

LW1

Ruslan S. Gredasov

2025-12-17

GitHub

Механистический анализ

Определение

Механистический анализ - подход, в большей степени связанный с фундаментальной наукой, исследованиями и разработками, и к нему больше подходит термин «моделирование», чем «анализ». Механистическое моделирование и анализ отличаются очень глубоким пониманием системы, которое приходит в результате многолетнего контролируемого изучения стабильной системы посредством большого числа экспериментов.

Отличительные черты

- Применяется к простым или хорошо моделируемым детерминированными уравнениями ситуациям
- Обычно применяется к физическим или инженерным наукам
- Часто единственный шум в данных - ошибки измерения

Пример статьи

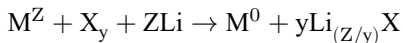
Investigation of the Lithiation and Delithiation Conversion Mechanisms of Bismuth Fluoride Nanocomposites - M. Bervas, A. N. Mansour, W.-S. Yoon, et al.

DOI

Целью данной работы является формирование модели, основанной на изменении механизмов электронного и ионного транспорта в зависимости от степени завершенности реакций превращения и обратного превращения в нанокompозите BiF_3/C при циклическом воздействии, что приводит к образованию Bi^0 и LiF во время литирования и повторному образованию BiF_3 во время делитирования.

Обоснование

1. Целью исследования является не констатация факта, а подробное описание процессов, происходящих при реакции веществ:



2. В ходе работы подробно описываются все этапы исследуемого процесса.
3. Для доказательства роли каждого звена авторы используют методы, которые точно нарушают или моделируют предполагаемый механизм, в частности изменение температуры реагентов во время реакции

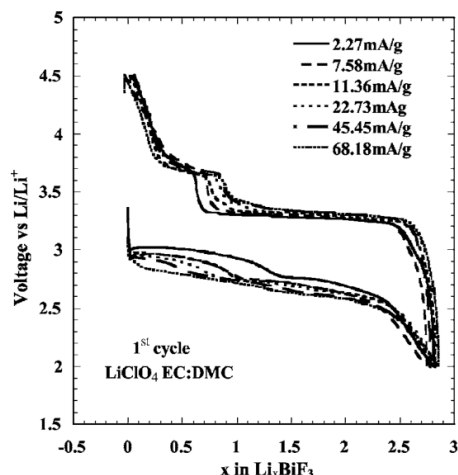


Figure 6. First cycle of the BiF_3/C nanocomposite at different current densities in a LiClO_4 EC/DMC 0.4 M electrolyte.

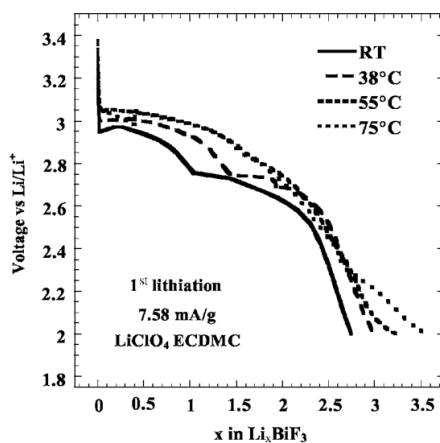


Figure 7. First lithiation of the BiF_3/C nanocomposite at different temperatures in a LiClO_4 EC/DMC 0.4 M electrolyte. The current density was 7.58 mA/g.

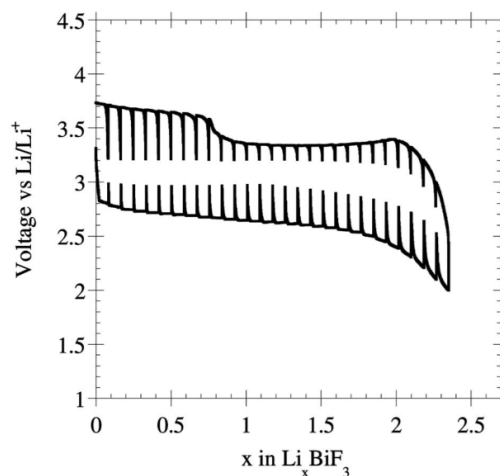


Figure 8. GITT for the first cycle of the $t\text{-BiF}_3/\text{C}$ nanocomposite in a LiPF_6 EC/PC/DEC/DMC electrolyte. The current density was 7.58 mA/g. The current was turned on for 1 h and then stopped for 5 h.

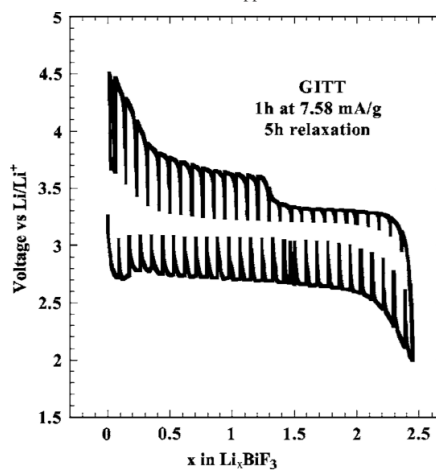


Figure 9. GITT for the first cycle of the $o\text{-BiF}_3/\text{C}$ nanocomposite in a LiPF_6 EC/PC/DEC/DMC electrolyte. The current density was 7.58 mA/g. The current was turned on for 1 h and then stopped for 5 h.

Дедуктивный анализ

Определение

Дедуктивный анализ — подход, который позволяет делать прогнозы и выводы о популяции на основе выборочных данных. В отличие от описательного анализа, который только обобщает данные, дедуктивный анализ позволяет проверять гипотезы, делать оценки и измерять степень неопределенности прогнозов.

Отличительные черты

- Позволяет оценивать значение переменной для генеральной совокупности и указывает меру неопределенности в отношении полученной оценки
- Возможность точного вывода информации о большей популяции во многом зависит от схемы выборки

Пример статьи

Prevalence and socio-demographic correlates of psychological health problems in Chinese adolescents during the outbreak of COVID-19 - Shuang-Jiang Zhou, Li-Gang Zhang, Lei-Lei Wang, et al.

DOI

Целью данного исследования было оценить распространенность и социально-демографические корреляты депрессивных и тревожных симптомов среди китайских подростков, затронутых вспышкой COVID-19. Авторы провели кросс-секционное исследование среди китайских школьников в возрасте 12–18 лет в период эпидемии COVID-19.

Обоснование

1. Статья имеет целью проверку статистической гипотезы, распространяемой на генеральную совокупность, на основании ограниченной выборки:

Целью настоящего исследования было оценить распространенность двух конкретных психических симптомов, тревоги и депрессии, а также их социально-демографические корреляты среди подростков в китайском населении во время вспышки COVID-19.

2. Для анализа использовался статистический критерий хи-квадрат (χ^2):

Для демографических данных использовались критерии хи-квадрат для анализа категориальных переменных.

3. В статье явным образом указывалась возможность экстраполяции полученных результатов на генеральную популяцию:

Была продемонстрирована надежность и валидность как в общей популяции, так и у пациентов с психическими расстройствами.

Сравнение подходов

Критерий	Механистический анализ	Дедуктивный анализ
Основная цель	Понять и объяснить точные причинно-следственные механизмы и внутренние процессы, которые производят наблюдаемый результат	Сделать выводы о более широкой совокупности (population) на основе данных выборки (sample) и оценить неопределенность этих выводов
Ключевой вопрос	«КАК именно это работает? Какие конкретные шаги и правила приводят к этому результату?»	«ЧТО мы можем сказать о всей группе на основе этой выборки? Насколько мы уверены в этом?»
Область применения	Физика, инженерия, теоретическая биология, обратный инжиниринг	Медицина, социальные науки, A/B тестирование
Тип моделируемых отношений	Детерминированные или вероятностные, но с акцентом на механизм. Стремится установить причинно-следственную связь на уровне процесса	Статистические отношения. Чаще фокусируется на ассоциации и корреляции, хотя специальные методы могут устанавливать причинность.
Подход к данным	Данные используются для верификации или калибровки уже предложенного механизма. Анализ часто начинается с теории/гипотезы о механизме	Данные используются для оценки параметров и проверки статистических гипотез о совокупности. Вывод исходит из данных

Критерий	Механистический анализ	Дедуктивный анализ
Выход / Результат	Прозрачная модель. Качественное объяснение «черного ящика». Понимание вклада каждой переменной в процесс	Доверительные интервалы. р-значения, результаты проверки гипотез. Оценки параметров с мерой ошибки.