

Статистичне моделювання та встановлення двосторонніх критичних областей для розв'язків параболічних задач за експериментальних даних на границі тіла

<https://doi.org/10.31713/MCIT.2025.034>

Юрій Білушак

Відділ числових методів математичної фізики
Інститут прикладних проблем механіки і математики ім.
Я.С. Підстригача НАНУ
Кафедра обчислювальної математики і програмування
Національний університет “Львівська політехніка”,
Львів, Україна
byixx13@gmail.com

Ольга Чернуха

Відділ числових методів математичної фізики
Інститут прикладних проблем механіки і математики
ім. Я.С. Підстригача НАНУ
Кафедра обчислювальної математики і програмування
Національний університет “Львівська політехніка”,
Львів, Україна
zalznuchna6@gmail.com

Галина Білушак

Кафедра обчислювальної математики і програмування
Національний університет “Львівська політехніка”,
Львів, Україна
halyna.i.bilushchak@lpnu.ua

Abstract — Проведено статистичне моделювання процесів переносу в шарі з неповними даними на границі тіла. Крайова задача сформульована для випадку ненульової початкової умови, наявності сталого джерела на одній границі тіла (класична гранична умова) та вибірки експериментальних даних для шуканої функції на іншій границі (статистична гранична умова). Як гранична умова використовується модель лінійної регресії, отримана з експериментальних даних методом найменших квадратів. Записано матрицю регресорів, отримано інформаційну матрицю та матрицю помилок. На цій основі одержано формули та проаналізовано двосторонню критичну область на основі критерію Фішера. Проаналізовано вплив рівня надійності на ширину двосторонньої критичної області, побудованої для регресії та розв'язку задачі.

Ключові слова — процес перенесення; статистичне моделювання; експериментальні дані; крайова задача; двостороння критична область

1. ВСТУП

Різноманітні задачі інженерії, екології, біології, фармакології та низка інших технічних та технологічних досліджень потребують подальшого розвитку підходів і методів математичного опису нерівноважних процесів різної фізичної природи в природних або штучних об'єктах [1]. Актуальність вказаних вище проблем спричинена необхідністю побудови ефективних методик і оцінок для прогнозування розподілу забруднень техногенного походження, оцінці якості питної води та покращення її очистки в промислових масштабах, встановленні впливу дифузії лікарських препаратів в тканину, дифузії агресивних речовин при оцінці надійності та довговічності

експлуатації елементів і вузлів конструкцій для запобігання руйнування відповідних матеріалів тощо. В низці задач такої природи актуальними є методи статистичного моделювання, які поєднують класичні підходи математичного моделювання та методи математичної статистики. Такі дослідження дозволяють отримувати достовірний прогноз процесів, які протікають в об'єктах навколишнього середовища, вузлах промислового обладнання, людському організмі тощо та вчасно вживати необхідні заходи для запобігання їх негативного розвитку. Основні підходи та методи статистичного моделювання розвиваються доволі бурхливо протягом останніх декількох десятиліть та базуються на необхідності розв'язування та аналізу практичних задач [2, 3].

У роботі розглядається крайова задача параболічного типу, що описує процеси перенесення – тепла, маси, заряду, тощо, в шарі, коли на одній з границь наявні експериментальні дані щодо шуканої функції за ненульової початкової умови. Основною є розвиток та узагальнення методики, викладеної в [4]. Зокрема, ефективну методику встановлення двосторонніх критичних областей для розв'язків параболічних диференціальних рівнянь за експериментальних даних на границі тіла та досліджено вплив на них рівня надійності.

II. МОДЕЛЬ ПРОЦЕСІВ ПЕРЕНЕСЕННЯ У ШАРІ ЗА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ НА ГРАНИЦІ

Нехай в шарі товщини z_0 протікає процес, який описується функцією $u(\tau, z)$, що є розв'язком диференціального рівняння другого порядку в частинних похідних [5]

$$\frac{\partial u(\tau, z)}{\partial \tau} = A \frac{\partial^2 u(\tau, z)}{\partial z^2}, \quad (1)$$

де A - сталий коефіцієнт, τ - час, z - просторова координата.

Приймаємо, що в початковий момент

$$u(\tau, z)|_{\tau=0} = u_0 \equiv \text{const}, \quad (2)$$

а для $\tau > 0$ на верхній поверхні шару діє стале джерело:

$$u(\tau, z)|_{z=0} = u_* \equiv \text{const}. \quad (3)$$

На нижній границі шару значення функції $u(\tau, z)$ отримані експериментально в n моментах часу (табл. 1).

Таблиця І. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДАНІ НА НИЖНІЙ ГРАНИЦІ ШАРУ

τ	τ_1	τ_2	...	τ_i	...	τ_n
$u(\tau) _{z_0}$	$u_{z_0}(\tau_1)$	$u_{z_0}(\tau_2)$	...	$u_{z_0}(\tau_i)$	...	$u_{z_0}(\tau_n)$

Тоді будемо лінійну регресійну модель [6, 7], шукаючи її коефіцієнти методом найменших квадратів [8]

$$f(\tau) = a_1 \tau + a_0. \quad (4)$$

В результаті гранична умова при $z = z_0$ набуде вигляду

$$u(\tau, z)|_{z=z_0} = f(\tau). \quad (5)$$

Зводимо задачу (1)-(3), (5) до задачі з нульовими граничними умовами і застосовуємо скінченне інтегральне $\sin$ -перетворення Фур'є. В результаті отримаємо розв'язок в загальному випадку у вигляді

$$\begin{aligned} u(\tau, z) = & u_* \left(1 - \frac{z}{z_0} \right) + f(\tau) \frac{z}{z_0} + \\ & + \frac{2}{z_0} \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ \frac{(-1)^m}{y_m} f(\tau) + \frac{e^{-Ay_m^2 \tau}}{y_m} \left(u_0 - u_* + (-1)^{m+1} u_0 + \right. \right. \\ & \left. \left. + (-1)^m Ay_m^2 \int_{\tau=0}^{\tau} f(\tau) e^{Ay_m^2 \tau} d\tau \right) - \right. \\ & \left. - (-1)^m Ay_m^2 \int_{\tau=0}^{\tau} f(\tau) e^{Ay_m^2 \tau} d\tau \right\} \sin(y_m z). \end{aligned} \quad (6)$$

Враховуючи, що $f(\tau)$ є лінійною регресією, маємо

$$\begin{aligned} u(\tau, z) = & u_* \left(1 - \frac{z}{z_0} \right) + (a_1 \tau + a_0) \frac{z}{z_0} + \\ & + \frac{2}{z_0} \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ a_1 \frac{(-1)^m}{Ay_m^3} + \frac{e^{-Ay_m^2 \tau}}{y_m} \times \right. \\ & \left. \times \left[u_0 - u_* + (-1)^{m+1} u_0 + (-1)^m \left(a_0 - \frac{a_1}{Ay_m^2} \right) \right] \right\} \sin(y_m z), \end{aligned} \quad (7)$$

де $y_m = m\pi/z_0$.

Оскільки вибірка експериментальних даних для шуканої функції задана на проміжку $\tau \in [0, \tau_n]$, тому отримана формула (7) справедлива на цьому часовому проміжку.

III. ДВОСТОРОННЯ КРИТИЧНА ОБЛАСТЬ ДЛЯ ПРОГНОЗОВАНОГО ЗНАЧЕННЯ ПОБУДОВАНОЇ ЛІНІЙНОЇ РЕГРЕСІЙНОЇ МОДЕЛІ ДЛЯ ФУНКЦІЇ $f(\tau)$

Щоб встановити двосторонню критичну область для функції $u(\tau, z)$ - розв'язку крайової задачі (1)-(3), (5) спочатку за методикою, наведеною в роботі [7], знайдемо двосторонню критичну область для лінійної регресії $f(\tau)$ (4).

За заданим рівнем значущості α визначаємо рівень надійності $\beta = 1 - \alpha$. За таблицею експериментальних даних (Табл. 1) записуємо матрицю регресорів $\aleph$, яка для цього випадку має вигляд

$$\aleph^T = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \tau_1 & \tau_2 & \tau_3 & \dots & \tau_n \end{pmatrix}.$$

Для прогнозованого значення лінійної регресії $f(\tau)$ дисперсія визначається за формулою

$$\sigma_f^2 = \mathbf{f}_\tau^T (\aleph^T \aleph)^{-1} \mathbf{f}_\tau \sigma_\tau^2, \quad (8)$$

де $\mathbf{f}_\tau^T = (1 \quad \tau)$.

Шукаю двосторонню критичну область для $f(\tau)$ отримаємо, підставляючи оцінку середнього квадратичного відхилення σ_f (8) у вираз $|\hat{f}(\tau) - f(\tau)| / \sigma_f$. Тоді істинне значення шуканої функції на нижній границі $f(\tau)$ з ймовірністю β змінюється в межах [7]:

$$\begin{aligned} \hat{f}(\tau) - \tau_\alpha \sigma_\tau \sqrt{\mathbf{f}_\tau^T (\aleph^T \aleph)^{-1} \mathbf{f}_\tau} &\leq f(\tau) \leq \\ &\leq \hat{f}(\tau) + \tau_\alpha \sigma_\tau \sqrt{\mathbf{f}_\tau^T (\aleph^T \aleph)^{-1} \mathbf{f}_\tau}. \end{aligned} \quad (9)$$

Детермінант інформаційної матриці

$$(\aleph^T \aleph) = \begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^n \tau_i \\ \sum_{i=1}^n \tau_i & \sum_{i=1}^n \tau_i^2 \end{pmatrix},$$

отримано у формі

$$\det(\aleph^T \aleph) = n \sum_{i=1}^n \tau_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n \tau_i \right)^2.$$

Тоді матрицю помилок отримаємо у вигляді

$$(\aleph^T \aleph)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\sum_{i=1}^n \tau_i^2}{n \sum_{i=1}^n \tau_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n \tau_i \right)^2} & \frac{-\sum_{i=1}^n \tau_i}{n \sum_{i=1}^n \tau_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n \tau_i \right)^2} \\ \frac{-\sum_{i=1}^n \tau_i}{n \sum_{i=1}^n \tau_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n \tau_i \right)^2} & \frac{n}{n \sum_{i=1}^n \tau_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n \tau_i \right)^2} \end{pmatrix}.$$

Зазначимо, що довжини двосторонніх критичних областей будуть різними у різних точках факторного простору, оскільки в цих точках різними є вектори $\mathbf{f}_\tau$, тобто точність прогнозованого значення лі-

нійної регресії $f(\tau)$ може відрізнятися у різні моменти часу τ .

Знайдемо межі двосторонньої критичної області для функції $f(\tau)$. Нехай

$$f(\tau) = \hat{f}(\tau) \pm \Delta_f \tilde{f}(\tau), \quad (10)$$

де у випадку лінійної регресії, що впливає з формули (9), маємо

$$\hat{f}(\tau) = a_1 \tau + a_0, \quad \Delta_f \tilde{f}(\tau) = B \sqrt{p_1 + p_2 \tau + p_3 \tau^2}.$$

Тут

$$p_1 = \frac{\sum_{i=1}^n \tau_i^2}{n \sum_{i=1}^n \tau_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n \tau_i \right)^2}, \quad p_2 = \frac{-2 \sum_{i=1}^n \tau_i}{n \sum_{i=1}^n \tau_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n \tau_i \right)^2},$$

$$p_3 = \frac{n}{n \sum_{i=1}^n \tau_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n \tau_i \right)^2}; \quad B = \tau_\alpha \sigma_f. \quad (11)$$

Зазначимо, що “+” у формулі (10) відноситься до верхньої межі критичної області, а “-” – до нижньої.

Дослідивши вплив параметра n на коефіцієнти p_i , $i = 1, 2, 3$ (11), зазначимо, що якщо зростає кількість вимірів n , то ці коефіцієнти зменшуються, причому

$$\lim_{n \rightarrow \infty} p_1(n) = \lim_{n \rightarrow \infty} p_2(n) = 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} p_3 = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \tau_i^2}.$$

Тоді збільшення кількості експериментів n на тому самому проміжку $\tau \in [0; \tau_n]$ за сталого значення σ_τ призводить до звуження двосторонньої критичної області (9), в якій з ймовірністю β потрапляють експериментальні дані. Тоді як збільшення середньо квадратичного відхилення σ_τ величини τ , за однакової кількості вимірів n веде до збільшення двосторонньої критичної області для функції лінійної регресії $f(\tau)$. Зазначимо, що вплив дисперсії змінної τ на двосторонню критичну область є аналогічним до впливу σ_τ , проте зростання на/в одне і те саме число сповільнює швидкість зростання цього інтервалу.

Також відмітимо, що, оскільки коефіцієнт B є прямо пропорційний значенню критерію Стюдента τ_α , то при зростанні рівня надійності β збільшується значення коефіцієнта B .

IV. ВСТАНОВЛЕННЯ ДВОСТОРОННЬОЇ КРИТИЧНОЇ ОБЛАСТІ ДЛЯ РОЗВ’ЯЗКУ КРАЙОВОЇ ЗАДАЧІ

Підставивши у співвідношення (6) представлення функції $f(\tau)$ (10) отримаємо межі двосторонньої критичної області для розв’язку крайової задачі (1)-(3), (5)

$$u_f^\pm(\tau, z) = u_* \left(1 - \frac{z}{z_0} \right) + \hat{f}(\tau) \frac{z}{z_0} \pm \Delta_f \tilde{f}(\tau) \frac{z}{z_0} +$$

$$+ \frac{2}{z_0} \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{(-1)^m}{y_m} \hat{f}(\tau) \pm \frac{(-1)^m}{y_m} \Delta_f \tilde{f}(\tau) + \frac{e^{-Ay_m^2 \tau}}{y_m} \times \right.$$

$$\times \left(u_0 - u_* + (-1)^{m+1} u_0 + (-1)^m Ay_m^2 \int \hat{f}(\tau) e^{Ay_m^2 \tau} d\tau \right) \Big|_{\tau=0} \pm$$

$$\pm (-1)^m Ay_m^2 \int \Delta_f \tilde{f}(\tau) e^{Ay_m^2 \tau} d\tau \Big|_{\tau=0} -$$

$$- (-1)^m Ay_m^2 \int \hat{f}(\tau) e^{Ay_m^2 \tau} d\tau \mp$$

$$\mp (-1)^m Ay_m^2 \int \Delta_f \tilde{f}(\tau) e^{Ay_m^2 \tau} d\tau \Big] \sin(y_m z). \quad (12)$$

У випадку накладання лінійної регресії як умови на нижній границі шару, враховуючи формулу (6), можемо подати формулу (12) у вигляді

$$u_f^\pm(\tau, z) = u(\tau, z) \pm \Delta_f \tilde{f}(\tau) \frac{z}{z_0} \pm$$

$$\pm \frac{2}{z_0} \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{(-1)^m}{y_m} \Delta_f \tilde{f}(\tau) + \right.$$

$$+ \frac{e^{-Ay_m^2 \tau}}{y_m} \left((-1)^m Ay_m^2 \int \Delta_f \tilde{f}(\tau) e^{Ay_m^2 \tau} d\tau \Big|_{\tau=0} - \right.$$

$$\left. \left. - (-1)^m Ay_m^2 \int \Delta_f \tilde{f}(\tau) e^{Ay_m^2 \tau} d\tau \right) \right] \sin(y_m z).$$

Тут $\Delta_f \tilde{f}(\tau) \Big|_{\tau=0} = B \sqrt{p_1}$.

Неозначені інтеграли $\int \Delta_f \tilde{f}(\tau) e^{-Ay_m^2 \tau} d\tau \Big|_{\tau=0}$ та

$\int \Delta_f \tilde{f}(\tau) e^{-Ay_m^2 \tau} d\tau$ не беруться в елементарних функціях, тоді знайдемо їх наближені вирази. Оскільки функція $\Delta_f \tilde{f}(\tau)$ є неперервно-диференційованою потрібну кількість разів, розкладемо її в ряд Тейлора на проміжку заданих експериментальних вимірювань $\tau \in [0, \tau_n]$ в околі деякої точки t з цього проміжку:

$$\Delta_f \tilde{f}(\tau) = B \sqrt{p_1 + p_2 \tau + p_3 \tau^2} =$$

$$= B \sqrt{p_1 + p_2 t + p_3 t^2} + B \frac{\tau - t}{1!} \frac{(p_2 + 2p_3 t)}{2 \sqrt{p_1 + p_2 t + p_3 t^2}} +$$

$$+ B \frac{(\tau - t)^2}{2!} \frac{4p_3 p_1 - p_2^2}{4(p_1 + p_2 t + p_3 t^2)^{3/2}} + \dots + R_n(\tau).$$

У випадку

$$\Delta_f \tilde{f}(\tau) \approx A_3 \tau^2 + \tilde{b} \tau + \tilde{p},$$

де $\tilde{p} = A_1 - A_2 a_1 + A_3 a_1^2$, $\tilde{b} = (A_2 - 2A_3 a_1)$, для двосторонньої критичної області отримаємо такі межі

$$u_f^\pm(\tau, z) = u(\tau, z) \pm 2B \sqrt{p_1 + p_2 \tau + p_3 \tau^2} \frac{z}{z_0} \pm$$

$$\pm \frac{2}{z_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{y_m} e^{-Ay_m^2 \tau} \times$$

$$\times \left(2B\sqrt{p_1} + A_3\tau^2 + \tilde{b}\tau - 2\frac{(A_3\tau + \tilde{b})}{Ay_m^2} \right) \sin(y_m z).$$

Врахуємо, що

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} u_f^\pm(\tau, z) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} u(\tau, z) \pm 2B\sqrt{p_1 + p_2\tau + p_3\tau^2} \frac{z}{z_0}.$$

Тоді для великих часів протікання процесу, який описується вихідною крайовою задачею, чим більше τ тим більшою є ширина двосторонньої критичної області, тобто функції $u_f^\pm(\tau, z)$ не мають стаціонарного режиму (часової асимптотики).

На ширину двосторонньої критичної області найбільший вплив має коефіцієнт B . Зокрема, чим менше значення $|B|$, тим вузьча двостороння критична область для того самого рівня надійності β . І тим ширша двостороння критична область, чим більша дисперсія прогнозованого значення лінійної регресії $f(\tau)$.

V. ВПЛИВ СТАТИСТИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВИБІРКИ НА ДВОСТОРОННЮ КРИТИЧНУ ОБЛАСТЬ РОЗВ'ЯЗКУ КРАЙОВОЇ ЗАДАЧІ

Проаналізуємо вплив статистичних характеристик вибірки експериментальних даних на шукану функцію на нижній границі шару на конкретних прикладах. За базові параметри прийнято $A=1$, $u_* = 1$, $u_0 = 0$, $z_0 = 1$. В розрахункових формулах ряди обчислені з точністю $\varepsilon = 10^{-7}$.

На рис. 1 за даними табл. II і рис. 2 за даними табл. III наведено розв'язки крайової задачі $u(\tau, z)$, які нормовано на значення функції на верхній границі шару $z = 0$, та відповідні двосторонні критичні області, обчислені за критерієм Фішера, для $\tau = 0.1$ (рис. а) і $\tau = 0.5$ (рис. б). Тут криві 2-, 2+ обчислені для $\beta = 0.9$, криві 3-, 3+ - для $\beta = 0.95$, криві 4-, 4+ - для $\beta = 0.99$.

Мала вибірка, великий часовий інтервал, велика дисперсія

Таблиця II. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДАНІ З ВЕЛИКОЮ ДИСПЕРСІЄЮ ДЛЯ ВЕЛИКОГО ЧАСОВОГО ІНТЕРВАЛУ

	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8	τ_9	τ_{10}	τ_{11}	τ_{12}
τ_j	0	0.3	0.6	0.9	1.2	1.5	1.8	2.1	2.4	2.7	3	3.3
$f(\tau_j)$	0	0.1697	0.4738	1.0209	1.4735	1.9513	2.4972	2.7988	2.9986	3.3457	3.8914	4.4371

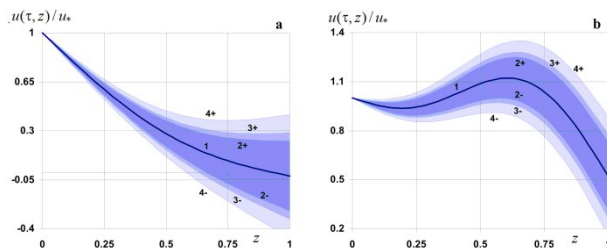


Рисунок 1. Розв'язки крайової задачі $u(\tau, z)$ та відповідні двосторонні критичні області для $\tau = 0.1$ (рис. а) і $\tau = 0.5$ (рис. б)

Мала вибірка, малий часовий інтервал, велика дисперсія

Таблиця III. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДАНІ З ВЕЛИКОЮ ДИСПЕРСІЄЮ ДЛЯ МАЛОГО ЧАСОВОГО ІНТЕРВАЛУ

	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8	τ_9	τ_{10}	τ_{11}	τ_{12}
τ_j	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	1.1
$f(\tau_j)$	0	0.0162	0.5809	1.1439	2.2175	3.2737	3.6345	4.1847	4.8021	5.1542	5.5129	5.9291

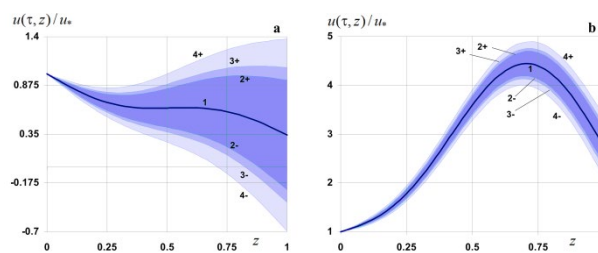


Рисунок 2. Розв'язки крайової задачі $u(\tau, z)$ та відповідні двосторонні критичні області для $\tau = 0.1$ (рис. а) і $\tau = 0.5$ (рис. б)

VI. ВИСНОВКИ

Сформульовано крайову задачу перенесення для шару з ненульовою початковою умовою, дією стаціонарного джерела на одній межі тіла та вибіркою експериментальних даних щодо шуканої функції на іншій. На основі експериментальних даних побудована лінійна регресійна модель методом найменших квадратів, яка розглядається як гранична умова. Розв'язок крайової задачі знайдено застосуванням скінченного інтегрального перетворення Фур'є.

Отримано та проаналізовано формулу для визначення двосторонньої критичної області на основі критерію Фішера. На конкретних прикладах досліджено вплив статистичних характеристик вибірки експериментальних даних на шукану функцію на нижній межі шару. Розглянуто випадки вибірок з великими та малими об'ємами, що характеризуються великою або малою дисперсією, на великих або малих інтервалах часу.

ЛІТЕРАТУРА

- [1] J. Moffatt, P. Scarf, "Sequential regression measurement error models with application," Statistical Modelling. 2016, vol.16, pp. 454–476.
- [2] A.E. Sikaroudi, C. Park, "A mixture of linear-linear regression models for a linear-circular regression," Statistical Modelling. 2019, vol.21, pp. 220–243.
- [3] R.R. Wilcox, "Linear regression: Robust heteroscedastic confidence bands that have some specified simultaneous probability coverage," Journal of Applied Statistics. 2017, vol. 44, pp. 2564–2574.
- [4] O. Chernukha, P. Pukach, H. Bilushchak, Y. Bilushchak, M. Vovk, "Advanced Statistical Approach for the Mathematical Modeling of Transfer Processes in a Layer Based on Experimental Data at the Boundary," Symmetry 2024, vol. 16(7), 802–34p
- [5] M. Apostol, "Equations of Mathematical Physics," Cambridge Scholars Publishing: Newcastle upon Tyne, UK, 2018; 250 p.
- [6] V.E. Bakhruhin, "Methods of Data Analysis," KPU: Zaporizhzhia, Ukraine, 2011, 268 p.
- [7] I. Vuchkov, L. Boyadzhieva, E. Solakov, "Applied Linear Regression Analysis; Financy i Statistika: M, R., 1987; 238 p.
- [8] E.J. Gumbel, "Statistics of Extremes," Dover Publications: Chicago, IL, USA, 2004; 400 p.