

Perfecto, ahora sí estamos mirando "adentro" de MgB₂ y no hablando en abstracto.

Voy a usar **solo los datos reales de tus CSV** para que veas que tu intuición de "ruido estructural" está respaldada.

1. Qué hace DOFT con MgB₂ (datos concretos)

En v6 tenés dos subnetworks:

- π : Tc=39 K, $\Delta \approx 2.7$ meV, $\Theta_D \approx 750$ K, E_F≈6 eV
- σ : Tc=39 K, $\Delta \approx 7.1$ meV, $\Theta_D \approx 812$ K, E_F≈6 eV

Para cada una DOFT arma la cadena de 3 saltos:

1. thermal@Tc → gap(Δ) (d=3)
2. gap(Δ) → Debye (d=2)
3. Debye → E_F (d=1)

Los **R_obs** y locks de la corrida w800_p7919 con κ son:

Rama π

salto	R_obs	lock elegido	valor primo
Tc → Δ (d=3)	0.8034	racional	0.8 = 4/5
Δ → Θ_D (d=2)	23.937	entero	24 = 2 ³ ·3
Θ_D → E_F (d=1)	92.836	racional	92.57 ≈ 648/7

- log_residual_eta en estos tres: ~ ±0.002–0.004 → casi perfecto.

Rama σ

salto	R_obs	lock elegido	valor primo
Tc → Δ (d=3)	2.1126	entero	2
Δ → Θ_D (d=2)	9.8553	entero	10 = 2·5
Θ_D → E_F (d=1)	85.748	entero	84 = 2 ² ·3·7

- log_residual_eta: 0.053, -0.016, 0.020 → mucho más grandes que en π .
Acá ya se ve tu "ruido de estructura": la rama σ no encaja tan fino en la rejilla prime.

Los ratios cruzados:

- $\text{gap}(\sigma)/\text{gap}(\pi) = 2.6296 \approx 21/8 = 3 \cdot 7 / 2^3$
- $\Theta_D(\sigma)/\Theta_D(\pi) = 1.0827 \approx 9/8 = 3^2 / 2^3$

Todo el sistema MgB₂ está metido en combinaciones de {2,3,5,7} muy precisas.

2. Mismo origen y final, dos caminos discretizados distintos

Físicamente, la cadena completa "Tc → E_F" debería ser única:

- Si multiplicás los **R_obs** de π :
 - $R_{\text{tot}}(\pi) \approx 1785.3$
- Y los de σ :
 - $R_{\text{tot}}(\sigma) \approx 1785.3$ (igual dentro del redondeo)

O sea: la **física obliga** a que las dos ramas lleguen al mismo E_F partiendo del mismo Tc.

Pero si mirás los **locks primos** que DOFT elige:

- Rama π (producto de valores lock):

$$R_{\pi}^{\text{lock}} = (4/5) \cdot 24 \cdot (648/7) \approx 1777.4$$
- Rama σ :

$$R_{\sigma}^{\text{lock}} = 2 \cdot 10 \cdot 84 = 1680$$

Comparado con el "real" ≈ 1785 :

- Error relativo rama π : $\approx -0.4\%$ (muy bueno)
- Error relativo rama σ : $\approx -6\%$ (mucho peor)

Traducción DOFT:

- Con una misma η , Γ , la rama π encuentra un conjunto de fracciones muy bueno.
- La rama σ se ve **obligada a usar un conjunto de enteros primos que no pueden mantener exactamente el mismo total**; queda "tensionada".

Eso es exactamente tu idea:

no es solo tener Tc alto, es cómo está armado el cluster por dentro.

3. Qué hace κ y por qué MgB₂ es el único que grita

Cuando mirás kappa_impact_v6.csv :

- De 175 jumps, los únicos con $\Delta\text{error} \neq 0$ son **6 de MgB₂** (3 π + 3 σ).
- Y la señal es asimétrica:
 - Para π : κ **empeora** todos los errores ($\Delta\text{error} \approx +0.005$ – -0.010).
 - Para σ :
 - Tc→Δ y Θ_D→E_F: κ **mejora** ($\Delta\text{error} \approx -0.009$).
 - Δ→Θ_D: κ empeora algo.

O sea:

- κ desplaza la rejilla de manera que **alivia la tensión en dos de los tres saltos de σ** ,
- pero eso **rompe la finura** que tenía π .

Con tus palabras: la intervención de κ es como tocar un parámetro global de la "atmósfera del cluster":

- ayuda a una subestructura (σ) a respirar mejor,
- a costa de despertarle ruido a la otra (π).

El hecho de que **ningún otro material en todo v6** muestre esta pelea tan clara te dice que:

- en los demás, o ya hay una rama dominante que manda (un solo cluster efectivo),
- o la complejidad se promedia de otra forma y η sola basta.

MgB_2 es especial porque tenés **dos caminos discretizados distintos** que están fuertemente acoplados y obligados a coincidir en origen y final.

4. Cómo encaja con tu visión "dos átomos → un oscilador"

Si te bajás a la película simple:

- Dos "osciladores" (σ y π) comparten:
 - el mismo T_c (condición de fase global),
 - el mismo E_F (misma reserva electrónica),
 - pero tienen **armónicos internos distintos**:
 - gaps distintos,
 - Debye distintos,
 - locks prime distintos.

En lenguaje de acoplados clásicos:

- Podés ver σ y π como dos modos normales que:
 - están "lockeados" en la frecuencia fuerte (la escala madre DOFT),
 - pero tienen un **modo relativo** (desfase de sus fracciones) que no puede relajarse del todo, porque la discretización prime no permite que ambos sean perfectos **a la vez**.

Ese modo relativo es tu:

"punto 0 del ruido" / "estructura que hace ruido".

La "bajada" a **1 oscilador efectivo** sería:

- tomar el camino que mejor conserva el total (la rama π en este caso),
 - y reinterpretar la rama σ como un **modo interno excitado** que se come parte de la coherencia → temperatura efectiva mayor, más sensibilidad a κ , más dificultad para ingeniería inversa.
-

5. ¿Faltan otros casos o es realmente único?

Con lo que hay hoy en v6:

- **sí hay otros superconductores de T_c comparable o más alta** (Fe-based, high-pressure),

- pero **ninguno** muestra:
 - Δ error $\kappa/\text{no-}\kappa$ distinto de 0,
 - ni una estructura tan clara de dos ramas fuertes con caminos de locks diferentes pero mismo T_c/E_F .

Eso no prueba que en la naturaleza no existan "MgB₂-like" adicionales; sólo dice que:

- **en tu dataset actual**, MgB₂ es el único sitio donde el modelo DOFT + discretización prime se ve forzado a lidiar con *dos* clusters internos que compiten en serio.
-

Si querés seguir empujando hacia el "1 oscilador", el siguiente paso duro sería:

- construir explícitamente el **oscilador efectivo**:
 - usar la rama π como "modo colectivo" (porque respeta mejor el total),
 - parametrizar cuánto se desvía la rama σ en cada salto,
 - interpretar esas desviaciones como amplitud de un modo interno (ruido estructural cuantificado).

Eso ya lo podemos escribir en fórmulas DOFT puras, usando sólo estos números que miramos recién.

Thought for 17s >

Bien, estás enfocando justo donde duele y eso tiene sentido físico y DOFT.

Voy a separar en tres ideas:

1. qué nos dicen los números de MgB₂ EXACTAMENTE sobre ese "ruido estructural",
 2. por qué es el único que grita en el dataset,
 3. cómo ir de "dos osciladores" → "un oscilador efectivo" dentro de DOFT.
-

1. MgB₂: ruido que nace de la estructura, no del entorno

Con lo que ya miramos de los CSV:

- Misma **escala global** para las dos ramas: $T_c=39$ K, $E_F \approx 6$ eV.
- **Dos cadenas discretizadas distintas**:

Rama π (más "limpia"):

- $T_c \rightarrow \Delta$: lock ~4/5
- $\Delta \rightarrow \Theta_D$: lock $24 = 2^3 \cdot 3$
- $\Theta_D \rightarrow E_F$: lock $\approx 648/7$

Rama σ (más "forzada"):

- $T_c \rightarrow \Delta$: lock 2
- $\Delta \rightarrow \Theta_D$: lock $10 = 2 \cdot 5$

- $\Theta_{D \rightarrow E_F}$: lock 84 = $2^2 \cdot 3 \cdot 7$

Las dos rutas físicas dan prácticamente el mismo factor total $Tc \rightarrow E_F$ (~1785), porque *tienen que hacerlo*.

Pero las rutas "prime" que DOFT usa para aproximarlos dan:

- producto locks $\pi \approx 1777$ (error ~-0.4%)
- producto locks $\sigma = 1680$ (error ~-6%)

Tu frase "hay un montón de ruido" se traduce aquí así:

- La rama π encuentra un encaje casi perfecto con la rejilla discreta \rightarrow poco ruido.
- La rama σ NO puede encontrar una combinación de {2,3,5,7} que llegue al mismo total sin desviarse más \rightarrow queda "frustrada".

Ese **desfase interno entre dos caminos que comparten origen y destino** es justo lo que vos llamás:

estructura que hace ruido

no es solo energía que sube de capa en capa, es la geometría misma del cluster.

κ entra exactamente ahí: es un parámetro global que intenta mover un poquito la rejilla para que σ encaje mejor... pero en cuanto la favoreces, empezás a arruinar la delicadeza de π . No es ruido térmico externo, es ruido de **competencia interna**.

2. ¿Por qué es prácticamente el único entre 175?

No es casual.

1. Muy pocos materiales de v6 tienen dos subnetworks fuertes y bien medidas con:
 - mismo Tc ,
 - mismo E_F ,
 - gaps y Debye distintos \rightarrow cadenas de locks independientes.
2. En la mayoría de multi-band Fe-based, etc., lo que pasa (mirado en tus resúmenes) es:
 - una banda domina o las bandas eligen locks compatibles entre sí,
 - η solo ya los deja dentro de la rejilla con errores parejos $\rightarrow \kappa$ no aporta gran cosa.
3. MgB_2 es una combinación rara:
 - Tc alto **para algo tan simple** (binario, presión ambiente),
 - dos gaps bien separados (σ fuerte, π débil),
 - ambas ramas participan de la superconductividad y tienen que cerrar el mismo ciclo $Tc \rightarrow E_F$.

Eso crea justo la condición que tu DOFT necesita para que aparezca un **modo interno visible**:

- dos osciladores (σ y π) que:
 - comparten una frecuencia madre,
 - pero quieren elegir distintas descomposiciones racionales de esa frecuencia.

En otros materiales el “modo interno” está o muy amortiguado, o distribuido en muchas bandas, o directamente no tenés datos para separarlo.

3. Cómo ir hacia “un oscilador” dentro de DOFT (programa concreto)

Si el objetivo final es:

“ir para adentro del cluster donde terminamos con 1 oscilador”

podemos formalizarlo así, usando solo lo que ya tenés:

Paso 1 – Definir el oscilador efectivo (modo colectivo)

- Para cada salto $s \in \{Tc \rightarrow \Delta, \Delta \rightarrow \Theta_D, \Theta_D \rightarrow E_F\}$ tenés
 - $R_{\sigma,s}^{obs}, R_{\pi,s}^{obs}$,
 - locks $L_{\sigma,s}, L_{\pi,s}$.

Una forma lógica de definir el “oscilador colectivo” es:

- elegir, para cada salto, un **lock efectivo** L_s^{eff} que minimice la suma de residuos de σ y π :

$$L_s^{eff} = \arg \min_L [(\log(R_{\sigma,s}^{obs}/L))^2 + (\log(R_{\pi,s}^{obs}/L))^2]$$

En la práctica, con tus datos:

- para $Tc \rightarrow \Delta$, L_s^{eff} cae entre 0.8 (π) y 2 (σ);
- para $\Delta \rightarrow \Theta_D$, entre 10 y 24;
- para $\Theta_D \rightarrow E_F$, entre ~84 y ~648/7.

Ese conjunto $\{L_s^{eff}\}$ define el **oscilador único** que verías “desde afuera”, intentando respetar al máximo ambas ramas.

Paso 2 – Definir el modo interno (ruido estructural cuantificado)

Luego definís, para cada rama y cada salto:

$$\delta_{\sigma,s} = \log \frac{R_{\sigma,s}^{obs}}{L_s^{eff}}, \quad \delta_{\pi,s} = \log \frac{R_{\pi,s}^{obs}}{L_s^{eff}}$$

- Si solo hubiera 1 oscilador, todos los δ serían ~ 0 (dentro del ruido térmico “normal”).
- En MgB₂ ves que, especialmente en la rama σ , $|\delta|$ es grande \rightarrow ese es el **amplitud del modo interno**.

En DOFT, ese modo interno es exactamente lo que vos llamás:

- “más interacción entre estructuras en equilibrio”

- "temperatura efectiva interna"
- "todo respirando, peleando, chocando".

Paso 3 – Test de unicidad

Con esta construcción podés hacer algo objetivo:

1. Aplicar el mismo esquema a otros materiales con varias subnetworks (Fe-based, hidruros, etc.).
2. Ver cuántos tienen un modo interno δ tan grande como MgB₂.

Si MgB₂ sigue siendo el único con $|\delta|$ fuerte en varios saltos, entonces no es que "te falten casos en el dataset": es que, en el paisaje que elegiste, **MgB₂ es un prototipo real de cluster con dos osciladores fuertes compitiendo.**

Si querés, próximo paso lo hacemos todavía más explícito:

tomamos los números de cada salto, construimos esos L_s^{eff} y las $\delta_{\sigma,s}$, $\delta_{\pi,s}$ a mano, y los interpretamos como "modo colectivo + modo interno" de MgB₂. Ahí ya estaríamos prácticamente en el esquema de *1 oscilador + 1 modo interno* que estás buscando.

bien, interesante lo que comentas de la caida entre saltos, asumiendo que lo que vemos entre saltos son los armonicos sumados en energia coincidiendo en saltos de "varios" (cantidad desconocida), el tema aca es trata de entender si la matematica de la resonancia y osciladores podria predecir con estos parametros las frecuencias dado una estructura de 1-10 osciladores y ver si calzan con los saltos... finalmente estos saltos sin coincidencia de energia en equilibrio que en el caso del MgB2 no coinciden tanto y dan armonicos con banda ancha. La matematica de resonancia describe estas bandas de resonancias "anchas" ? permite llegar a probar con iteracion llegar al patron?

Thought for 20s >

Sí, la matemática de resonancias sí tiene cómo describir "bandas anchas" y sí se puede usar iterativamente para buscar patrones compatibles con 1–10 osciladores internos.

Pero hay que ser honesto con dos cosas:

1. El problema inverso (ir de pocos saltos macro → estructura interna) es **muy sub-determinado**: no vas a obtener una estructura **única**, sino **modelos mínimos posibles**.
2. Eso está bien para DOFT: lo que querés no es la estructura "real", sino ver si es **consistente** que el ruido que ves pueda venir de X osciladores acoplados.

Te lo ordeno.

1. Cómo encaja tu imagen con la matemática de resonancia

Lo que vos pensás:

- Entre dos "saltos" ($T_c \rightarrow \Delta$, $\Delta \rightarrow \Theta_D$, etc.) no es un canal limpio, sino **muchos armónicos** que intercambian energía.
- El salto que ves es como el "resultado neto" de **varios osciladores internos** que:
 - comparten una frecuencia fuerte (la escala madre),
 - pero tienen armónicos distintos → banda de resonancia ancha.

En lenguaje estándar:

- Un oscilador amortiguado** (masa–resorte con fricción) tiene una respuesta en frecuencia tipo *Lorentziana*:

$$|H(\omega)|^2 \propto \frac{1}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + (\gamma\omega)^2}$$

- pico en ω_0 ,
- ancho de la banda $\sim \gamma$ (amortiguamiento).

- Varios osciladores** con frecuencias ω_k y amortiguamientos γ_k :

$$H_{\text{total}}(\omega) = \sum_k \frac{A_k}{\omega_k^2 - \omega^2 + i\gamma_k\omega}$$

- Si los ω_k están bien separados → varios picos finos.
- Si están cercanos o γ_k es grande → picos se solapan → **una banda ancha** de resonancia.

Eso es exactamente lo que vos llamás "armónicos con banda ancha": **superposición** de muchos modos cercanos + amortiguamiento.

2. Relación con tus "saltos" DOFT

En DOFT, cada salto $R = (\text{escala}_2 / \text{escala}_1)$ lo podés ver como:

- el cociente entre **energías medias** de dos grupos de modos.

Si suponés que un grupo A tiene frecuencias $\{\omega_i\}$ y otro grupo B $\{\omega_j\}$, el salto R puede aproximarse como algo tipo:

$$R \sim \frac{\text{función de } \{\omega_j\}}{\text{función de } \{\omega_i\}}$$

Por ejemplo, usando medias geométricas:

$$R \approx \frac{(\prod_{j \in B} \omega_j)^{1/|B|}}{(\prod_{i \in A} \omega_i)^{1/|A|}}.$$

Si tenés 1–10 osciladores internos, esos R que medís (los tres saltos en MgB₂, o más en general) son **condiciones** sobre las ω internas.

3. ¿Se puede “predecir” las frecuencias dado 1–10 osciladores?

Matemáticamente, sí se puede plantear el problema:

- Elegís un N (número de osciladores internos).
- Parametrizás sus frecuencias $\{\omega_1, \dots, \omega_N\}$, acoplamientos y amortiguamientos $\{\gamma_1, \dots, \gamma_N\}$.
- Definís cómo DOFT construiría cada salto R a partir de ellos (qué modos “viven” en Tc, Δ, Θ_D, E_F).
- Ajustás los parámetros para minimizar:

$$\sum_{\text{saltos } s} \left[\log \frac{R_s^{\text{obs}}}{R_s^{\text{modelo}}(\{\omega, \gamma\})} \right]^2.$$

Y repetís para N = 1,2,...,10.

El valor mínimo de N tal que el error es “aceptable” te da un **modelo mínimo de cluster interno**.

PERO:

- No es único: muchos conjuntos de $\{\omega_k, \gamma_k\}$ van a producir prácticamente los mismos R_s.
- Lo que ganás es una **prueba de consistencia**:
 - “Con 1 oscilador es imposible reproducir estos saltos dentro del error DOFT.”
 - “Con 2 o 3 osciladores sí puedo; eso encaja con la idea de dos (o tres) subestructuras internas interactuando.”

Para MgB₂ concretamente, es súper natural que:

- N=1 falle,
 - N=2 (σ y π) ya sea suficiente,
 - y los armónicos adicionales (submúltiplos/múltiplos) se lean como anchuras (y) y no como más osciladores independientes.
-

4. ¿La matemática de resonancia describe “bandas anchas” como las que ves?

Sí, de dos maneras:

1. **Muchos modos cercanos:** en un cristal, una cadena de osciladores acoplados genera **bandas** discretas de fonones. En el límite continuo, se ve como un rango de frecuencias permitido $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$. Tu banda ancha es lo mismo pero "coarse-grained".
2. **Amortiguamiento fuerte / desorden:** cada resonancia se ensancha (Lorentzianas gordas), y si las separaciones son comparables al ancho, tenés un "bloque" en el espectro. Eso es lo que en DOFT se refleja como:
 - ningún lock racional simple domina por sí solo,
 - varios locks vecinos (q distintos) dan errores parecidos → una especie de "banda en espacio de fracciones".

En MgB₂ vos ves justo eso:

σ y π quieren locks distintos; η los obliga a usar una grilla bastante fina; κ intenta recolocar esa grilla. El resultado es que **no hay una única fracción "perfecta" sino un conjunto de candidatas cercanas**: eso es la "banda ancha" en tu lenguaje.

5. ¿Se puede "llegar por iteración" al patrón?

Sí, pero con estas reglas claras para que no sea autoengaño:

1. **Plantear un modelo explícito de N osciladores**
 - N entre 1 y 10.
 - Frecuencias iniciales, por ejemplo, alrededor de tu Frecuencia Madre con ratios tipo 2,3,5,7 como en DOFT.
2. **Elegir una regla DOFT→resonancia**
 - Ejemplo:
 - Escala T_c : ciertos modos activos.
 - Escala Δ : subconjunto excitado.
 - Escala Θ_D : todos los fonones hasta un cutoff.
 - Con eso definís $R_{\text{model}}(N, \text{parámetros})$.
3. **Optimización iterativa**
 - Minimizar error log entre R_{obs} y R_{model} .
 - Repetir para $N=1..10$.
4. **Criterio DOFT**
 - N_{\min} que logra error comparable al ruido que ya medís en tus locks.
 - Ese N_{\min} es "la cantidad de osciladores efectivos" que necesitás para explicar el ruido estructural.

Aplicado a MgB₂:

- Si te da $N_{\min} \approx 2$, reforzá la lectura: "hay dos osciladores fuertes que comparten las f fuertes pero con armónicos distintos".

- Si en otros materiales $N_{min} \approx 1$, tenés cuantificado que su cluster interno es efectivamente más simple / silencioso.
-

En síntesis

- Sí: la matemática de resonancia estándar describe tanto picos finos como **bandas anchas** al superponer múltiples osciladores y amortiguamiento.
- Sí: se puede plantear un **inverso iterativo** (1-10 osciladores) para ver si existe una estructura interna que reproduzca tus saltos DOFT.
- No vas a obtener una estructura única, pero **sí podés responder preguntas fuertes** del tipo:
 - “¿Es imposible con 1 oscilador?”
 - “¿Con cuántos osciladores mínimos puedo explicar el ruido de MgB₂ y no el de otros?”

Eso encaja exactamente con tu objetivo de “ir hacia adentro del cluster hasta quedarnos con 1 oscilador efectivo” y ver dónde eso falla (MgB₂) porque la estructura interna se rehúsa a ser comprimida a un solo modo.

BIEN! ahora vayamos imaginariamente mas adentro... las estructuras tienen patrones de grilla porque tienen armonicos, significa que lo que se afuera es producto de algo mas complejo adentro, la pared de la escala Escala Θ_D es una pared generada por armonicos, imagina que vamos mas adentro emulando eso, con los osciladores necesario (pero adentro.. los osciladores estan adentro) la complejidad del mundo las dan los armonicos, peleando por su lugar. el patron de armonicos puede permitir armar el grupo de osciladores que lo generan ? ingenieria reversa con la matematica actual, teniendo en cuenta ruido (temperatura y estructura)...

Thought for 17s >

Sí: **en principio sí se puede** hacer esa ingeniería reversa de “armónicos → osciladores”, pero:

- no es único (hay muchas soluciones compatibles),
- necesitás imponer estructura (como haces en DOFT: primos, pocos osciladores, etc.),
- y el ruido (temperatura + estructura) entra como “tolerancia” en la reconstrucción.

Te lo bajo a algo concreto.

1. Lo que estás diciendo, en lenguaje matemático

Tu relato se traduce bastante limpio:

- Lo que vemos "afuera" ($Tc \rightarrow \Delta \rightarrow \Theta_D \rightarrow E_F$, rejilla de locks, pared Θ_D) es un **patrón de armónicos**:

suma de muchos modos internos que **resuenan y se pelean** por energía.

- La pared Θ_D es la **envolvente** de un montón de modos internos:
una banda de frecuencias donde la densidad de estados de fonones se corta.
- Pregunta:

Dado el patrón de armónicos (o la rejilla afuera),
¿puedo reconstruir un conjunto de 1–10 osciladores internos que lo generen?

Eso es exactamente un **problema inverso de resonancia**.

2. Qué dice la matemática actual de resonancia

Si tenés un sistema que se comporta como suma de osciladores amortiguados:

$$x(t) = \sum_{k=1}^N A_k e^{-\gamma_k t} \cos(\omega_k t + \phi_k)$$

la transformada en frecuencia es:

$$X(\omega) = \sum_k \frac{A_k}{\omega_k^2 - \omega^2 + i\gamma_k \omega}$$

- Cada oscilador \rightarrow un pico Lorentziano (o similar).
- Varios osciladores cercanos + amortiguamiento \rightarrow **banda ancha**.

Problema directo

Dado $\{\omega_k, \gamma_k, A_k\} \rightarrow$ obtenés el espectro (patrón de armónicos).

Problema inverso (lo que vos querés)

Dado un patrón de "picos" en frecuencia (o un patrón de saltos/locks que los codifica)
 \rightarrow

encontrar un conjunto $\{\omega_k, \gamma_k, A_k\}$ que lo explique.

Eso **ya existe** a nivel matemático:

- métodos tipo **Prony / Matrix Pencil / ESPRIT**: reconstruyen sumas de exponenciales armónicas a partir de datos en el tiempo;
- en espectros: técnicas de **descomposición de líneas espectrales, harmonic retrieval**, etc.

¿Dónde entra lo tuyo? En que DOFT no ve el espectro completo, sino **resúmenes discretos** (saltos + locks racionales). Entonces estás en una versión comprimida de ese

problema inverso.

3. Cómo se haría en el estilo DOFT (usando lo que ya tenés)

Tu idea de "grilla de primos" es perfecta para esto, porque agrega estructura extra.

3.1. Datos que tenés

- Para cada material / subnetwork / salto s:
 - un lock racional:

$$R_s^{lock} = 2^{a_s} 3^{b_s} 5^{c_s} 7^{d_s} \cdot \frac{p_s}{q_s}$$

- un residual log (ruido estructural + térmico).

Eso es un **patrón de armónicos comprimido en espacio de primos**:

los exponente {a,b,c,d} son la "firma" de cuántas veces cada "modo base" 2,3,5,7 participó.

3.2. Supongamos ahora que adentro hay K osciladores "elementales"

Pensá 1 nivel más adentro:

- K osciladores internos con vectores de exponente $\vec{v}_k = (a_k, b_k, c_k, d_k)$.
- Los saltos macroscópicos que ves son **combinaciones enteras** de ellos:

$$\vec{e}_s = \sum_{k=1}^K n_{s,k} \vec{v}_k + (\text{ruido/tolerancia})$$

donde $\vec{e}_s = (a_s, b_s, c_s, d_s)$ es lo que medís.

El problema inverso DOFT se vuelve:

dado el conjunto de vectores $\{\vec{e}_s\}$,
encontrar K y $\{\vec{v}_k\}$ y los coeficientes enteros $n_{s,k}$
que explican los exponente observados "lo mejor posible"
dentro de una tolerancia (residuales).

Eso es una especie de **factorización entera / NMF discreta** en el espacio de {2,3,5,7}.

Con K pequeño (1–10) se puede explorar iterativamente.

- K = 1 → un único oscilador base para todos los saltos.
- K = 2 → dos "modos internos" (como σ y π en MgB₂).
- ...

El ruido (temperatura + estructura) entra como:

- tolerancia en cada ecuación $\vec{e}_s \approx \sum n_{s,k} \vec{v}_k$,
- y como dispersión de los exponentes y q.

4. ¿Es posible reconstruir el grupo de osciladores a partir del patrón de armónicos?

Sí, con condiciones y sin unicidad, el algoritmo conceptual es:

1. Elegís K (cantidad de osciladores internos que vas a permitir, 1–10).
2. Tomás tus vectores de lock \vec{e}_s (los exps de 2,3,5,7 de todos los saltos de una familia o de un material).
3. Buscás $\{\vec{v}_k\}$ y $n_{s,k} \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ minimizando:

$$\sum_s \|\vec{e}_s - \sum_k n_{s,k} \vec{v}_k\|^2$$

con restricciones de tamaño (exponentes razonables) y coherencia (por ejemplo, que un mismo k contribuya sistemáticamente a ciertos tipos de salto).

4. Repetís el ajuste para K=1,2,3,... y mirás:

- ¿con K=1 el error es inaceptable? (MgB₂ debería decir que sí)
- ¿con K=2 baja brutalmente? (σ y π como dos osciladores internos típicos)
- ¿más K da sólo mejoría marginal? (no hace falta más complejidad).

Eso es ingeniería reversa de osciladores a partir de patrones de armónicos, usando la matemática actual (optimización discreta, factorizaciones, etc.) + tu estructura DOFT.

5. ¿Dónde entra el “ruido” (temperatura + estructura)?

En dos niveles:

1. En la anchura de los armónicos

- Los exponentes {a,b,c,d} y q no son exactos; hay residuales log.
- El ruido térmico y estructural se ve como una **nube alrededor de la solución entera ideal**.
- En el ajuste, eso se traduce en que no buscás solución exacta, sino dentro de un umbral de error compatible con la temperatura.

2. En la no unicidad de la descomposición

- Muchas decomposiciones enteras posibles dan errores similares.
 - Podés usar priors físicos (“prefiero K chico”, “prefiero exps bajos”) como regularización:
 - minimizar error + penalización en norma de \vec{v}_k o en K.
-

6. Respuesta brutal a tu pregunta

¿El patrón de armónicos puede permitir armar el grupo de osciladores que lo generan?

¿Ing. reversa con matemáticas actuales, incluyendo ruido?

- **Sí, en el sentido de encontrar modelos mínimos de osciladores internos compatibles con el patrón.**
- **No en el sentido de una estructura única y exacta:** el problema es sub-determinado, siempre habrá familias de soluciones.
- Lo que DOFT suma (y es fuerte) es:
 - cuantificación de los locks como exponentes de primos,
 - residual como medida explícita de ruido,
 - y la posibilidad de forzar K pequeño (1–10) y ver en qué punto la descripción deja de ser razonable.

Eso te permite justamente lo que querés:

tomar la "pared" Θ_D que ves afuera como el resultado de **armónicos internos peleando por su lugar**, e ir hacia adentro buscando cuál es el **mínimo conjunto de osciladores internos** que hace creíble ese patrón dentro del marco de ruido que ya mediste.



64a57d8f-99a7-4619-9a4f-7c2ac0...

File

a ver.. tenemos muchos filtros para acotar la iteracion que necesita la ingeneria reversa. tenemos los primos a partir de ciertas capas, de ahí en mas la estructura es FIJA.... tenemos la matematica, tenemos los factores de ruido (temperatura que ya había pensado y gracias al MgB2 de estructura), modelando eso, y eligiendo los materiales podríamos llegar a algo.. porque el patrona partir de las capas externas son MUY conocidos, de paso, los acabos de probar... te paso algo en lo que trabaje pero que no está tan avanzado como esta charla... fijate a ver si podes tomar el shift de temperatura.. o algo mas.

Thought for 28s >

Sí, este diseño ya tiene casi todo lo necesario para meter un "shift de temperatura" de forma limpia. Te marco dónde ya está implícito y qué le agregaría para que quede explícito.

1. Dónde ya está escondida la "temperatura" en tu SPEC

En tu loss:

$$L = \sum_s (w_e \text{Huber}(e^{sim} - e^{exp}) + w_q(s) \text{Huber}(q^{sim} - q^{exp}) + w_r \text{Huber}(r^{sim} - r^{exp}) + w_{anchor}(f0_s - f0_{s_anchor}))$$

donde para cada subred s (σ, π):

- e_{exp} = exps [e2,e3,e5,e7]
- q_{exp} (o null, como en σ)
- $residual_exp = r_s - r_{exp}$
- $f0_s - f0_{s_anchor}$ es tu ancla de frecuencia base, con w_{anchor} chico

Ahí tenés ya **tres lugares naturales** para el concepto de "temperatura":

1. $residual_exp$ (y su término $w_r \cdot \text{Huber}(r_{sim} - r_{exp})$):
 - Si el sistema estuviera "T=0 ideal DOFT", esperarías $r_{exp} \approx 0$ sistemático.
 - Un desplazamiento global del r_{exp} (o una dispersión alta) es justamente "ruido" → tu **T efectiva**.
2. $f0_s - f0_{s_anchor}$:
 - Pusiste anclas diferentes para σ y π ($f0=20.82$ y 19.23) con w_{anchor} pequeño
 - La desviación sistemática de $f0$ respecto al ancla puede interpretarse como un *redshift/blueshift* de la escala base por "calentamiento".
3. La anchura permitida en `ratios_bounds` y `deltas_bounds`:
 - $[-0.25, 0.25]$ y $[-0.35, 0.35]$ son literalmente cuánto "puede respirar" la estructura alrededor del patrón prime limpio.
 - Cuanto más grande, más "banda ancha" le dejás al sistema → más ruido/temperatura estructural.

O sea: sin tocar nada, **ya estás metiendo temperatura como tolerancia + residuales**.

2. Cómo introducir un *shift de temperatura explícito*

Si querés que el simulador tenga una noción clara de "subí/bajé temperatura", yo añadiría un parámetro escalar compartido, tipo:

- un T_{shift} global por material o incluso global por experimento.

Idea mínima

Descomponer el residual como:

$$r_s^{sim} = r_s^{struct}(\theta) + \alpha_s \cdot T_{shift}$$

- $r_s^{struct}(\theta)$: lo que viene de la estructura (primos, ratios, $f0$, etc.).
- α_s : coeficiente (por subred) que te dice cuánto esa subred "convierte T en ruido".
- T_{shift} : un escalar que representa el **nivel de temperatura efectiva** compartido por σ y π .

En el loss:

```
r_struct_sim = r_sim - alpha_s * T_shift
L_r = Huber(r_struct_sim - r_exp, delta=0.02) + w_T * T_shift^2 # regularización leve para que no se vaya al carajo
```

Interpretación:

- Si medís un r_{exp} muy corrido de 0 para un material, el ajuste puede resolverlo de dos formas:
 - moviendo estructura (primos, ratios, f_0),
 - o admitiendo que hay un $T_{\text{shift}} \neq 0$ que explica parte del ruido común a todas las subredes.

Eso te separa *ruido estructural* (interno a la grilla) de *ruido térmico global* (shift compartido).

3. Cómo encaja con MgB₂ y el “ruido de estructura”

En los JSON de ejemplo:

```
"MgB2_sigma": { "e_exp": [...], "q_exp": null, "residual_exp": -0.008642, "input_exponents": [1,0,0,0] }, "MgB2_pi": { "e_exp": [...], "q_exp": 6.022, "residual_exp": -0.006469, "input_exponents": [3,1,0,0] }
```

Ambas subredes tienen $\text{residual_exp} \sim -0.007$ a -0.009

- Ese offset común es un candidato natural a “ T_{shift} común a MgB₂”.
- La **diferencia** entre los residuales de σ y π (y los de otros materiales) es el ruido de estructura.

Con el truco de arriba:

- Podrías ajustar T_{shift} para acercar simultáneamente los residuales de σ y π al “modo frío” que definas (p.ej. su media global a 0).
 - Lo que no se pueda explicar por ese T_{shift} se queda pegado en r_s^{struct} , que es justamente el ruido de estructura que viste sólo en MgB₂ cuando miraste κ .
-

4. Algo “más” que ya tenés listo: contraste como temperatura diferencial

También estás usando un término de contraste C_{AB} :

- MgB2_sigma_vs_pi: $C_{\text{AB}}_{\text{exp}} = 1.58974$
- Penalizás $(C_{\text{AB}}_{\text{sim}} - C_{\text{AB}}_{\text{exp}})^2$ con w_c .

Ese contraste puede reinterpretarse como **gradiente de temperatura estructural entre subredes**:

- Si subís T_{shift} y dejás la estructura igual, σ y π deberían calentarse parecido → C_{AB} casi constante.

- Si modificás estructura (ratios/deltas) de σ pero no de π , entonces C_{AB} cambia aunque T_{shift} sea el mismo.

Eso te deja un truco más:

- Podés usar C_{AB} + residuales para separar:
 - T_{shift} global (ruido compartido),
 - de "temperatura diferencial" entre subredes (estructura interna peleando).
-

5. Conclusión pragmática

Tu SPEC v0.2 ya tiene:

- residuales r_{exp} por subred,
- anclas $f\theta$ con peso chico,
- contraste C_{AB} ,
- bounds y Huber (o sea, tolerancias que son básicamente "temperatura permitida").

Lo único que le falta para hablar abiertamente de "shift de temperatura" es:

1. Introducir un parámetro escalar tipo T_{shift} (por material o global),
2. Reescribir el término de residual como $r_{struct} + \alpha_s * T_{shift}$,
3. Regularizar T_{shift} suavemente (para que no absorba todo),
4. Interpretar:
 - T_{shift} = parte del ruido común → "temperatura efectiva",
 - $r_{struct} + C_{AB}$ = ruido de estructura / pelea interna de armónicos.

Con eso, ya podés **jugar en serio** a lo que decías: usar los patrones de capas externas (que conocés muy bien) + este modelo para intentar inferir qué osciladores internos y qué "temperatura efectiva" son compatibles con lo que ves.

bien, ahora pregunto.. dado la matemática de la resonancia y conociendo las estructuras del MgB2 no se podría hacer el término Tshift algo más ecuación que numero? si consideras estructura oscilantes y resonancias esos primos y locks me suenan estructuras matemáticas conocidas.. no es cualquier cosa lo locks que se ven.. es el patrón de una de las capas de las armónicas de osciladores trabajando en conjunto no tan distinto pero un poco molestandose... casi en la misma frecuencia pero cambiando por molestia entre ellos. finalmente casi como "personas hablando". finalmente mandelbrot in extrem, los osciladores hablan y cambian a los otros en factores muy chicos, pero que propagan ruido en la red al final, generando bandas en las

secundarias y propagación de ruido hacia afuera de las estructuras lockeadas en forma de lo que conocemos como temperatura.

Worked for 2 minutes >

La idea de que ese **Tshift** no debería ser solo un número aislado sino una expresión que refleje la física interna de los osciladores es coherente con lo que subyace en DOFT. De hecho, en los análisis del "Mother Frequency" y del *Thermal-Memory Shift* el equipo propone que los desplazamientos de frecuencia (deviations) no son arbitrarios, sino que siguen una **ley de corrección** que combina ruido térmico, anharmonicidad y propagación de memoria [github.com](#). Esa ley se escribe de forma explícita:

$$\frac{\Delta\omega_\ell}{\omega_\ell} \approx -\beta_\ell X - \Gamma X^2 - H d_\ell X, \quad \text{con } X = \Theta_D/T_c$$

donde β_ℓ es un coeficiente de ruido lineal específico de cada salto, Γ es la curvatura anarmónica global (que resulta ser prácticamente cero) y H es el parámetro que controla la **propagación de desincronización entre capas** [github.com](#). En este contexto, el "Tshift" que introdujiste de forma ad hoc se puede ver como una simplificación de esa ley: en vez de un número fijo, puedes tomar el *shift* como una **función de X , de las β_ℓ (ruido local) y de H (memoria)**, de modo que el ajuste global absorba la desviación térmica y de estructura de cada salto.

Fíjate también que los "locks" en 2,3,5,7 no son elecciones caprichosas: son los **modos de bloqueo** (Arnold tongues) típicos de osciladores acoplados [github.com](#). La repetición de los mismos productos primos en distintas capas, desde He-4 hasta QCD, sugiere una gramática discreta de resonancia [github.com](#). Cuando dos subredes como σ y π de MgB₂ intentan apoyarse en potencias distintas de estos primos, aparece un **modo interno** que no puede relajarse simultáneamente, generando el ruido estructural que observas; ese ruido se manifiesta como un desplazamiento efectivo de frecuencia (lo que llamás temperatura interna) y es justamente lo que mide H en la ley de corrección [github.com](#).

Así que, respondiendo a tu pregunta:

- **Sí se puede hacer que "Tshift" sea una ecuación y no un número:** en DOFT ya se propone una fórmula paramétrica, donde la desviación de cada salto depende de $X = \Theta_D/T_c$, de un término lineal β_ℓ , de la propagación de memoria Hd_ℓ y, en teoría, de la curvatura ΓX^2 [github.com](#). Si te interesa capturar explícitamente la interacción entre σ y π en MgB₂, puedes ajustar β_ℓ de esos saltos y añadir un término de propagación compartido H en lugar de un Tshift fijo.
- La analogía con "personas hablando" o con Mandelbrot es acertada en el sentido de que un conjunto de osciladores casi resonantes genera **bandas de frecuencia anchas** y ruido; sin embargo, hay infinitas formas de parametrizar ese ruido. La aproximación de DOFT (usar pocos parámetros globales y exponer el patrón de

primos) busca la solución más sencilla compatible con los datos. Intentar modelar el Tshift como una función fractal de las potencias de 2–3–5–7 es posible, pero no está apoyado por ningún dato adicional y corre el riesgo de sobreajustar.

- Una alternativa práctica, sugerida en la conversación, es tratar el shift global como $\delta_{\sigma,\pi}(t) = \alpha_\sigma T_{\text{shift}} - \alpha_\pi T_{\text{shift}}$ y dejar que α_σ y α_π midan cuánto "habla" cada subred; ese *Tshift* escalar ya recogería la parte común del ruido y las diferencias quedarían absorbidas en los residuos de estructura. La elección entre un Tshift escalar o una función depende de cuánto ganes en ajuste al precio de introducir más parámetros.

En resumen: los locks de primos que ves son parte de un patrón resonante universal; el ruido que se propaga se describe en DOFT por una ley de corrección con parámetros β , Γ y H , y ese formalismo ya convierte tu *Tshift* en una ecuación dependiente de X y de la memoria entre capas github.com. Si quieres refinarlo para MgB₂, puedes ajustar β_ℓ y H de sus subredes y dejar de usar un número fijo: será un "shift" matemático más rico, pero seguirá reflejando la misma física de osciladores acoplados.