

属性提取与可核验性的边界

Ivan B. Kurpishev · ЛОГИКА КУРПИШЕВА 2

1. 已发布属性的提取审计

B3.7 继承 B3.6，审计 JVASP-114724 的属性提取。结果只涉及保留的公开记录和固定版本的参考代码。尚未取得原始 OUTCAR/vasprun、历史计算流程或独立的 KLT 结构。科学准入保持 BLOCKED。

观测与检查	结果
#11 · DFT-OptB88vdW · 原始标签	带隙 3.366 eV; CBM 3.652 eV; VBM 7.017 eV。CBM – VBM = –3.365 eV，与正带隙不相容。
#11 · 独立的 *_tol 字段	CBM 7.017 eV; VBM 3.652 eV。差值 3.365 eV 在条件性舍入模型下与 3.366 eV 相容。
#12 · DFT-TBmBJ	直接带隙 4.638 eV ≥ 间接带隙 4.304 eV。仅检查必要的大小关系，没有重建能谱。
#13 · Voigt 体积模量	根据已发布的对称张量独立计算得到 163.4 GPa，与记录值完全一致。

9月24日的 S1 快照从已核验的 B3.6 RESEARCH 档案中恢复，SHA-256 未改变。9月26日再次获取时返回 HTTP 403，因此不声明 XML 在当天仍为最新内容。对可访问文件的有限检索没有发现新的原始计算协议。

原始标签和值均保留。内部一致性不能证明方法正确、物理精度、收敛性或某次运行的来源。

2. 参考代码中的标签互换

审查了 JARVIS 官方仓库的三个文件，版本与 B3.5/B3.6 相同：2c2241dbd47c7d3ec5f0f7a78e7231e7705b43f7。文件于9月26日取得，固定了摘要，并连同原始 NIST 声明保存在 RESEARCH 中 [S2-S4]。

get_indir_gap 的非自旋分支将最低未占据能级作为 CBM、最高占据能级作为 VBM，并返回 (gap, cbm, vbm)。自旋分支却把占据能级的最大值赋给 cbm，把未占据能级的最小值赋给 vbm，而 gap 仍按正确方向相减 [S2]。序列化程序将返回元组的第1和第2索引直接写入 CBM、VBM 标签 [S3]。

合成分支	函数实际输出
非自旋极化	(gap, CBM, VBM) = (6, 5, -1); CBM - VBM = 6。
自旋极化	(gap, CBM, VBM) = (6, -1, 5); CBM - VBM = -6。

只对两个合成 NumPy 数组执行了固定函数的 AST 函数体。没有整体导入 JARVIS，没有运行计算文件，也没有启动 VASP。这复现了参考代码中的标签问题，并非复现试点计算。

观察到的互换与该机制相符，但历史原因仍为 UNVERIFIED。试点的软件版本、ISPIN、NELECT、占据方案及本征值未知。已发布的零磁矩不能确定 ISPIN。本次不自动交换或修正字段。

3. 舍入数据相容性的精确条件

定理（标准区间结果在本审计中的应用）。设各 x_i 独立地取遍非空闭区间 $[l_i, u_i]$ ，且 $y = \sum(a_i x_i)$ 。则 y 的可达集合恰为 $[L, U]$ ：

$$L = \sum \min(a_i l_i, a_i u_i), U = \sum \max(a_i l_i, a_i u_i).$$

证明：每个线性项在区间端点达到极值。坐标独立性使所有下界及所有上界可以分别同时达到。凸长方体的线性像仍然凸；一维情况下，像覆盖两端之间的整个区间。因此，报告区间 J 与模型相容，当且仅当 J 与 $[L, U]$ 相交。

若区间仅包围相互关联的量，交集只表示在扩大后的长方体模型中仍有可能，不能证明实际可行。缩小可行集合不能消除已经证明的不相容；先前的相容性却可能消失。相容不等于确定真实值。

$$g = c - v. \text{*_tol}: [L, U] = [3.364, 3.366] \text{ eV}; J = [3.3655, 3.3665] \text{ eV}.$$

每个字段采用 0.001 eV 的量化步长，对应闭包误差 ± 0.0005 eV。虽然中心相差 0.001 eV，区间仍相交。原始标签给出 $[L, U] = [-3.366, -3.364] \text{ eV}$ ，与报告区间不相交。

$$K_V = (C11 + C22 + C33 + 2(C12 + C23 + C31))/9 = 163.4 \text{ GPa}.$$

取 $C11=C22=C33=345.0$ 、 $C12=C23=C31=72.6$ GPa，显示数值的计算结果完全一致。各分量的条件性误差为 ± 0.05 GPa 时，因为系数绝对值之和为 1，可得 K_V 属于 $[163.35, 163.45]$ GPa。舍入模型依据参考序列化程序；它不是物理不确定度，也不验证历史流程。

4. 量的类型、复现与后续工作

量	本版本支持的操作
自由能 TOTEN	保留 B3.6 契约：明确能量定义及按原子数归一化的方式。
带隙，eV	在同一方法和协议内计算带边差；不除以原子数。
体积模量 K_V，GPa	对 bulk 的 GPa 张量应用线性泛函；拒绝 N/m 或非对称张量，不认证稳定性。

单位相同并不意味着物理量类型相同。OptB88vdW 与 TBmBJ 通道保持分离。TOTEN、无熵能量和 SIGMA→0 外推能量不自动互换；VASP 区分这些输出 [S5]。发布的属性不能认证原始任务的能量定义或归一化。

Python 3.11+: `python3 -m unittest discover -s tests -v` 在 RESEARCH 中运行28项检查，其中20项算术检查、8项保留来源检查。`python3 audit_published.py --out my_report.json` 离线复现报告，输出文件必须尚不存在。`python3 reproduce_reference.py` 运行两个合成分支，需要 NumPy。PUBLIC 运行20项算术检查；由于不含完整 XML，跳过8项来源检查。

B3.8：取得原始证据，独立确定 #11 的历史分支、#12 的提取设置和 #13 的张量协议。在此之前，`science=ABSTAIN`，`DHC_chem=OPEN-NOT-CONFIRMED`，`EXT-RUN=NOT_RUN`，`truth_layer_promotion=0`，`T6-RA5=NOT_ISSUED`，`training=CLOSED`。37项历史阻塞全部保留，没有宣称解除任何一项。第一至第五卷及旧版本保持不变。

- S1 • [NIST JARVIS-DFT: JVASP-114724; retained 24.09.2026](#)
- S2 • [JARVIS Vasprun.get_indir_gap, lines 1434-1462](#)
- S3 • [JARVIS XML fields and rounding](#)
- S4 • [JARVIS ElasticTensor.voigt_modulus](#)
- S5 • [VASP Wiki: Smearing technique](#)
- S6 • [JARVIS-DFT database documentation](#)