The theoretical derivation process presented here is a continuation and supplementary explanation of Section 4 - Illustrative Example in the article.

For the first functional scenario:

$$T_1 := x \leq 0,\ D_1 := n = 0$$

Let's take $x = -10$ as an example:

The actual execution path of the program is:

$$\begin{gathered} sum = 0; \\ n = 0; \\ \neg(sum < x) \end{gathered}$$

The backward derivation process of Hoare logic is as follows:

$$\begin{gathered} \{n = 0\} \\ \neg(sum < x) \\ \{n = 0 \wedge \neg(sum < x)\} \\ n = 0 \\ \{0 = 0 \wedge \neg(sum < x)\} \\ sum = 0 \\ \{0 = 0 \wedge \neg(0 < x)\} \\ T \wedge Ct \Rightarrow D' := x \leq 0 \wedge !(0 < x) \Rightarrow (0 = 0) \end{gathered}$$

That is to prove

$$x \leq 0 \wedge !(0 < x) \Rightarrow (0 = 0)$$

is a tautology, which is obviously true.

For the first functional scenario: $T_1 := x \leq 0,\ D_1 := n = 0$

Let's take $x = -10$ as an example:

The actual execution path of the program is:

$$\begin{gathered} sum = 0; \\ n = 0; \\ \neg(sum < x) \end{gathered}$$

The derivation process of Hoare logic is as follows:

$$\{n = 0\}$$
$$\neg(sum < x)$$
$$\{n = 0 \land \neg(sum < x)\}$$
$$n = 0$$
$$\{0 = 0 \land \neg(sum < x)\}$$
$$sum = 0$$
$$\{0 = 0 \land \neg(0 < x)\}$$

$T \land Ct \Rightarrow D' := x \leq 0 \land !(0 < x) \Rightarrow (0 = 0)$

That is to prove $x \leq 0 \land !(0 < x) \Rightarrow (0 = 0)$ is a tautology, which is obviously true.

For the second functional scenario:

$$T_2 := x > 0,\ D_2 := \frac{(n-1)^2 n^2}{4} < x \leq \frac{n^2(n+1)^2}{4}$$

Let's take $x = 66$ as an example:

The actual execution path of the program is:

$$sum = 0;$$
$$n = 0;$$
$$sum < x$$
$$n = (n) + 1$$
$$sum = sum + ((n) * (n) * (n))$$
$$sum < x$$
$$n = (n) + 1$$
$$sum = sum + ((n) * (n) * (n))$$
$$sum < x$$
$$n = (n) + 1$$
$$sum = sum + ((n) * (n) * (n))$$
$$sum < x$$
$$n = (n) + 1$$
$$sum = sum + ((n) * (n) * (n))$$
$$\neg(sum < x)$$

The derivation process of Hoare logic is as follows:

$$\{((n) - 1) * (n) * ((n) - 1) * (n)/4 < x \land (n) * ((n) + 1) * (n) * ((n) + 1)/4 >= x'\}$$
$$\neg(sum < x)$$
$$\{((n) - 1) * (n) * ((n) - 1) * (n)/4 < x \land (n) * ((n) + 1) * (n) * ((n) + 1)/4 >= x' \land \neg(sum < x)\}$$
$$sum = sum + ((n) * (n) * (n))$$
$$\{((n) - 1) * (n) * ((n) - 1) * (n)/4 < x \land (n) * ((n) + 1) * (n) * ((n) + 1)/4 >= x'$$
$$\land \neg(sum + ((n) * (n) * (n)) < x)\}$$
$$n = (n) + 1$$
$$\{(((n) + 1) - 1) * ((n) + 1) * (((n) + 1) - 1) * ((n) + 1)/4 < x \land$$
$$((n) + 1) * (((n) + 1) + 1) * ((n) + 1) * (((n) + 1) + 1)/4 >= x \land$$

$$\neg(sum + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) < x)\}$$

$$(sum < x)$$

$$\{(((n)+1)-1) * ((n)+1) * (((n)+1)-1) * ((n)+1)/4 < x \wedge$$
$$((n)+1) * (((n)+1)+1) * ((n)+1) * (((n)+1)+1)/4 >= x \wedge$$
$$\neg(sum + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) < x) \wedge (sum < x)\}$$

$$sum = sum + ((n) * (n) * (n))$$

$$\{(((n)+1)-1) * ((n)+1) * (((n)+1)-1) * ((n)+1)/4 < x \wedge$$
$$((n)+1) * (((n)+1)+1) * ((n)+1) * (((n)+1)+1)/4 >= x \wedge$$
$$\neg(sum + ((n) * (n) * (n)) + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) < x) \wedge$$
$$(sum + ((n) * (n) * (n)) < x)\}$$

$$n = (n) + 1$$

$$\{((((n)+1)+1)-1) * (((n)+1)+1) * ((((n)+1)+1)-1) * (((n)+1)+1)/4 < x \wedge$$
$$(((n)+1)+1) * ((((n)+1)+1)+1) * (((n)+1)+1) * ((((n)+1)+1)+1)/4 >= x \wedge$$
$$\neg(sum + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) + ((((n)+1)+1) * (((n)+1)+1) * (((n)+1)+1)) < x)$$
$$\wedge(sum + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) < x)\}$$

$$(sum < x)$$

$$\{((((n)+1)+1)-1) * (((n)+1)+1) * ((((n)+1)+1)-1) * (((n)+1)+1)/4 < x \wedge$$
$$(((n)+1)+1) * ((((n)+1)+1)+1) * (((n)+1)+1) * ((((n)+1)+1)+1)/4 >= x \wedge$$
$$\neg(sum + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) + ((((n)+1)+1) * (((n)+1)+1) * (((n)+1)+1)) < x)$$
$$\wedge(sum + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) < x) \wedge (sum < x)\}$$

$$sum = sum + ((n) * (n) * (n))$$

$$\{((((n)+1)+1)-1) * (((n)+1)+1) * ((((n)+1)+1)-1) * (((n)+1)+1)/4 < x$$
$$\wedge(((n)+1)+1) * ((((n)+1)+1)+1) * (((n)+1)+1) * ((((n)+1)+1)+1)/4 >= x$$
$$\wedge\neg(sum + ((n) * (n) * (n)) + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) +$$
$$((((n)+1)+1) * (((n)+1)+1) * (((n)+1)+1)) < x)$$
$$\wedge(sum + ((n) * (n) * (n)) + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) < x)$$
$$\wedge(sum + ((n) * (n) * (n)) < x)\}$$

$$n = (n) + 1$$

$$\{(((((n)+1)+1)+1)-1) * ((((n)+1)+1)+1) * (((((n)+1)+1)+1)-1)$$
$$((((n)+1)+1)+1)/4 < x \wedge ((((n)+1)+1)+1) * (((((n)+1)+1)+1)+1)$$
$$((((n)+1)+1)+1) * (((((n)+1)+1)+1)+1)/4 >= x$$
$$\wedge\neg(sum + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) + ((((n)+1)+1) * (((n)+1)+1)$$
$$(((n)+1)+1)) + (((((n)+1)+1)+1) * ((((n)+1)+1)+1) * ((((n)+1)+1)+1)) < x)$$
$$\wedge(sum + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) + ((((n)+1)+1) * (((n)+1)+1) * (((n)+1)+1)) < x)$$
$$\wedge(sum + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) < x)\}$$

$$(sum < x)$$

$$\{(((((n)+1)+1)+1)-1) * ((((n)+1)+1)+1) * (((((n)+1)+1)+1)-1)$$
$$((((n)+1)+1)+1)/4 < x \wedge ((((n)+1)+1)+1) * (((((n)+1)+1)+1)+1)$$
$$((((n)+1)+1)+1) * (((((n)+1)+1)+1)+1)/4 >= x$$
$$\wedge\neg(sum + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) + ((((n)+1)+1) * (((n)+1)+1)$$
$$(((n)+1)+1)) + (((((n)+1)+1)+1) * ((((n)+1)+1)+1) * ((((n)+1)+1)+1)) < x)$$
$$\wedge(sum + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) + ((((n)+1)+1) * (((n)+1)+1) * (((n)+1)+1)) < x)$$
$$\wedge(sum + (((n)+1) * ((n)+1) * ((n)+1)) < x) \wedge (sum < x)\}$$

$$sum = sum + ((n) * (n) * (n))$$

$$\{(((((n) + 1) + 1) + 1) - 1) * ((((n) + 1) + 1) + 1) * (((((n) + 1) + 1) + 1) - 1)$$
$$((((n) + 1) + 1) + 1)/4 < x \land ((((n) + 1) + 1) + 1) * (((((n) + 1) + 1) + 1) + 1)*$$
$$((((n) + 1) + 1) + 1) * (((((n) + 1) + 1) + 1) + 1)/4 >= x$$
$$\land\neg(sum + ((n) * (n) * (n)) + (((n) + 1) * ((n) + 1) * ((n) + 1)) + ((((n) + 1) + 1)*$$
$$(((n) + 1) + 1) * (((n) + 1) + 1)) + (((((n) + 1) + 1) + 1) * ((((n) + 1) + 1) + 1)*$$
$$((((n) + 1) + 1) + 1)) < x) \land (sum + ((n) * (n) * (n)) + (((n) + 1) * ((n) + 1) * ((n) + 1))+$$
$$((((n) + 1) + 1) * (((n) + 1) + 1) * (((n) + 1) + 1)) < x)$$
$$\land(sum + ((n) * (n) * (n)) + (((n) + 1) * ((n) + 1) * ((n) + 1)) < x)$$
$$\land(sum + ((n) * (n) * (n)) < x)\}$$

$$n = (n) + 1$$

$$\{((((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) - 1) * (((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) * ((((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) - 1)*$$
$$(((((n) + 1) + 1) + 1) + 1)/4 < x \land (((((n) + 1) + 1) + 1) + 1)$$
$$((((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) + 1) * (((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) * ((((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) + 1)/4 >= x$$
$$\land\neg(sum + (((n) + 1) * ((n) + 1) * ((n) + 1)) + ((((n) + 1) + 1) * (((n) + 1) + 1) * (((n) + 1) + 1))$$
$$+(((((n) + 1) + 1) + 1) * ((((n) + 1) + 1) + 1) * ((((n) + 1) + 1) + 1)) + ((((((n) + 1) + 1) + 1) + 1)$$
$$(((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) * (((((n) + 1) + 1) + 1) + 1)) < x)$$
$$\land(sum + (((n) + 1) * ((n) + 1) * ((n) + 1)) + ((((n) + 1) + 1) * (((n) + 1) + 1)*$$
$$(((n) + 1) + 1)) + (((((n) + 1) + 1) + 1) * ((((n) + 1) + 1) + 1) * ((((n) + 1) + 1) + 1)) < x)\land$$
$$(sum + (((n) + 1) * ((n) + 1) * ((n) + 1)) + ((((n) + 1) + 1) * (((n) + 1) + 1)$$
$$(((n) + 1) + 1)) < x) \land (sum + (((n) + 1) * ((n) + 1) * ((n) + 1)) < x)\}$$

$$(sum < x)$$

$$\{((((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) - 1) * (((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) * ((((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) - 1)$$
$$(((((n) + 1) + 1) + 1) + 1)/4 < x\land$$
$$(((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) * ((((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) + 1) * (((((n) + 1) + 1)$$
$$+1) + 1) * ((((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) + 1)/4 >= x\land$$
$$\neg(sum + (((n) + 1) * ((n) + 1) * ((n) + 1)) + ((((n) + 1) + 1) * (((n) + 1) + 1)*$$
$$(((n) + 1) + 1)) + (((((n) + 1) + 1) + 1) * ((((n) + 1) + 1) + 1) * ((((n) + 1) + 1) + 1))+$$
$$((((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) * (((((n) + 1) + 1) + 1) + 1) * (((((n) + 1) + 1) + 1)$$
$$+1)) < x) \land (sum + (((n) + 1) * ((n) + 1) * ((n) + 1)) + ((((n) + 1) + 1)$$
$$*(((n) + 1) + 1) * (((n) + 1) + 1)) + (((((n) + 1) + 1) + 1) * ((((n) + 1) + 1) + 1)*$$
$$((((n) + 1) + 1) + 1)) < x) \land (sum + (((n) + 1) * ((n) + 1)*$$
$$((n) + 1)) + ((((n) + 1) + 1) * (((n) + 1) + 1) * (((n) + 1) + 1)) < x)$$
$$\land(sum + (((n) + 1) * ((n) + 1) * ((n) + 1)) < x) \land (sum < x)\}$$

$$n = 0$$

$$\{((((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) - 1) * (((((0) + 1) + 1) + 1) + 1)*$$
$$((((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) - 1) * (((((0) + 1) + 1) + 1) + 1)/4 < x\land$$
$$(((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) * ((((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) + 1) * (((((0) + 1) + 1)$$
$$+1) + 1) * ((((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) + 1)/4 >= x\land$$
$$\neg(sum + (((0) + 1) * ((0) + 1) * ((0) + 1)) + ((((0) + 1) + 1) * (((0) + 1) + 1)*$$
$$(((0) + 1) + 1)) + (((((0) + 1) + 1) + 1) * ((((0) + 1) + 1) + 1) * ((((0) + 1) + 1) + 1))+$$
$$((((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) * (((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) * (((((0) + 1) + 1)$$
$$+1) + 1)) < x) \land (sum + (((0) + 1) * ((0) + 1) * ((0) + 1))$$

$$+((((0)+1)+1)*(((0)+1)+1)*(((0)+1)+1))+(((((0)+1)+1)+1)$$
$$((((0)+1)+1)+1)*((((0)+1)+1)+1))<x)\land$$
$$(sum+(((0)+1)*((0)+1)*((0)+1))+((((0)+1)+1)*$$
$$(((0)+1)+1)*(((0)+1)+1))<x)\land$$
$$(sum+(((0)+1)*((0)+1)*((0)+1))<x)\land(sum<x)\}$$

$$sum=0$$

$$\{((((((0)+1)+1)+1)+1)-1)*(((((0)+1)+1)+1)+1)*((((((0)+1)+$$
$$1)+1)+1)-1)*(((((0)+1)+1)+1)+1)/4<x\land$$
$$(((((0)+1)+1)+1)+1)*((((((0)+1)+1)+1)+1)+1)*$$
$$(((((0)+1)+1)+1)+1)*((((((0)+1)+1)+1)+1)+1)/4>=x\land$$
$$\lnot(0+(((0)+1)*((0)+1)*((0)+1))+((((0)+1)+1)*(((0)+1)+1)*$$
$$(((0)+1)+1))+(((((0)+1)+1)+1)*((((0)+1)+1)+1)*$$
$$((((0)+1)+1)+1))+((((((0)+1)+1)+1)+1)*$$
$$(((((0)+1)+1)+1)+1)*(((((0)+1)+1)+1)+1))<x)\land$$
$$(0+(((0)+1)*((0)+1)*((0)+1))+((((0)+1)+1)*(((0)+1)+1)$$
$$(((0)+1)+1))+(((((0)+1)+1)+1)*((((0)+1)+1)+1)$$
$$((((0)+1)+1)+1))<x)\land(0+(((0)+1)$$
$$((0)+1)*((0)+1))+((((0)+1)+1)*(((0)+1)+1)*(((0)+1)+1))<x)$$
$$\land(0+(((0)+1)*((0)+1)*((0)+1))<x)\land(0<x)\}$$

$$T\land Ct\Rightarrow D':=$$
$$x>0\ \land\lnot(0+(((0)+1)*((0)+1)*((0)+1))+$$
$$((((0)+1)+1)*(((0)+1)+1)*(((0)+1)+1))+(((((0)+1)+1)+1)$$
$$((((0)+1)+1)+1)*((((0)+1)+1)+1))+((((((0)+1)+1)+1)+1)*$$
$$(((((0)+1)+1)+1)+1)*(((((0)+1)+1)+1)+1))<x)\land(0+(((0)+1)$$
$$((0)+1)*((0)+1))+((((0)+1)+1)*(((0)+1)+1)*(((0)+1)+1))$$
$$+(((((0)+1)+1)+1)*((((0)+1)+1)+1)*((((0)+1)+1)+1))<x)\land$$
$$(0+(((0)+1)*((0)+1)*((0)+1))+((((0)+1)+1)*(((0)+1)+1)*(((0)+1)+1))<x)\land$$
$$(0+(((0)+1)*((0)+1)*((0)+1))<x)\land(0<x)$$
$$\Rightarrow((((((0)+1)+1)+1)+1)-1)*(((((0)+1)+1)+1)+1)*$$
$$((((((0)+1)+1)+1)+1)-1)*(((((0)+1)+1)+1)+1)/4<x\land$$
$$(((((0)+1)+1)+1)+1)*((((((0)+1)+1)+1)+1)+1)*$$
$$(((((0)+1)+1)+1)+1)*((((((0)+1)+1)+1)+1)+1)/4>=x$$

To prove $T\land Ct\Rightarrow D'$ is a tautology.

That is equivalent to proving that the formula $T\land Ct\land\lnot D'$ is unsatisfiable.

After solving with the constraint solver, it can be determined that the formula is unsatisfiable.

If we change the code $sum<x$ into $sum<=x$:

The logical expression will become:

$$
\begin{gathered}
T \wedge Ct \Rightarrow D' := \\
x > 0 \ \wedge \neg(0 + (((0) + 1) * ((0) + 1) * ((0) + 1)) + \\
((((0) + 1) + 1) * (((0) + 1) + 1) * (((0) + 1) + 1)) + (((((0) + 1) + 1) + 1) \\
((((0) + 1) + 1) + 1) * ((((0) + 1) + 1) + 1)) + ((((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) * \\
(((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) * (((((0) + 1) + 1) + 1) + 1)) <= x) \wedge (0 + (((0) + 1) \\
((0) + 1) * ((0) + 1)) + ((((0) + 1) + 1) * (((0) + 1) + 1) * (((0) + 1) + 1)) \\
+(((((0) + 1) + 1) + 1) * ((((0) + 1) + 1) + 1) * ((((0) + 1) + 1) + 1)) <= x) \wedge \\
(0 + (((0) + 1) * ((0) + 1) * ((0) + 1)) + ((((0) + 1) + 1) * (((0) + 1) + 1) * (((0) + 1) + 1)) < x) \wedge \\
(0 + (((0) + 1) * ((0) + 1) * ((0) + 1)) <= x) \wedge (0 <= x) \\
\Rightarrow ((((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) - 1) * (((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) * \\
((((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) - 1) * (((((0) + 1) + 1) + 1) + 1)/4 < x \wedge \\
(((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) * ((((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) + 1) * \\
(((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) * ((((((0) + 1) + 1) + 1) + 1) + 1)/4 >= x
\end{gathered}
$$

which is satisfiable and Z3 will produce a counterexample x = 36.