УДК 519.633:519.21 URL: https://ptsj.bmstu.ru/catalog/math/compmath/1127.html

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ИНТРУЗИВНЫХ И НЕИНТРУЗИВНЫХ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ РАЗЛОЖЕНИЯ ПОЛИНОМИАЛЬНОГО ХАОСА НА ПРИМЕРЕ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Г.А. Кожемякин kozhemyakinga@student.bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

В работе рассмотрена задача теплопроводности в постановке с учетом стохастической природы коэффициента температуропроводности материала и случайности в начальном условии. Для описания неопределенности использован метод разложения полиномиального хаоса. Аналитическое решение сравнивается с двумя стохастическими аппроксимациями: неинтрузивным методом наименьших квадратов и интрузивным методом Галеркина, реализованным совместно со схемой Кранка — Николсона. Выполнено статистическое моделирование, построены средние траектории температуры и их трехмерные визуализации, оценены ошибки между методами. Полученные результаты демонстрируют высокую согласованность численных подходов с аналитическим решением и свидетельствуют о допустимости применения подходов на практике.

Ключевые слова: полиномиальный хаос, интрузивные методы, неинтрузивные методы, метод Галеркина, метод наименьших квадратов, стохастическое моделирование, уравнение теплопроводности, математическая физика

Введение. В настоящее время большинство задач физики, химии и биологии описываются постановками, включающими краевые задачи со случайными входными данными. Например, при работе с полупроводниками применяют модели, описываемые нелинейным уравнением Смолуховского со случайными начальными распределениями и стохастическими потенциалами [1]. При моделировании транспорта жидкости в пористых средах решают уравнение Дарси со случайным коэффициентом проницаемости [2].

Для учета влияния случайности часто используют разложение полиномиального хаоса (РПХ), которое является весьма эффективным для количественной оценки неопределенности [3, 4] и позволяет существенно снизить трудоемкость алгоритма за счет уменьшения числа реализаций входящего поля. Использование разложения полиномиального хаоса позволяет исследовать построенную прямую функцию по многим параметрам, включая вычисление чувствительности, без дополнительной выборки. В данной работе по-

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2026 ISSN 2541-8009

казана эффективность применения РПХ к исследованию решения нестационарного уравнения теплопроводности со случайным коэффициентом температуропроводности.

Метод полиномиального хаоса. Полиномиальный хаос — это метод представления случайной величины или стохастического процесса в виде разложения в ряд по ортогональным полиномам от случайных входных параметров, формирующих базис. Разложение полиномиального предназначено для конструирования аналитической метамодели $Y_{PC} =$ $_{PC}(X)$, которая имеет меньшую вычислительную сложность по сравнению с математической моделью, описывающей задачу.

Рассмотрим отклик модели $Y =$ (X) как случайную величину, принадлежащую определенному пространству (например, пространству стохастических величин с конечной дисперсией), и затем представленную через надлежащий базис. Тогда разложение Y в виде сходящегося ряда выглядит следующим образом [5, 6]:

$$Y = \sum_{j=0}^{+\infty} a_j \Psi_j, \tag{1}$$

где Ψ_j — множество случайных переменных, образующих базис; $a_j \in \mathbb{R}$ — коэффициенты разложения случайного отклика Y в этом базисе.

В частности, если базис составлен из ортонормированных полиномов случайных величин, то ряд (1) называется РПХ. В первых работах по данной тематике была установлена связь между семействами ортогональных полиномов и законом распределения случайного воздействия [7–9], например, равномерному распределению соответствует разложение по полиномам Лежандра, нормальному — полиномы Эрмита и так далее. Таким образом, ортогональные полиномы позволяют получать разложение случайного процесса по нужному базису в соответствующем вероятностном пространстве.

Подходы к вычислению коэффициентов полиномиального хаоса. Интрузивные схемы вычислений подразумевают дискретизацию уравнений задачи как в физическом пространстве, так и в случайном пространстве с использованием РПХ. Это приводит к появлению связанных систем уравнений, которые требуют специальных решателей [10]. За последнее десятилетие были разработаны альтернативные подходы, называемые неинтрузивными. Их объединяет то, что они основаны на многократном повторном запуске вычислительной модели для выбранных реализаций случайного вектора **X** [10].

Основной представитель класса *интрузивных методов* — стохастический метод Галеркина. Значительно реже применяют остальные интрузивные методы, например метод Пуассона — Лагранжа. К преимуществам интрузивных

методов можно отнести высокую точность и контролируемую ошибку, хорошую работу при гладком отклике и известных уравнениях модели. Однако существует и ряд недостатков: непригодность для использования в парадигме «черных ящиков», неприменимость для использования в сложных программных комплексах, плохая масштабируемость при увеличении размерности случайных входов [10].

Метод Галеркина основан на аппроксимации выходной величины Y с использованием конечного числа ортогональных базисных функций $\psi_\alpha(\xi)$. Аппроксимация осуществляется проекцией Y на подпространство, натянутое на эти базисные функции [8]. Числовая оценка коэффициентов может быть выполнена с помощью моделирования методом Монте-Карло [11] или же путем численного интегрирования правой части уравнения с использованием квадратурных методов на разреженных сетках [11]. Отметим, что метод Монте-Карло демонстрирует низкую эффективность, а методы интегрирования требуют больших вычислительных затрат, особенно с ростом размерностей.

В классе *неинтрузивных методов* используется внешний доступ к модели как к «черному ящику» — модель многократно вызывается при различных значениях входных параметров, а далее строится аппроксимация коэффициентов разложения [10]. К основным неинтрузивным методам относятся метод наименьших квадратов (МНК), метод эластичной сети, сжатые регрессии [6]. Их преимущества состоят в том, что они не требуют вмешательства в исходный код модели, удобны для инженерного программного обеспечения, просты в реализации. К основным недостаткам стоит отнести уменьшение точности при сильной нелинейности, склонность к переобучению при высокой размерности, зависимость точности от качества выборки [12].

В данной работе будет использован МНК. Подход к минимизации МНК заключается в нахождении набора коэффициентов, минимизирующего среднеквадратичную ошибку.

Таким образом, для нахождения коэффициентов РПХ могут быть применены два класса алгоритмов со своими достоинствами и недостатками, рассмотрим применение проекционного метода типа Галеркина и МНК на примере уравнения теплопроводности со случайным параметром.

Постановка задачи в целях исследования эффективности разложения полиномиального хаоса. Рассмотрим задачу одномерной теплопроводности в нестационарной постановке с учетом стохастической природы коэффициента температуропроводности материала. Такая постановка характерна для гетерогенных сред, где тепловые свойства зависят от внутренней микроструктуры и степени неоднородности, что делает модель особенно актуальной при анализе композитных материалов, керамик, пористых тел [13].

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2026 ISSN 2541-8009

Рассмотрим нестационарное уравнение теплопроводности в одномерной области $x \in [0,1]$:

$$\frac{\partial T(x,t,\xi)}{\partial t} = \alpha(\xi)\frac{\partial^2 T(x,t,\xi)}{\partial x^2}, \tag{2}$$

где $T(x,t,\xi)$ — температура, зависящая от координаты, времени и случайного параметра; $\alpha(\xi)$ — температуропроводность материала, моделируемая как случайная величина.

Начальные и граничные условия имеют вид

$$\begin{cases} T(x,0) = T_0 + T_0(1+\varepsilon\xi)\sin \pi x, \ x \in [0,1]; \\ T(0,t) = T_0, \ \ T(1,t) = T_0, \qquad\quad t \geq 0, \end{cases} \tag{3}$$

где T_0 — начальная температура; ε — параметр, характеризующий относительную величину случайной компоненты начального распределения. При $\varepsilon = 0$ задача сводится к детерминированному начальному условию.

Коэффициент температуропроводности α представляет собой физически положительную величину, описывающую способность материала проводить теплоту. В данной задаче параметр α моделируется как случайная величина, отражающая неопределенность, связанную с микроструктурной неоднородностью среды. Следуя примерам работы [13] со случайным параметром температуропроводности в контексте данной задачи, зададим коэффициент в виде

$$\alpha(\xi) = \mu_\alpha + \sigma_\alpha \xi, \ \ \xi \sim \quad (0,1), \tag{4}$$

где μ_α — математическое ожидание; σ_α — стандартное отклонение.

Выбор закона распределения коэффициента температуропроводности обусловлен двумя основными факторами, а именно: физической правдоподобностью (гауссовское распределение отражает случайную флуктуацию теплофизических свойств, обусловленную естественной неоднородностью среды) и математическим удобством: гауссовская модель допускает аналитическое разложение по полиномам Эрмита — базису полиномиального хаоса, ортонормированному по нормальной мере. Кроме того, для соблюдения физической реализуемости (коэффициент температуропроводности не может принимать отрицательные значения) следует выбирать параметры математического ожидания и дисперсии так, чтобы соблюсти положительность в пределе трех сигм.

Таким образом, решение уравнения теплопроводности $T(x,t,\xi)$ становится стохастическим процессом, зависящим от случайного входного параметра.

 © МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2026

Решение задачи методом Галеркина (интрузивный подход). Для приближенного решения стохастического уравнения теплопроводности рассмотрим интрузивный подход на основе метода Галеркина.

Рассмотрим уравнение (2) с коэффициентом теплопроводности (4). Начальные и граничные условия заданы формулой (3).

Поскольку ξ — стандартная нормально распределенная величина, в качестве базиса выбираем ортонормированные полиномы Эрмита $\Psi_i = \frac{\mathrm{He}(\xi)_i}{\sqrt{i!}}$. Предположим, что решение аппроксимируется конечной суммой

$$T(x,t,\xi) \approx \sum_{i=0}^{P} T_i(x,t)\Psi_i(\xi), \tag{5}$$

где $T_i(x,t)$ — искомые коэффициенты разложения, зависящие от координаты и времени.

Подставляя это выражение в исходное уравнение и проектируя обе части на базисную функцию $\Psi_k(\xi)$, получаем:

$$\left\langle \frac{\partial T(x,t,\xi)}{\partial t},\ \Psi_k(\xi) \right\rangle = \left\langle (\mu_\alpha + \sigma_\alpha \xi)\frac{\partial^2 T(x,t,\xi)}{\partial x^2},\ \Psi_k(\xi) \right\rangle.$$

Слева по свойствам линейности и ортогональности имеем:

$$\left\langle \frac{\partial T(x,t,\xi)}{\partial t},\ \Psi_k(\xi) \right\rangle = \frac{\partial T_k(x,t)}{\partial t}.$$

Справа, пользуясь тождеством $\xi\Psi_j(\xi) = \sqrt{j+1}\,\Psi_{j+1}(\xi) + \sqrt{j}\,\Psi_{j-1}(\xi)$, можно выразить скалярные произведения $\left\langle \xi\Psi_k(\xi), \Psi_k(\xi) \right\rangle$ аналитически, в частности:

$$\left\langle \Psi_j(\xi), \Psi_k(\xi) \right\rangle = \delta_{jk};$$
$$\left\langle \xi\Psi_j(\xi), \Psi_k(\xi) \right\rangle = \sqrt{j+1}\,\delta_{j+1,k} + \sqrt{j}\,\delta_{j-1,k}.$$

Таким образом получаем систему $P + 1$ детерминированных уравнений:

$$\frac{\partial T_k(x,t)}{\partial t} = \sum_{j=0}^{P} A_{k,j}\frac{\partial^2 T_j(x,t)}{\partial x^2},\ k = 0,\ldots,P,$$

матрица $A_{k,j}$ имеет вид

$$A_{k,j} = \mu_\alpha \delta_{k,j} + \sigma_\alpha \left\langle \xi\Psi_j(\xi), \Psi_k(\xi) \right\rangle.$$

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2026 ISSN 2541-8009

Учитывая наличие символа Кронекера, получаем

$$\frac{\partial T_k}{\partial t} = \mu_\alpha \frac{\partial^2 T_k}{\partial x^2} + \sigma_\alpha \left(\sqrt{k} \frac{\partial^2 T_{k-1}}{\partial x^2} + \sqrt{k+1} \frac{\partial^2 T_{k+1}}{\partial x^2} \right), \ k = 0, \ldots, P.$$

При этом, поскольку граничные условия не зависят от случайного параметра, граничные условия останутся прежними ($T(0, t, \xi) = T_0$, $T(1, t, \xi) = T_0$), а начальные условия при разложении в ряд будут иметь следующий вид.

Для $k = 0$:

$$T_0(x, 0) = \left\langle T(x, 0, \xi), \ \Psi_0(\xi) \right\rangle = \left\langle T_0 + T_0 \sin \pi x \cdot (1 + \varepsilon\xi), 1 \right\rangle =$$
$$= T_0 + T_0 \sin \pi x + T_0 \sin \pi x \cdot \varepsilon\xi, \ \ 1 = T_0 + T_0 \sin \pi x,$$

так как $\left\langle \xi, 1 \right\rangle = 0$.

Для $k = 1$:

$$T_1(x, 0) = \left\langle T(x, 0, \xi), \ \Psi_1(\xi) \right\rangle = \left\langle T_0 + T_0 \sin \pi x \cdot (1 + \varepsilon\xi), \xi \right\rangle =$$
$$= T_0 \sin \pi x \cdot \varepsilon \left\langle \xi, \xi \right\rangle = T_0 \sin \pi x \cdot \varepsilon,$$

так как $\left\langle \xi, \xi \right\rangle = 1$.

Для $k \geq 2$:

$$T_k(x, 0) = \left\langle T(x, 0, \xi), \Psi_k(\xi) \right\rangle = 0,$$

так как ни T_0, ни $T_0 \sin \pi x$, ни ξ не проецируются на полиномы Эрмита высших порядков.

Для дальнейшего моделирования примем значение параметра $P = 5$. При данном значении получим систему из шести связанных уравнений:

$$\frac{\partial T_0}{\partial t} = \mu_\alpha T_{0,xx} + \sigma_\alpha T_{1,xx};$$
$$\frac{\partial T_1}{\partial t} = \sigma_\alpha T_{0,xx} + \mu_\alpha T_{1,xx} + \sqrt{2}\sigma_\alpha T_{2,xx};$$
$$\frac{\partial T_2}{\partial t} = \sqrt{2}\sigma_\alpha T_{1,xx} + \mu_\alpha T_{2,xx} + \sqrt{3}\sigma_\alpha T_{3,xx};$$
$$\frac{\partial T_3}{\partial t} = \sqrt{3}\sigma_\alpha T_{2,xx} + \mu_\alpha T_{3,xx} + \sqrt{4}\sigma_\alpha T_{4,xx};$$
$$\frac{\partial T_4}{\partial t} = \sqrt{4}\sigma_\alpha T_{3,xx} + \mu_\alpha T_{4,xx} + \sqrt{5}\sigma_\alpha T_{5,xx};$$
$$\frac{\partial T_5}{\partial t} = \sqrt{5}\sigma_\alpha T_{4,xx} + \mu_\alpha T_{5,xx}.$$

 © МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2026

или в матричном эквиваленте:

$$\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} = \mathbf{A}\frac{\partial^2 \mathbf{T}}{\partial x^2};\ \ \mathbf{T} = (T_0, \ldots, T_5)^{\mathrm{T}}. \tag{6}$$

Матрица **A** представляет собой симметричную трехдиагональную матрицу с соответствующими значениями:

$$A_{k,k} = \mu_\alpha,\ A_{k,k+1} = A_{k+1,k} = \sigma_\alpha\sqrt{k+1},\ \ k = 0,\ \ldots,\ 4.$$

При $P > 1$ система уравнений становится жесткой. При дискретизации уравнения теплопроводности вторым разностным оператором матрица системы имеет большие отрицательные собственные значения, что приводит к высокой обусловленности и жесткости системы [14]. Для таких систем эффективны неявные схемы. В работе используется метод Кранка — Николсона, который является безусловно устойчивым в задачах теплопроводности [14, 15].

Полученную систему уравнений решали численно, после чего приближенное стохастическое решение восстановили по формуле (5).

Таким образом были найдены коэффициенты РПХ в узлах сетки по *x*.

Решение задачи методом наименьших квадратов (неинтрузивный подход). В отличие от метода Галеркина, метод наименьших квадратов относится к классу неинтрузивных методов. Он не требует изменения исходной дифференциальной модели, а лишь использует множество независимых прогонов для различных реализаций случайного параметра. Это делает метод особенно привлекательным для инженерной практики, где модель представляет собой «черный ящик».

Пусть искомое решение $T(x, t, \xi)$ приближается с помощью РПХ степени P в форме (5).

Метод МНК предполагает приближение коэффициентов T_i на фиксированных узлах x, t по значению температуры, полученному из численного решения исходного уравнения при разных значениях ξ.

В ходе решения задачи методом МНК генерируется набор реализаций случайного параметра $\xi^{(j)}$, $j = 1, \ldots, N$, где $\xi^{(j)} \sim \quad (0, 1)$.

Для каждой реализации решается детерминированная задача теплопроводности

$$\frac{\partial T^{(j)}}{\partial t} - \alpha(\xi^{(j)})\frac{\partial^2 T^{(j)}}{\partial x^2} = 0$$

с граничными условиями $T^{(j)}(0, t) = T^{(j)}(L, t) = T_0$ и начальным условием

$$T^{(j)}(x, 0) = T_0 + T_0(1 + \varepsilon\xi^{(j)})\sin \pi x.$$

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2026 ISSN 2541-8009

Таким образом будет получен набор траекторий для каждой реализации:

$$T^{(j)}(x,t),\ \ j=1,\ldots,N.$$

Для фиксированных x и t используем разложение (5), подставив j-ю реализацию случайного параметра.

Это линейная регрессионная модель с неизвестными коэффициентами $T_k(x,t)$. Запишем ее в матричной форме, при этом $\mathbf{T}(x,t)$ — вектор наблюдений, $\boldsymbol{\Psi}$ — матрица базисных функций, $\mathbf{c}(x,t)$ — вектор искомых коэффициентов:

$$\mathbf{T}(x,t)=\boldsymbol{\Psi}\cdot\mathbf{c}(x,t);$$

$$\mathbf{T}(x,t)=\begin{bmatrix}T^{(1)}(x,t)\\T^{(1)}(x,t)\\\vdots\\T^{(N)}(x,t)\end{bmatrix}\in\mathbb{R}^N;\ \ \mathbf{c}(x,t)=\begin{bmatrix}T_0(x,t)\\T_1(x,t)\\\vdots\\T_P(x,t)\end{bmatrix};$$

$$\boldsymbol{\Psi}=\begin{bmatrix}\Psi_0(\xi^{(1)}) & \Psi_1(\xi^{(1)}) & \cdots & \Psi_P(\xi^{(1)})\\ \Psi_0(\xi^{(2)}) & \Psi_1(\xi^{(2)}) & \cdots & \Psi_P(\xi^{(2)})\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \Psi_0(\xi^{(N)}) & \Psi_1(\xi^{(N)}) & \cdots & \Psi_P(\xi^{(N)})\end{bmatrix}.$$

Тогда коэффициенты находятся как решение задачи МНК:

$$\mathbf{c}(x)=\arg\min_{\mathbf{y}\in\mathbb{R}^{P+1}}\left\|\boldsymbol{\Psi}\cdot\mathbf{y}-\mathbf{T}(x,t)\right\|_2^2;$$

$$\hat{\mathbf{c}}(x)=(\boldsymbol{\Psi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi})^{-1}\boldsymbol{\Psi}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{T}(x).$$

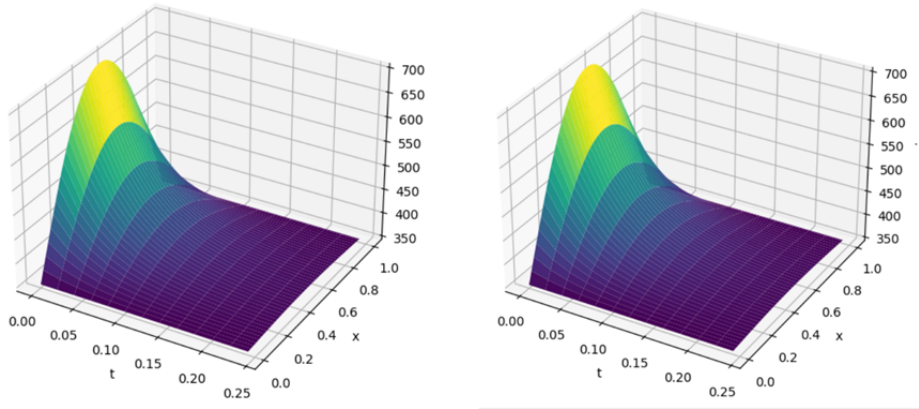
Сравнительный анализ методов нахождения коэффициентов полиномиального хаоса. В ходе численного моделирования задачи были приняты следующие значения параметров: $T_0=350$ K, $\varepsilon=0{,}1$, $\mu_\alpha=2$, $\sigma_\alpha=0{,}3$. Графическое изображение средней траектории для метода Галеркина и МНК представлено на рис. 1.

Для оценки точности численных методов используется аналитическое решение задачи теплопроводности при фиксированных значениях случайного параметра. В условиях задачи, когда температуропроводность α является постоянной для каждой реализации, аналитическое решение уравнения с заданными начальными и граничными условиями может быть получено в виде

$$T(x,t,\xi)=T_0+T_0(1+\varepsilon\xi)\sin\pi x\cdot e^{(-\pi^2\alpha(\xi)t)}.$$

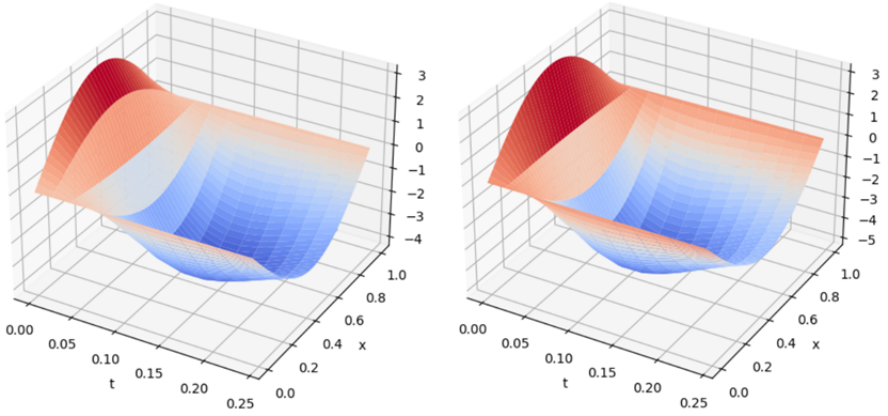
 © МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2026

Такое решение служит эталонным для сравнения с приближенными результатами, полученными методами РПХ. Так как построенные поверхности для трех методов зрительно сложно различимы, приведем графики ошибок по средним траекториям методов Галеркина и МНК в сравнении с аналитическим решением.



а *б*

Рис. 1. Численное моделирование средней траектории методом МНК (*а*) и Галеркина (*б*)



а *б*

Рис. 2. Ошибка для метода Галеркина (*а*) и МНК (*б*)

В рамках численного эксперимента средние поля аналитического решения вычислялись по 200 реализациям случайного параметра, а методов Галеркина и МНК — по общей независимой выборке из 80 реализаций, в связи с чем приведённые ошибки включают расхождение выборочных средних (см. таблицу).

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2026 ISSN 2541-8009

Ошибки рассматриваемых методов в сравнении с аналитическим решением

Ошибка	Метод Галеркина	Метод наименьших квадратов
Среднеквадратическая	1,074	1,091
Максимальная абсолютная	4,244	5,170

В проведенном сравнении с аналитическим решением показано, что все три построения демонстрируют близкие результаты. Метод наименьших квадратов, несмотря на то что является чисто статистическим методом демонстрирует высокую точность, сравнимую с методом Галеркина в рамках поставленной задачи.

Заключение. Современные методы учета неопределенностей в задачах математической физики становятся все более актуальными в связи с ростом требований к точности инженерных расчетов и необходимостью моделирования параметров, подверженных случайным флуктуациям. В настоящей работе был рассмотрен метод РПХ.

В исследовании был проведен анализ двух ключевых подходов к вычислению коэффициентов полиномиального хаоса: интрузивного метода Галеркина и неинтрузивного МНК. На числовом примере нестационарного уравнения теплопроводности со случайным коэффициентом температуропроводности было показано, что метод Галеркина и МНК для $P = 5$ демонстрируют высокую точность. В то же время метод МНК обладает рядом практических преимуществ: простотой реализации, универсальностью и возможностью работы с «черными ящиками», что делает его предпочтительным в применении на практике.

Литература

[1] Sabelfeld K.K., Brandt O., Kaganer V.M. Stochastic model for the fluctuation-limited reaction-diffusion kinetics in inhomogeneous media based on the nonlinear Smoluchowski equations. *Journal of Mathematical Chemistry*, 2015, vol. 53, no. 2, pp. 651–669. https://doi.org/10.1007/s10910-014-0446-6

[2] Шалимова И.А., Сабельфельд К.К. Решение стохастического уравнения Дарси на основе полиномиального разложения хаоса. *Сибирский журнал вычислительной математики*, 2017, т. 20, № 3, с. 313–327. https://doi.org/10.15372/SJNM20170307

[3] Métivier D., Vuffray M., Misra S. Efficient polynomial chaos expansion for uncertainty quantification in power systems. *Electric Power Systems Research*, 2020, vol. 189, art. no. 106791. https://doi.org/10.1016/j.epsr.2020.106791

 © МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2026

[4] Kantarakias K.D., Papadakis G. Sensitivity-enhanced generalized polynomial chaos for efficient uncertainty quantification. *Journal of Computational Physics*, 2023, vol. 491, art. no. 112377. https://doi.org/10.1016/j.jcp.2023.112377

[5] Облакова Т.В., Фам Куок Вьет. Об оптимальной конструкции моделирования разложения полиномиального хаоса в задачах количественной оценки неопределенности. *Математическое моделирование и численные методы*, 2024, № 3, с. 120–139. https://doi.org/10.18698/2309-3684-2024-3-120139

[6] Облакова Т.В., Фам Куок Вьет. Сравнительное моделирование на основе многочленов Колмогорова — Габора в задачах полиномиального хаоса и регрессии. *Математическое моделирование и численные методы*, 2023, № 4, с. 93–108. https://doi.org/10.18698/2309-3684-2023-4-93108

[7] Wiener N. The Homogeneous Chaos. *American Journal of Mathematics*, 1938, vol. 60, no. 4, pp. 897–936. https://doi.org/10.2307/2371268

[8] Ghanem R.G., Spanos P.D. *Stochastic Finite Elements: A Spectral Approach*. New York, Springer-Verlag, 1991, 214 p. https://doi.org/10.1007/978-1-4612-3094-6

[9] Xiu D., Karniadakis G.E. Modeling uncertainty in flow simulations via generalized polynomial chaos. *Journal of Computational Physics*, 2003, vol. 187, no. 1, pp. 137–167. https://doi.org/10.1016/S0021-9991(03)00092-5

[10] Sudret B. *Polynomial chaos expansions and stochastic finite-element methods. In: Risk and Reliability in Geotechnical Engineering*. Boca Raton, CRC Press, 2015, chap. 6, pp. 265–300.

[11] Ghiocel D.M., Ghanem R.G. Stochastic Finite-Element Analysis of Seismic Soil–Structure Interaction. *Journal of Engineering Mechanics*, 2002, vol. 128, no. 1, pp. 66–77. https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9399(2002)128:1(66)

[12] Sudret B., Blatman G., Berveiller M. *Response Surfaces based on Polynomial Chaos Expansions. In: Construction Reliability: Safety, Variability and Sustainability*. ISTE/Wiley, 2011, chap. 8, pp. 147–167.
https://doi.org/10.1002/9781118601099.ch8

[13] Brill S. *Stochastic Modeling of Heat Transfer through Heterogeneous Materials*. Undergraduate Research Report, University of Notre Dame, 2015, 42 p.

[14] Crank J., Nicolson P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 1947, vol. 43, no. 1, pp. 50–67. https://doi.org/10.1017/S0305004100023197

[15] Strikwerda J.C. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. Philadelphia, SIAM, 2004, 435 p. https://doi.org/10.1137/1.9780898717938

Поступила в редакцию 24.03.2026

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2026 ISSN 2541-8009

Кожемякин Григорий Андреевич — студент кафедры «Вычислительная математика и математическая физика», МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

Научный руководитель — Т.В. Облакова, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Вычислительная математика и математическая физика», МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:
Кожемякин Г.А. Сравнительный анализ интрузивных и неинтрузивных методов вычисления коэффициентов разложения полиномиального хаоса на примере уравнения теплопроводности. *Политехнический молодежный журнал*, 2026, № 5 (106). URL: https://ptsj.bmstu.ru/catalog/math/compmath/1127.html

 © МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2026

COMPARATIVE ANALYSIS OF INTRUSIVE AND NON-INTRUSIVE METHODS FOR COMPUTING POLYNOMIAL CHAOS EXPANSION COEFFICIENTS: A CASE STUDY OF THE HEAT EQUATION

G.A. Kozhemyakin kozhemyakinga@student.bmstu.ru

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

This paper considers the heat equation under a formulation that accounts for the stochastic nature of the thermal diffusivity coefficient and randomness in the initial condition. Uncertainty is represented using the Polynomial Chaos Expansion method. The analytical solution is compared with two stochastic approximations: the non-intrusive least-squares method and the intrusive Galerkin method implemented together with the Crank — Nicolson scheme. Statistical simulations are performed, mean temperature trajectories and their three-dimensional visualizations are constructed, and errors between the methods are evaluated. The results demonstrate a high degree of consistency between the numerical approaches and the analytical solution, confirming the practical suitability of the proposed methods.

Keywords: polynomial chaos, intrusive methods, non-intrusive methods, Galerkin method, least-squares method, stochastic simulation, heat equation, mathematical physics, uncertainty

References

[1] Sabelfeld K.K., Brandt O., Kaganer V.M. Stochastic model for the fluctuation-limited reaction-diffusion kinetics in inhomogeneous media based on the nonlinear Smoluchowski equations. *Journal of Mathematical Chemi*stry, 2015, vol. 53, no. 2, pp. 651–669. https://doi.org/10.1007/s10910-014-0446-6

[2] Shalimova I.A., Sabelfeld K.K. Reshenie stokhasticheskogo uravneniya Darsi na osnove polinomialnogo razlozheniya khaosa [Solution to a stochastic Darcy equation by the polynomial chaos expansion]. *Sibirskiy zhurnal vychislitelnoy matematiki*, 2017, vol. 20, no. 3, pp. 313–327. (In Russ.). https://doi.org/10.15372/SJNM20170307

[3] Métivier D., Vuffray M., Misra S. Efficient polynomial chaos expansion for uncertainty quantification in power systems. *Electric Power Systems Research*, 2020, vol. 189, art. no. 106791. https://doi.org/10.1016/j.epsr.2020.106791

[4] Kantarakias K.D., Papadakis G. Sensitivity-enhanced generalized polynomial chaos for efficient uncertainty quantification. *Journal of Computational Physics*, 2023, vol. 491, art. no. 112377. https://doi.org/10.1016/j.jcp.2023.112377

[5] Oblakova T.V., Pham Quoc Viet. Ob optimalnoy konstruktsii modelirovaniya razlozheniya polinomialnogo khaosa v zadachakh kolichestvennoy otsenki neopredelennosti [On the optimal modeling design polynomial chaos expansion in

© BMSTU, 2026 ISSN 2541-8009

problems of quantitative assessment of uncertainty]. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody*, 2024, no. 3, pp. 120–139. (In Russ.). https://doi.org/10.18698/2309-3684-2024-3-120139

[6] Oblakova T.V., Pham Quoc Viet. Sravnitelnoe modelirovanie na osnove mnogochlenov Kolmogorova — Gabora v zadachakh polinomialnogo khaosa i regressii [Polynomial chaos and regression based on Kolmogorov — Gabor polynomials: comparative modeling]. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody*, 2023, no. 4, pp. 93–108. (In Russ.). https://doi.org/10.18698/2309-3684-2023-4-93108

[7] Wiener N. The Homogeneous Chaos. *American Journal of Mathematics*, 1938, vol. 60, no. 4, pp. 897–936. https://doi.org/10.2307/2371268

[8] Ghanem R.G., Spanos P.D. *Stochastic Finite Elements: A Spectral Approach*. New York, Springer-Verlag, 1991, 214 p. https://doi.org/10.1007/978-1-4612-3094-6

[9] Xiu D., Karniadakis G.E. Modeling uncertainty in flow simulations via generalized polynomial chaos. *Journal of Computational Physics*, 2003, vol. 187, no. 1, pp. 137–167. https://doi.org/10.1016/S0021-9991(03)00092-5

[10] Sudret B. *Polynomial chaos expansions and stochastic finite-element methods. In: Risk and Reliability in Geotechnical Engineering*. Boca Raton, CRC Press, 2015, chap. 6, pp. 265–300.

[11] Ghiocel D.M., Ghanem R.G. Stochastic Finite-Element Analysis of Seismic Soil–Structure Interaction. *Journal of Engineering Mechanics*, 2002, vol. 128, no. 1, pp. 66–77. https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9399(2002)128:1(66)

[12] Sudret B., Blatman G., Berveiller M. *Response Surfaces based on Polynomial Chaos Expansions. In: Construction Reliability: Safety, Variability and Sustainability*. ISTE/Wiley, 2011, chap. 8, pp. 147–167. https://doi.org/10.1002/9781118601099.ch8

[13] Brill S. *Stochastic Modeling of Heat Transfer through Heterogeneous Materials*. Undergraduate Research Report, University of Notre Dame, 2015, 42 p.

[14] Crank J., Nicolson P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 1947, vol. 43, no. 1, pp. 50–67. https://doi.org/10.1017/S0305004100023197

[15] Strikwerda J.C. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. Philadelphia, SIAM, 2004, 435 p. https://doi.org/10.1137/1.9780898717938

Received 24.03.2026

 © BMSTU, 2026

Kozhemyakin G.A. — Student, Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.

Scientific advisor — T.V. Oblakova, Ph. D. (Phys.-Math.), Associate Professor, Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.

Please reference this article as follows:
Kozhemyakin G.A. Comparative analysis of intrusive and non-intrusive methods for computing polynomial chaos expansion coefficients: a case study of the heat equation. *Politekhnicheskiy molodezhnyy zhurnal*, 2026, no. 5 (106). (In Russ.). URL: https://ptsj.bmstu.ru/catalog/math/compmath/1127.html

© BMSTU, 2026 ISSN 2541-8009