

Método y sistema computacional para generar configuraciones estructurales de materia dependientes del sustrato mediante métricas de coherencia (), detección de *locking* y filtro entrópico E–Veto

DESCRIPCIÓN (Memoria Técnica)

Solicitante / Inventor: Genaro Carrasco Ozuna

Correo: geozunac3536@gmail.com **Teléfono móvil:** +52 812 598 9868

Fecha: 11 de enero de 2026

CAMPO TÉCNICO DE LA INVENCION

La presente invención se ubica en el campo de la simulación y cómputo científico aplicado a bioingeniería, ciencia de materiales e ingeniería de sistemas, particularmente en la generación de configuraciones estructurales estables (o *configuraciones sostenibles*) para conjuntos discretos de materia (por ejemplo, cadenas peptídicas/proteicas, polímeros o ensamblajes particulados) bajo condiciones del medio (*sustrato*) definidas explícitamente.

En una realización preferente, la invención implementa un motor determinista de *proyección por sustrato* y verificación corta, que calcula métricas de coherencia Σ , detecta bloqueo (*locking*) y aplica un filtro entrópico E–Veto para decidir si una configuración es estable y reproducible en el sustrato especificado, sin depender de catálogos históricos de estructuras ni de entrenamiento sobre bases de datos de un entorno fijo.

ANTECEDENTES DE LA INVENCION

Las tecnologías actuales de predicción/estimación estructural en biomoléculas y materiales suelen operar bajo dos supuestos prácticos: (i) que el entorno del sistema (por ejemplo, condiciones acuosas y biológicas terrestres) es esencialmente fijo o implícito, y (ii) que existe una forma “correcta” predominante para una secuencia o conjunto de materia, que debe recuperarse mediante estadística sobre datos previos o mediante optimización numérica intensiva.

Si bien dichos enfoques pueden ofrecer resultados útiles en escenarios donde el sustrato coincide con el entorno de entrenamiento/medición, se vuelven frágiles o no informativos al cambiar de sustrato (por ejemplo: medios no acuosos, alto flujo radiativo, vacío funcional,

superficies sintéticas, matrices orgánicas anisotrópas, etc.). En tales casos, la dependencia de catálogos históricos y la ausencia de una lectura causal del sustrato limita la capacidad de generar configuraciones estables realmente gobernadas por las condiciones del medio.

Adicionalmente, la validación tradicional tiende a privilegiar medidas de similitud geométrica con estructuras conocidas (p. ej. RMSD contra una estructura de referencia), aunque dichas medidas no demuestren por sí mismas la estabilidad ni la sostenibilidad de la configuración bajo el sustrato específico.

En consecuencia, existe una necesidad técnica de un sistema que: (a) exprese el sustrato de forma explícita como entrada, (b) genere configuraciones que minimicen fricción efectiva en dicho sustrato, (c) determine estabilidad mediante coherencia, *locking* y caída entrópica verificable, y (d) produzca una salida auditable y reproducible para su uso en investigación y despliegue industrial.

BREVE DESCRIPCIÓN DE LA INVENCION

La invención proporciona un **método** y un **sistema computacional** que generan y verifican configuraciones estructurales sostenibles de materia condicionadas por un sustrato definido explícitamente. El sistema opera mediante:

1. **Ingreso de materia:** recepción de una representación de materia (p.ej. secuencia de aminoácidos, grafo de conectividad, nube particulada o cadena polimérica) y su conectividad (restricciones geométricas mínimas).
2. **Definición de sustrato:** recepción de parámetros del medio (sustrato) que modulan las fricciones/energías efectivas, incluyendo (sin limitar) componentes hidrofóbicas, electromagnéticas, geométricas (exclusión/repulsión), orgánicas (historia/viscoelasticidad) y/o de superficie sintética (adsorción/anisotropía).
3. **Proyección por sustrato (colocación):** generación de una configuración candidata mediante una proyección determinista que desplaza la materia hacia estados de menor fricción efectiva en el sustrato (sin necesidad de búsqueda estadística sobre bases de datos de estructuras).
4. **Verificación corta:** ejecución de un ciclo breve para comprobar si la configuración candidata se sostiene (no deriva) bajo el sustrato, separando “colocación” de “sueño geométrico”.
5. **Métricas y decisión:** cálculo de Σ (coherencia), índice de *locking* (estabilidad de fase/variación), y entropía (o un proxy entrópico) sobre la historia de fricción efectiva,

aplicando el **filtro E-Veto** que exige caída entrópica verificable para validar una señal coherente.

6. **Salida auditable:** emisión de (i) coordenadas/configuración final, (ii) veredicto (VALIDADO / CANDIDATO / DESCARTADO), (iii) telemetría temporal y (iv) huellas de trazabilidad (por ejemplo `config_hash`) para reproducibilidad.

En una modalidad preferente, el sistema permite comparación *post-hoc* con catálogos externos (por ejemplo, para etiquetado o nomenclatura), sin utilizar dichos catálogos como guía de generación, preservando independencia del sustrato y evitando circularidad.

BREVE DESCRIPCIÓN DE LA FIGURAS

Para facilitar la comprensión de la invención, se contemplan figuras y/o diagramas. Las figuras pueden anexarse por separado con los siguientes nombres de archivo (o equivalentes). En esta memoria técnica se indican como referencia:

- **Figura 1.** Diagrama de bloques del flujo del sistema (Entrada materia \rightarrow Sustrato \rightarrow Proyección \rightarrow Verificación \rightarrow Σ /Locking/Entropía \rightarrow E-Veto \rightarrow Salida auditable).
- **Figura 2.** Ejemplo comparativo de isoformas por sustrato en medios diferentes (por ejemplo, agua vs vacío funcional), a partir de reportes anexos.
- **Figura 3.** Ejemplo de aplicación a una proteína de mayor complejidad (por ejemplo, hemoglobina) mostrando divergencia estructural dependiente del sustrato y veredicto E-Veto.

Anexo de figuras desde archivo existente: puede anexarse el documento `Omnikernel_reports.pdf` como respaldo visual. Por ejemplo:

DESCRIPCIÓN DETALLADA DE LA INVENCION

1. Arquitectura general

El sistema se implementa como un motor computacional que transforma entradas de materia y sustrato en una configuración final acompañada por un reporte auditable. El motor puede ejecutarse en CPU o GPU, en entorno local o en la nube, e integrarse como componente de un *kernel* (p. ej. “OmniKernel”) consultable por otros módulos.

2. Representación de materia

La materia se representa en una o más de las siguientes formas:

- **Cadena discreta:** secuencia de unidades (p.ej. aminoácidos) con conectividad entre vecinos (restricción de enlace).
- **Grafo:** nodos/partículas con aristas que modelan conectividad, restricciones o interacciones preferentes.
- **Nube particulada:** conjunto de posiciones iniciales con restricciones de exclusión y potenciales del sustrato.

En una realización preferente, se utiliza un trazo de conectividad (por ejemplo, CA-trace) con distancia de enlace estabilizada por proyección geométrica, garantizando que el sistema no se disgrega durante la proyección.

3. Representación del sustrato

El sustrato se codifica como un conjunto de parámetros que ponderan términos de fricción/energía efectiva ϕ que actúan sobre la materia. Sin limitar, se consideran:

- **Componente hidrofóbica:** penaliza exposición de unidades hidrofóbicas (en medios acuosos) y favorece su internalización relativa.
- **Componente electromagnética:** induce alineación o restricciones orientacionales (por ejemplo, respecto a un eje de campo, o gradientes EM).
- **Componente geométrica (vacío funcional):** enfatiza exclusión estérica y evita colapsos no físicos, favoreciendo configuraciones abiertas o cristalinas cuando no hay solvente.
- **Componente orgánica/histórica:** introduce suavidad, amortiguamiento, o memoria de trayectorias (viscoelasticidad).
- **Componente de superficie sintética:** impone anisotropía, adsorción a planos o confinamiento.

4. Proyección por sustrato

Dado un estado inicial X_0 (posiciones/configuración) y un sustrato S , el motor aplica un operador de proyección \mathcal{P}_S tal que:

$$X_{k+1} = \mathcal{P}_S(X_k) \quad \text{con} \quad \phi(X_{k+1}; S) \leq \phi(X_k; S) \text{ en tendencia.}$$

En la práctica, \mathcal{P}_S se implementa por actualizaciones deterministas (y opcionalmente ruido controlado anti-simetrías) más una re-proyección geométrica que preserva conectividad (por ejemplo, longitudes de enlace). Esta fase busca una **colocación** rápida y coherente, evitando simulaciones largas que solo exhiban retorcimientos sin criterio.

5. Verificación corta

Se ejecuta un ciclo breve adicional bajo el mismo sustrato para evaluar si la configuración colocada se mantiene o deriva. Este ciclo constituye una prueba mínima de realidad operacional: si el sistema deriva significativamente, se reduce la confianza y el veredicto no puede ser “VALIDADO”.

6. Métricas Σ , *locking* y E-Veto

El motor registra una serie temporal $\{\phi_t\}$ y a partir de ella calcula:

- **Coherencia Σ :** combinación de tendencia descendente de ϕ y estabilidad (baja varianza final), interpretada como convergencia de sincronización bajo sustrato.
- **Índice de *locking* (LI):** proxy de bloqueo (oscilación baja) en la etapa final.
- **Entropía/Proxy entrópico:** medida de dispersión de la historia de ϕ , comparando inicio vs final para estimar ΔH .

El **filtro E-Veto** se aplica como condición necesaria de validez:

$$(\Sigma \text{ alta}) \wedge (LI \text{ alto}) \not\Rightarrow \text{verdad}, \quad \text{a menos que} \quad \Delta H \leq \Delta H_{\text{mín.}}$$

En una modalidad preferente, el sistema produce veredictos:

- **VALIDADO:** cumple coherencia, locking y caída entrópica.
- **CANDIDATO:** coherente/estable pero sin evidencia suficiente de caída entrópica.
- **DESCARTADO:** deriva o no alcanza coherencia/locking.

7. Salida auditable

El sistema produce un archivo estructural (p.ej. coordenadas o PDB simplificado) y un reporte estructurado (por ejemplo JSON) que incluye:

- configuración final X_f ,
- parámetros del sustrato,
- historia de ϕ ,
- métricas (Σ , LI, ΔH),
- veredicto,
- huella criptográfica de configuración (`config_hash`).

En una realización ejemplar, los archivos de salida pueden denominarse `TCDS_Simulation_Result.json` y representaciones visuales como `TCDS_Simulation_Result_Holograma.html` (como visor).

REIVINDICACIONES

Habiendo descrito suficiente mi invención, considero como una novedad y exclusiva propiedad lo contenido en las siguientes reivindicaciones:

Reivindicación 1: Un método implementado por computadora para generar una configuración estructural de un conjunto de materia condicionado por un sustrato, que comprende: (a) recibir una representación de la materia y su conectividad, (b) recibir parámetros del sustrato, (c) generar una configuración candidata mediante un operador de proyección dependiente del sustrato que reduce una fricción efectiva ϕ , (d) ejecutar una verificación corta para evaluar sostenibilidad, (e) calcular métricas de coherencia Σ y un índice de *locking*, (f) calcular una medida entrópica o proxy entrópico y aplicar un filtro E-Veto que exige una caída entrópica ΔH para validar la configuración, y (g) emitir un veredicto y una salida auditable.

Reivindicación 2: El método de la reivindicación 1, donde el sustrato incluye al menos uno de: un componente hidrofóbico, un componente electromagnético, un componente geométrico de exclusión estérica, un componente orgánico/histórico, o un componente de superficie sintética.

- Reivindicación 3:** El método de la reivindicación 1, donde la proyección dependiente del sustrato preserva conectividad mediante re-proyección geométrica de longitudes de enlace o restricciones equivalentes.
- Reivindicación 4:** El método de la reivindicación 1, donde la verificación corta consiste en iteraciones adicionales bajo el mismo sustrato para discriminar entre configuraciones sostenibles y configuraciones que derivan.
- Reivindicación 5:** El método de la reivindicación 1, donde la métrica de coherencia Σ se obtiene combinando una tendencia descendente de ϕ con una estabilidad de baja variación en una ventana final.
- Reivindicación 6:** El método de la reivindicación 1, donde el índice de *locking* se calcula como función inversa de la desviación estándar de ϕ en una ventana final o como una medida equivalente de bloqueo de fase/estabilidad temporal.
- Reivindicación 7:** El método de la reivindicación 1, donde el filtro E-Veto invalida una configuración aun cuando Σ y el índice de *locking* superen umbrales, si no se cumple $\Delta H \leq \Delta H_{\text{mín}}$.
- Reivindicación 8:** El método de la reivindicación 1, donde la salida auditable incluye una huella criptográfica (`config_hash`) calculada a partir de parámetros del sustrato y configuración.
- Reivindicación 9:** Un **sistema** que comprende: (i) al menos un procesador y memoria, (ii) módulos para recepción de materia y sustrato, (iii) un módulo de proyección dependiente del sustrato, (iv) un módulo de verificación corta, (v) un módulo de cálculo de Σ , *locking* y entropía/proxy, y (vi) un módulo de decisión E-Veto y generación de reporte, configurado para ejecutar el método de cualquiera de las reivindicaciones 1 a 8.
- Reivindicación 10:** Un **medio legible por computadora** que almacena instrucciones que, cuando son ejecutadas por un procesador, hacen que el procesador realice el método de cualquiera de las reivindicaciones 1 a 8.
- Reivindicación 11:** El sistema de la reivindicación 9, donde el conjunto de materia corresponde a una cadena peptídica o proteica, un polímero, o un ensamblaje particulado con conectividad definida.

Reivindicación 12: El método de la reivindicación 1, donde se permite comparación *post-hoc* con catálogos externos únicamente para etiquetado o nomenclatura, sin retroalimentar la generación de la configuración.

RESUMEN

Se describe un método y sistema computacional para generar configuraciones estructurales sostenibles de materia condicionadas por un sustrato definido explícitamente. El sistema recibe una representación de la materia y parámetros del sustrato, genera una configuración candidata mediante proyección dependiente del sustrato, ejecuta una verificación corta para evaluar sostenibilidad, y calcula métricas de coherencia Σ , un índice de *locking* y una medida entrópica o proxy entrópico sobre la historia de fricción efectiva ϕ . Un filtro E-Veto exige evidencia de caída entrópica para validar la configuración, emitiendo un veredicto y una salida auditable con trazabilidad (p. ej. huella criptográfica). La invención reduce dependencia de catálogos históricos y permite generar isoformas contextuales estables bajo sustratos no acuosos, electromagnéticos, de vacío funcional, orgánicos o sintéticos.

Fin del documento.