

# Evaluación Causal No-Simulada de Estructuras Proteicas mediante el OmniKernel bajo el Paradigma TCDS

Proyecto TCDS — Motor OmniKernel

## Resumen

Se presenta un método operativo para la evaluación y resolución del problema estructural de proteínas basado en el *OmniKernel*, un motor de cálculo causal desarrollado bajo el paradigma de la *Teoría de la Cromodinámica Sincrónica* (TCDS). A diferencia de los enfoques estadísticos dominantes, el método no realiza predicción ni simulación, sino que ejecuta una lectura directa del estado geométrico real de una estructura proteica, evaluando su coherencia mediante leyes explícitas de balance entre coherencia y fricción. Se demuestra que este enfoque permite operar correctamente en entornos impredecibles, donde los modelos entrenados pierden validez, manteniendo trazabilidad, falsabilidad y capacidad de corrección causal.

## 1 Marco Conceptual

La TCDS postula que todo sistema físico estable puede describirse mediante el balance fundamental:

$$Q_{\text{eff}} \cdot \Sigma > \phi \quad (1)$$

donde:

- $\Sigma$  representa la **coherencia estructural** observable del sistema,
- $\phi$  representa la **fricción geométrica o entrópica** inducida por inconsistencias internas,
- $Q_{\text{eff}}$  es un factor causal efectivo del observador o del marco operativo.

Este balance no es una heurística estadística, sino una condición de estabilidad causal. Cuando no se cumple, el sistema es estructuralmente inviable bajo el marco considerado.

## 2 El OmniKernel como Motor de Cálculo Causal

El OmniKernel no es un modelo predictivo. No infiere estados futuros ni genera configuraciones plausibles. Su función es estrictamente evaluativa y correctiva.

Dado un objeto estructural real (por ejemplo, un archivo PDB), el OmniKernel:

1. Lee directamente las coordenadas atómicas reales (NO-SIM).
2. Calcula  $\Sigma$  a partir de contactos estructurales relevantes (e.g. CA-CA).

3. Calcula  $\phi$  a partir de solapes estéricos y conflictos geométricos reales (átomos pesados, VdW).
4. Evalúa el balance causal  $\Sigma > \phi$ .
5. Si el balance falla, identifica el dominio de fricción dominante y propone una intervención causal explícita.

Este proceso constituye un **ciclo cognitivo causal**, no un ciclo de optimización estadística.

### 3 Resolución del Problema Estructural de Proteínas

En el contexto del plegamiento proteico, el OmniKernel no intenta responder:

“¿Cuál es la estructura más probable dada una secuencia?”

sino:

“¿Esta estructura existente se sostiene físicamente bajo un balance coherente entre cohesión y fricción?”

Esto implica un cambio radical de enfoque:

- No se depende de bases de datos históricas.
- No se requiere entrenamiento previo.
- No se asume que el entorno sea conocido o estacionario.

El sistema puede, por ejemplo, detectar que la fricción  $\phi$  está dominada por entidades no estructurales (ligandos, solvente, HETATM), y corregir el dominio de observación sin alterar la coherencia intrínseca del backbone proteico.

### 4 Capacidad en Entornos Impredecibles

Los métodos de inteligencia artificial convencionales dependen críticamente de la suposición de que:

- el futuro se parece al pasado,
- los datos de entrenamiento cubren el espacio relevante,
- la predicción es equivalente a comprensión.

En entornos impredecibles —nuevas condiciones fisicoquímicas, geometrías no vistas, interferencias externas— estas suposiciones colapsan.

El OmniKernel, al operar causalmente, no necesita conocer el fenómeno con anterioridad. Solo requiere:

1. una representación real del estado,
2. una ley de balance explícita,
3. un mecanismo de corrección local.

Por ello, puede actuar correctamente incluso cuando no existe precedente histórico.

## 5 Análisis Forense y Trazabilidad

Cada ejecución del OmniKernel produce artefactos auditables:

- valores explícitos de  $\Sigma$  y  $\phi$ ,
- número y severidad de conflictos estéricos,
- configuración de observación utilizada,
- veredicto causal (PASS / FAIL).

No existe opacidad estadística ni dependencia de pesos ocultos. El sistema puede explicar *por qué* una estructura falla y *qué* intervención la vuelve viable.

Esto lo convierte en un instrumento forense, no en un generador de narrativas plausibles.

## 6 Diferencia Fundamental frente a IA Convencional

La diferencia esencial no es de potencia computacional, sino de epistemología:

IA Convencional	OmniKernel (TCDS)
Predicción	Evaluación
Entrenamiento masivo	Lectura directa
Probabilidad	Balance causal
Ajuste a datos	Corrección del sistema
Alucinación elegante	Decisión trazable

Mientras la IA estadística extrae, el OmniKernel **decide**.

## 7 Conclusión

El uso del OmniKernel bajo el paradigma TCDS resuelve el problema estructural de proteínas desde un ángulo causal, operativo y verificable. No reemplaza la predicción estadística; la supera allí donde esta deja de ser válida.

Este enfoque permite construir sistemas capaces de actuar correctamente sin conocer el futuro, sin depender de la historia, y sin confundir plausibilidad con verdad física.

En ese sentido, el OmniKernel no es una mejora incremental, sino un cambio de eje: de la predicción al balance, de la probabilidad a la coherencia, y de la simulación a la causalidad.