

KLT-RBD-CHEM-PUBLICATION-ATLAS v1.1

Публикационный атлас химической RBD-базы

Иван Борисович Курпишев · Independent Researcher · Kaliningrad · me@kurpishev.ru
2026

Точка сборки: KLT-RBD-CHEM-PUBLICATION-ATLAS-RU-v1.1

Основание: KLT-RBD-CHEM-INTEGRATED-LAB-KNOWLEDGE-GRAPH v1.0 и химический слой v0.1-v1.0.

Аннотация

Настоящий атлас оформляет химическую RBD-базу KLT как публикационный слой. Он связывает объект C@C_chem, Reper-четвёрку Rep_chem(R,I,U;D), lambda/CGI-проверку, лабораторный Evidence-D и маршруты публикации для сайта, монографии, Excel/SQLite и транспортного ZIP.

Главный тезис: химия в KLT-RBD описывается не как список веществ, а как граф переходов веществ@состояний с обязательной привязкой к достаточному основанию D.

0. Паспорт версии

Параметр	Значение
Версия	v1.1
Статус	publication atlas
Source-of-truth	KLT-RBD-CHEM-INTEGRATED-LAB-KNOWLEDGE-GRAPH v1.0
DOCX/PDF	публикационный атлас
XLSX/SQLite/CSV	табличная и машинная карта
Site-ready	Markdown + HTML

1. Основание KLT-RBD-CHEM

Базовая формула слоя:

C@C_chem -> Rep_chem(R,I,U;D) -> lambda/CGI -> RBD graph

Компонент D является не декоративной ссылкой, а достаточным основанием, без которого химический узел не получает финальный truth-status. Поэтому публикационный атлас должен хранить не только таблицы веществ, но и их основание: метод, источник, калибровку, баланс, домен и uncertainty.

2. Линия модулей v0.1-v1.0

version	short_name	layer	content	integration_role	status
v0.1	STRUCTURE	Object skeleton	C@C, Rep(R,I,U;D), initial chemical domains	chemistry domain skeleton	locked
v0.2	STRUCTURE-QUANT	Quantitative seed	118 elements, solubility seed, ionic equations, safety-D	periodic and reference layer	locked
v0.3	REACTION-ENGINE	Reaction core	Formula parser, molecular balancing,	reaction transition layer	locked

			mass/charge checks		
v0.4	IONIC-REDOX-GRAPH	Ionic/redox core	Spectator-ion reduction, oxidation numbers, half-reactions	ionic and redox layer	locked
v0.5	PERIODIC-STRUCTURE-GRAPH	Periodic graph	Groups, periods, blocks, valence and ion patterns	element graph layer	locked
v0.6	COMPOUND-MATERIALS-GRAPH	Compound/material graph	Salts, oxides, acids, bases, minerals, materials	compound material layer	locked
v0.7	SOLUBILITY-ACIDBASE-MATERIALS	Solution/material engine	pH, solubility, precipitation, amphoterism, corrosion	solution and degradation layer	locked
v0.8	THERMO-KINETIC-MATERIALS	Thermo/kinetic engine	ΔG , K, rate-law seed, temperature windows	feasibility and rate layer	locked
v0.9	SPECTROSCOPY-ANALYTICS-EVIDENCE	Evidence engine	Spectroscopy, analytical identification, uncertainty, Evidence-D	measurement evidence layer	locked
v1.0	INTEGRATED-LAB-KNOWLEDGE-GRAPH	Integrated lab graph	Substance→formula→reaction→ion graph→material→pH/solubility→thermo/kinetic→evidence-D	unified KLT-RBD chemical laboratory knowledge graph	current

3. Архитектура публикационного атласа

Схема показывает переход от химического события@состояния к Evidence-D и truth/gap gate.

KLT-RBD-CHEM Publication Atlas v1.1: integrated laboratory knowledge graph

C@Cchem	Repchem	Formula	Reaction	Ionic/Redox	Material	Thermo/Kinetic	Evidence-D	Truth/Gate
sample / event@state	R, I, U; D	parser + balance	Δ , Ξ , Y transition	charge + electrons	corrosion / degradation	ΔG , K, rate-law	measurement + calibration	λ /CGI status

Gate principle: no truth-status without admissible chemical domain and sufficient foundation D

C@Cchem -> Repchem(R,I,U;D) -> λ /CGI -> RBD graph -> publication route

4. Карта разделов

section_id	title	content	artifact	status
SEC-00	Титульная фиксация	Паспорт версии, авторские	DOCX/PDF/site	ready

		реквизиты, точка сборки		
SEC-01	Основание KLT-RBD-CHEM	C@Cchem, Repchem(R,I,U;D), lambda/CGI, D-gate	монография + PILOT-01	ready
SEC-02	Линия версий v0.1-v1.0	История сборки модулей химической RBD-базы	module_map	ready
SEC-03	Архитектура базы	Вещество -> формула -> реакция -> ионный граф -> материал -> Evidence-D	architecture graph	ready
SEC-04	Карта таблиц	Описание всех табличных слоёв и статусов	table_map	ready
SEC-05	Карта диаграмм	Схемы публикационного атласа	figure_map	ready
SEC-06	Evidence-D	Измерение, калибровка, uncertainty, status	evidence_bindings	ready
SEC-07	Gap/CGI-протокол	Правила отказа от truth-status и пересборки	gap + cgi rules	ready
SEC-08	Лабораторный workflow	sample -> formula -> reaction -> graph -> evidence	lab_workflow	ready
SEC-09	Маршруты публикации	Сайт, монография, приложение, Роспатент/БД	publication_routes	ready
SEC-10	QA-протокол	Проверка состава пакета, legacy, архивов, таблиц	qa	ready
APP-A	Приложение А	CSV/SQLite/XLSX mapping	manifest	ready
APP-B	Приложение В	Словарь статусов и gate-правил	definitions	ready

5. Карта таблиц

table_id	source_table	description	rows	publication_policy
TBL-01	module_map_v1_0	Линия модулей v0.1-v1.0	10	включить полностью
TBL-02	kg_nodes_v1_0	Узлы интегрального химического графа	70	выборка + ссылка на CSV
TBL-03	kg_edges_v1_0	Рёбра графа: связи substance/reaction/evidence	79	выборка + ссылка на CSV
TBL-04	lab_workflow_v1_0	Лабораторный маршрут обработки вещества	8	включить полностью
TBL-05	evidence_bindings_v1_0	Связка наблюдений с достаточным основанием D	58	выборка + ссылка на CSV
TBL-06	gap_rules_v1_0	Гар-дисциплина химического слоя	18	включить полностью
TBL-07	cgi_rebuild_rules_v1_0	CGI-пересборка при разрыве связности	12	включить полностью
TBL-08	engine_decisions_v1_0	Примеры решений engine	80	выборка
TBL-09	sources_v1_0	Источниковая карта	13	включить полностью
TBL-10	validation_v1_0	QA v1.0, унаследованный слой	10	включить полностью

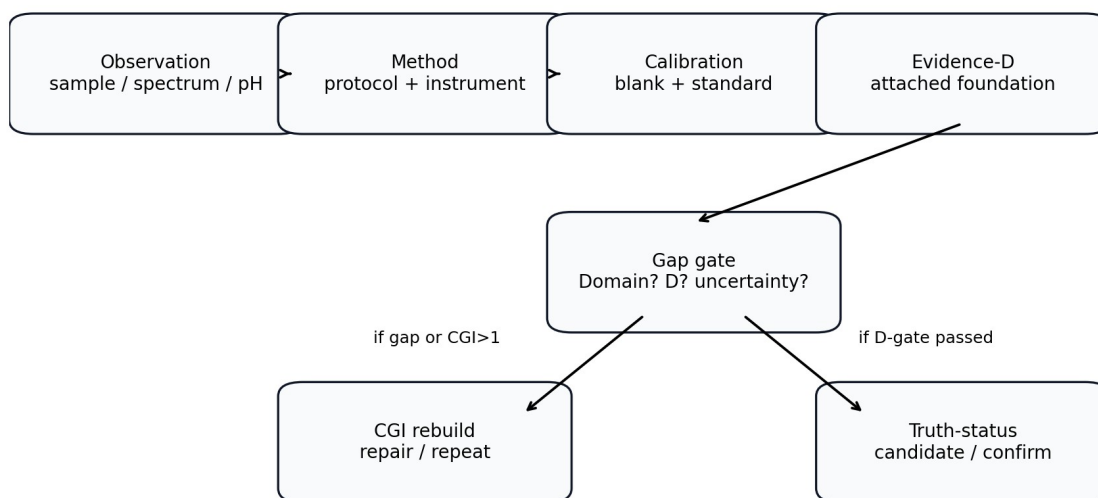
6. Карта диаграмм

figure_id	file	caption	section	status
FIG-01	architecture_graph_v1	Общая архитектура	SEC-03	ready

	1.png	KLT-RBD-CHEM		
FIG-02	publication_route_v1_1.png	Маршрут публикации: база -> атлас -> сайт/монография	SEC-09	ready
FIG-03	evidence_gate_v1_1.png	Evidence-D gate: measurement -> D -> truth-status	SEC-06	ready
FIG-04	dashboard_preview	Обзорный dashboard Excel	SEC-10	ready
FIG-05	legacy_lineage	Линия v0.1-v1.0, включена в таблицу	SEC-02	table-derived
FIG-06	gap CGI_protocol	Gate-map для gap/CGI	SEC-07	table-derived

7. Evidence-D gate

Evidence-D gate for chemical RBD



Evidence-D gate связывает наблюдение, метод, калибровку и достаточное основание. Если domain, D или uncertainty не закреплены, атлас переводит узел в gap/CGI-пересборку.

Выборка Evidence-D:

evidence_id	observable	method	target	D_requirements	uncertainty	status	cgi
EVD-0001	white curdy precipitate	gravimetry / visual + confirmation	AgCl chloride marker	blank + known standard + solubility domain	medium: moderate	EVIDENCE-D-PARTIAL	0.42
EVD-0002	white dense precipitate	gravimetry	BaSO4 sulfate marker	mass check + acid resistance domain	medium: low	EVIDENCE-D-STRONG	0.31
EVD-0003	pH < 3	pH-meter	strong acid context	calibration buffers + temperature	instrument: low	EVIDENCE-D-STRONG	0.24
EVD-0004	pH > 11	pH-meter	strong base context	calibration buffers + temperature	instrument: low	EVIDENCE-D-STRONG	0.24
EVD-0005	purple	UV-Vis /	permangana	wavelength	matrix:	EVIDENCE-D-	0.46

	solution fades	colorimetry	te reduction	+ blank + acidic domain	moderate	PARTIAL	
EVD-0006	blue Cu ₂ + solution loses color	UV-Vis	copper reduction/complex change	wavelength + concentration standard	matrix: moderate	EVIDENCE-D-PARTIAL	0.49
EVD-0007	IR carbonate band	IR	carbonate material	baseline + reference spectrum	overlap: moderate	EVIDENCE-D-PARTIAL	0.52

8. Gap/CGI-протокол

Gap-правила фиксируют дефекты домена, основания, формулы, баланса, среды и метода.

gap_id	name	trigger	repair_action	legacy_or_source	cgi_effect
GAP-v1-0-001	GAP-DOMAIN-MISSING	admissible domain absent	attach chemical domain: aqueous, solid, gas, material, spectro	PILOT-01	CGI++ until repaired
GAP-v1-0-002	GAP-FOUNDATION-MISSING	sufficient foundation D absent	attach source/protocol/calibration/balance proof	PILOT-01	CGI++ until repaired
GAP-v1-0-003	GAP-FORMULA-PARSE	formula cannot be parsed	repair formula syntax or add alias mapping	v0.3	CGI++ until repaired
GAP-v1-0-004	GAP-MASS-BALANCE	molecular equation mass not balanced	rebalance equation before truth-status	v0.3	CGI++ until repaired
GAP-v1-0-005	GAP-CHARGE-BALANCE	ionic equation charge not balanced	repair charge/electron count	v0.4	CGI++ until repaired
GAP-v1-0-006	GAP-SPECTATOR-UNREMOVED	spectator ions left in net equation	run spectator reduction	v0.4	CGI++ until repaired
GAP-v1-0-007	GAP-OXIDATION-NUMBER	oxidation number transition inconsistent	recompute oxidation states and half-reactions	v0.4	CGI++ until repaired
GAP-v1-0-008	GAP-PERIODIC-CLASS	element class/group not bound	attach periodic graph node	v0.5	CGI++ until repaired
GAP-v1-0-009	GAP-COMPOUND-CLASS	compound class ambiguous	classify as acid/base/salt/oxide/mineral/material	v0.6	CGI++ until repaired

CGI-правила фиксируют процедуру пересборки при разрыве химической связности.

rule_id	name	trigger	rebuild_action	legacy_or_source	target
CGI-v1-0-001	CGI-REBUILD-FORMULA	Formula parser or atom count fails	return to formula seed and alias map	v0.3	target CGI < 1
CGI-v1-0-002	CGI-REBUILD-IONIC	Charge or spectator layer fails	rebuild complete ionic equation	v0.4	target CGI < 1
CGI-v1-0-003	CGI-REBUILD-REDOX	Electron balance fails	split into half-reactions	v0.4	target CGI < 1
CGI-v1-0-004	CGI-REBUILD-PERIODIC	Element valence impossible	cross-check periodic valence/oxidation pattern	v0.5	target CGI < 1
CGI-v1-0-005	CGI-REBUILD-COMPOUND	Compound class ambiguous	check acid/base/salt/oxide/mineral/material class	v0.6	target CGI < 1
CGI-v1-0-006	CGI-REBUILD-SOLUBILITY	Precipitate claim conflicts with solubility	attach solubility and concentration domain	v0.7	target CGI < 1
CGI-v1-0-007	CGI-REBUILD-PH	Acid/base classification	bind pH measurement and	v0.7	target CGI < 1

		conflicts with pH	conjugate pair		
--	--	-------------------	----------------	--	--

9. Лабораторный workflow

step_id	stage	operation	required_inputs	klt_rbd_binding	gap_gate
LW-01	sample_intake	receive material/substance sample	sample id, chain of custody, visible state	C@C_lab	reject if domain missing
LW-02	formula_or_class_seed	assign preliminary substance/material class	formula, class, material context	Rep.R and Rep.I	GAP-FORMULA-MISSING if absent
LW-03	reaction_context	bind possible reactions and solution state	pH, solvent, ions, phase	Δ chem/Xichem	GAP-MEDIUM-MISSING if absent
LW-04	ionic_graph	construct complete/net ionic transition	ion list, charge balance, spectators	ionic RBD graph	GAP-CHARGE-BALANCE if failed
LW-05	thermo_kinetic_check	separate feasibility from rate	T, Δ G/K, Ea, catalyst, time	U-domain pruning	GAP-T-K-DOMAIN if missing
LW-06	material_coupling	attach material degradation/corrosion branch	humidity, chloride, sulfate, CO ₂ , oxygen	material Rep	GAP-ENVIRONMENT-MISSING if absent
LW-07	evidence_acquisition	select analytical method	IR/UV-Vis/XRD/pH/titration/EDS data	Evidence-D	GAP-EVIDENCE-CALIBRATION if absent
LW-08	lambda CGI_auth	issue status after Reper closure	R,I,U,D, lambda, CGI	truth-status or rebuild	No truth-status without D

10. Маршруты публикации

Publication route map



The atlas does not replace the database; it indexes, explains, and publishes it.

route_id	target	path_or_location	artifact_type	status
ROUTE-01	site	/ru/klt-rbd/chemistry/atlas-v1-1.html	site-ready HTML/MD	ready
ROUTE-02	monograph	Том II / Приложение CHEM	DOCX/PDF atlas	ready
ROUTE-03	database	KLT-RBD-CHEM SQLite + CSV	deposable data layer	ready
ROUTE-04	xlsx-dashboard	табличный навигатор	Excel workbook	ready
ROUTE-05	rbd-core	RBD source layer	v1.0 legacy included	ready
ROUTE-06	rospatent-db	описание базы данных	future registration appendix	candidate

ROUTE-07	lab-protocol	sample-to-evidence workflow	workflow table + gate rules	ready
ROUTE-08	public-summary	короткая публикационная аннотация	README/site block	ready

11. Source binding

binding_id	source	role	section	class
SRC-BIND-01	monograph5_0_ru.pdf	C@C -> Reper -> lambda/CGI ядро	SEC-01	core
SRC-BIND-02	PILOT01_PREPRINT_RU_FINAL.pdf	D-gate: domain + sufficient foundation	SEC-07	audit
SRC-BIND-03	Вся химия в 50 таблицах.pdf	таблицы строения атома, реакций, pH, равновесий	SEC-04	chem-reference
SRC-BIND-04	journal.pdf	химия как прикладная редукция ФОС	SEC-01	FOS-reduction
SRC-BIND-05	KLT_RBD_CHEM INTEGRATED LAB KNOWLEDGE_GRAPH_v1_0_PACKAGE.zip	legacy source-of-truth для v1.1	APP-A	legacy

12. QA-протокол

qa_id	check	status	note
QA-v1-1-001	legacy v1.0 package copied	PASS	source-of-truth included
QA-v1-1-002	atlas sections >= 12	PASS	13 sections
QA-v1-1-003	table map populated	PASS	10 tables
QA-v1-1-004	figure map populated	PASS	6 figures
QA-v1-1-005	publication routes populated	PASS	8 routes
QA-v1-1-006	Evidence-D layer inherited	PASS	58 evidence rows from v1.0
QA-v1-1-007	Gap rules inherited	PASS	18 gap rows from v1.0
QA-v1-1-008	CGI rebuild rules inherited	PASS	12 cgi rows from v1.0
QA-v1-1-009	DOCX/PDF atlas generated	PASS	DOCX rendered to 7 pages; PDF exported
QA-v1-1-010	ZIP integrity	PASS	ZIP integrity verified by unzip -t

Приложение А. Словарь

term	definition
C@C_chem	химическое событие@состояние: объект фиксируется как акт и состояние одновременно
Rep_chem	четвёрка (R,I,U;D), где D является достаточным основанием
Evidence-D	измерительное, источниковое или протокольное основание для химического утверждения
Gap	локальный дефект домена, основания, формулы, баланса, среды или метода
CGI	индекс разрыва связности; при CGI > 1 требуется пересборка
Publication Atlas	публикационная карта базы: разделы, таблицы, диаграммы, маршруты и QA

Приложение В. Состав файлов

Пакет включает DOCX, PDF, Excel, SQLite, CSV-таблицы, PNG-диаграммы, README, site-ready Markdown/HTML, MANIFEST_v1_1.json, SHA256SUMS.txt и legacy-файлы v1.0.