

# El problema oculto del modelo: cuando un buen ajuste se convierte en mecanismo y en óptimo

Juan Segurola

3Dresyns by Resyner Technologies S.L.

© 2026 Juan Segurola. Todos los derechos reservados.

Correspondencia: info@3Dresyns.com · www.3Dresyns.com

HEB-013 · Artículo técnico independiente · Versión v0.2

DOI: 10.5281/zenodo.22915377

## Resumen

Un modelo puede describir con precisión los datos observados sin identificar de forma única el mecanismo que los genere. Los modelos flexibles pueden ajustar varias explicaciones competidoras; los parámetros empíricos pueden absorber múltiples efectos físicos; y un óptimo calculado a partir de una superficie ajustada puede situarse en una región donde el experimento proporcione poca información. El problema oculto del modelo comienza cuando el éxito descriptivo se eleva a verdad mecanística o cuando un óptimo matemático se trata como un óptimo físico sin comprobar la adecuación del modelo, la identificabilidad de los parámetros, la incertidumbre y el dominio. Este artículo metodológico separa representación, interpolación, predicción, mecanismo y optimización. La proposición central es que el ajuste constituye evidencia sobre la relación entre un modelo y un conjunto de datos, no evidencia automática de que la historia interna del modelo sea verdadera.

**Palabras clave:** modelo; mecanismo; bondad de ajuste; identificabilidad; extrapolación; optimización; superficie de respuesta; predicción; parámetro

## 1. Propósito y límite de evidencia

HEB-001 distingue el error puro de la falta de ajuste y sitúa la validación del modelo después de la cualificación de la medición y la replicación [1]. HEB-013 desarrolla el límite epistémico entre una representación útil y una afirmación mecanística.

## 2. Una ecuación ajustada puede desempeñar varios papeles

Una ecuación puede resumir datos, interpolar dentro de una región, predecir observaciones futuras, estimar un parámetro con significado físico o representar un mecanismo propuesto. Estos papeles tienen requisitos de evidencia diferentes. Una superficie de respuesta polinómica puede ser valiosa para optimización local sin afirmar que el sistema subyacente sea literalmente polinómico.

## 3. Bondad de ajuste no equivale a unicidad

Dos modelos diferentes pueden ajustar de forma similar el mismo conjunto finito de datos. Un coeficiente de determinación alto o una suma de cuadrados residual pequeña no demuestran, por tanto, que un mecanismo este apoyado de forma única. La discriminación requiere predicciones o intervenciones en las que los modelos competidores difieran.

## 4. Los parámetros pueden no ser identificables

Cuando los parámetros están fuertemente correlacionados, varias combinaciones pueden producir prácticamente la misma curva. Los valores ajustados pueden parecer precisos porque el software devuelve dígitos, aunque el experimento no los haya restringido de forma independiente. La incertidumbre y la correlación de parámetros forman, por tanto, parte de la interpretación y no son diagnósticos opcionales. NIST/SEMATECH trata la incertidumbre de parámetros, la correlación y los diagnósticos de modelo como partes diferenciadas del análisis de regresión [2].

## 5. Los residuos prueban la representación, no la historia

La estructura de los residuos puede revelar curvatura, heterocedasticidad, interacciones omitidas o dependencia temporal. Residuos de apariencia aleatoria apoyan la adecuación de la representación dentro del dominio observado, pero no demuestran la interpretación mecanística de cada término. Un modelo puede ser empíricamente adecuado y mecanísticamente incorrecto.

## 6. Interpolacion y extrapolación son actos diferentes

Dentro de una región densamente muestreada, un modelo ajustado puede interpolar con incertidumbre acotada. Fuera de esa región, el resultado depende cada vez más de la forma funcional asumida. La extrapolación debe etiquetarse explícitamente y contrastarse con límites físicos, modelos alternativos y nuevas mediciones.

## 7. Los óptimos basados en modelos son condicionales

Un óptimo queda definido por la respuesta elegida, las restricciones, el modelo y el dominio. Cambiar cualquiera de ellos puede desplazar el óptimo. En problemás multirrespuesta, el resultado suele ser una región de compromiso y no un punto privilegiado. Un punto matemáticamente estacionario no es automáticamente robusto frente al ruido experimental o la incertidumbre del modeló. La optimización de modelos de mezcla hace explícita está dependencia del modelo y del dominio restringido [3].

## 8. El mecanismo requiere perturbación

La confianza mecanística aumenta cuando modificar una variable predicha por el mecanismo produce la respuesta específica esperada mientras alternativas plausibles fallán. La correlación por sí sola es débil porque variables ocultas pueden generar el mismo patrón. A menudo el experimento más informativo es aquel diseñado para separar modelos competidores, no el destinado a mejorar el ajuste del modelo preferido.

## 9. Las restricciones físicas son valiosas, pero no mágicas

Leyes de conservación, cotas, simetrías y monotonidades conocidas pueden reducir modelos implausibles. Sin embargo, un modelo restringido puede seguir siendo incompleto. La plausibilidad física es un filtro sobre la inferencia, no un sustituto de evidencia discriminante.

## 10. Disciplina práctica de modelización

Declare el papel del modelo, el dominio de ajuste, el significado de los parámetros, la incertidumbre, el comportamiento de los residuos y el límite de extrapolación. Compare alternativas plausibles cuando la conclusión dependa de la forma del modeló. Cuando sea viable, valide predicciones con datos no utilizados para ajustar el modeló. En optimización, verifique experimentalmente la región predicha y pruebe robustez alrededor de ella en lugar de publicar únicamente el máximo calculado.

## 11. Equifinalidad: mecanismos diferentes pueden producir el mismo observable

Muchos sistemás físicos son equifinales: rutas causales distintas conducen a mediciones finales similares. Una disminucion de conversión puede deberse a menor luz entregada, mayor inhibicion, diferente eficiencia del fotoiniciador, atenuación, temperatura o composición; un error dimensional puede deberse a propagación del curado, contracción, mecánica o sesgo de medición. Ajustar un modelo mecanístico a la respuesta final no elimina estas alternativas. ER-184 trata explícitamente mecanismos de defecto competidores y acepta la atribución no resuelta como resultado legítimo [4]. HEB-013 generaliza esa disciplina: cuando varios mecanismos predicen el mismo observable, el experimento debe añadir una medición discriminante en lugar de otorgar verdad a la narrativa con mejor ajuste.

## 12. El sobreajuste puede ocultarse detrás de residuos excelentes

Un modelo suficientemente flexible puede seguir el ruido y las particularidades locales de los datos de calibración. Los residuos de entrenamiento disminuyen mientras empeora el rendimiento predictivo sobre observaciones nuevas. La solución no es una penalización universal de complejidad, sino separar la construcción del modelo de su desafío. Validación hold-out, ensayos de confirmación replicados, formás de modelo preespecificadas o conjuntos de datos externos pueden probar si la estructura aparente generaliza. Un modelo que no sobrevive a datos que no ayudo a explicar es una base débil para mecanismo u optimización.

## 13. Predicción y explicacion deben evaluarse por separado

Un modelo empirico de caja negra puede predecir bien dentro de un dominio acotado sin ofrecer un mecanismo físico convincente. Un modelo mecanístico puede explicar el comportamiento cualitativo y seguir siendo demasiado incierto para una predicción precisa. Son logros científicos diferentes. La confusión aparece cuando la precisión predictiva se utiliza como prueba de mecanismo o cuando la plausibilidad mecanística se utiliza como prueba de predicción cuantitativa. Los informes deben declarar que papel importa para la decisión y evaluar el modelo respecto a ese papel.

## 14. Conclusiones

Un modelo gana confianza sobreviviendo a pruebas apropiadas, no por parecer suave o ajustar estrechamente. Un buen ajuste sustenta la representación dentro de un dominio declarado; el mecanismo requiere evidencia discriminante; la extrapolación añade supuestos; y un óptimo está condicionado por el modelo y el objetivo. El problema oculto del modelo se controla cuando la conveniencia matemática y la afirmación física permanecen explícitamente separadas.

## Referencias

- [1] Segurola, J. The Hidden Error Budget: Measurement-System Failure, False Precision and Experimental Design in Laboratory Science. HEB-001. 3Dresyns Independent Technical Articles (2026). DOI: 10.5281/zenodo.22862642.
- [2] Heckert, N. A.; Filliben, J. J.; Croarkin, C. M.; Hembree, B.; Guthrie, W. F.; Tobias, P.; Prinz, J. Handbook 151: NIST/SEMATECH e-Handbook of Statistical Methods. National Institute of Standards and Technology, 2002.
- [3] Cornell, J. A. Experiments with Mixtures: Designs, Models, and the Analysis of Mixture Data, 3rd ed. Wiley, 2002. DOI: 10.1002/9781118204221.
- [4] Segurola, J. Diagnostic Inference in Vat Photopolymerisation: Discriminating Between Competing Defect Mechanisms Under Uncertainty. ER-184. 3Dresyns Engineering Publications (2026). Concept DOI: 10.5281/zenodo.22722900.

## Limite de conocimiento

HEB-013 trata la distinción general entre ajuste, predicción, mecanismo y optimización basada en modelos. Los modelos mecanísticos y criterios de cualificación específicos de aplicación permanecen en los ER correspondientes.

## Limitaciones

Este artículo metodológico es una síntesis acotada de los corpus controlados HEB y Engineering Review. No informa de un nuevo conjunto de datos experimental, no establece umbrales numéricos universales y no convierte ejemplos de un dominio en especificaciones aplicables a todas las aplicaciones. Las afirmaciones que requieren cualificación específica de aplicación permanecen en la revisión técnica o estudio primario correspondiente.