

1. Гармонический прогноз и границы погрешности

Иван Борисович Курпишев. KLT-RBD, МАСТЕР-2. RUN-038 / ARBD51. 22 сентября 2026 года.

Математическое дополнение к протоколу T6-CHEM-PREREG-OH-ALK-001-RU-v1.0 от 24.08.2026. Рассматривается гармоническое дополнение трёх действительных координат, его невырожденность и точный образ прямоугольника ошибок с одним общим калибровочным сдвигом. Формулы реализованы точной рациональной арифметикой и проверены на синтетических входах.

Прочитан полный текст исходного протокола, 16 страниц. Его научная граница: реакции OH с ациклическими алканами C5–C10 в газовой фазе, логарифм константы скорости при 298 K, скрытый четвёртый изомер и независимая повторная сборка корпуса. Подготовка протокола не тождественна внешней регистрации.

$$y_X = \log_{10} \left(\frac{k_X(298 \text{ K})}{1 \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}} \right), \quad X \in \{R, I, U, D\}.$$

Позиции R, I, U, D определены структурным порядком изомеров. Они не являются моментами времени, а формула дополнения не является динамической траекторией RUN-037. Общим с RUN-036/037 остаётся принцип: один систематический сдвиг нельзя заменять независимыми смещениями каждого канала.

Интервальные условия этой работы являются отдельным сертификатом математической корректности. Они не переписывают критерии химической предрегистрации и не вводятся задним числом в первичный статистический тест. Их включение в эмпирический анализ потребует отдельного согласованного дополнения до просмотра скрытых outcomes.

SCIENCE=ABSTAIN; truth_layer_promotion=0; real_forecast_trial=NOT_RUN; EXT_RUN=NOT_RUN; independent_review=NOT_RUN. Скрытые химические значения в RUN-038 не получались. Замороженные тома и результаты прежних этапов не изменяются.

2. Формула и невырожденность репера

Обозначим видимые координаты r, i, u , а искомую координату h . Используется ровно та конвенция двойного отношения, которая записана в разделе 8 исходного протокола:

$$\frac{(u-r)(i-h)}{(u-h)(i-r)} = -1, \quad d = u + i - 2r.$$

Предложение 1. Единственность конечного дополнения

Если r, i, u попарно различны и d не равен нулю, существует единственное конечное h , удовлетворяющее этому равенству. Оно также отлично от всех трёх видимых координат:

$$H(r, i, u) = \frac{2ui - r(u+i)}{u+i-2r} = r + \frac{2(u-r)(i-r)}{d}.$$

Доказательство. После умножения на ненулевой знаменатель исходное равенство становится линейным по h с коэффициентом d . Решение даёт приведённую формулу. Отсутствие запрещённых совпадений следует из разностей:

$$H - r = \frac{2(u-r)(i-r)}{d}, \quad H - i = \frac{(i-r)(u-i)}{d}, \quad H - u = -\frac{(u-r)(u-i)}{d}.$$

Все их числители ненулевые. Подстановка восстанавливает двойное отношение -1 , что завершает доказательство.

Ненулевой d сам по себе недостаточен. Например, $r=i=0$ и $u=1$ дают $d=1$ и формальное $H=0$; двойное отношение не определено. Поэтому программа отдельно различает значение рациональной формулы и гармонический репер. При $d=0$ и попарно различных исходных точках проективное дополнение бесконечно, но конечный логарифм скорости этим не задаётся.

Предрегистрационный порог $|d| \geq 0,05$ сохранён буквально. Равенство порогу допускается. Это выбранный критерий устойчивости конкретного протокола, а не универсальная теорема химической кинетики.

3. Общий сдвиг и измерительная шкала

Предложение 2. Аффинная ковариантность

Для любых действительных $a \neq 0$ и b в области определения справедливо:

$$H(ar + b, ai + b, au + b) = aH(r, i, u) + b.$$

Доказательство. В разностной форме предложения 1 каждый множитель разности умножается на a , знаменатель — на a . Добавление b остаётся только в первом слагаемом. При этом d преобразуется в ad . Следовательно, фиксированный числовой порог 0,05 инвариантен к общему сдвигу, но не к произвольному масштабу a .

Для наблюждённых координат v_X модель строгих ошибок задаётся так:

$$x_X = v_X - b + e_X, \quad |e_X| \leq \varepsilon_X, \quad b \in [b_-, b_+].$$

Один и тот же b входит во все три видимых канала. Тогда $H(x_R, x_I, x_U) = H(v_R + e_R, v_I + e_I, v_U + e_U) - b$. Величина d от b не зависит. Так сохраняется реальная связь ошибок, которую потеряла бы замена общего сдвига тремя независимыми интервалами.

Изменение единицы положительной константы скорости добавляет к каждому логарифму одну константу и подчиняется этой формуле. Однако оно не доказывает, что разные статьи имеют общий калибровочный сдвиг: это самостоятельное измерительное предположение, требующее источникового основания.

Если скрытый канал и все видимые каналы действительно имеют один и тот же аддитивный сдвиг, он сокращается в разности скрытой координаты и аффинно-ковариантного прогноза. При разных калибровках такого сокращения нет. RUN-038 не приписывает общей калибровки реальным химическим данным и не оценивает ошибку относительно скрытого D .

4. Точный образ множества ошибок

Положим $r \in [r_-, r_+]$, $i \in [i_-, i_+]$, $u \in [u_-, u_+]$, где границы построены из $v_X \pm \varepsilon_X$ до вычитания общего b . Точный интервал знаменателя равен:

$$d \in [d_-, d_+] = [i_- + u_- - 2r_+, i_+ + u_+ - 2r_-].$$

Теорема 3. Достижимые интервальные границы

Если этот интервал не содержит нуля, точный образ H на всём прямоугольнике и общем интервале b есть $[h_-, h_+]$, где

$$h_- = H(r_+, i_-, u_-) - b_+, \quad h_+ = H(r_-, i_+, u_+) - b_-.$$

Доказательство. На прямоугольнике нет полюса. Прямое дифференцирование даёт знаки, не зависящие от знака d :

$$\partial_r H = -\frac{(u-i)^2}{d^2} \leq 0, \quad \partial_i H = \frac{2(u-r)^2}{d^2} \geq 0, \quad \partial_u H = \frac{2(i-r)^2}{d^2} \geq 0.$$

Последовательное изменение каждой координаты устанавливает минимум и максимум в указанных углах. Оба угла и обе крайние калибровки допустимы. Непрерывный образ связного компактного множества в действительной прямой есть замкнутый интервал; поэтому достигаются и все промежуточные значения.

Центр $(h_- + h_+)/2$ и радиус $(h_+ - h_-)/2$ дают точный минимакс по абсолютной ошибке для этого образа. Для любого иного центра худшее расстояние до одного из двух достижимых концов не меньше половины длины. Это гарантия внутри модели, не вероятность и не измеренная химическая точность.

Программа дополнительно требует $\min|d| \geq 0,05$ на всём прямоугольнике. При провале она не выдаёт конечный интервал H . Невырожденность всех реперов сертифицируется только при попарной непересекаемости трёх замкнутых интервалов; касание тоже допускает совпадение и потому не проходит этот сертификат.

5. Базовая модель и смысл погрешности

Линейная базовая модель исходного протокола — МНК-прямая по позициям 1, 2, 3 с прогнозом в позиции 4. Её точная формула и образ при той же модели ошибок:

$$L(r, i, u) = \frac{-2r + i + 4u}{3}, \quad L_- = L(r_+, i_-, u_-) - b_+, \quad L_+ = L(r_-, i_+, u_+) - b_-.$$

Доказательство. При средних позиции 2 и отклика $(r+i+u)/3$ коэффициент наклона равен $(u-r)/2$. Экстраполяция на две позиции даёт указанное L . Знаки коэффициентов $-2, 1, 4$ определяют точные углы экстремумов. Базовая модель вычисляется даже при отказе гармонического сертификата.

Учебный пример: $v_R = -12, v_I = -11, v_U = -10, \varepsilon_R = \varepsilon_I = \varepsilon_U = 0,01$ и $b = 0$. Точечные $H = -32/3$ и $L = -9$. Точный интервал H : $[-9878/925; -40487/3800]$, радиус $3437/281200$. Если $b \in [-0,2; 0,2]$, радиус становится $59677/281200$. Это вымышленные числа, не экспериментальные константы.

Десятичные входы и дроби преобразуются в рациональные числа без округления. Программа не вычисляет $\log_{10}$ из экспериментального k и не объявляет округлённый десятичный логарифм точным значением исходной физической величины.

Если первичная работа обосновывает строгий положительный интервал $k \in [k_-, k_+]$, монотонность логарифма даёт соответствующий интервал $\log_{10}(k)$. Для машинного сертификата его концы должны быть внешними рациональными границами с подтверждённым направлением округления. При $k_- \leq 0$ такая конструкция неприменима.

Стандартная ошибка, доверительный интервал и qualitative quality flag не являются строгими границами без дополнительных предположений. Исходный химический протокол может допускать quality flag, но это ещё не допуск к интервальному сертификату RUN-038. Нельзя произвольно заменять неизвестную погрешность нулём или выбирать удобный множитель стандартного отклонения.

6. Сохранённые правила химического теста

Ниже зафиксировано содержание исходного досье, а не результат его исполнения. Первичная единица — неперекрывающаяся изомерная четверка, независимая по компоненте lineage. Структурный порядок: Wiener index, числа третичных и четвертичных атомов углерода, canonical SMILES, InChIKey. Остатки списков не переносятся между формулами.

Из компоненты общей источниковой связности оставляется не более одной четверки по минимальному SHA-256 строки protocol_id|component_id|quartet_id|seed. Seed=20260824. Это правило зависит от идентификаторов, а не от скрытого значения.

$$L_H = \text{median}_q |y_{D,q} - \hat{y}_{D,q}^H|, \quad L_L = \text{median}_q |y_{D,q} - \hat{y}_{D,q}^L|, \quad \Delta = L_L - L_H.$$

Единственный первичный anchor равен -1 . Минимальный эффект $\Delta \geq 0,10$. Matched null: B=9999 перестановок внутри каждой четверки, seed=20260824, plus-one p. Предписанный штраф при полюсе в переставленных данных — $3,0 \log_{10}$ -единицы. Отрицательные результаты и неудобные полюсы не удаляются.

При $n_{\text{eff}} < 5$ исход ABSTAIN; при $5 \leq n_{\text{eff}} < 20$ возможен только exploratory signal, при остальных воротах PASS и $p \leq 0,10$. При $n_{\text{eff}} \geq 20$, всех воротах PASS, $\Delta \geq 0,10$ и $p \leq 0,05$ возможен STRICT_CLASS_CANDIDATE. Исходный протокол также задаёт ограниченную фальсификацию при $\Delta \leq -0,10$ и reverse $p \leq 0,05$. Эти статусы не доказывают универсальную химическую истинность.

Слепой порядок: фиксация протокола и исходного корпуса; маскирование D вместе с восстанавливающим его locator; commitment скрытого файла; прогноз и его hash до reveal; проверка хранителем и верификатором; одно раскрытие. Отсутствие независимого хранителя является блокером. RUN-038 не имитирует эту независимость программным флагом.

Дальнейшее применение новых условий невырожденности и интервальной устойчивости требует до раскрытия решить, будут ли они диагностикой или изменением первичного отбора. Если меняется первичное правило, необходимы новый идентификатор протокола и соблюдение его требований к независимому holdout; прежний документ остаётся неизменным.

7. Источники и условия эмпирического допущения

NIST SRD 17 используется как индекс поиска, а числовой носитель — оригинальная экспериментальная публикация. На 22.09.2026 главная страница показывает Version 7.1 / Data Version 2026, тогда как страница Citation содержит Version 7.0 / Data version 2015.09. Обе строки сохраняются как наблюдаемое расхождение; версия не выбирается по памяти. NIST рекомендует цитировать первичных авторов данных.

<https://kinetics.nist.gov/kinetics/>

<https://kinetics.nist.gov/kinetics/citation.jsp>

Для будущей строки нужны: primary article DOI/URL, название и авторы, страница/таблица/уравнение, дата доступа, hash сохранённого носителя, экспериментальный метод, фаза, температурный диапазон, порядок реакции, единицы, неопределённость с её смыслом и lineage. URL и hash сами по себе не заменяют точный locator.

До числового просмотра следует закрепить состав ролей и границу видимости. Полный корпус собирает куратор; скрытый канал хранит независимый custodian. Аналитик не получает его значения и восстанавливающие источниковые адреса. В RUN-038 проверялись общие страницы NIST, без запросов реакционных результатов и без поиска скрытых изомеров.

В доступном досье не подтверждены: внешняя регистрация, назначение независимого хранителя, готовый корпус и независимые четверки, конкретный первичный носитель измерений, калибровочная модель и строгие интервалы. Эти позиции перечислены в машинном аудите с областью действия «проверенный комплект», а не как утверждение об отсутствии иной работы автора.

Побайтовый аудит исходного программного ZIP химической предрегистрации не выполнен: архив не удалось получить. Новый расчёт RUN-038 является отдельной реализацией описанных здесь формул, не заверением корректности того архива и не заменой его reference evaluate.

Авторский источник: Курпишев И.Б. T6-CHEM-PREREG-OH-ALK-001-RU-v1.0, 24.08.2026, 16 с.; особенно разделы 6–11, 14–18. Предыдущий математический этап: RUN-037, «Матрицы и последовательности».

<https://klt-rbdv6-analyzer.workspace-406992.chatgpt.site/arbd/projective-mathematics.html>

8. Воспроизведение и граница завершённого этапа

Реализация `harmonic.js` содержит чистое вычисление на `BigInt`. Вход `ARBD-HARMONIC-BOX-v1` принимает только `SYNTHETIC`, `DECLARED_LOG10_RATE`, `HARD_BOUNDS`, три видимых координаты с ошибками и один интервал общего сдвига. Поля скрытого `D`, посторонние поля, отрицательные ошибки, неверные единицы и попытка эмпирического режима отклоняются.

Выполнены 17 содержательных тестов. На 472 целочисленных невырожденных тройках результат согласован с независимым ядром однородного двойного отношения `PGL` из `RUN-037`. Для 54 прямоугольников обоих знаков знаменателя проверены крайние свидетели и 20250 точек с тремя значениями общего сдвига. Перебор поддерживает проверку реализации, но доказательство непрерывного покрытия дано теоремой 3.

Проверены точное равенство порогу $1/20$, значение непосредственно ниже него, попадание интервала в полюс, малый ненулевой запас, совпадение точек, касание интервалов, аффинная ковариантность, линейная база, точные десятичные числа и сохранение научных ограничений. Независимый расчёт `Python Fraction` подтвердил числовой пример раздела 5.

Комплект содержит исходный код, `CLI`, тесты, шесть вымышленных примеров, единый текст для `HTML/TeX/PDF`, машинный аудит предрегистрации и пустой шаблон `source ledger`. Новых химических числовых строк в нём нет. Веб-интерфейс вычисляет локально и позволяет скопировать условия вместе с результатом.

Из корня исследовательского комплекта: `node -test tests/arbd51.test.mjs`. Пример отдельного расчёта: `node scripts/harmonic-cli.mjs public/arbd/harmonic-data/demo-stable.json`. Перегенерация примеров: `node scripts/build-harmonic-dossier.mjs`. Контрольные суммы перечислены в `MANIFEST.json`.

Следующий эмпирический шаг: подтвердить внешнюю регистрацию и независимого хранителя; получить исходный код предрегистрации для аудита; решить статус нового математического дополнения до раскрытия; собрать первичные носители в контуре куратора и подготовить допустимую видимую выгрузку. Пока эти основания отсутствуют, запуск реального прогноза не разрешается научным протоколом.

`EXT_RUN` означает независимую повторную сборку и самостоятельный расчёт, а не повторный запуск того же кода данным исполнителем. Новая лабораторная эмпирическая репликация является ещё отдельным испытанием. `SCIENCE=ABSTAIN`; `DHC_CHEM=OPEN-NOT-CONFIRMED`; `truth_layer_promotion=0`.