

Извлечение свойств и границы проверяемости

Ivan B. Kurpishev · ЛОГИКА КУРПИШЕВА 2

1. Результат аудита опубликованных свойств

B3.7 продолжает B3.6 и проверяет извлечение свойств JVASP-114724. Результат относится к сохранённой публичной карточке и закреплённому исходному коду. Первичные OUTCAR/vasprun, историческая версия расчётной процедуры и независимая KLT-структура не получены. Научный допуск остаётся BLOCKED.

Наблюдение / проверка	Результат
#11 · DFT-OptB88vdW · исходные подписи	Зазор 3.366 eV; CBM 3.652 eV; VBM 7.017 eV. CBM – VBM = –3.365 eV: подписи не согласуются с положительным зазором.
#11 · отдельные поля *_tol	CBM 7.017 eV; VBM 3.652 eV. Разность 3.365 eV совместима с 3.366 eV при условной модели округления.
#12 · DFT-TBmBJ	Прямой зазор 4.638 eV ≥ непрямого 4.304 eV. Проверено только необходимое соотношение; спектр не восстановлен.
#13 · Voigt bulk	По опубликованному симметричному тензору независимо получено 163.4 GPa, в точности как в поле карточки.

Снимок S1 от 24 сентября восстановлен из проверенного B3.6 RESEARCH; его SHA-256 совпал. Повторное получение 26 сентября вернуло HTTP 403. Поэтому свежесть XML на 26 сентября не подтверждается. Поиск в доступных файлах не дал новых первичных расчётных протоколов; область поиска ограничена.

Исходные подписи и значения сохранены без исправления. Совместимость полей не доказывает правильность метода, физическую точность, сходимость или происхождение конкретного запуска.

2. Воспроизводимый механизм перестановки подписей

Проверены три файла официального репозитория JARVIS в той же закреплённой редакции, что и B3.5/B3.6: 2c2241dbd47c7d3ec5f0f7a78e7231e7705b43f7. Код получен 26 сентября, зафиксирован по SHA-256 и включён в RESEARCH с исходным уведомлением NIST [S2-S4].

В неспиновой ветви `get_indir_gar` определяет CBM как минимум незанятого уровня, VBM как максимум занятого и возвращает (`gar`, `cbm`, `vbm`). В спиновой ветви тот же код присваивает переменной `cbm` максимум занятого уровня, а `vbm` — минимум незанятого; сам `gar` остаётся разностью в правильном направлении [S2]. Сериализатор переносит позиции 1 и 2 непосредственно в подписи CBM и VBM [S3].

Синтетическая ветвь	Фактический результат функции
Без спиновой поляризации	(<code>gar</code> , <code>CBM</code> , <code>VBM</code>) = (6, 5, -1); <code>CBM</code> - <code>VBM</code> = 6.
Со спиновой поляризацией	(<code>gar</code> , <code>CBM</code> , <code>VBM</code>) = (6, -1, 5); <code>CBM</code> - <code>VBM</code> = -6.

Исполнено только извлечённое AST-тело закреплённой функции на двух искусственных массивах NumPy. Пакет JARVIS целиком не импортировался, файлы расчётов не исполнялись, VASP не запускался. Это воспроизведение дефекта подписей в эталонной ветви кода, а не воспроизведение пилотного расчёта.

Наблюдаемая перестановка согласуется с таким механизмом, но историческая причина остаётся UNVERIFIED: неизвестны версия кода, ISPIN, NELECT, схема занятости и исходные собственные значения пилота. Нулевой опубликованный магнитный момент не устанавливает ISPIN. Автоматическая перестановка полей не выполняется.

3. Точное условие совместимости округлённых данных

Теорема (стандартный интервальный результат, применённый к аудиту). Пусть истинные значения x_i принадлежат независимым замкнутым интервалам $[l_i, u_i]$, а $y = \sum a_i x_i$. Тогда множество допустимых y — весь интервал $[L, U]$, где:

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

Доказательство. Каждый линейный член достигает своих концов на концах соответствующего интервала. Независимость координат позволяет достичь сумм всех минимумов и всех максимумов. Линейный образ выпуклого параллелепипеда выпуклый; в одном измерении он заполняет весь промежуток между этими концами. Следовательно, опубликованный интервал J совместим с моделью тогда и только тогда, когда J пересекается с $[L, U]$.

Если интервалы лишь внешне ограничивают коррелированные величины, пересечение даёт только необходимую возможность в расширенной модели. Сужение исходного множества не устраняет уже доказанную несовместимость; прежняя совместимость при сужении может исчезнуть. Совместимость не равна установлению истинного значения.

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

При квантовании каждого поля зазора и края с шагом 0.001 eV берётся замкнутая оболочка ± 0.0005 eV. Пересечение непусто, хотя центры различаются на 0.001 eV. Для исходных подписей $[L, U] = [-3.366, -3.364]$ eV и пересечение пусто.

$$K_V = (C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2(C_{12} + C_{23} + C_{31}))/9 = 163.4 \text{ GPa}.$$

При $C_{11}=C_{22}=C_{33}=345.0$ и $C_{12}=C_{23}=C_{31}=72.6$ GPa формула даёт точное совпадение на опубликованных числах. Условные ошибки компонентов ± 0.05 GPa дают $K_V \in [163.35, 163.45]$ GPa, поскольку сумма модулей коэффициентов равна 1. Модель округления взята из эталонного сериализатора; это не оценка физической погрешности и не подтверждение исторической процедуры.

4. Типы величин, воспроизведение и продолжение

Величина	Допустимая операция в этом выпуске
Свободная энергия TOTEN	Сохраняется контракт B3.6: точное определение энергии и явно заданная нормировка по числу атомов.
Зонный зазор, eV	Разность краёв в пределах одного метода и протокола. Деление на число атомов не применяется.
Модуль K_V, GPa	Линейный функционал тензора в GPa для bulk. N/m и асимметричный тензор отклоняются; устойчивость не сертифицируется.

Одинаковые единицы не означают одинаковый тип величины. Каналы OptB88vdW и TBmBJ не объединяются. TOTEN, энергия без энтропии и экстраполяция SIGMA→0 автоматически не подменяются: VASP различает эти выходы [S5]. Опубликованное значение свойства не удостоверяет энергию и нормировку исходного задания.

Python 3.11+: `python3 -m unittest discover -s tests -v` — 28 проверок в RESEARCH (20 арифметических, 8 по сохранённому источнику). `python3 audit_published.py --out my_report.json` — повторный отчёт без сети; файл результата должен быть новым. `python3 reproduce_reference.py` — две синтетические ветви, требуется NumPy. PUBLIC содержит 20 арифметических проверок; 8 проверок источника пропускаются, поскольку полный XML туда не включён.

B3.8: получить первичные основания, отдельно установить историческую ветвь #11, параметры извлечения #12 и тензорный протокол #13. До этого сохраняются `science=ABSTAIN`, `DHC_chem=OPEN-NOT-CONFIRMED`, `EXT-RUN=NOT_RUN`, `truth_layer_promotion=0`, `T6-RA5=NOT_ISSUED`, обучение CLOSED. Все 37 исторических блокеров остаются; их снятие не заявляется. Томы I-V и прежние публикации не изменяются.

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](#)