AUDITORÍA / 1.3.1

Manual completo

Interpretar cada resultado con el estimador y la evidencia correctos.

WPF y web / Español / 30 de octubre de 2026

Este suplemento de cuatro páginas contiene las correcciones vigentes de la auditoría 1.3.1. Léelo antes del manual conservado, especialmente si comparas distribuciones ILT e intervalos Monte Carlo.

A partir de la página PDF 5 se conserva intacto el documento 1.3. Sus pantallas, títulos y numeración son históricos; no se presentan como nuevas capturas 1.3.1. Las precisiones de este suplemento prevalecen sobre las instrucciones conservadas.

02 Intervalos y problema inverso >

03 Datos, orden, signo y procedencia >

04 Correcciones y controles prácticos >

05 Abrir el manual 1.3 conservado >

Intervalos y problema inverso

El intervalo pertenece al ajuste mono

El Monte Carlo vuelve a ajustar el modelo monoexponencial de referencia. La interfaz identifica su D e intervalo por separado. Si eliges NNLS, Tikhonov o L1, el centroide ILT es otro estimador: el intervalo mono no cuantifica ese centroide ni la forma, máximos o número de componentes de la distribución. Aquí no se calcula incertidumbre de una distribución ILT.

La lista singular no demuestra unicidad

Una matriz de 20 observaciones por 64 valores D tiene rango como máximo 20 y al menos 44 direcciones nulas derechas. Sus 20 valores singulares devueltos pueden ser no nulos y aun así dejar ese espacio sin resolver. El aviso incluye esta limitación; no cuenta moléculas ni demuestra que toda solución positiva sea imposible.

Por qué se hace esta comprobación

Un residuo pequeño y un intervalo estrecho responden a preguntas distintas. Compara regularización, malla, datos reservados y alternativas compatibles. Mantén el mismo procesado y las mismas observaciones para atribuir cambios al método. Un ajuste reproducible no establece identidad química.

Objetivo del estudiante

Antes de citar un intervalo, escribe qué estimador describe, qué errores comparte y qué propiedades no calcula. No asignes al centroide ILT un intervalo obtenido para otro ajuste.

Datos, orden, signo y procedencia

Una referencia coherente

El procesado por señal y Monte Carlo usan la referencia de menor b. Reordenar las mismas parejas (b, señal) no debe crear ni borrar picos por cambiar la fila de referencia. Esto no equivale a invertir físicamente una adquisición: una nueva rampa puede exponer deriva o cinética real.

Controles reservados con signo

El control conserva la referencia con signo y el procesado declarado. Tomar valores absolutos o recortar señales negativas cambia el problema. Inspecciona fase, señal y modelo antes de interpretar una diferencia como difusión o separar especies.

Importar no demuestra calibración

Una serie importada y sus metadatos no aportan por sí solos una referencia independiente. Se distinguen procedencia, escala aplicada y evidencia disponible. Una escala introducida por el usuario sigue siendo condicional; sin b documentada no se inventa un ajuste D.

Valores válidos y estabilidad

Gradientes vacíos/no numéricos, referencias o fases no finitas y conversiones a SI que desborden se rechazan con explicación ES/EN. No se convierten en cero. El ajuste de datos con b no nulo usa una referencia desplazada al menor b; si la amplitud extrapolada a b=0 no es representable, se indica no disponible, no NaN como resultado físico.

Correcciones y controles prácticos

Dos erratas concretas

Ejemplo temperature-standard/factors: 0.89 x 293/301 = 0.86634551495, que se redondea a 0.8663 en ES/EN. La D corregida, 0.33 x 0.86634551495 = 0.2859 en unidades 10^-9 m²/s, no cambia. La nota española de Kuchel 2012 [38] dice ahora g0=0, no g00; la ecuación matemática no cambia.

Una práctica para detectar errores

1. Explica las unidades y conserva signo, fase y referencia. 2. Compara mono e ILT sobre los mismos datos y lee qué estimador cubre el intervalo. 3. Invierte las filas emparejadas y distingue esa prueba de readquirir otra rampa. 4. Introduce un valor inválido y verifica su rechazo. 5. Importa con procedencia y diseña un control que pueda refutar la conclusión.

Qué acreditan las comprobaciones

La auditoría compara ejemplos, límites analíticos, contratos de software e interfaces ES/EN. El validador distingue identidad binaria del PPTX y coincidencia fresca de sus 81 diapositivas registradas. Los originales e informes históricos permanecen conservados. Estas comprobaciones no son calibración física, identificación química ni un estudio de eficacia docente.

Beatrix, fuentes y alcance

Documentación, entrenamiento ejecutado y evaluación nativa aprobada son evidencias distintas. La consulta matemática conserva sus fuentes Sinnaeve/Kuchel; modelos UF/SPEN simplificados no certifican una secuencia experimental completa. Consulta las notas bilingües y los informes de la entrega para el alcance exacto.

Academy y notas de la entrega >

DIFFATONCE ACADEMY / 1.3.0

Manual completo

Aprender a medir, interpretar y defender la difusión por RMN.

WPF y web / Español / 30 de octubre de 2026

PARTE I - Investigación continua 1.3

Instrucciones actuales: doce etapas, misma muestra, incertidumbre compartida, controles, competencias, piloto y revisión.

APÉNDICE A - Laboratorio doctoral 1.2

Material conservado de las nueve actividades y sus derivaciones, datos y límites. Conserva su rotulado histórico.

APÉNDICE B - Curso original 1.0

24 lecciones, ejemplos y herramientas del curso original. Profundización y referencia de la interfaz histórica.

Las instrucciones nuevas de la parte I son la referencia vigente. Los apéndices no se reescriben ni convierten capturas antiguas en interfaz actual. La guía documental, el entrenamiento ejecutado y un modelo aprobado son estados distintos.

Índice del volumen y navegación

Los números de este índice son páginas PDF del volumen. Dentro de cada parte se conserva la numeración impresa del documento fuente. Usa los enlaces o los marcadores para cambiar de parte.

Parte I - Investigación continua 1.3 3
Cómo aprender y conservar la misma muestra 5
01 La pregunta 7
02 Calibrar 8
03 Diseñar 9
04 Adquirir 10
05 Procesar 11
06 Interpretar 12
07 Incertidumbre 13
08 Próxima medida 14
09 RF y espacio 15
10 Competencias y piloto 16
11 Defensa y revisión 17
12 Datos públicos 18
Ejemplo continuo reproducible 19
Beatrix y modos de respuesta 21
Protocolo docente y retención 22
Guardar, importar y fuentes 23
Apéndice A - Doctorado 1.2 / separador 25
Apéndice B - Curso 1.0 / separador 48

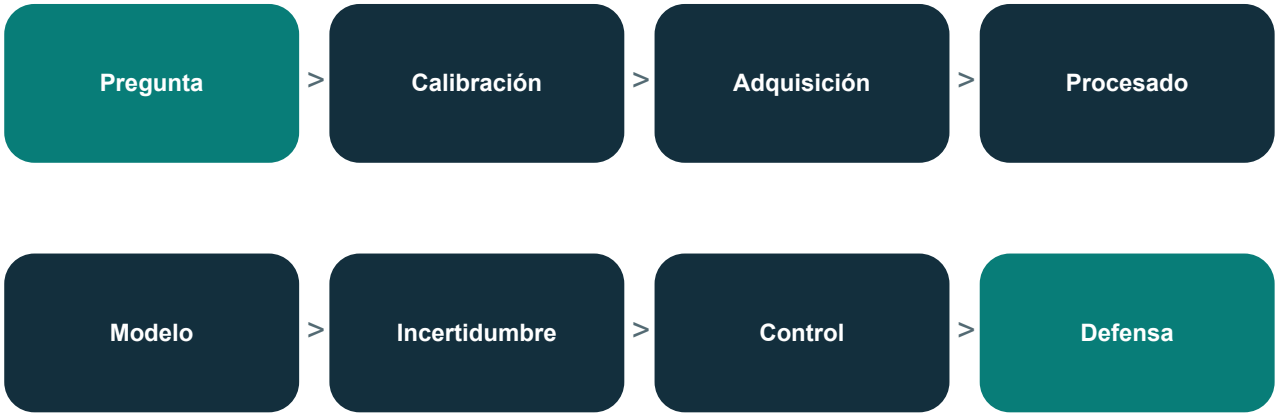
Cada capítulo mantiene su procedencia. Los enlaces web de los apéndices reflejan la fecha original; para instalación y acceso actuales usa la parte I y la página de Academy.

DIFFATONCE ACADEMY / 1.3.0

De la pregunta a la evidencia

Manual de investigación continua

Doce etapas, una misma muestra y decisiones que puedes defender.



Ediciones WPF y web - Español

30 / 10 / 2026

Simulaciones docentes calculadas, originales públicos atribuidos y revisión humana. Los modelos y las inferencias mantienen sus condiciones explícitas.

Contenido y acceso

Web: abre Academy y selecciona Investigación. WPF: pulsa Investigación continua; cambia ES/EN desde la aplicación.

diffatonce.com/academy - English product page

Las doce etapas de la interfaz

01 La pregunta / 02 Calibrar / 03 Diseñar / 04 Adquirir / 05 Procesar / 06 Interpretar / 07 Incertidumbre / 08 Próxima medida / 09 RF + espacio / 10 Competencias / 11 Defensa y revisión / 12 Datos públicos

Contenido y acceso 2

Cómo aprender con esta versión 3

Qué conserva la misma muestra 4

01 - La pregunta 5

02 - Calibrar antes de medir 6

03 - Diseñar una medida informativa 7

04 - Adquirir la misma muestra 8

05 - Procesar con decisiones explícitas 9

06 - Interpretar sin sobreafirmar 10

07 - Propagar errores compartidos 11

08 - Elegir la próxima medida 12

09 - RF, gradientes y espacio 13

10 - Comprobar lo aprendido 14

11 - Defender, revisar y mejorar 15

12 - Trabajar con originales públicos 16

Ejemplo continuo - preparar y adquirir 17

Ejemplo continuo - interpretar y cuestionar 18

Beatrix, fuentes y modos de respuesta 19

Protocolo docente y evaluación independiente 20

Guardar, importar y reproducir 21

Fuentes, enlaces y problemas frecuentes 22

Cómo aprender con esta versión

Transformar una pregunta sobre difusión en una conclusión proporcionada a los datos.

Qué hacer

1. Abre Investigación en Academy web o pulsa Investigación continua en WPF y selecciona ES/EN. La misma interfaz y los mismos motores numéricos sustentan ambas ediciones.

2. Recorre las doce etapas. Antes de pulsar una acción, escribe una predicción y su motivo en el panel de ayuda.

3. Usa las actividades Doctorado, Derivaciones y Animaciones para profundizar y vuelve al mismo caso.

4. Exporta la investigación al acabar cada sesión. Practica después con otra semilla y sin consultar el ejemplo resuelto.

Qué significa

Las siete ampliaciones enlazan muestra, incertidumbre, datos reales, competencias, diseño de controles, codificación espacial y tutoría/revisión.

Antes de continuar

Al terminar debes poder explicar qué mediste, cómo elegiste la ecuación, qué sesgos quedan y qué control podría refutarte.

> Límite: Completar pantallas o superar pruebas de software no demuestra dominio ni valida un experimento.

Qué conserva la misma muestra

Distinguir datos adquiridos, decisiones, supuestos y verdad de una simulación.

Qué hacer

1. La semilla fija una muestra sintética reproducible; no identifica una molécula real.

2. Calibración, diseño, serie compleja, procesado y ajuste permanecen unidos a su identidad e historial.

3. Si cambias una decisión anterior, revisa las etapas posteriores y vuelve a calcular. Un resultado previo no prueba el nuevo diseño.

4. Al vincular integrales públicas o CSV, la evidencia se declara experimental/importada y su procedencia sigue siendo necesaria.

Qué significa

Las unidades internas son SI: D en m²/s, b en s/m² y gradiente en T/m. La interfaz muestra pulsos en µs y tiempos de secuencia en ms.

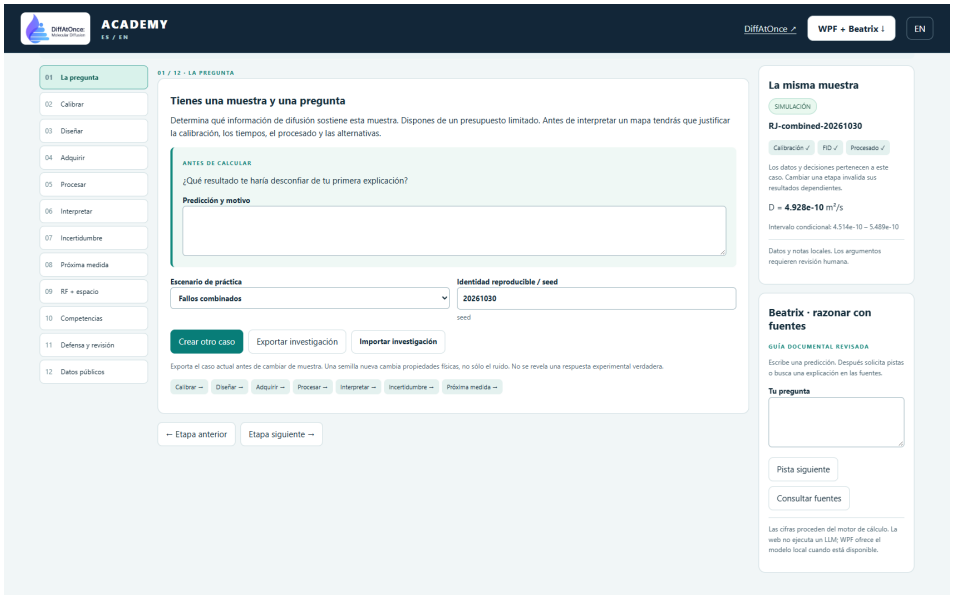
Antes de continuar

Comprueba identidad, unidades y estado del procesado antes de comparar dos resultados.

> Límite: Los originales experimentales no se modifican. La calibración virtual no recalibra automáticamente datos importados ni el espectrómetro.

01 - La pregunta

Formular una hipótesis y un resultado que la pueda contradecir.



Captura real de la interfaz compartida. Los pasos siguientes identifican los controles; amplía la imagen si necesitas inspeccionar etiquetas pequeñas.

Qué hacer

1. Selecciona Dificultad oculta e Identidad reproducible; pulsa Crear otro caso sólo cuando quieras iniciar otra muestra.

2. Empieza con Señal aislada; después prueba Calibración del gradiente, Convección, Deriva temporal, Solapamiento o Fallos combinados.

3. Escribe una pregunta concreta: por ejemplo, si una diferencia de D puede explicarse por orden de rampa y no sólo por dos especies.

4. Registra qué observarías bajo cada hipótesis antes de adquirir.

Qué significa

La causa no se revela por acertar una palabra. Las decisiones y los controles deben sostener tu argumento.

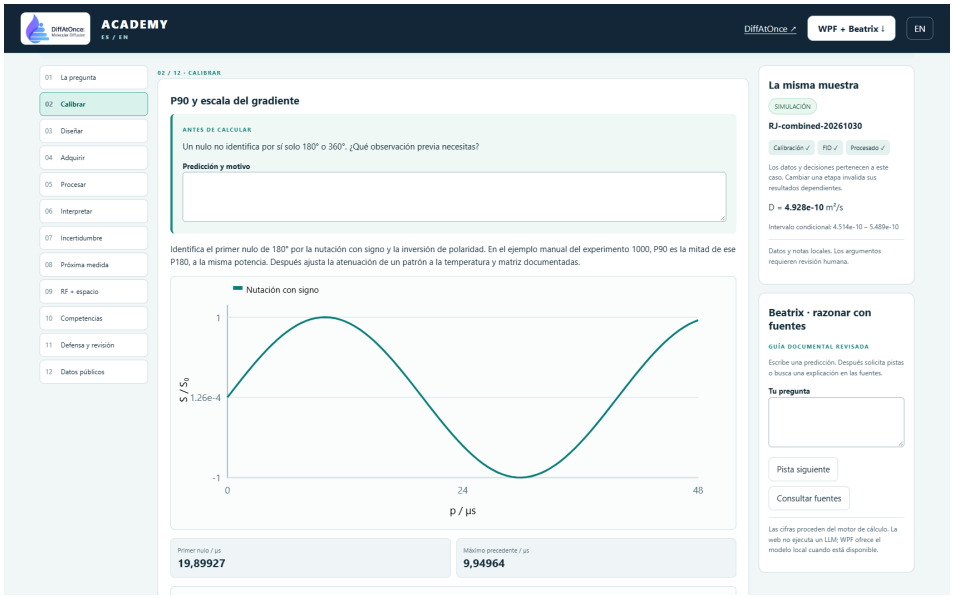
Antes de continuar

Tu pregunta contiene una observación medible, una alternativa y un control posible.

> Límite: Elegir un preset informa de la familia del problema. Para evaluar sin esa pista usa casos y preguntas reservados del docente; una práctica guiada no es una prueba completamente ciega.

02 - Calibrar antes de medir

Separar calibración RF, escala de gradiente y condiciones del patrón.



Captura real de la interfaz compartida. Los pasos siguientes identifican los controles; amplía la imagen si necesitas inspeccionar etiquetas pequeñas.

Qué hacer

1. Inspecciona la curva de nutación con signo. Identifica el primer nulo de 180° mediante el máximo anterior y el cambio de signo.

2. Introduce P90 = P180/2 a potencia y condiciones constantes. Un nulo de 360° se divide entre cuatro; el nulo aislado no identifica su orden.

3. Ajusta el decaimiento del patrón frente a b nominal; para una escala común g_real=s·g_nominal usa s=√(D_nominal/D_ref).

4. Comprueba temperatura del patrón y referencia; después pulsa Aplicar calibración al caso.

Qué significa

Si se usa b nominal, un error de escala del gradiente aparece al cuadrado en D. Repetir más scans no elimina ese sesgo.

Antes de continuar

Justifica el nulo elegido, el D de referencia, su temperatura y qué forma de onda cubre la calibración.

> Límite: P90 debe comprobarse para la muestra y potencia adecuadas. p30, d20 y d5 requieren el programa de pulsos concreto; no tienen una traducción universal.

03 - Diseñar una medida informativa

Elegir una ventana de atenuación y controles dentro de un presupuesto.

Qué hacer

1. Elige Eco de espín, Eco estimulado, LED o Doble estimulado y documenta por qué.

2. Ajusta δ, Δ, d5/LED, gradiente máximo, niveles, NS, réplicas y orden de rampa.

3. Pulsa Comprobar diseño y presupuesto; revisa duración, b máximo y restricciones antes de adquirir.

4. Predice qué cambiará al aumentar Δ o invertir/intercalar la rampa. Cambia una variable cada vez cuando quieras atribuir una causa.

Qué significa

Más ponderación puede mejorar contraste y perder señal. LED añade tiempo; las pérdidas y la compensación dependen de la secuencia.

Antes de continuar

Puedes explicar qué aporta cada nivel y qué parte de tu presupuesto sirve para controlar errores.

> Límite: Los tiempos son un modelo docente ideal. Verifica el programa real y los límites del instrumento antes de trasladar una receta al laboratorio.

04 - Adquirir la misma muestra

Relacionar el diseño con una serie compleja y con su orden temporal.

Qué hacer

1. Después de calibrar y diseñar, pulsa Adquirir la serie virtual.

2. Inspecciona el FID y el número de adquisiciones; conserva la identidad de muestra y semilla.

3. Compara una réplica con una adquisición invertida/intercalada. Describe qué debería cambiar si existe deriva.

4. Conserva la primera investigación exportada antes de iniciar otra semilla.

Qué significa

Los datos sintéticos contienen ruido reproducible y dificultades fijadas por la muestra; el FID no es un gráfico decorativo.

Antes de continuar

La señal, el orden temporal y b se mantienen emparejados en tu análisis.

> Límite: Esta acción no envía órdenes a TopSpin ni adquiere una muestra física. Los datos experimentales entran por Datos públicos o importación.

05 - Procesar con decisiones explícitas

Conservar el signo y comprobar la dependencia de fase, ventana y línea de base.

Qué hacer

1. Ajusta Corrección de fase, Offset sustraído, apodización y Ventana de señal.

2. Pulsa Procesar e integrar. Inspecciona el espectro y el decaimiento de las integrales.

3. Compara Todo el espectro, Señal 1 y Señal 2 cuando exista solapamiento.

4. Explica por qué una ventana o fase distinta puede alterar una atenuación sin que D física haya cambiado.

Qué significa

Una integral es una decisión sobre datos complejos. Tomar sólo magnitudes o recortar valores negativos puede cambiar el ruido y sesgar el ajuste.

Antes de continuar

Tu informe permite repetir fase, ventana y tratamiento de línea de base.

> Límite: Para archivos Bruker reales comprueba filtro digital, referencia, secuencia y metadatos en el flujo experimental. No traslades índices de otra muestra.

06 - Interpretar sin sobreafirmar

Comparar modelos sobre exactamente las mismas observaciones.

Qué hacer

1. Selecciona Monoexponencial, NNLS, Tikhonov no negativo o L1 no negativo y pulsa Ajustar los mismos datos.

2. En ILT registra λ y la malla; compara residuos, estabilidad y máximos, no sólo el aspecto del mapa.

3. Mantén el mismo procesado para atribuir cambios al método. Después estudia por separado la sensibilidad al procesado.

4. Vuelve al laboratorio Doctorado para profundizar en el núcleo ILT, correlaciones y análisis conjunto.

Qué significa

Una curva bien ajustada no determina una distribución única. La penalización introduce una preferencia y puede fusionar o crear máximos aparentes.

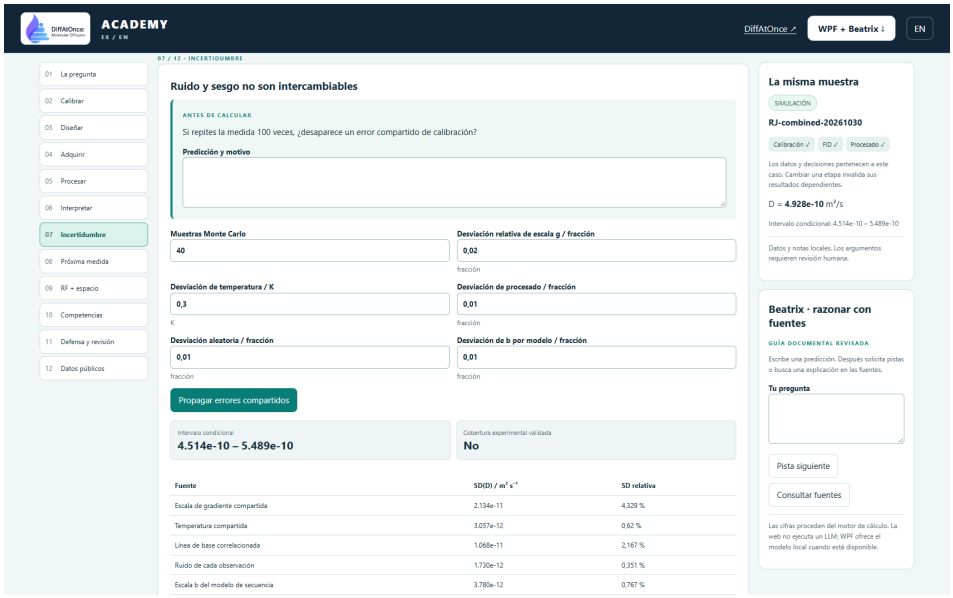
Antes de continuar

Puedes distinguir ajuste numérico, resolución, distribución y asignación química.

> Límite: La D monoexponencial de una mezcla es condicional al modelo. No atribuyas masas absolutas ni especies a partir del mapa por sí solo.

07 - Propagar errores compartidos

Separar dispersión aleatoria de sesgos y dependencias comunes.



Captura real de la interfaz compartida. Los pasos siguientes identifican los controles; amplía la imagen si necesitas inspeccionar etiquetas pequeñas.

Qué hacer

1. Introduce Muestras Monte Carlo y las desviaciones de escala g, temperatura, procesado, ruido y modelo b.

2. Pulsa Propagar errores compartidos y compara contribuciones e intervalo condicional.

3. Repite reduciendo sólo ruido; después reduce la incertidumbre de calibración. Compara la diferencia.

4. Describe qué fuentes comparten una misma realización entre gradientes y señales, y cuáles varían por observación.

Qué significa

La misma calibración puede desplazar juntas varias D. Tratar ese error como ruido independiente fabricaría información que no se adquirió.

Antes de continuar

Justifica un control que reduzca la fuente dominante y enumera errores que tu intervalo no cuantifica.

> Límite: El intervalo es condicional a los modelos y distribuciones introducidos. No es cobertura experimental validada ni corrige automáticamente un modelo erróneo.

08 - Elegir la próxima medida

Usar la ambigüedad para diseñar un control discriminante.

Qué hacer

1. Compara Mayor rango b, Repetir el diseño, Invertir el orden, Cambiar Δ y Compensación de flujo.

2. Escribe una predicción antes de pulsar Comparar diseños.

3. Elige una adquisición y pulsa Observar control reservado. Las observaciones reservadas usan una realización independiente.

4. Contrasta tu predicción con los resultados y explica qué alternativas sobreviven.

Qué significa

Dos distribuciones pueden predecir casi igual los datos disponibles y divergir en otra región b. La adquisición propuesta explora esa diferencia.

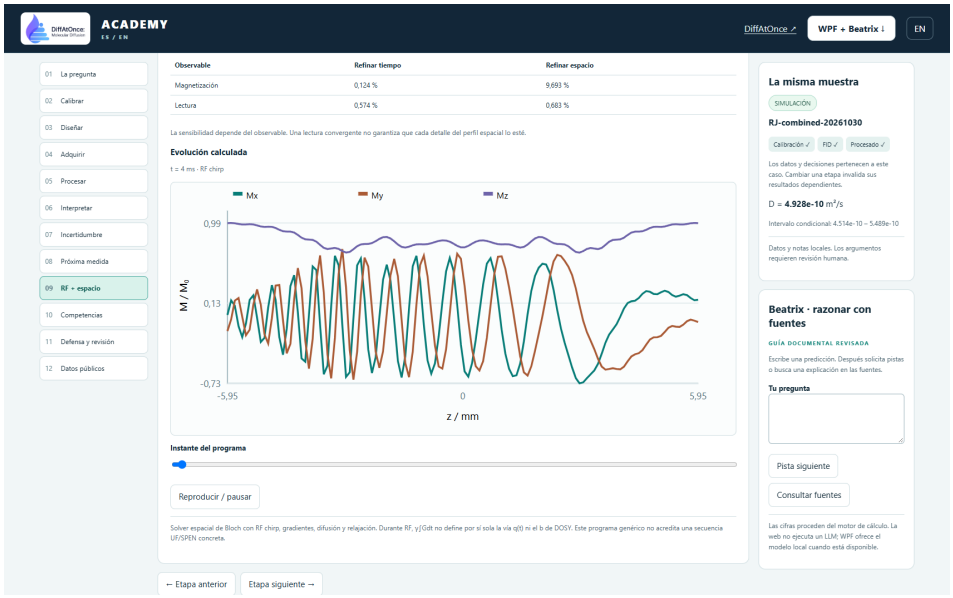
Antes de continuar

Puedes defender por qué este control discrimina mejor que adquirir más puntos equivalentes.

Límite: La selección de diseño y el dato reservado sintético no son validación externa de una muestra real. La compensación de flujo ideal no equivale a cualquier programa doble STE.

09 - RF, gradientes y espacio

Comprender el origen físico de la codificación espacial y sus límites numéricos.



Captura real de la interfaz compartida. Los pasos siguientes identifican los controles; amplía la imagen si necesitas inspeccionar etiquetas pequeñas.

Qué hacer

1. Ajusta celdas espaciales, longitud, duración/amplitud RF, barrido chirp, gradientes, evolución, lectura y perfil de bobina.

2. Pulsa Calcular Bloch-Torrey; inspecciona magnetización, fase, perfil transversal y señal de lectura.

3. Pulsa Comprobar convergencia para comparar el paso temporal y la malla refinados. Revisa los avisos de aliasing.

4. Compara con el modelo introductorio ultrafast/SPEN de Doctorado: explica qué añade el cálculo desde RF y qué continúa siendo ideal.

Qué significa

El modelo es $dM/dt = \Omega \times M + D \cdot d^2M/dz^2 - (Mx/T2, My/T2, (Mz-1)/T1)$. Ω contiene RF y gradiente, con fase chirp integrada en el tiempo. Se usan paredes reflectantes, difusión Crank-Nicolson y rotaciones exactas por paso. La lectura suma magnetización compleja ponderada por la bobina.

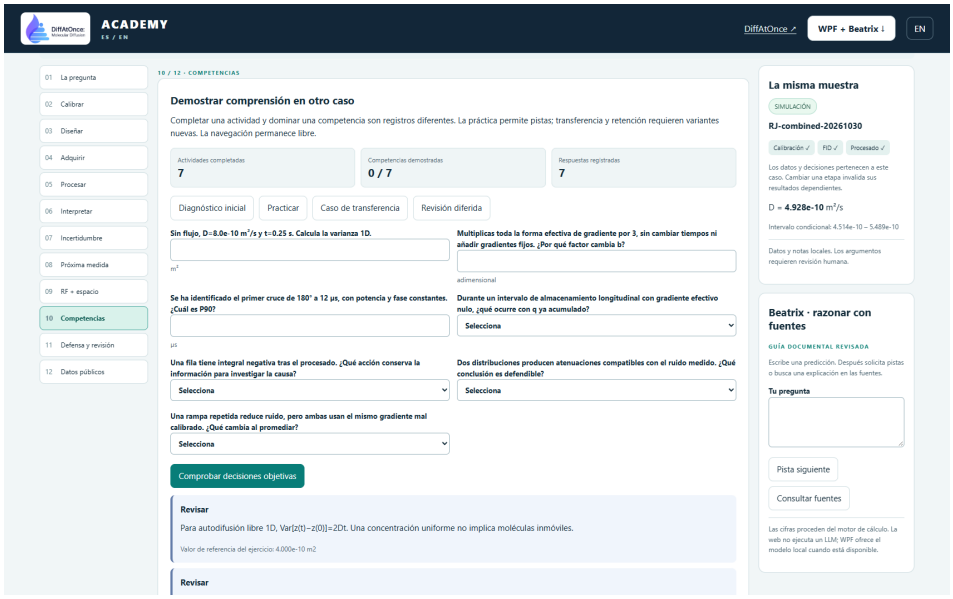
Antes de continuar

Puedes distinguir fase RF, integral física del gradiente, resolución nominal y error de discretización.

> Límite: Durante RF, $\gamma\int Gdt$ no es una vía de coherencia ni un b DOSY. Con lectura lineal, un offset Δf produce $\Delta z_{aparente} = \Delta f/(\gamma Hz \cdot G)$: no es movimiento molecular. El protocolo genérico no valida una secuencia UF/SPEN-DOSY concreta.

10 - Comprobar lo aprendido

Demostrar transferencia y retención, además de completar actividades.



Captura real de la interfaz compartida. Los pasos siguientes identifican los controles; amplía la imagen si necesitas inspeccionar etiquetas pequeñas.

Qué hacer

1. Realiza Diagnóstico inicial antes de consultar pistas. Usa Practicar para trabajar conceptos pendientes y registra la ayuda utilizada.

2. Completa Caso de transferencia con parámetros nuevos e inspecciona el estado por competencia. Vuelve a un caso que obligue a usarla.

3. El piloto docente voluntario empieza vacío. Si participas, usa un código local opcional, marca el consentimiento y pulsa Consentir y abrir el caso inicial. Pretest y postest contienen siete preguntas con semillas diferentes; declara si respondiste sin ayuda.

4. El caso de retención se habilita tras siete días, en la fecha mostrada; no hay un botón para adelantar ese plazo. Usa Comprobar fecha actual y Exportar resultados del piloto. No se precargan alumnos ni resultados.

Qué significa

Las comprobaciones automáticas se limitan a elecciones y números explícitos. Un argumento escrito necesita revisión humana.

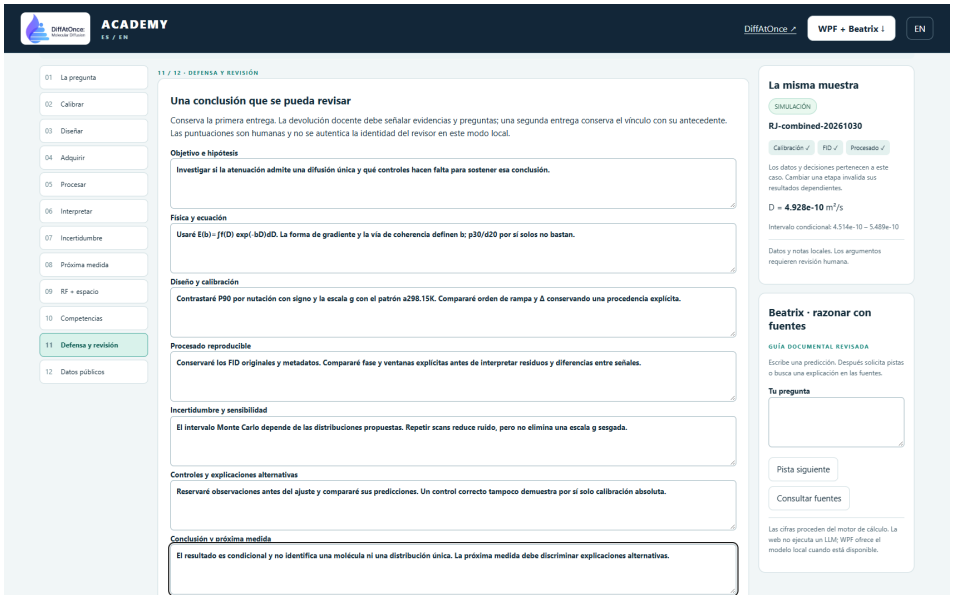
Antes de continuar

Resuelve una situación nueva sin pista y explica la regla que aplicaste.

> Límite: La aplicación no certifica formación doctoral ni deduce comprensión de la longitud del texto. La eficacia educativa debe medirse con estudiantes y evaluación independiente.

11 - Defender, revisar y mejorar

Conservar un razonamiento revisable y una segunda versión trazable.



Captura real de la interfaz compartida. Los pasos siguientes identifican los controles; amplía la imagen si necesitas inspeccionar etiquetas pequeñas.

Qué hacer

1. Completa objetivo, física, diseño, procesado, incertidumbre, controles y conclusión.

2. Pulsa Guardar una nueva entrega. Exportar expediente conserva investigación, evidencias y entregas.

3. El docente usa los cinco criterios 0-4, cita evidencias, escribe comentarios/preguntas y pulsa Crear y exportar devolución.

4. El alumno utiliza Importar devolución, responde a las preguntas y guarda otra entrega sin sustituir la primera.

Qué significa

Las devoluciones se vinculan a una entrega concreta y su identidad; una revisión de otro caso no debe convertirse en su evaluación.

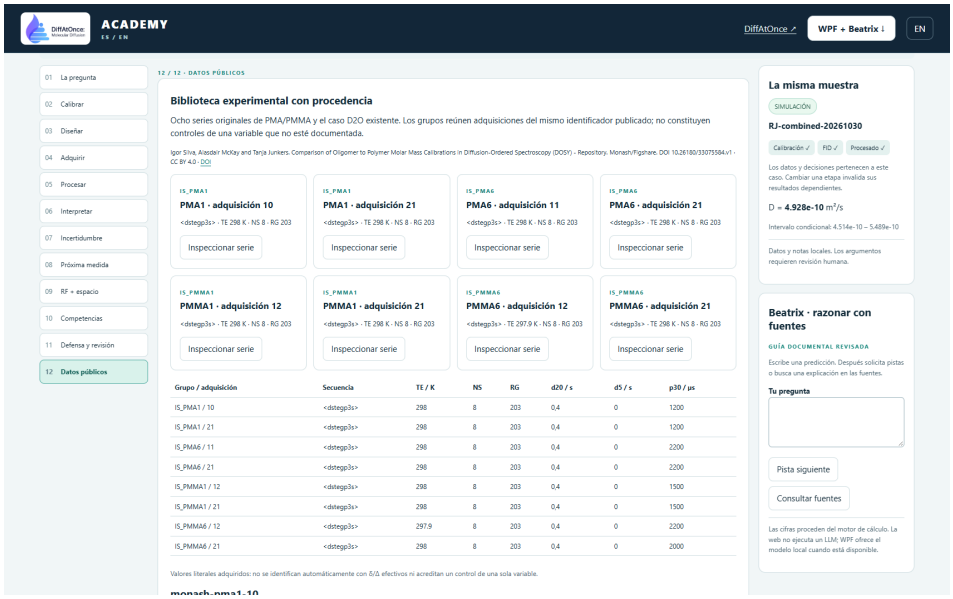
Antes de continuar

Tu segunda versión explica qué cambiaste, qué evidencia te convenció y qué permanece sin resolver.

> Límite: La puntuación y el juicio son del docente. Las verificaciones de integridad no autentican la identidad civil del evaluador ni sustituyen un sistema institucional de notas.

12 - Trabajar con originales públicos

Procesar experimentos reales y reconocer cuándo falta información para inferir D.



Captura real de la interfaz compartida. Los pasos siguientes identifican los controles; amplía la imagen si necesitas inspeccionar etiquetas pequeñas.

Qué hacer

1. Abre Datos públicos y selecciona una adquisición PMA1, PMA6, PMMA1 o PMMA6. Cada grupo incluye dos adquisiciones del repositorio.

2. La carga comprueba bytes y SHA-256 antes de interpretar FID y metadatos. Inspecciona programa, temperatura guardada, filtro digital, NS y RG.

3. Ajusta fase, apodización y ventana; pulsa Procesar serie pública. Proporciona un b por adquisición y documenta su procedencia antes de ajustar.

4. Pulsa Continuar la investigación con estas integrales para vincularlas al caso. Documenta qué condiciones permiten comparar las dos adquisiciones.

Qué significa

Los ocho conjuntos proceden del depósito Monash/Figshare de Silva, McKay y Junkers, CC BY 4.0. Las condiciones guardadas no acreditan por sí solas controles de temperatura o convección.

Antes de continuar

Distingue ausencia de b verificados, escala nominal, calibración absoluta y una D condicional al procesado.

> Límite: Estos ocho conjuntos no aportan parámetros DOSY guardados suficientes para justificar automáticamente b. No inventes ese eje ni una D verdadera o masa absoluta.

Ejemplo continuo - preparar y adquirir

Reproducir una investigación sintética con parámetros y salidas verificables.

Qué hacer

1. En La pregunta, selecciona Fallos combinados y semilla 20261030; crea el caso RJ-combined-20261030.

2. El primer nulo de 180° es 19.8993 µs y el máximo anterior está en 9.94964 µs. Introduce P90=9.94964 µs.

3. Usa D_ref=1.9×10^-9 m²/s a 298.15 K. La curva nominal ajusta D=2.20719e-09 m²/s: s=√(D_nominal/D_ref)=1.07781.

4. Introduce esa escala, ambas temperaturas 298.15 K y aplica la calibración. Diseña STE: δ=2 ms, Δ=80 ms, LED=5 ms, g_max=0.3 T/m, 20 niveles, NS=8, una réplica, reciclado=2 s, orden ascendente y presupuesto=15 min.

5. Comprueba duración aproximada 6.352 min y b_max=2.37445e+09 s/m²; adquiere la serie virtual.

Qué significa

Los valores se calculan con el motor que acompaña a esta edición. Las cifras mostradas están redondeadas; la exportación conserva la precisión disponible.

Antes de continuar

Compara el ejemplo con escala g=1 en una copia exportada, manteniendo el resto de decisiones.

Límite: Este ejemplo no proporciona parámetros de operación para tu espectrómetro ni un resultado experimental aceptado.

Ejemplo continuo - interpretar y cuestionar

Llegar a un resultado reproducible que todavía exige controles.

Qué hacer

1. Procesa con fase=0°, offset=0, LB=0 Hz y ventana Todo el espectro. Ajusta Monoexponencial con los mismos datos.

2. El ejemplo devuelve D≈4.92791e-10 m²/s y RMS residual≈0.0198293. Una cifra reproducible no convierte la mezcla/fallo combinado en una especie única.

3. Propaga 40 muestras Monte Carlo: SD relativa g=0.02, SD T=0.3 K, procesado=0.01, ruido=0.01 y escala b de secuencia=0.01.

4. El intervalo condicional ilustrativo es [4.51375e-10, 5.48915e-10] m²/s. Compara las contribuciones antes de decidir qué reducir.

5. Predice el efecto de Invertir el orden y observa el control reservado. Escribe qué explica y qué no explica la diferencia, y prepara una entrega.

Qué significa

El ejemplo muestra por qué una estimación, su incertidumbre y una explicación causal son objetos distintos.

Antes de continuar

Prueba otra semilla sin copiar estos valores: la justificación debe sobrevivir al cambio de muestra.

> Límite: Si cambias versión, parámetros, procesado o semilla, no fuerces coincidencia con esta tabla. Guarda y explica la nueva identidad.

Beatrix, fuentes y modos de respuesta

Utilizar ayuda trazable sin sustituir tu predicción ni el cálculo.

Qué hacer

1. Escribe primero Predicción y motivo. Pulsa Pista siguiente para recibir ayuda gradual vinculada a la etapa.

2. Introduce Tu pregunta y pulsa Consultar fuentes: la recuperación documental presenta pasajes revisados y referencias.

3. En WPF, Preguntar al modelo local solicita la inferencia disponible con contexto acotado. Lee siempre la etiqueta de modo y distingue guía documental de texto generado.

4. Comprueba cualquier número en el motor de cálculo y contrasta la respuesta con las fuentes citadas.

Qué significa

La edición web usa guía documental, no ejecuta un LLM en PHP. En Windows sólo se usa un modelo cuyo manifiesto y evaluación CPU estén aprobados; en caso contrario se ofrece guía documental. Un candidato entrenado no se convierte automáticamente en el modelo activo.

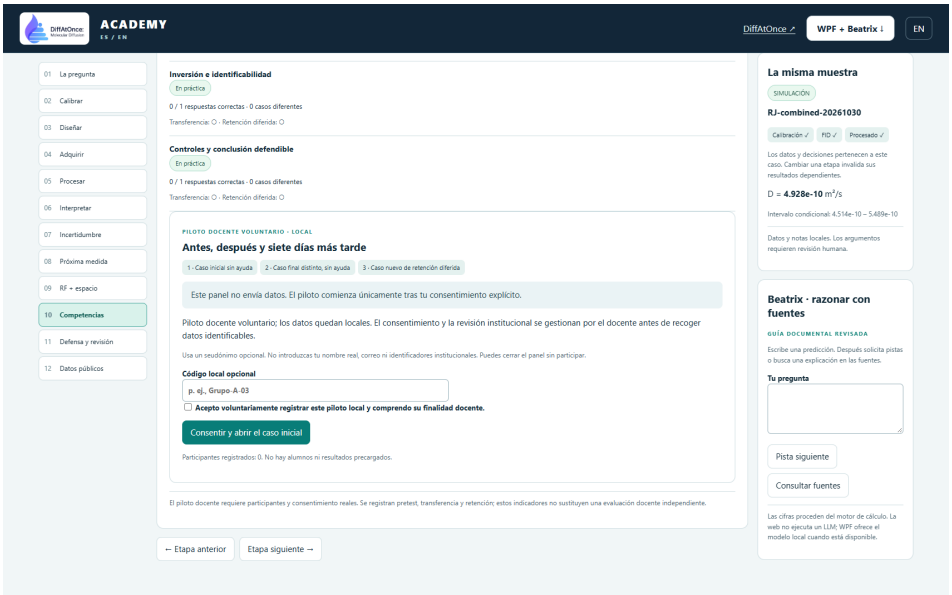
Antes de continuar

Puedes señalar qué parte procede de una fuente, cuál del cálculo y cuál de una generación real.

> Límite: Recuperación documental, entrenamiento ejecutado y modelo aprobado son estados distintos. La fluidez no valida una ecuación, calibración, asignación ni evaluación del alumno.

Protocolo docente y evaluación independiente

Comprobar si el recorrido mejora decisiones en situaciones nuevas.



Captura real de la interfaz compartida. Los pasos siguientes identifican los controles; amplía la imagen si necesitas inspeccionar etiquetas pequeñas.

Qué hacer

1. Antes del curso, reserva casos y preguntas de transferencia que no se usen para entrenar al tutor ni para seleccionar parámetros.

2. Registra diagnóstico inicial, decisiones, pistas consultadas, predicciones y primera entrega.

3. Dos docentes pueden revisar informes con la misma rúbrica, comparar desacuerdos y documentar la segunda versión.

4. Realiza caso final diferente y revisión diferida. Compara física, controles, incertidumbre y calidad de la conclusión, no sólo respuestas de opción múltiple.

Qué significa

El panel de Competencias ejecuta el piloto local con consentimiento, casos inicial/final distintos y retención diferida. La revisión de argumentos es humana. Este manual no presenta resultados de una cohorte que no se ha evaluado.

Antes de continuar

Define por adelantado qué mejora sería relevante y conserva también fallos y resultados negativos.

> Límite: Las pruebas de software verifican comportamiento informático y controles sintéticos. No sustituyen revisión experta ni evaluación educativa independiente.

Guardar, importar y reproducir

Conservar evidencia sin confundir estado local, originales y resultados.

Qué hacer

1. Exportar investigación/expediente produce JSON de la versión 1.3: muestra, decisiones, resultados, aprendizaje y entregas. El expediente de interfaz omite los FID brutos: conserva los originales por separado.

2. Importar investigación restaura un expediente compatible. Para reprocesar, vuelve a cargar la serie original o readquiere la simulación reproducible. Importar devolución exige una entrega correspondiente y verificación de su identidad.

3. La importación CSV requiere pares b/señal finitos y unidades correctas. Una procedencia local sin verificar no adquiere licencia ni calibración por importarse.

4. Para reproducir, registra versión, semilla o hashes, parámetros, fuentes b, operaciones de procesado, método y controles. Guarda el expediente fuera de la caché del navegador.

Qué significa

El almacenamiento es local. Cambiar de navegador, limpiar caché o usar otro perfil puede cambiar el progreso visible; la exportación es la copia transportable.

Antes de continuar

Abre una exportación en una sesión aislada y comprueba identidad y resultados antes de dar por terminada una entrega.

> Límite: Los JSON tienen límites de tamaño y compatibilidad. No edites hashes para forzar una importación. La web no sincroniza notas ni datos con una cuenta docente.

Fuentes, enlaces y problemas frecuentes

Encontrar la ecuación, el dato y la ayuda que corresponden a cada afirmación.

Qué hacer

1. Sinnaeve (2012), DOI 10.1002/cmr.a.21223, y Kuchel et al. (2012), DOI 10.1002/cmr.a.21241: fuentes del recorrido matemático. Consulta los 20 capítulos de Derivaciones para símbolos, páginas, ecuaciones y supuestos.

2. Torrey (1956), DOI 10.1103/PhysRev.104.563: difusión en las ecuaciones de Bloch. Shrot, Shapira y Frydman (2004), DOI 10.1016/j.jmr.2004.08.001: codificación espacial continua.

3. Silva, McKay y Junkers, DOI 10.26180/33075584.v1, CC BY 4.0: procedencia de los archivos experimentales públicos; conserva su atribución.

4. Si faltan datos públicos, revisa acceso al paquete/versionado. Si falta b, documenta su derivación; si aparece aliasing, revisa malla/lectura. Ante un fallo de guardado, exporta antes de cerrar.

Qué significa

Este manual complementa el manual doctoral y el curso original, que se mantienen disponibles con sus fuentes y convenciones explícitas.

Antes de continuar

Toda conclusión final identifica datos, modelo, condiciones, incertidumbre y limitaciones.

> Límite: Un grupo de archivos, un buen ajuste o una captura atractiva no validan por sí solos una explicación física.

Manual doctoral conservado

Sinnaeve 2012

Kuchel et al. 2012

Torrey 1956

Shrot et al. 2004

Monash / Figshare

CC BY 4.0

APÉNDICE A

Laboratorio doctoral

Documento fuente conservado - versión 1.2

Las siguientes 22 páginas corresponden al manual doctoral 1.2, de 5 de octubre de 2026. Las nueve actividades permanecen disponibles en Doctorado.

Profundiza en movimiento, fase/eco, q(t), derivaciones, campaña, casos ciegos, ILT, correlaciones, FID públicos y modelos introductorios UF/SPEN.

Las páginas se anexan sin cambiar el contenido, las ecuaciones, las figuras ni sus límites científicos. La página impresa vuelve a empezar en el documento fuente; la barra del lector y los marcadores identifican la posición en este volumen.

Para instrucciones actuales, exportación, nuevo piloto y reglas de selección del modelo usa la parte I. Sólo se utiliza un modelo cuyo manifiesto y evaluación CPU estén aprobados; en caso contrario, guía documental.

Ir al documento conservado >

Volver a las instrucciones actuales >

Aprender a medir, interpretar y defender la difusión por RMN

Manual completo del laboratorio doctoral

Versión 1.2.0 - Español - 5 de octubre de 2026

Nueve actividades conectan movimiento molecular, fases, secuencias, calibración, problemas inversos y conclusiones científicas. El objetivo es que puedas diseñar una medida y explicar por qué los datos sostienen o limitan tu afirmación.



Interfaz real del recorrido doctoral. Las figuras proceden de pruebas de la aplicación. El caso Monash se identifica como evidencia real condicionada.

Cómo usar este manual. Sigue la ruta de las páginas 2-3 y después completa las nueve actividades. Escribe predicciones antes de ejecutar y conserva controles, supuestos y conclusiones en el cuaderno.

Alcance. Los experimentos virtuales son modelos docentes sintéticos. El caso Monash contiene señales reales publicadas y su estimación de D queda condicionada a metadatos y calibración. La aplicación no controla el espectrómetro.

01 | Ruta de aprendizaje y objetivos

No necesitas resolver toda la teoría antes de experimentar. Empieza con una predicción física y vuelve a la derivación cuando necesites justificar el resultado. Los tres niveles de la actividad guiada permiten recorrer intuición, diseño experimental y matemáticas.

Las nueve actividades

1. sync: relacionar moléculas, fases, vectores de magnetización y eco.

2. sequence: construir el historial q(t), calcular b y sensibilidad al flujo.

3. guided: completar predicciones, unidades y pasos de las derivaciones.

4. campaign: calibrar y diseñar una rampa con un presupuesto de tiempo.

5. blind: distinguir causas mediante controles independientes.

6. inverse: comparar ajustes e inversión, relaciones espectrales e incertidumbre.

7. cases: procesar datos reales o sintéticos con procedencia explícita.

8. advanced: estudiar una reacción con adquisición secuencial y codificación espacial.

9. assessment: defender una conclusión y revisarla con una rúbrica humana.

Resultados que debes poder explicar

Por qué hay autodifusión en equilibrio; por qué el eco se atenúa aun cuando se refocaliza un gradiente; qué mide b; cómo un error de gradiente sesga D; cuándo dos poblaciones son resolubles; qué controles distinguen convección, procesamiento y cambio de composición.

02 | Abrir la aplicación y conservar tu trabajo

Windows WPF

1. Extrae por completo el ZIP portable. Conserva juntos el ejecutable y las carpetas Content, Web, Lab, Models y Docs. No ejecutes desde dentro del ZIP.

2. Abre **DiffAtOnce.Academy.exe**. El botón **Laboratorio doctoral** abre el laboratorio; puedes cambiar ES/EN sin perder el razonamiento activo. **Manual doctoral (PDF)** abre la edición del manual que corresponde al idioma.

3. El lector integrado necesita Microsoft Edge WebView2 Runtime. Si falta, instala el runtime oficial o utiliza la edición web. El contenido, las animaciones y las ecuaciones son locales.

Edición web

Abre la página de Academy del despliegue disponible y selecciona **Doctorado**. La web incluye el laboratorio educativo sin ejecutar un LLM. La disponibilidad pública de una versión es independiente de este manual y debe comprobarse en la página de descargas.

Cuaderno y exportación

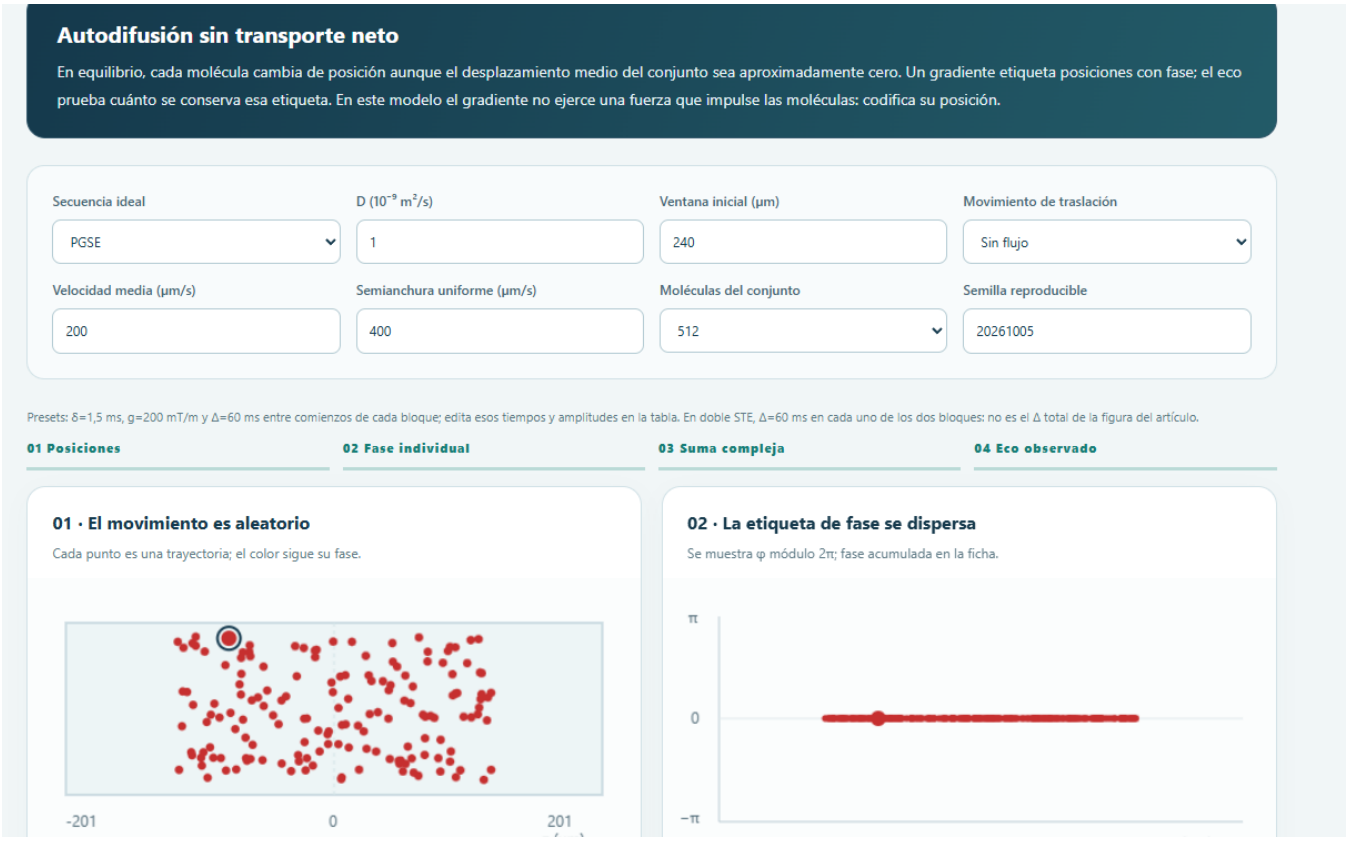
Las actividades conservan predicciones, parámetros, decisiones y evidencia entre idiomas. El cuaderno permite exportar un registro JSON; guarda una copia antes de cerrar, cambiar de equipo o limpiar el almacenamiento del navegador. Un archivo de datos importado puede requerir volver a importarse tras salir de su actividad.

El registro conserva procedencia, hashes, procesamiento y conclusiones; no convierte una simulación en validación experimental y no publica tus FID. Si el almacenamiento está bloqueado o lleno, exporta antes de cerrar.

Microsoft WebView2 Runtime - documentación oficial

03 | Moléculas, fase y eco: una sola historia

Objetivo. Explicar la pérdida de eco como una distribución de fases, no como moléculas que desaparecen.



Actividad sync: observa simultáneamente desplazamiento, fase y señal. Sigue una molécula y después considera el conjunto.

1. Predice qué ocurrirá si las moléculas permanecen quietas entre codificación y decodificación.

2. Ejecuta el modelo y relaciona la posición seleccionada con la fase y su vector complejo.

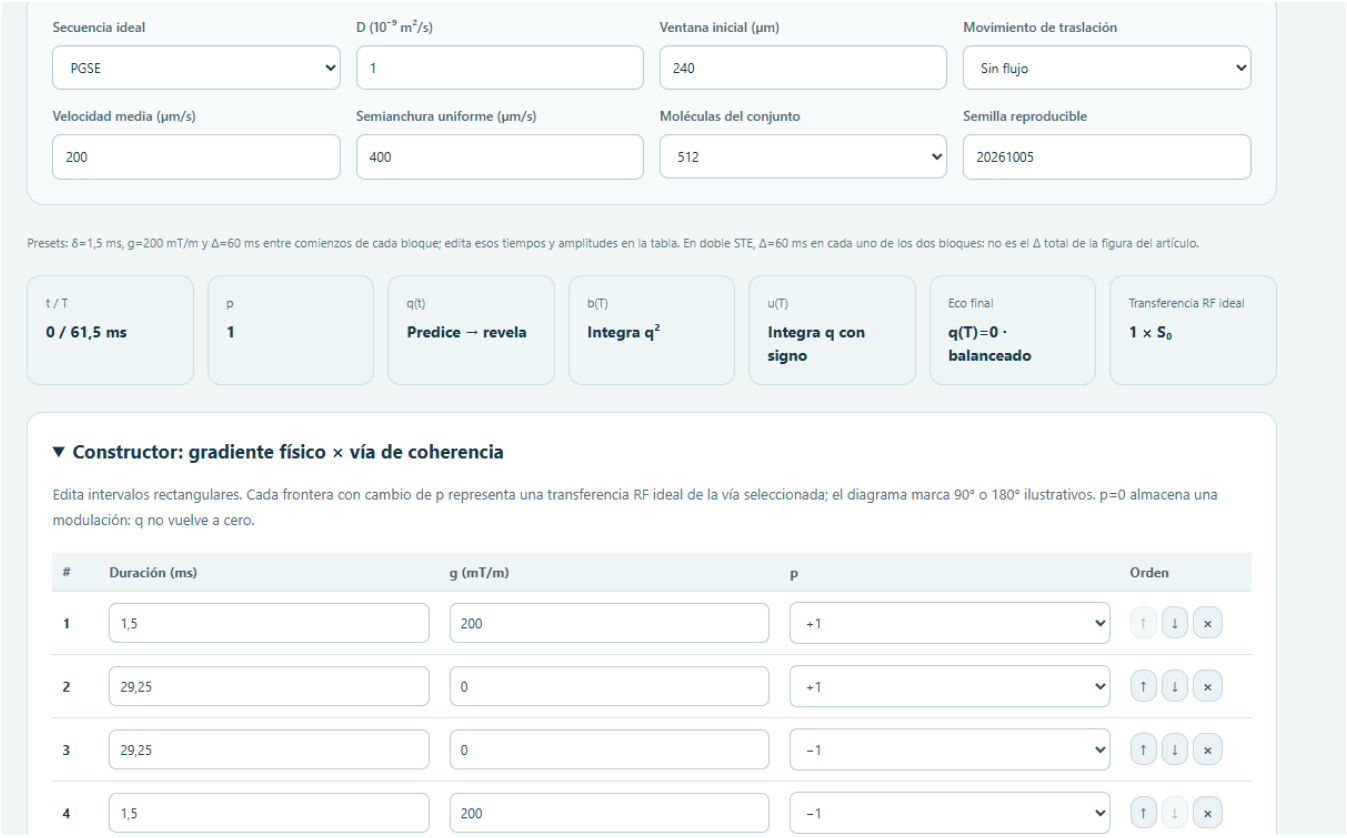
3. Aumenta D o el intervalo de difusión sin cambiar el resto. Observa la dispersión de fases y la magnitud de la suma.

4. Añade flujo uniforme o una distribución de velocidades. Distingue un desplazamiento de fase del conjunto de una pérdida de amplitud por dispersión.

$$E = \langle \exp(i\varphi) \rangle \; ; \; |E| = |\langle \cos\varphi \rangle + i\langle \sin\varphi \rangle|$$

En equilibrio pueden compensarse los flujos macroscópicos y seguir moviéndose cada molécula. La autodifusión se describe mediante desplazamientos y correlaciones; una concentración uniforme no implica D = 0. El modelo de movimiento libre no demuestra difusión restringida ni intercambio químico.

04 | Constructor de secuencias y memoria q(t)



Actividad sequence: el historial acumulado determina la ponderación, incluso durante almacenamiento longitudinal.

1. Introduce segmentos RF, gradiente y tiempo con las unidades que pide la interfaz. Antes de revelar el cálculo, dibuja tu predicción de q(t).

2. Sigue el orden de coherencia p(t). Un cambio RF modifica el gradiente efectivo p(t)g(t); no borra automáticamente el historial q.

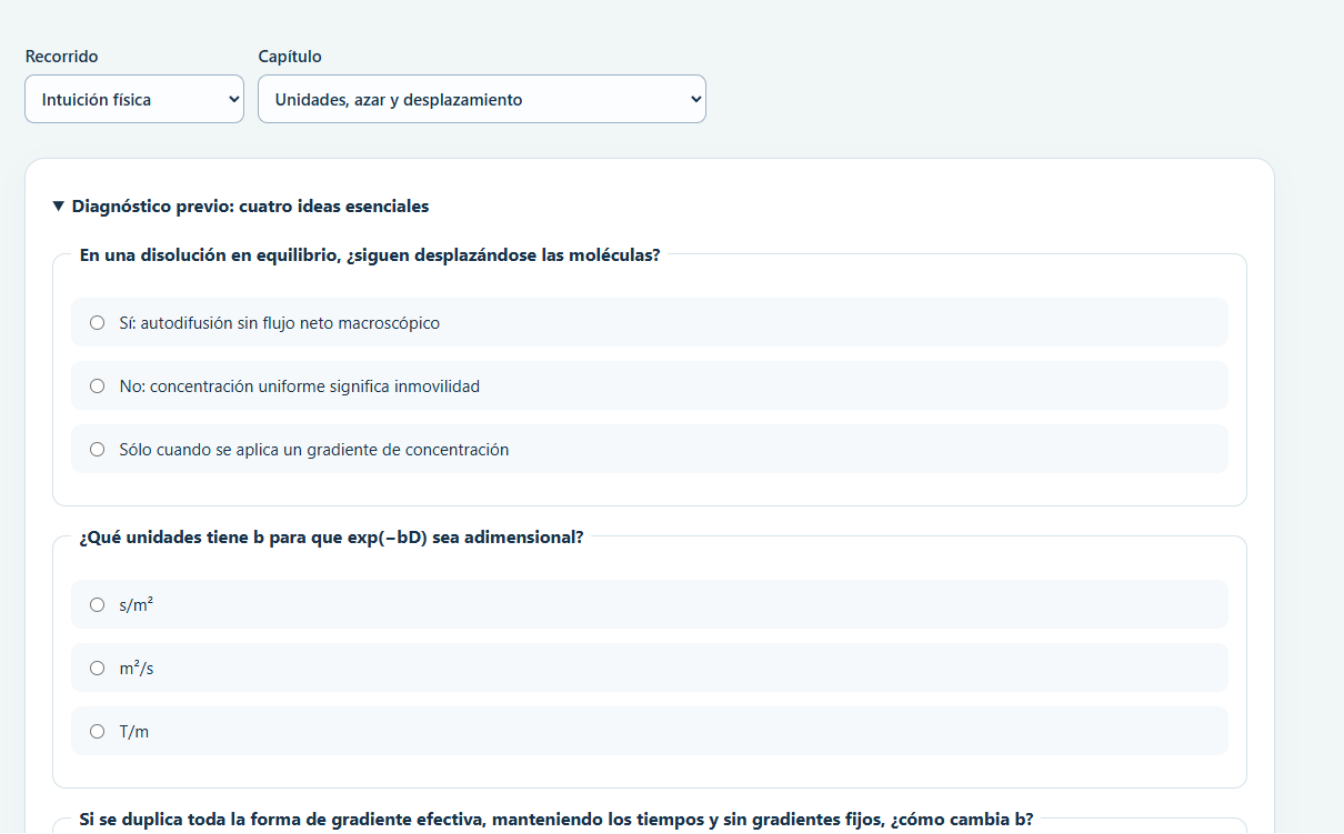
3. Compara el área bajo q^2 y el primer momento $\int q\,dt$. Un eco balanceado q(T)=0 no implica sensibilidad nula al flujo.

4. Modifica una duración, la forma del gradiente o la separación. Comprueba que la ecuación elegida corresponde a toda la forma temporal efectiva.

$$q(t) = \gamma \int_0^t p(s)g(s)\,ds$$
$$b = \int_0^T q^2(t)\,dt \; ; \; M_1 = \int_0^T q(t)\,dt$$

Usa un programa de pulsos real para interpretar p30, d20, d5 y los gradientes de selección. La misma etiqueta de parámetro no establece un intervalo efectivo universal. La aplicación construye topologías docentes; no instala una secuencia en TopSpin ni valida su ejecución.

05 | Completar la derivación, no memorizarla



Actividad guided: cada transformación se acompaña de una predicción, comprobación o pregunta sobre sus supuestos.

La colección incluye 20 capítulos, 93 pasos y las 111 ecuaciones numeradas de Sinnaeve y Kuchel. Hay 79 tareas objetivas, 16 comprobaciones numéricas y 14 pasos documentales que requieren revisión humana. La cobertura identifica DOI y páginas PDF/revista; las discrepancias de notación se explican sin modificar los originales.

1. Elige intuición, experimental o matemático. Lee el significado de las variables y las condiciones de validez.

2. Escribe la predicción o completa la tarea antes de solicitar una pista. Las pistas tienen niveles progresivos y contenido revisado.

3. Resuelve las tareas objetivas de elección, unidades o números. Los pasos algebraicos complejos requieren revisión humana; una respuesta guardada no equivale a una demostración correcta.

4. Conecta la ecuación con un experimento: ¿qué observable cambia?, ¿qué parámetro necesitas medir?, ¿qué control podría invalidar el supuesto?

La ecuación de Bloch-Torrey combina evolución de magnetización, difusión y fase espacial. La forma escalar E = exp(-Db) exige los supuestos del modelo y una ponderación correctamente calculada; no es una ley universal para cualquier muestra.

06 | Calibrar antes de elegir la rampa



Actividad campaign: identifica el nulo RF, aplica la referencia de gradientes y repite la medida para comprobar qué cambia.

Calibración manual P90

La serie de nutación virtual muestra un máximo a 9 µs, un nulo de 180° a 18 µs y un nulo de 360° a 36 µs. El de 180° cruza de polaridad; P90 = P180/2. Si eliges el nulo de 360°, P90 = P360/4. Un nulo aislado no identifica por sí solo el orden.

Selecciona duración y orden, pulsa aplicar y observa la sensibilidad. En tu flujo real, el experimento 1000 puede contener la búsqueda manual del nulo; verifica qué representa p1 antes de dividir. La potencia RF, el tuning, la muestra y el canal deben corresponder al experimento.

Referencia de gradiente

$$s = \sqrt{(D_{nominal} / D_{ref})} \; ; \; g_{real} = s \cdot g_{nominal}$$

La actividad ajusta en espacio de señal una serie sintética del patrón. El patrón y su D deben corresponder a temperatura y matriz: si las temperaturas difieren, la calibración no se aplica. La ley cuadrática supone que se escala toda la forma efectiva; gradientes fijos y términos cruzados requieren el historial completo.

07 | Diseñar δ, Δ, sensibilidad y tiempo

1. Predice si la rampa tendrá suficiente atenuación usando b_max·D. Una atenuación mínima aporta poca información; una cola enterrada en ruido tampoco resuelve componentes.

2. Elige δ, Δ y gradiente máximo. Cambia uno cada vez y observa atenuación, residuos y señal absoluta.

3. Compara PGSE, STE, STE + LED y los dos lazos reflejados ideales Double-STE. Revisa las definiciones temporales del modelo.

4. Fija puntos, repeticiones, NS, d1 y adquisición. Comprueba el presupuesto; más datos tienen un coste de tiempo y una muestra puede evolucionar mientras se adquieren.

5. Entrega una conclusión con calibración, rango b, SNR, tiempo y controles. Después revela los parámetros generadores para evaluar el sesgo.

$$b_{PGSE} = \gamma^2 g^2 \delta^2 (\Delta - \delta/3)$$

$$\text{Tiempo} = \text{puntos} \times \text{repeticiones} \times \text{NS} \times (d1 + \text{AQ} + \text{duración de secuencia})$$

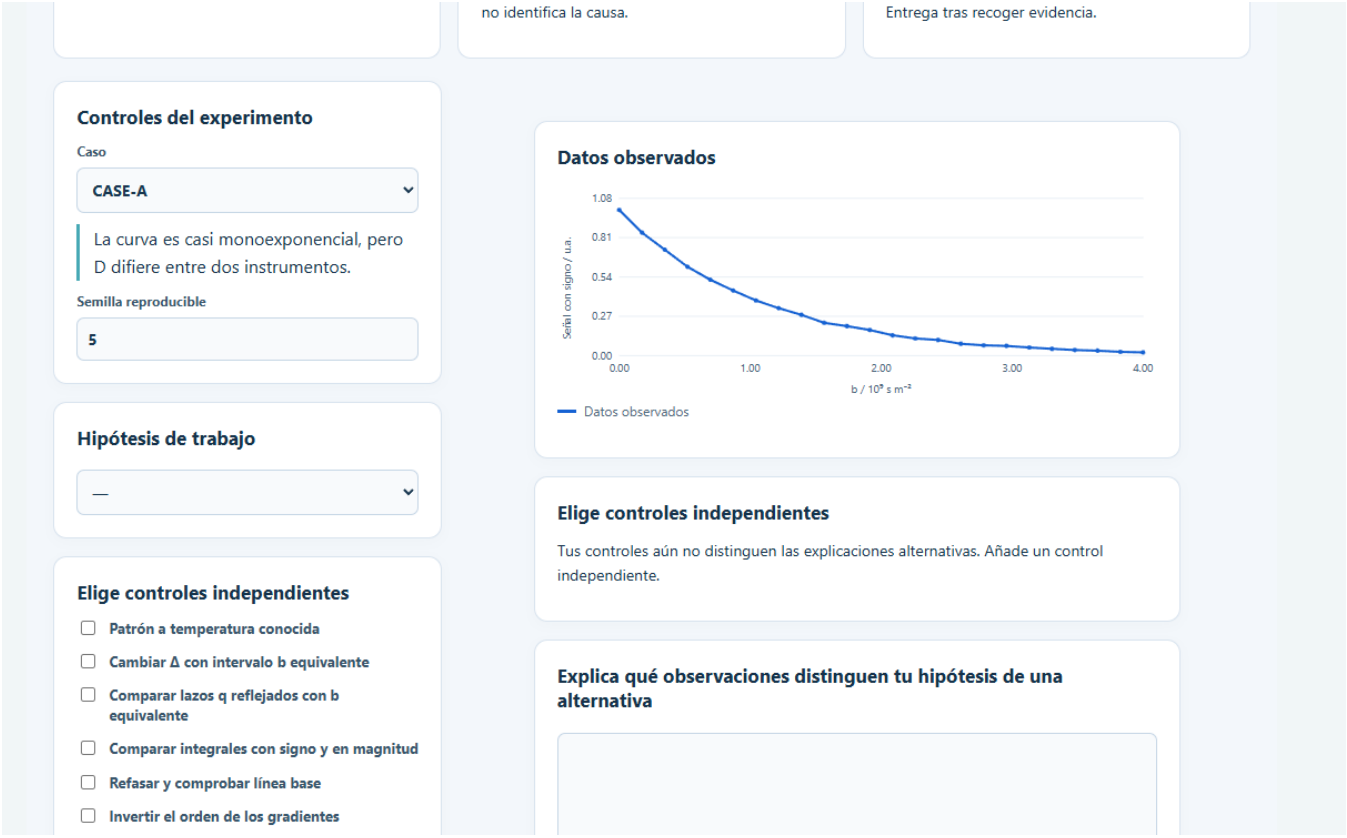
La recuperación virtual es 1 - exp(-d1/T1). La transferencia RF ideal del camino seleccionado vale 1 para PGSE, 1/2 para STE/LED y 1/4 para los dos ecos estimulados. La compensación tiene un coste de sensibilidad. Una recuperación constante insuficiente puede conservar D tras normalizar, mientras empeora la precisión. Los factores T1/T2 y de error RF restantes son aproximaciones docentes, no simulaciones completas de caminos de coherencia.

En Double-STE se usan dos lazos q idénticos y reflejados: b = 2b_lazo y el primer momento de flujo uniforme se cancela idealmente. Δ pertenece a cada lazo. LED se representa mediante tiempo adicional y no se afirma que elimine automáticamente convección.

Conclusión que debes justificar

Explica qué ganarías aumentando Δ y qué perderías por relajación, convección o evolución temporal. La mejor rampa es la que responde a tu pregunta con evidencia suficiente dentro de sus restricciones.

08 | Casos ocultos: elegir controles informativos



Actividad blind: la curva inicial no revela su causa. La respuesta se revisa después de una hipótesis, controles y explicación de evidencia.

Cinco casos exploran escala de gradiente, convección, fase, cambio temporal y recuperación. La interfaz oculta el modelo con finalidad docente; no constituye un examen seguro. La curva sola no establece un diagnóstico único.

1. Elige una hipótesis y una explicación alternativa. Predice qué control daría resultados distintos bajo cada una.

2. Adquiere controles: patrón a temperatura conocida; Δ y b equivalente; lazos reflejados; fase/línea base; orden inverso; referencia temporal; recuperación; nutación RF.

3. Escribe qué observación apoya tu hipótesis, cuál la debilita y qué no has descartado.

4. Entrega el diagnóstico. Sin controles discriminantes o explicación suficiente, la causa permanece oculta. Una hipótesis equivocada puede revisarse tras consultar la evidencia.

La revisión automática sólo verifica requisitos del ejercicio; no evalúa la calidad completa del argumento ni valida un diagnóstico real. Varias causas pueden coexistir en una muestra experimental.

09 | Una curva, varios problemas inversos



Actividad inverse: todos los métodos reciben los mismos datos; compara distribuciones y residuos en vez de juzgar el mapa por su aspecto.

$$y_i = \Sigma_j K_{ij} a_j + \varepsilon_i \; ; \; K_{ij} = \exp(-b_i D_j)$$

Mono: estima A y D por mínimos cuadrados en espacio de señal; no aplica logaritmo ni elimina señales negativas. Un valor de D único puede ser aparente si la muestra es una mezcla.

NNLS: minimiza el error con amplitudes no negativas. **Tikhonov positivo:** añade suavidad mediante diferencias segundas sobre una malla log D. **L1 positivo:** penaliza el área no negativa. Todos reportan residuo KKT, tolerancia y convergencia. Estos ejemplos no implementan PALMA, CONTIN ni todos los algoritmos del catálogo.

Cambia SNR, contraste de D y penalización. Si picos distintos explican casi igualmente los mismos datos, explica qué conclusión se mantiene y qué detalle depende del método. Un máximo local no identifica una especie.

10 | Correlaciones espectrales e incertidumbre

Separación conjunta supervisada

La matriz sintética contiene dos componentes con D compartida entre frecuencias. El ejercicio conoce sus espectros puros y proyecta la matriz sobre esas plantillas antes de ajustar las curvas separadas. Es separación supervisada, no NMF ciega ni identificación química automática.

1. Examina valores singulares, correlación de plantillas e indicador de condicionamiento. No conviertas una segunda singularidad en evidencia automática de dos especies.

2. Aumenta el solapamiento hasta uno. Si las plantillas son idénticas, las curvas individuales no son identificables mediante esta proyección.

3. Compara la estimación conjunta y la de una única señal. Explica el supuesto que aporta información y cómo lo comprobarías con datos independientes.

Bootstrap condicionado al modelo

La actividad remuestrea residuos del ajuste mono con una semilla reproducible. El intervalo muestra incertidumbre por ruido dentro de ese modelo; no tiene cobertura del 95 % validada. No incluye sesgos de mezcla, calibración, términos cruzados, dependencia experimental o selección del modelo.

Un intervalo estrecho alrededor de un valor sesgado puede ser engañoso. Guarda por separado incertidumbre condicional, sensibilidad a regularización y alternativas científicas. La revisión de la conclusión requiere criterio humano.

Fuentes relacionadas

Tikhonov regularization and optimal choice of the regularization parameter (2011)

PALMA: entropy/L1 hybrid regularization (2017)

11 | Caso real: del FID a una conclusión condicionada



Caso real Monash después de FFT, integración y ajuste nominal. El resultado conserva sus condiciones y no valida D absoluta.

El caso Monash D2O proviene de Silva, McKay y Junkers, DOI 10.26180/33075584.v1, licencia CC BY 4.0. El subconjunto docente tiene 16 FID de 16 384 puntos complejos y la secuencia dstegp3s (Double-STE + LED). Los archivos originales se leen sin modificación.

1. Carga el caso y revisa procedencia, hash y parámetros antes de procesar.

2. Realiza FFT y revisa corrección de retardo de grupo, ensanchamiento de línea, fase y línea base. El ejemplo utiliza retardo de grupo 76 y LB 0.3 Hz; no los transfieras a otra muestra.

3. Selecciona la señal en ppm a partir del espectro. La ventana docente 4.5-5.0 ppm corresponde a este caso, no a todas las muestras.

4. Compara ajuste log de señales positivas y ajuste directo con signo. Conserva las decisiones de fase e integración.

El pico está cerca de 4.7014 ppm; una fase manual alrededor de -104.6° orienta esta señal en este procesado. Usa la propia inspección espectral para decidir, no la cifra como receta universal.

12 | Importar y conservar la procedencia

Qué se puede importar

El lector acepta curvas CSV con b_s_m2 y signal, FID CSV con time_s, real e imag, y espectros CSV con ppm y real. Bruker bruto requiere acqus y fid, o acqus, acqu2s y ser/ser.ser; procesado requiere 1r y procs. Selecciona el tipo correcto y revisa las unidades.

1. Trabaja con una copia de lectura y conserva el original. Registra archivos, tamaños y hashes.

2. Comprueba TD, dimensiones, endianness/tipo numérico, frecuencia, ancho espectral, secuencia, lista de gradientes y temperatura. Un archivo parcial no demuestra un experimento completo.

3. Documenta procesamiento, ventana ppm, normalización, definición b, método de ajuste e incertidumbre.

4. Exporta el cuaderno y registra qué datos necesitas para una conclusión absoluta. Tras abandonar la actividad puede ser necesario reimportar el archivo; no supongas que el navegador conserva un FID completo.

Qué permite afirmar Monash

El cálculo utiliza los valores nominales TopSpin Gamma, Glen, Gdist y difflist para construir b. Una estimación nominal cercana a 1.93×10^{-9} m^2/s es un resultado condicionado del procesado; no queda validada como D absoluta sin calibración de gradiente, temperatura y definición temporal de la secuencia.

Los tres casos sintéticos de esta actividad permiten explorar señal aislada, fase y deriva. Indica en cada conclusión si usaste datos publicados reales, una perturbación sintética o una simulación completa.

13 | Difusión resuelta en el tiempo



Actividad advanced: una conversión A → B cambia la atenuación mientras una rampa secuencial recorre b.

$$f_A(t) = \exp(-kt)$$
$$E(b,t) = f_A(t)\exp(-bD_A) + [1-f_A(t)]\exp(-bD_B)$$

1. Predice la dirección del sesgo si aumentas b mientras A se convierte en B.

2. Compara orden directo e inverso sobre la misma ventana temporal. Si las estimaciones cambian con el orden, una descripción estática exige controles.

3. Promedia rampas directas/inversas y compáralas con la referencia simultánea ideal en el tiempo medio.

4. Varía k, duración y tiempo de inicio. Identifica cuándo la evolución dentro de la adquisición afecta tu interpretación.

Promediar dos rampas cuesta dos veces los transitorios. Puede reducir deriva de primer orden, pero no constituye una instantánea ni elimina todo sesgo cinético. El modelo supone respuesta RMN igual, D constantes e intercambio despreciable durante cada período de codificación.

14 | Ultrafast y SPEN: qué gana la codificación espacial

Pregunta científica

¿Puedes obtener la información de difusión antes de que cambie la composición? La paralelización espacial asigna diferentes ponderaciones a diferentes posiciones y permite recogerlas dentro de una adquisición. El coste aparece en codificación, lectura, resolución y sensibilidad.

1. Examina b(z), el perfil de la bobina y la pérdida adicional durante lectura. La referencia simultánea ideal permite separar evolución temporal y limitaciones de codificación.

2. Compara ultrafast bruto y corregido. La corrección supone perfiles conocidos de manera independiente y amplifica ruido donde la sensibilidad es baja.

3. Aumenta la dispersión espacial del modelo inspirado en SPEN. Compara datos brutos y decodificación positiva con suavidad.

4. Concluye qué necesitarías calibrar o medir para convertir este ejemplo en un experimento cuantitativo.

Límites explícitos

El ejercicio prescribe b(z), perfiles y un aumento docente de ruido √N. SPEN se representa mediante una matriz gaussiana de dispersión espacial, no mediante propagación Bloch de pulsos chirp. No calcula adiabaticidad, ancho RF, gradientes reales, términos cruzados o toda la resolución espectral. No representa de manera cuantitativa un protocolo SPEN-DOSY concreto.

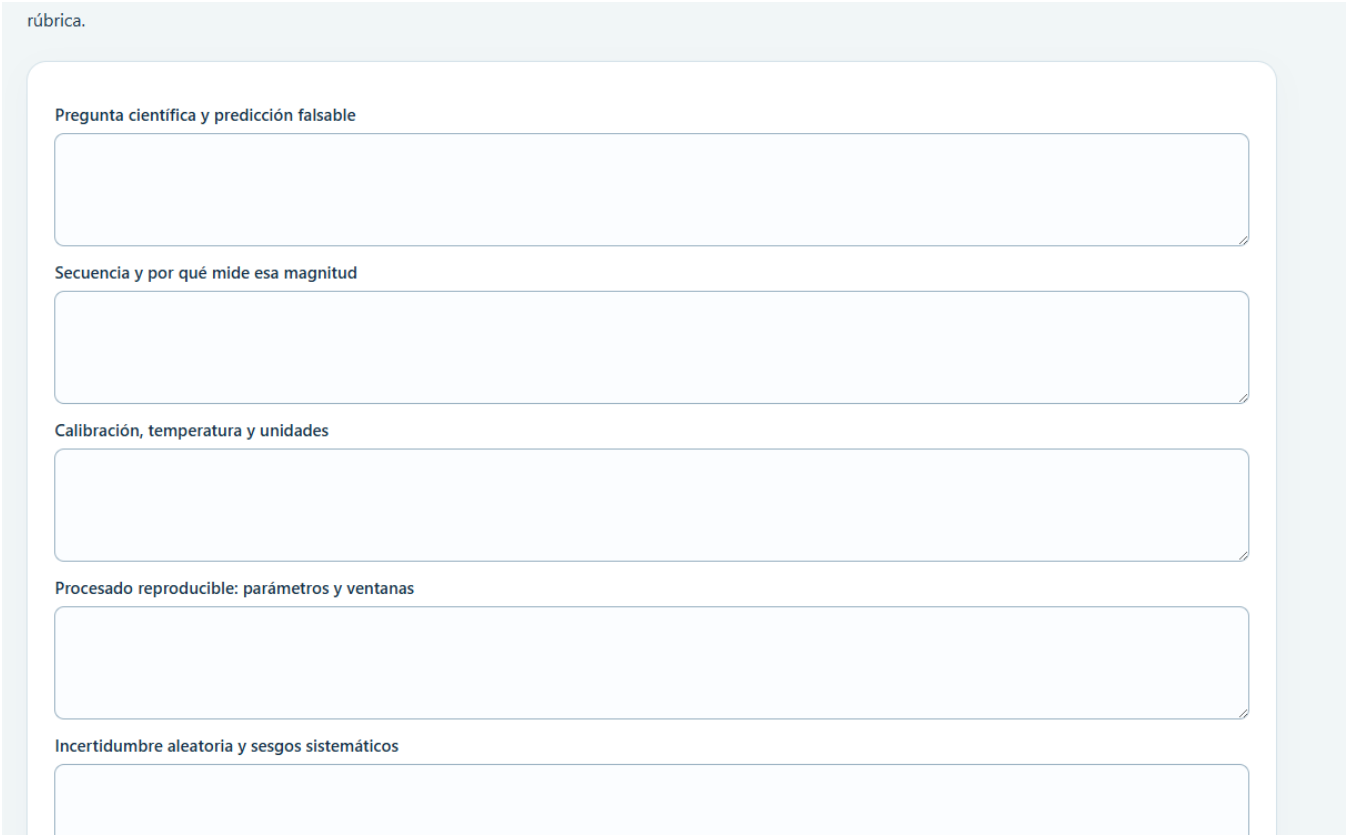
El mapa y la simulación ayudan a elegir preguntas y controles. Una secuencia real requiere cálculo de su codificación, calibración, comprobación experimental y estimación de incertidumbre.

Ultrafast diffusion-based unmixing of ^{1}H NMR spectra (2021)

Optimisation of spatially-encoded DOSY for mixtures (2021)

Time-resolved and ultrafast restricted-diffusion studies (2020)

15 | Defender la conclusión y revisar el argumento



Actividad assessment: una rúbrica orienta la revisión humana del razonamiento; no identifica especies ni califica argumentos con un LLM.

La rúbrica contiene cinco criterios con niveles 0-4. Un docente o investigador asigna la valoración según la evidencia, no según lo atractivo del gráfico. Consulta los nombres y descriptores completos que presenta la actividad.

1. Define una pregunta y una afirmación concreta; separa observación e interpretación.

2. Justifica calibración, secuencia, rango b y procesamiento con los metadatos disponibles.

3. Explica controles, supuestos, residuo, incertidumbre condicional y alternativas.

4. Indica qué cambiaría tu conclusión o qué medida falta.

5. Solicita revisión humana, conserva comentarios y registra una versión revisada del argumento.

Guardar un texto o completar tareas objetivas no demuestra haber comprendido toda la derivación. La evaluación de aprendizaje debe incluir un caso nuevo que no use los mismos parámetros ni una solución memorizada.

15b | Rúbrica para revisión humana

La aplicación registra siete apartados: pregunta, secuencia, calibración, procesado, incertidumbre, controles y conclusión. El mínimo de 30 caracteres comprueba que existe una respuesta; no mide su corrección semántica. La nota permanece sin asignar hasta revisión humana.

Cinco criterios, 0-4 cada uno

1. Física y ecuación apropiada: relación entre observable, historial q, b y condiciones del modelo.

2. Diseño y controles discriminantes: adquisición que responde a la pregunta y controles que separan explicaciones.

3. Procedencia y procesado reproducible: archivos, unidades, hashes y decisiones suficientes para repetir el análisis.

4. Incertidumbre y estabilidad: ruido, sesgos, sensibilidad a parámetros y límites de resolución.

5. Conclusión proporcionada a la evidencia: afirmación delimitada y próxima medida capaz de modificarla.

Descriptores comunes de los niveles

0: ausente o contradictorio. **1:** afirmación sin justificación. **2:** correcto con controles incompletos. **3:** justificado, reproducible y con límites. **4:** compara alternativas, cuantifica límites y propone una prueba independiente.

Usa los comentarios para revisar el argumento; no cambies una puntuación pendiente a validación experimental. El programa no asigna esta nota automáticamente ni delega el juicio en Beatrix.

16 | Beatrix, pistas y separación de evidencia

Dos modos claramente distintos

Lecciones originales WPF: Beatrix conserva el modelo local ajustado de las 24 lecciones originales. Sus respuestas generadas deben contrastarse con fuentes y datos.

Nuevas matemáticas y actividades doctorales: las ayudas son documentales y revisadas. No generan explicaciones nuevas mediante un LLM, no se entrenó un modelo nuevo para estos capítulos y no se utiliza el tutor para calificar argumentos abiertos.

Web: el laboratorio funciona sin inferencia LLM. Las pistas revisadas pueden consultarse sin transferir los datos importados a un modelo remoto.

Por qué importa esta separación

Una respuesta convincente puede confundir fase, q(t), b y el perfil de la bobina. Las pruebas anteriores del modelo en los nuevos capítulos detectaron contradicciones físicas; por eso se entrega una guía revisada. Un tutor útil debe decir qué fuente y supuesto sostiene la explicación.

Etiquetas que debes conservar

Sintético: un modelo genera los datos. **Real:** señales publicadas o importadas con procedencia. **Condicionado:** cálculo sujeto a parámetros o calibración incompletos. **Verificado por software:** pruebas de código e interfaz. **Validado experimentalmente:** evidencia obtenida con controles adecuados; no se deduce de que una prueba de software pase.

17 | Ecuaciones esenciales y sus condiciones

$$J = -D\,\nabla c \;;\; \partial c/\partial t = -\nabla\cdot J = D\,\nabla^2 c$$

Conservación y ley de Fick con D constante. En equilibrio J neto puede ser cero y existir desplazamiento molecular.

$$P(x,t|x_0) = (4\pi Dt)^{-1/2}\exp[-(x-x_0)^2/(4Dt)]$$
$$\langle (x-x_0)^2\rangle = 2Dt$$

Propagador unidimensional libre, gaussiano, sin fronteras ni deriva. En tres dimensiones $\langle |r-r_0|^2\rangle = 6Dt$.

$$\partial M/\partial t = D\nabla^2 M + i\gamma p(t)g(t)xM - R_2 M$$
$$q(t) = \gamma\int_0^t p(s)g(s)ds \;;\; E = \exp[-D\int_0^T q^2(t)dt]$$

Forma transversal compleja simplificada de Bloch-Torrey con una convención de fase. La expresión del eco supone difusión libre gaussiana y refocalización q(T)=0; la relajación y los caminos de coherencia se tratan según la secuencia.

$$E_v = \exp(-Db)\exp(-ivM_1) \;;\; M_1 = \int_0^T q(t)dt$$
$$E_uniforme = \exp(-Db)\,\mathrm{sinc}(v_max\, M_1)$$

Con fase positiva de codificación y q(T)=0, integración por partes da la fase de velocidad -vM1. La última expresión promedia una distribución uniforme de velocidades entre -v_max y +v_max. No es una ley universal de convección.

Al comparar con la vista sincronizada: esa vista usa la convención opuesta, $\varphi = -\gamma\int p(t)g(t)z(t)dt$, y su factor de flujo es exp(+ivM1). Ambas convenciones conjugan el eco: cambian el signo de la fase y de la parte imaginaria, pero conservan |E|, b y D.

18 | Unidades, supuestos y errores frecuentes

Usa unidades SI dentro de los cálculos: γ en rad s^{-1} T^{-1}; g en T m^{-1}; δ y Δ en s; q en rad m^{-1}; b en s m^{-2}; D en m^2 s^{-1}. El producto bD es adimensional. Si empleas γ en Hz/T necesitas tratar el factor 2π de manera coherente.

1. No confundir δ con Δ ni duración de un lobo con duración total de un par bipolar.

2. No reiniciar q durante almacenamiento longitudinal: el historial de codificación continúa determinando la atenuación.

3. No aplicar la ecuación rectangular a cualquier forma de gradiente. La forma y los gradientes fijos pueden alterar b y sus términos cruzados.

4. No confundir eco balanceado y primer momento nulo de velocidad.

5. No interpretar un pico ILT como identidad química, masa absoluta o población experimental demostrada.

6. No tratar un intervalo bootstrap condicionado como incertidumbre total.

7. No trasladar fase, ventana ppm, índices o calibración de una muestra a otra sin comprobar el espectro y el experimento.

Correcciones de notación en los artículos

Los capítulos documentan discrepancias literales encontradas al contrastar ecuaciones, unidades y límites. Conservan la ecuación del PDF junto con la expresión revisada y su justificación; no afirman un erratum oficial si no existe. Consulta la nota correspondiente antes de usar una fórmula de catálogo.

19 | Resolver problemas de uso y reproducir el trabajo

1. El lector WPF no abre: verifica extracción completa y WebView2 Runtime. Conserva el mensaje del error; usa la web si el runtime no está disponible.

2. Entrada no válida: revisa límites, signo y unidades. El laboratorio elimina resultados inválidos. Tras editar un parámetro, las gráficas anteriores se identifican como anteriores; vuelve a ejecutar.

3. No se revela un caso: entrega hipótesis, controles discriminantes y una explicación de evidencia. El mínimo de texto es un requisito de interacción, no una calificación de calidad científica.

4. El mapa cambia al variar λ: inspecciona residuos, amplitudes y supuestos. Guarda ambas configuraciones y explica qué conclusión es estable.

5. No convergencia: consulta KKT/tolerancia. No interpretes la distribución como una solución numérica confirmada mientras no converja.

6. No guarda el navegador: exporta el cuaderno antes de cerrar. Conserva datos originales por separado y reimporta cuando haga falta.

7. Importación incompleta: revisa tipo de archivo y metadatos requeridos. No inventes calibración o parámetros faltantes.

Registro mínimo reproducible

Versión de aplicación y contenido, actividad y semilla, parámetros y unidades, datos/DOI/hashes, procesamiento, método y tolerancia, predicción, controles, conclusión y límites. Conserva evidencia de software por separado de evidencia obtenida en el espectrómetro.

20 | Fuentes primarias, licencia y consulta

Stejskal & Tanner (1965). Spin Diffusion Measurements: Spin Echoes in the Presence of a Time-Dependent Field Gradient.
doi:10.1063/1.1695690

Sinnaeve (2012). The Stejskal-Tanner Equation Generalized for Any Gradient Shape.
doi:10.1002/cmr.a.21223

Kuchel et al. (2012). Stejskal-Tanner Equation Derived in Full.
doi:10.1002/cmr.a.21241

Silva, McKay & Junkers. Monash D2O public data.
doi:10.26180/33075584.v1

El subconjunto de datos se atribuye a sus autores bajo CC BY 4.0. El repositorio docente conserva el manifiesto provenance.json; el manual no reproduce los PDF privados de los artículos.

Diffusion inversion / related methods.
Tikhonov regularization (2011)
PALMA (2017)

Spatial and time-resolved methods.
Ultrafast diffusion-based unmixing (2021)
SPEN-DOSY optimisation (2021)
Time-resolved and ultrafast diffusion (2020)

Archivos de la aplicación

Content/derivations.json: derivaciones revisadas. Web/doctoral-*.js: actividades. Content/doctoral-data/: datos públicos y procedencia. Docs/DOCTORAL_MANUAL_ES.pdf y EN.pdf: este manual. START_HERE_ES_EN.txt: inicio del paquete. Los nombres y rutas dependen del paquete publicado, no de una calibración del instrumento.

Documentación de aplicación educativa. Comprueba las fuentes, los metadatos y los supuestos antes de convertir un resultado en una afirmación experimental.

APÉNDICE B

Curso original y herramientas

Documento fuente conservado - versión 1.0

Las siguientes 20 páginas conservan el manual de formación original 1.0. Sirven como referencia de las 24 lecciones, ejemplos, taller y funcionamiento histórico de Beatrix.

Las capturas y los nombres de versión se mantienen intencionadamente. La edición 1.3 añade Investigación continua sin convertir esos documentos históricos en una descripción de sus nuevas pantallas.

Las páginas se anexan sin cambiar el contenido, las ecuaciones, las figuras ni sus límites científicos. La página impresa vuelve a empezar en el documento fuente; la barra del lector y los marcadores identifican la posición en este volumen.

Para instrucciones actuales, exportación, nuevo piloto y reglas de selección del modelo usa la parte I. Sólo se utiliza un modelo cuyo manifiesto y evaluación CPU estén aprobados; en caso contrario, guía documental.

Ir al documento conservado >

Volver a las instrucciones actuales >

DiffAtOnce:
Molecular Diffusion

DOSY · ES / EN

DiffAtOnce Academy

Manual de formación

Aprender a medir. Entender antes de interpretar.

24 módulos · 48 ejemplos · 17 escenas

Estudiantes y docentes · versión 1.0

Simulaciones sintéticas, fuentes y capturas reales de la aplicación.

Beatrix: LLM local + texto del curso · paquete híbrido verificado

2026-10-05 · diffatonce.com

Índice

Guía de uso · DiffAtOnce Academy **3**

Abrir la aplicación . . . 3

Cuatro espacios para una misma lección . . . 4

Taller numérico: provocar errores y medir sus consecuencias . . . 5

El laboratorio de 17 escenas . . . 7

Beatrix: cómo preguntar y leer la respuesta . . . 9

Consultar diapositivas y métodos . . . 11

Sesión guiada de 100 minutos . . . 13

Demostración de 20 minutos . . . 13

Guardar y compartir el trabajo . . . 14

Problemas habituales . . . 14

Recorrido completo de 24 módulos **15**

Galería de ejemplos y comprobaciones **18**

Procedencia y reproducibilidad **20**

Guía de uso · DiffAtOnce Academy

La finalidad del curso es aprender a tomar decisiones defendibles en DOSY. Antes de cambiar una opción, describa qué cree que ocurrirá. Después compare lo que esperaba con el resultado y escriba qué control necesitaría en una muestra real. La aplicación presenta problemas, mecanismos y comprobaciones; los valores de sus talleres son simulados.

Abrir la aplicación

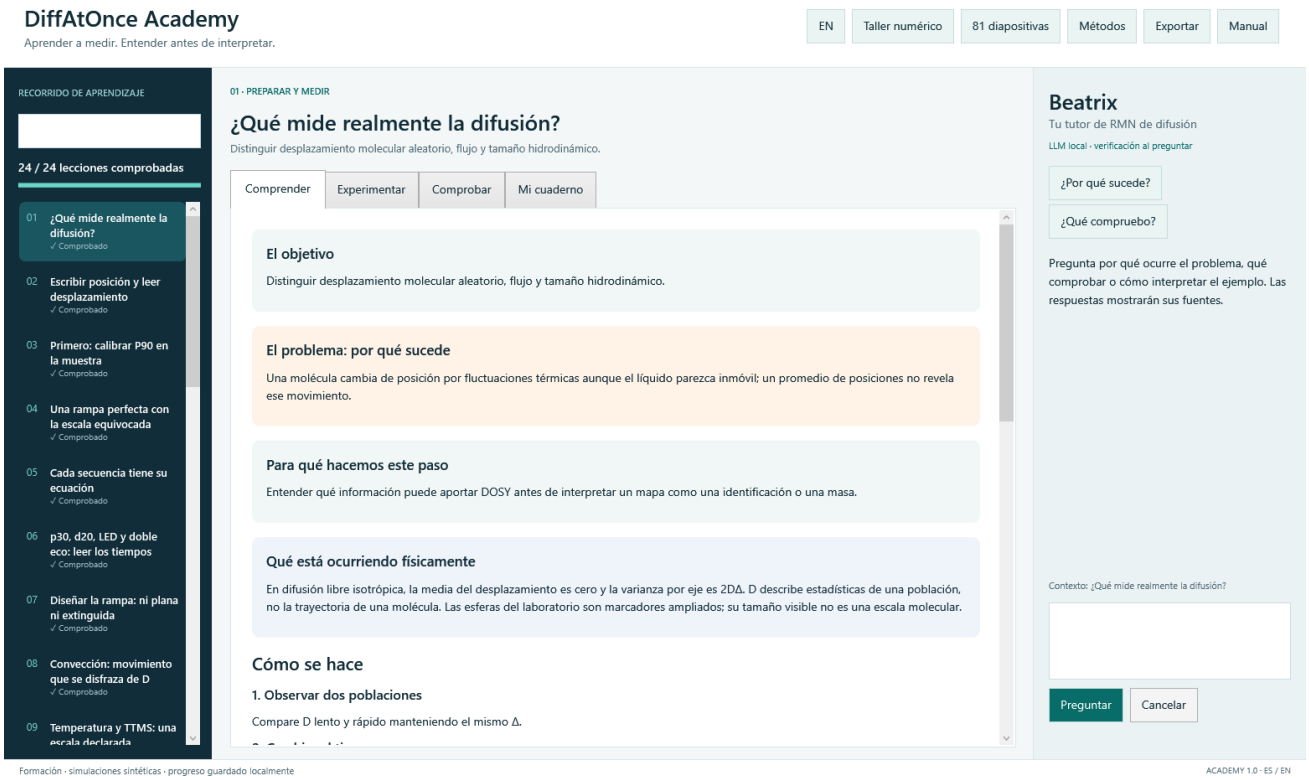
1. Extraiga la carpeta completa del paquete en Windows.
2. Abra DiffAtOnce.Academy.exe conservando sus carpetas Content, Lab y cualquier carpeta Models suministrada.
3. Elija español mediante el botón **ES/EN** de la barra superior.
4. Seleccione una lección en el recorrido de la izquierda. La búsqueda filtra título, capítulo y explicación del problema.
5. Para una sesión práctica, empiece por **03 · Primero: calibrar P90 en la muestra**. Los módulos 01 y 02 dan la explicación mínima de difusión y fase.

El botón **Manual** abre la edición PDF del idioma activo. En una ventana compacta use las barras de desplazamiento; el contexto de Beatrix sigue siendo la lección seleccionada.

El laboratorio usa WebView2. Si falta su runtime, verá una explicación en **Experimentar**; puede continuar en **Comprender**, **Comprobar** y el **Taller numérico**. Los enlaces a artículos se abren en el navegador externo; las escenas del laboratorio se cargan desde el paquete local.

Cuatro espacios para una misma lección

La ventana de formación



Captura real de QA. El progreso 24/24 proviene del test automatizado, no de un estudiante evaluado. El panel Beatrix identifica el modo activo; no se ha inventado una respuesta del modelo.

Espacio	Qué hacer	Qué producir
Comprender	Lea objetivo, problema, finalidad, mecanismo y pasos. Abra ejemplos y fuentes.	Una hipótesis y una predicción.
Experimentar	Reproduzca la animación y cambie una variable. Compare caso útil y contraejemplo.	Una observación con parámetros y unidades.
Comprobar	Responda las dos preguntas y pulse **Comprobar y aprender**.	Una decisión y su explicación.
Mi cuaderno	Escriba qué cambió, qué ocurrió y qué comprobaría después.	Un registro razonado por módulo.

Un módulo se marca **Comprobado** cuando sus dos respuestas son correctas. Puede repetirlo después de revisar las explicaciones. La barra representa módulos comprobados, no una certificación para operar un espectrómetro. Las notas se guardan al salir del campo, cambiar de lección o cerrar la ventana.

Abrir este experimento → carga la escena asociada y los parámetros disponibles del ejemplo. Algunos ejemplos son ejercicios escritos de decisión o crítica de resultados históricos: no son 48 motores de simulación distintos. Mantenga su instrucción a la vista y resuelva la parte conceptual en el cuaderno.

Taller numérico: provocar errores y medir sus consecuencias

Pulse **Taller numérico** en la barra superior. Sus cinco pestañas funcionan con curvas calculadas y muestran supuestos. Puede escribir decimales con punto o coma, pulsar **Calcular** y guardar **Exportar resultado JSON**. Ese archivo lleva la etiqueta synthetic-teaching-simulation.

Al editar un parámetro se borran la curva y los resultados anteriores. Pulse **Calcular** para generar una salida coherente con los valores nuevos; no lea una gráfica antigua como si correspondiera a un campo recién cambiado. Beatrix recibe el contexto del taller al abrirlo, cambiar de pestaña o calcular: parámetros, resultados calculados y supuestos del ejercicio. Antes de pedir una explicación numérica, compruebe que hay un resultado vigente.

1. Pulso de 90°

Exp. 1000: 22 / 2 = 11 µs



Captura real del taller nativo P90 con curva firmada: azul marca el máximo de 90° y rojo el primer nulo de 180°. Los 22 µs y 11 µs son valores del ejercicio; no se ha operado el instrumento.

El ejemplo del usuario está asociado al experimento 1000. Es una etiqueta del flujo manual, no una orden enviada a TopSpin.

1. Mantenga **P90 conocido = 11 µs**, **nulo seleccionado = 22 µs** y ruido cero.
2. Localice máximo a 90°, primer nulo no trivial a 180° y siguiente nulo a 360°.
3. Compruebe **22/2 = 11 µs**.
4. Cambie el nulo seleccionado a **44 µs**. Dividirlo por dos da 22 µs y el taller señala que no es el primer nulo de 180°.

La regla P90=P180/2 exige haber identificado ese nulo y conservar potencia RF. Si el nulo es de 360°, corresponde P360/4. En un instrumento mantenga fase, ganancia, región de integración y condiciones comparables; el signo de la nutación ayuda a identificar el cruce. La simulación omite inhomogeneidad RF y relajación y no demuestra que un tubo real esté calibrado.

2. Gradiente

Use los valores iniciales **G nominal = 420 mT/m**, **δ = 1.4 ms**, **Δ = 80 ms**, **Dref = 0.80 ×10^{-9} m^2/s** y **Greal/Gnom = 1.10**. El ajuste con b nominal devuelve D aparente cercano a **0.968 ×10^{-9}**: 1.10^2=1.21, un sesgo del 21 %. El ajuste puede seguir siendo perfecto.

El propósito es recuperar la escala usando una señal de patrón. En una calibración real se necesita Dref(T), solvente, temperatura estable, extracción común y la ecuación de b correcta para la secuencia. Este patrón educativo no sustituye TBO ni escribe constantes de gradiente en TopSpin.

3. δ y Δ

Compare el caso inicial con **δ = 0.3 ms** y después con δ mayor. Observe señal lenta y rápida, b máximo y señal respecto al ruido. Una curva plana aporta poca pendiente; una extinguida pierde la cola. Los indicadores del taller -señal lenta ≤50 % y rápida >3σ- son criterios didácticos del ejemplo, no reglas universales de adquisición ni límites de una sonda.

En Bruker, traduzca primero p30/d20 a los intervalos físicos del programa. La misma etiqueta no significa el mismo tiempo en todas las secuencias. El taller utiliza PGSE rectangular ideal y no comprueba calentamiento, duty cycle ni duración máxima admitida por su hardware.

4. Convección

Conserve **D = 0.80**, **velocidad común = 35 µm/s** y ponga el semiancho de velocidades a cero. Una velocidad compartida rota fase y puede mantener el módulo. Aumente el semiancho a **300 µm/s** y observe pérdida de módulo, posibles lóbulos y D aparente. Cambie Δ conservando las otras variables.

Este taller usa una distribución uniforme de velocidades con semiancho; la escena animada usa su propio modelo gaussiano con dispersión. No son una identificación del perfil real de un tubo. Δ dependiente por sí solo no demuestra convección: restricción, intercambio, cinética y errores también pueden influir. La salida adecuada puede ser «inconcluso: adquirir control», sin masa definitiva.

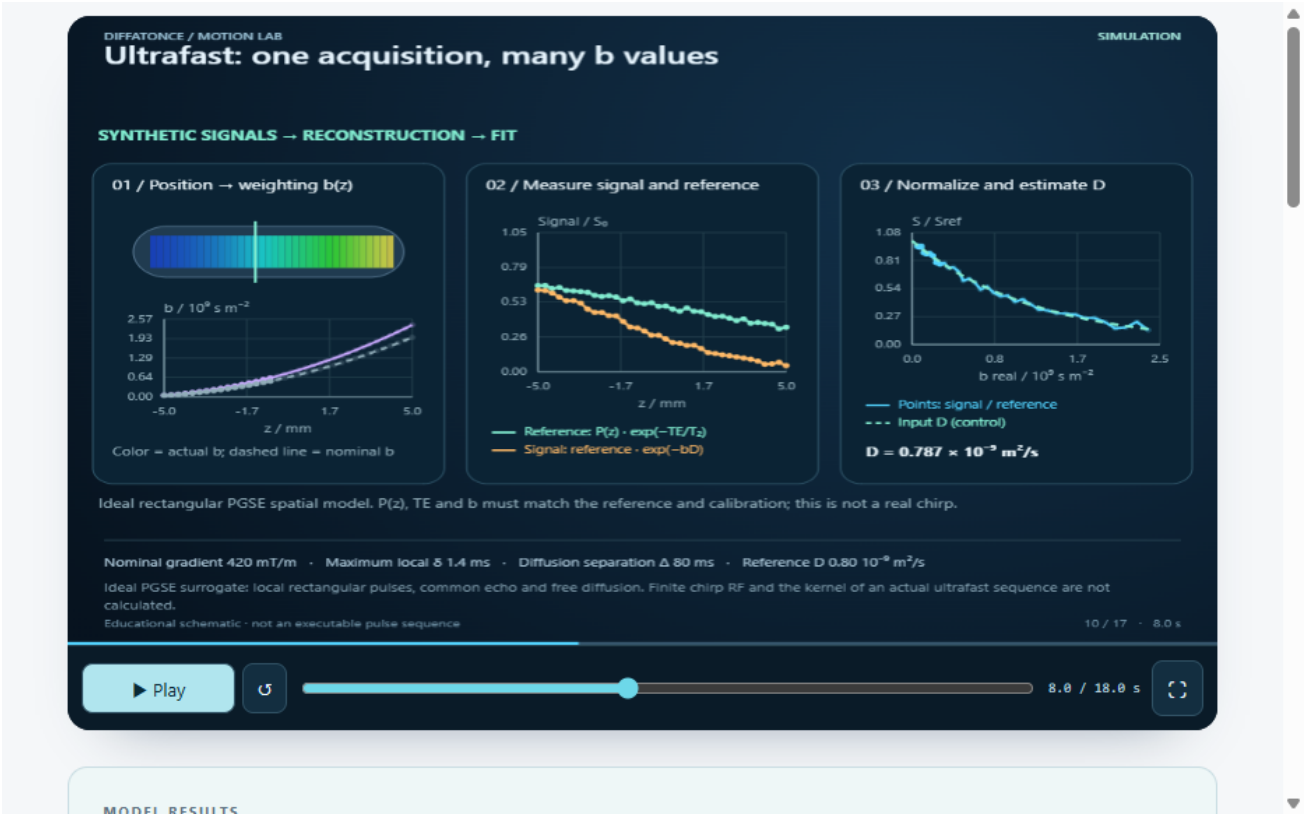
5. ILT

Empiece con **bmax = 3 ×10⁹ s/m²**, **32 puntos**, **40 bins** y ruido **1 %**. Compare las curvas de uno y dos componentes, diferencia/ruido y espectro singular. Aumente bins manteniendo los puntos y explique por qué no aparecen nuevas mediciones. Escriba números enteros en puntos y bins.

El rango efectivo depende del kernel, escala y criterio de ruido del taller; no es un número de moléculas. La gráfica muestra el mal condicionamiento, pero no ejecuta todos los algoritmos del catálogo ni garantiza separación ILT.

El laboratorio de 17 escenas

Ultrafast en el laboratorio local



Captura real de la escena calculada. El perfil y las estimaciones provienen de un modelo ideal, no de una adquisición experimental.

Escenas	Pregunta que ayudan a responder
Brownian, spin echo, gradients-b	¿Qué desplazamiento se codifica y cómo se construye b?
Pulse-90, acquisition-window	¿Cómo calibrar RF y encontrar una rampa informativa?
Convection, attenuation-mixture	¿Por qué una curva bonita puede dar D aparente?
ILT, overlap-joint	¿Qué información distingue componentes y qué añade un modelo conjunto?

Escenas	Pregunta que ayudan a responder
Ultrafast, SPEN, time-resolved	¿Qué cambia al codificar espacialmente o medir una muestra que evoluciona?
D-T_2, prototype-1d	¿Qué ejes se recuperan y qué validación queda pendiente?
Restricted, exchange, anisotropy	¿Qué otros mecanismos producen dependencia temporal o direccional?

Lea la evidencia y límites de cada escena: algunas son esquemas; UF, SPEN y time-resolved calculan señales y ajustes bajo modelos ideales. El reloj de animación no es Δ ni el tiempo de reacción. Puede guardar las salidas ofrecidas por la escena; la aplicación le pedirá dónde guardarlas. Un vídeo histórico puede representar la versión anterior de la escena y está etiquetado como tal.

Tres comparaciones avanzadas

• **Ultrafast:** compare D sin normalizar, con referencia+b nominal y con

referencia+b calibrado. La referencia cancela perfil y relajación sólo bajo condiciones compatibles. Un chirp real requiere su q(z,t), no la fórmula rectangular aplicada sin revisión.

• **SPEN:** siga datos complejos, reordenado de polaridades, fase y transformadas

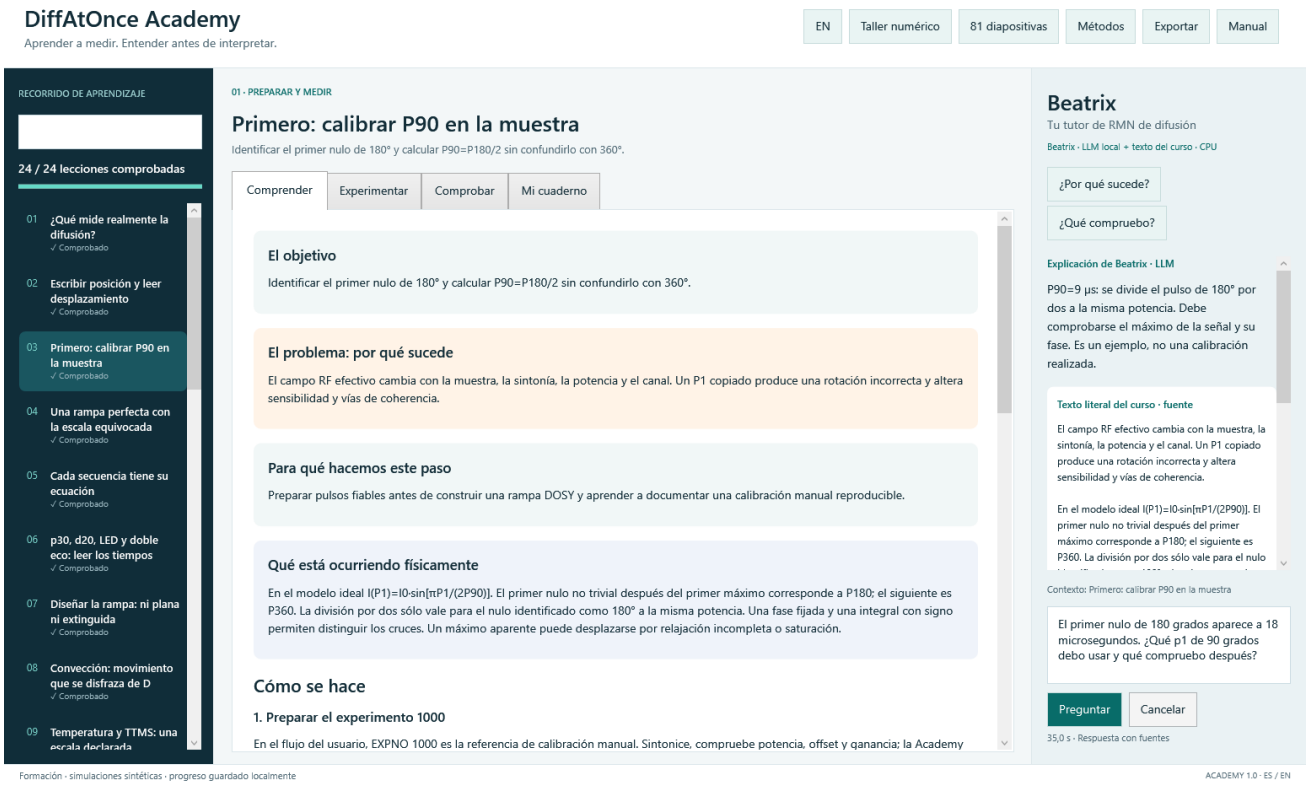
antes de ajustar. Pruebe A pura y después A ausente a la misma frecuencia; una fuga de B no es un D_A recuperado válido.

• **Time-resolved:** fije tLab=0 y compare orden ascendente, descendente y

permutado. D_A permanece constante mientras cambia población. La cadencia entre frames no es la resolución temporal: ventanas solapadas comparten datos y promedian evolución. Ventanas menores que Δ+lectura no son ejecutables.

Beatrix: cómo preguntar y leer la respuesta

Generación local y texto literal: dos bloques visibles



Captura real de inferencia CPU: la pregunta usa un primer nulo de 18 µs y Beatrix explica P90=9 µs. Es un ejercicio distinto del taller de 22/2=11 µs. El texto LLM y la copia literal del curso aparecen identificados por separado. Las fuentes y el contexto acompañan la respuesta; no se ha calibrado el instrumento.

Seleccione una lección y use **¿Por qué sucede?**, **¿Qué compruebo?** o escriba una pregunta. Por ejemplo:

- «Primer nulo a 22 µs: ¿por qué divido entre dos y cómo descarto 360°?»
- «Tengo un ajuste perfecto con g real 10 % distinto: ¿por qué D cambia 21 %?»
- «¿Por qué la permutación de gradientes no congela una reacción?»
- «Dos métodos dan picos distintos con residuos parecidos: ¿qué control falta?»

La respuesta muestra modo y fuentes. Abra la diapositiva o artículo citado; si la respuesta necesita condiciones no aportadas, debe reconocerlo. **Cancelar** detiene la consulta en curso.

Beatrix combina dos bloques identificados:

1. **Explicación de Beatrix · LLM** contiene texto realmente generado por el modelo local.
2. **Texto literal del curso · fuente** copia el problema y mecanismo del módulo. Es contenido del curso; no se atribuye a generación del modelo.

El modo indica **LLM local + texto del curso · CPU**. Lea ambos bloques y abra sus fuentes. En comprobaciones nativas de preguntas abiertas SPEN/TR, el texto generado omitió causas; el bloque literal

aporta la explicación conservada en el curso. Un resultado 32/32 en evaluación HF no significa que el GGUF CPU solo haya superado esas preguntas causales. Los informes preservan esa diferencia.

Compruebe la etiqueta **Contexto** antes de preguntar. Desde el taller, por ejemplo: cambie el nulo, pulse **Calcular** y pregunte por qué ese resultado deja de ser válido. Al volver a **Experimentar**, el contexto regresa a la escena del laboratorio; al cambiar de lección, vuelve al módulo seleccionado. Las salidas transmitidas a Beatrix son simulaciones, no datos del espectrómetro.

Estado del paquete híbrido verificado. El ajuste local obtuvo 32/32 en el test HF reservado, frente a 21/32 del modelo base. El paquete CPU obtuvo 15/15 en comprobaciones del conjunto **LLM + texto literal del curso**. El modelo CPU solo omitió causas en preguntas abiertas SPEN/TR; esas limitaciones se conservan en sus informes. El bloque literal aporta el mecanismo del curso y no se atribuye al LLM. El manifiesto vincula modelo, informes y versión del curso. Esta evidencia no es validación instrumental, revisión experta independiente ni eficacia educativa medida.

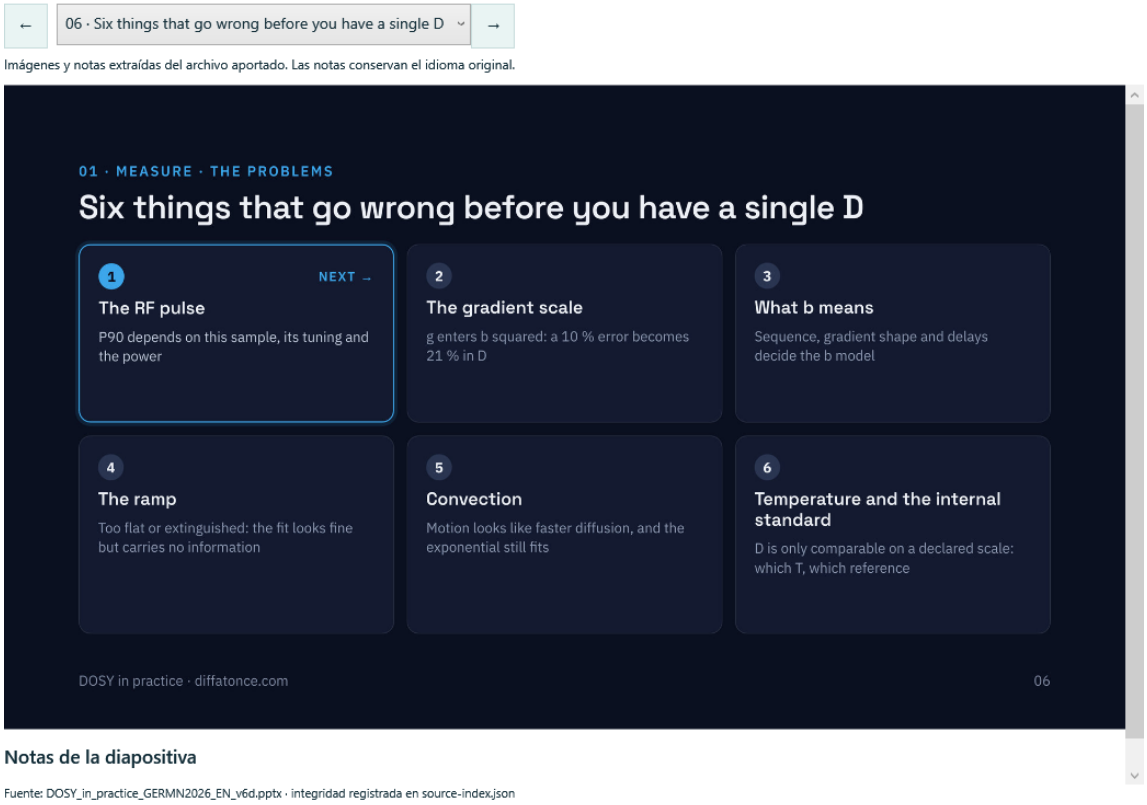
La aplicación verifica el paquete antes de inferencia. **Guía documental · sin LLM** significa recuperación sin inferencia, incluso ante modelo ausente o fallo; no la presente como generación del modelo.

Beatrix sirve para explicar y proponer controles. No modifica resultados, calibra el instrumento ni valida identidades. Una respuesta fluida o un modelo fine-tuned no reemplaza evidencia experimental o revisión docente.

Consultar diapositivas y métodos

Consulta del workshop original

El workshop original, disponible dentro del curso



Captura real del visor de las 81 diapositivas aportadas. Imágenes y notas conservan el idioma de la fuente.

Elegir por objetivo y límites

Qué resuelve cada método y qué presupone

Catálogo completo de las 51 entradas de la biblioteca fijada, 9 rutas nativas Prime y 12 familias/componentes de contexto. No es una lista exhaustiva de toda la literatura ni 72 algoritmos distintos.



Captura real del catálogo de 72 registros auditados. Disponibilidad histórica no significa que Academy ejecute todos los métodos.

81 diapositivas abre el workshop original con selector y flechas. Las imágenes y notas están en el idioma original inglés; el curso es bilingüe. Las fuentes de una lección llevan directamente a las diapositivas relacionadas. Los valores TP194, KK2 y HDO son resultados históricos reportados en ese deck, no adquisiciones recalculadas por la Academy.

El visor usa el snapshot extraído y congelado. En el cierre se detectó otro hash del contenedor PPTX actual; las 81 imágenes, notas, descripciones y orden coinciden con ese snapshot. Consulte source-input-reaudit.json para distinguir identidad didáctica y binaria. La causa del cambio de contenedor no se atribuye.

Métodos permite buscar nombre, uso y limitaciones. Hay 72 registros: 51 cores de biblioteca, 9 rutas históricas Prime y 12 familias de contexto. No son 72 algoritmos distintos ni una lista exhaustiva de literatura. La disponibilidad allí describe el catálogo original: no garantiza un botón que ejecute cada método en Academy. Compare objetivo, hipótesis y limitación, además del nombre. Una entrada Tikhonov con λ fijo no es el programa CONTIN completo.

Sesión guiada de 100 minutos

Tiempo	Actividad	Entrega del estudiante
0-10 min	Módulos 01-02: movimiento, fase y significado de b.	Predicción del efecto de Δ.
10-25 min	Módulos 03-04 y taller P90/gradiente.	22/2, diagnóstico del nulo 44 y sesgo 21 %.
25-40 min	Módulos 05-07: secuencia, LED y diseño δ/Δ.	Tabla intervalo→parámetro y rampa justificada.
40-55 min	Módulo 08 y taller convección.	Diferencia entre fase común y dispersión; control propuesto.
55-65 min	Módulos 09-11: T/TTMS, procesamiento y ajuste aislado.	Factores explícitos y ejemplo de normalización inválida.
65-80 min	Módulos 12-15: ILT, regularización, catálogo y espectro conjunto.	Comparación de hipótesis y criterio de estabilidad.
80-92 min	Módulos 20-23: UF, SPEN, time-resolved y D-T_2.	Separar relojes y explicar el límite de cada modelo.
92-100 min	Módulo 24, Beatrix y exportación del cuaderno.	Decisión aceptada/exploratoria/bloqueada con siguiente control.

La sesión selecciona actividades del curso, no pretende leer todo en 100 min. Los módulos 16-19 -asignación, tamaño/masa, TopSpin y casos- pueden prepararse antes o trabajarse como tarea posterior. Un docente puede pedir las preguntas de cada bloque al terminar, sin usar rapidez de respuesta como criterio de rigor.

Demostración de 20 minutos

Tiempo	Acción
0-4 min	Taller P90: 22→11 y nulo 44; gradiente: 10 %→21 %.
4-8 min	δ/Δ plana frente a extinguida; convección y control.
8-12 min	Baseline/normalización; ILT con curvas casi iguales y más bins.
12-16 min	Información entre frecuencias, TP194 y un caso bloqueado.
16-19 min	Una comparación en UF, SPEN y time-resolved.
19-20 min	Pregunta concreta a Beatrix y conclusión en el cuaderno.

Prepare las ventanas y ejemplos antes de comenzar. Si el LLM no está disponible o tarda, use la guía documental identificada; la enseñanza no depende de fingir que una respuesta fue generada.

Guardar y compartir el trabajo

Exportar guarda un JSON con versión/hash del curso, respuestas, módulos y notas. No entrega automáticamente el archivo al docente. El taller exporta otro JSON con parámetros y resultados sintéticos. No confunda ambos con un informe experimental ni con una adquisición TopSpin.

El progreso local está en %LOCALAPPDATA%\DiffAtOnce\Academy\progress-v1.json. Para una copia del trabajo, use la exportación y conserve los archivos elegidos. El progreso está ligado a la versión del curso: no edite su hash para trasladar aprobaciones entre versiones.

Problemas habituales

Observación	Acción útil
Experimentar no carga	Lea el mensaje WebView2 y continúe con lecciones/taller; instale el runtime legítimo si corresponde.
Una salida numérica no aparece	Compruebe números finitos, unidades y tiempos; use enteros para puntos/bins.
No encuentra una lección	Borre la búsqueda o use el título en el idioma activo.
No aparece Comprobado	Responda ambas preguntas y revise las explicaciones; se requieren 2/2.
Beatrix muestra sin LLM	Es una alternativa documental explícita; consulte estado/manifiesto, sin renombrarla como inferencia.
Resultado distinto del deck	Distinga ejercicio sintético y caso histórico; no reescale datos para forzar coincidencia.
Quiere operar el espectrómetro	Esta aplicación enseña el razonamiento; use el procedimiento del instrumento con supervisión y controles.

Las instrucciones que aparecen en diapositivas son material didáctico. No se ejecutan automáticamente ni autorizan cambios en datos o calibraciones.

Recorrido completo de 24 módulos

01 · ¿Qué mide realmente la difusión?

Distinguir desplazamiento molecular aleatorio, flujo y tamaño hidrodinámico.

Escena: brownian

02 · Escribir posición y leer desplazamiento

Explicar la pérdida del eco a partir de fase y desplazamiento, y distinguir PFG de DOSY.

Escena: spin-echo

03 · Primero: calibrar P90 en la muestra

Identificar el primer nulo de 180° y calcular P90=P180/2 sin confundirlo con 360°.

Escena: pulse-90

04 · Una rampa perfecta con la escala equivocada

Calibrar la escala de b mediante un patrón con D(T) conocido y explicar el sesgo cuadrático del gradiente.

Escena: gradients-b

05 · Cada secuencia tiene su ecuación

Construir b desde q(t), reconocer el límite PGSE rectangular y evitar intercambiar fórmulas de secuencias.

Escena: gradients-b

06 · p30, d20, LED y doble eco: leer los tiempos

Identificar qué parámetro controla cada intervalo físico y qué debe revisarse al seleccionar una secuencia.

Escena: acquisition-window

07 · Diseñar la rampa: ni plana ni extinguida

Seleccionar δ, Δ y gradientes para obtener una atenuación informativa sobre el ruido.

Escena: acquisition-window

08 · Convección: movimiento que se disfraza de D

Distinguir difusión, velocidad coherente y dispersión de velocidades mediante controles y señal con signo.

Escena: convection

09 · Temperatura y TTMS: una escala declarada

Calcular factores de referencia y temperatura sin duplicarlos ni convertirlos en corrección de convección.

Escena: attenuation-mixture

10 · El procesamiento también fabrica D

Detectar sesgos de fase, baseline, integración y normalización antes de invertir.

Escena: attenuation-mixture

11 · Una señal: empezar por el ajuste más claro

Interpretar ajuste monoexponencial, residuos y puntos utilizados antes de un mapa completo.

Escena: attenuation-mixture

12 · ILT: curvas casi iguales, distribuciones distintas

Explicar mal condicionamiento, rango informativo y límites de resolución sin confundir bins con información.

Escena: ilt

13 · Regularizar es elegir una preferencia

Interpretar λ, prior y estabilidad con el mismo dato, grid y modelo de ruido.

Escena: ilt

14 · Elegir algoritmos por su hipótesis

Seleccionar familias según señal aislada, distribución continua, pocos componentes o espectro conjunto, y diferenciar solver, objetivo y diagnóstico.

Escena: ilt

15 · Una molécula deja varias pistas

Explicar el beneficio y límites de compartir información de difusión entre frecuencias.

Escena: overlap-joint

16 · Beatrix: preguntar, razonar y verificar

Usar una tutora con fuentes para proponer hipótesis y resolver dudas sin delegar conclusiones químicas ni cambios de datos.

Escena: overlap-joint

17 · De D a radio y masa: declarar las hipótesis

Calcular Rh bajo Stokes-Einstein y distinguir masa aparente empírica de masa absoluta.

Escena: brownian

18 · Un flujo de calibración que también puede rechazar

Organizar calibración RF, patrón, metadatos y revisión previa a una adquisición automatizada.

Escena: pulse-90

19 · Casos de éxito y casos que se detienen

Comparar controles y trazabilidad de TP194 y KK2 sin transferir índices o resultados a otras muestras.

Escena: attenuation-mixture

20 · Ultrafast: una rampa repartida por el tubo

Interpretar codificación espacial, normalización del perfil y calibración de b(z) con señal conocida y recuperada.

Escena: ultrafast

21 · SPEN-DOSY: reconstruir antes de ajustar

Seguir señal compleja EPSI, reordenado de polaridades, corrección de fase y recuperación de atenuaciones por frecuencia.

Escena: spen

22 · Una reacción avanza mientras se mide la rampa

Separar t_lab, Δ, ventana y cadencia y demostrar sesgo por orden de gradientes durante una reacción.

Escena: time-resolved

23 · D-T_2 y desarrollo en sondas convencionales

Distinguir mapa de difusión-relajación, DOSY con desplazamiento químico y prototipo aún no validado cuantitativamente.

Escena: dt2

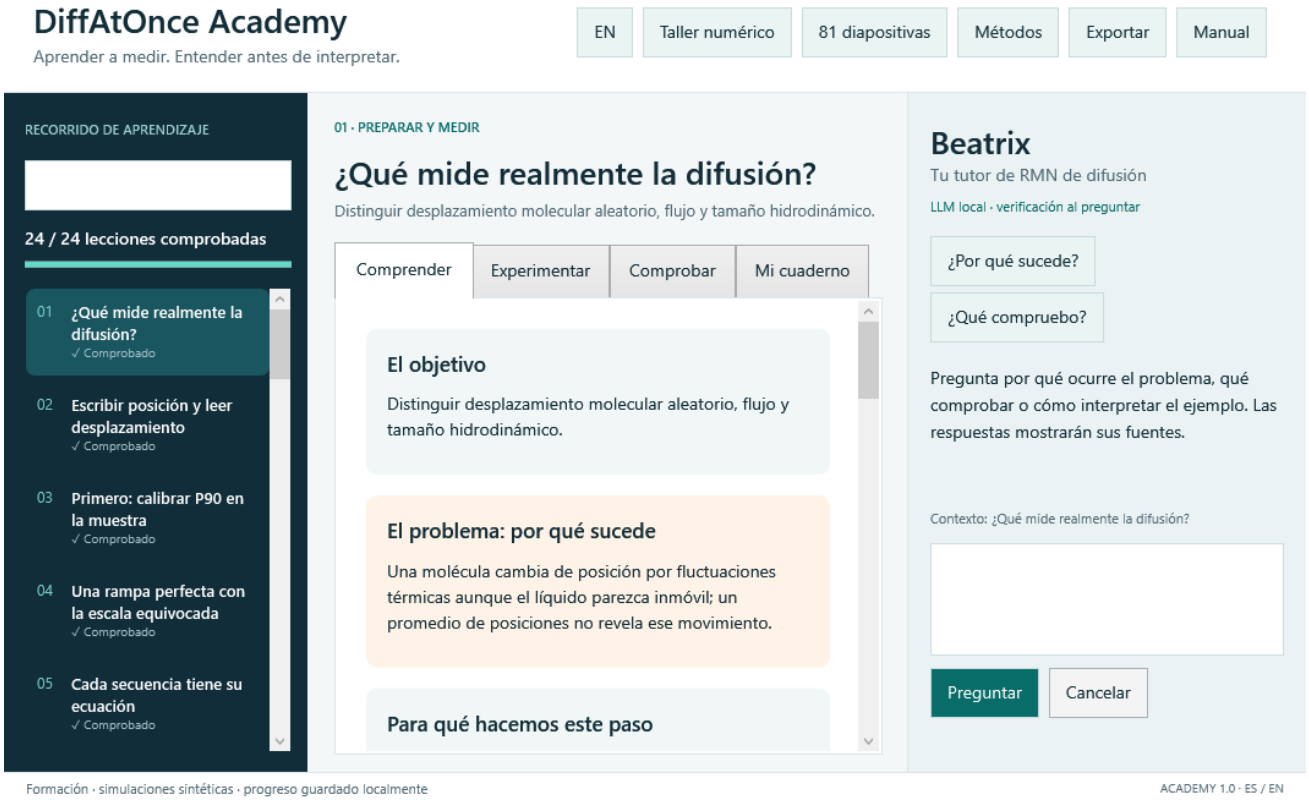
24 · Caso final: decidir qué se puede concluir

Construir una decisión completa y distinguir convección, restricción, intercambio y anisotropía antes de elegir un modelo.

Escena: restricted

Galería de ejemplos y comprobaciones

La misma lección en una ventana compacta



Captura real de la ventana compacta. Use las barras de desplazamiento para leer toda la lección; el contexto de Beatrix sigue siendo el módulo activo. El progreso mostrado procede del test de software.

Laboratorio ampliado: comparar hipótesis



Captura real de WebView2 en la versión final del laboratorio. Los controles permiten variar parámetros, observar la señal y contrastar modelos. Los resultados siguen siendo simulaciones ideales para formación.

Cómo leer este ejemplo: el D de entrada es 0.800 $\times 10^{-9}$ m^2/s. El ajuste sin normalización da 1.296; con referencia y b nominal, 0.952; con referencia y b calibrado, 0.787. El sesgo restante es -1.64 %. Compare cada estimación con el valor conocido y explique qué cancela la referencia. La calibración está declarada en la simulación; no ha sido medida en el espectrómetro.

Procedencia y reproducibilidad

El snapshot extraído y congelado relaciona 81 diapositivas con 24 módulos.

PPTX al extraer · SHA-256: d54f2a6b7a42dc640a26b199408bf19505cea4dac7615089e5f679d168a63a1d

Course SHA-256: f9a17df9645b541abc70907e5d04cd38c213293443ce1d37c2c0d94f8aea0cb9

PPTX actual · SHA-256: 5dfce0b0ec2b6f9bf2ddc1eef5ca04a4d31e053c9e2f051d6542fff63e273975

El contenedor actual tiene otro hash y 22 bytes más. Las 81 imágenes, notas, texto/descripciones, orden, ocultación y relaciones de medios coinciden con el snapshot. No se atribuye causa ni se afirma identidad binaria. Informe aditivo: source-input-reaudit.json; curso/índice/entrenamiento permanecen congelados.

Las imágenes son capturas reales de aplicación o copias exactas de la fuente. No se inventa una conversación LLM. Los datos históricos siguen atribuidos a su procedencia.

Reportes y hashes de las capturas utilizadas: manual-build-manifest.json. Generador: tools/manual_build.py.

Este manual no opera TopSpin, modifica TBO/KK2 ni acredita calibración o identidad. El prototipo UF mantiene NO-GO cuantitativo hasta controles instrumentales.

Manifiesto híbrido verificado: beatrix-academy-qwen3-1.7b-lora-v2-q8 · SHA-256: eb49a43f12de5057b9fbe41ab242fc8a7916bf9a36d15ce2cd733adfb8bd89ff

Informe CPU del conjunto LLM + curso: 15/15 · SHA-256: 3dd224a85bc67219fe39d57f2e53e70cc532894c1defc1f18ffbf2378d11dbb3

Las omisiones causales del texto generado solo en SPEN/TR permanecen documentadas; el bloque del curso no es generación del modelo.