FOUND
字节改变	FILE_DIGEST_MISMATCH
#11 混入 TBmBJ	CHANNEL_METHOD_MISMATCH
原子数不符	STRUCTURE_NATOMS_MISMATCH
多个 ENCUT 共用一个输出	OUTPUT_REUSED_ACROSS_SETTINGS
替换日志关联	RUN_LOG_BINDING_MISMATCH
附加停止阶段失败	BOTH_STOPPING_CHECKS_REQUIRED

内部检查通过仅返回 CONSISTENT_DECLARATIONS_REVIEW_REQUIRED；scientific_admission 始终为 BLOCKED。RESEARCH 标签本身不认证任何来源。停止标志被当作声明检查，底层试验的真实性仍需审查。

支持受限的显式元素与坐标 POSCAR [S2]、单一明确的 ENCUT 和 OUTCAR 中最后一个自由能 TOTEN [S3]。零温能量、vasprun XML 和其他格式不会被静默转换；必须依据真实样本建立相应适配器。

04 / 复现、限制与后续工作

核验结果：35/35项单元测试及八个可复现合成数据包。测试覆盖精确容差边界、单位与容差共同缩放、文件/日志替换、通道混用、路径越界、符号链接、重复 JSON 键和无效数值。输入保持不变，重复报告完全一致。

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

示例命令：python3 protocol_binding.py --packet fixtures/complete/packet.json --root fixtures/complete --out my_report.json。输出文件必须为新文件。要求 Python 3.11+，检查器仅用标准库，不执行包内文件。

限制：不会认证方法语义、KPOINTS 与赝势正确性、日志真实性、成功完成运行、许可范围或属性收敛。13个文件不能构成科学真理证书。独立 KLT 结构对应仍未建立。

B3.7：取得三个通道的原始包并独立审查来源，确定能量定义及带隙/弹性属性提取规则，只依据已取得样本扩展适配器。未向数据提供方发送消息。37项历史阻塞全部保留，解除0项。训练 CLOSED，真实预测 NOT_RUN。

现行化学 TXT 已在 B3.5 固定，继续工作无需再次搜索旧 A7。本 RESEARCH 是增量包，保存选定证据和不可变 B3.5 引用，不重复全部化学汇编。PDF 由 ReportLab 生成；提供 XeLaTeX 源码，但未执行编译。

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.