arXiv:2603.24255v1 [math.NA] 25 Mar 2026

用于随机动力学弱积分的、基于异构与装饰 Butcher 级数的最优随机 Runge-Kutta 方法的推导

Adrien Busnot Laurent[1], Kristian Debrabant[2] 和 Anne Kværnø[3]

2026年3月26日

摘要

设计用于求解高弱阶随机动力学的数值积分器，需要进行繁琐的计算，并受到大量阶条件的制约。文献中的原始方法针对强近似，并通过以适当的随机变量替代迭代随机积分，将其改造用于弱近似。由此得到的方法在函数求值次数方面并非最优，而且阶条件的分析也不必要地复杂。本文提出了一种新方法，依托精心选取的随机 Runge-Kutta 系数集合，大幅减少阶条件的数量。我们成功运用该方法，构造了一系列新的二阶弱阶随机 Runge-Kutta 方法；这些方法具有最优的函数求值次数，且所需随机变量更少。数值实验验证了新方法的效率；此外，我们还提供了一种运用 Hopf 代数的现代代数方法，用于推导和研究阶条件。

关键词：随机微分方程、随机 Runge-Kutta 方法、阶条件、Butcher级数、奇异森林、奇异级数、装饰森林、Hopf 代数。
美国数学学会学科分类（*2020*年）：60H35, 65L06, 41A58, 16T05。

1 引言

我们提出了新的方法，用于对一般形式的伊藤随机微分方程进行高阶弱数值积分：

$$dX(t) = f^0(X(t))dt + \sum_{p=1}^{m} f^p(X(t))dW^p(t), \quad X(0) = X_0, \tag{1.1}$$

以及具有Stratonovich噪声的随机微分方程

$$dX(t) = f^0(X(t))dt + \sum_{p=1}^{m} f^p(X(t)) \circ dW^p(t), \quad X(0) = X_0, \tag{1.2}$$

[1]法国雷恩大学、INRIA（MINGuS 研究团队）、IRMAR（法国国家科学研究中心 UMR 6625）和雷恩高等师范学院，法国。Adrien.Busnot-Laurent@inria.fr。[2]南丹麦大学数学与计算机科学系，丹麦欧登塞。Debrabant@imada.sdu.dk。[3]挪威科技大学数学科学系，挪威特隆赫姆。Anne.Kvarno@ntnu.no。

其中， f^p 是光滑的Lipschitz向量场， W^p 是定义在满足标准假设的概率空间上的标准独立布朗运动。

对（1.1）和（1.2）进行高弱阶数值近似的早期方法，是从强方法（即逐路径近似）推导出来的。这导致方法不必要地复杂，阶条件和分析也十分繁琐。最早的二阶弱阶随机 Runge-Kutta 方法所需的函数求值次数为 m^2 （见 [70, 43, 80, 46, 29]）；理论上，至少在伊藤情形下，可以预期最优的函数求值次数为 $2m+2$ 。在 [74, 75]中，研究者借助 B级数方法简化了这些方法，使函数求值次数成为关于 m的仿射函数。 [79]进一步简化了伊藤情形下的方法，但仍未达到最优的函数求值次数。本文着重于推导不依赖任何中间强近似的弱近似，并针对一般的伊藤和 Stratonovich 随机微分方程（1.1）—（1.2），给出具有最优函数求值次数的新方法。我们考虑以下一类一般的随机 Runge-Kutta 方法，其构思源自 [73]中引入的方法:

$$
\begin{aligned}
H_i^p &= X_n + h\sum_{j=1}^{s} Z_{i,j}^{p,0} f^0(H_j^0) + \sqrt{h}\sum_{j=1}^{s}\sum_{q=1}^{m} Z_{i,j}^{p,q} f^q(H_j^q), \quad i=1,\dots,s,\\
X_{n+1} &= X_n + h\sum_{i=1}^{s} z_i^0 f^0(H_i^0) + \sqrt{h}\sum_{i=1}^{s}\sum_{p=1}^{m} z_i^p f^p(H_i^p),
\end{aligned}
\tag{1.3}
$$

其中龙格-库塔系数 $z^p \in \mathbb{R}^s$ 和 $Z^{p,\,q} \in \mathbb{R}^{s,\,s}$ 为随机变量，为简洁起见，省略了系数对 n 的依赖。我们沿用基于 Milstein方法 [63], 设计高弱阶方法的标准方法，该方法采用局部估计。在满足标准的有界矩性质时，通常可以获得全局弱阶（例如，参见教材 [43, 64, 65] 及其中的参考文献）。本文着重于设计用于控制弱误差且函数求值次数最少的新型高阶方法，并建立一般随机微分方程随机数值计算的代数基础。

计算阶条件十分繁琐，需要运用 Butcher 级数技术。过去几十年间，多项研究将标准 Butcher 级数 [18, 36] （另见教材 [35, 19, 20] 和综述 [62]）推广到了随机情形。Burrage 和 Burrage [13, 14] 以及 Komori、Mitsui 和 Sugiura [48] 在强收敛的背景下引入了随机B级数。随后，Rößler [71, 72, 73, 76, 77], 、Komori [45, 46, 47] 以及 Debrabant 和 Kværnø [26, 25, 27, 28, 4] 将相关分析拓展到随机 Runge-Kutta 方法，以构造高阶弱积分器和强积分器。我们借鉴先前的树形式体系，采用装饰森林，并要求森林与问题的维数及噪声数量无关，从而使每个阶条件仅对应一个森林。装饰森林形式体系能够表示数值方法的泰勒展开；我们将看到，要写出精确流的泰勒展开，只需采用更精简的异类森林形式体系。在加性噪声的背景下，Bronasco、Laurent 和 Vilmart 在 [55, 51, 9] 中引入了异类级数形式体系，用于构造积分器，以高阶弱精度求解随机动力学并处理不变测度（另见例如 [8, 57, 1, 2, 58]）。这一形式体系与芳香 B 级数 [22, 41, 6, 53, 52] 及 LB级数 [40], 结合后，在 [56, 11] 中得到扩展，用于流形上随机微分方程的外在和内在数值积分；如今，类似的代数形式体系已应用于多个不同领域 [3, 31, 7]。异类树形式体系的基本几何与代数

性质后来在 [10, 54] 中得到了研究（确定性情形下的研究另见 [21, 61, 66, 5]）。异类与装饰级数形式体系将先前用于研究带乘性噪声的欧几里得随机微分方程的森林形式体系统一起来，并证明是简化繁琐计算的关键工具。我们将精确流和数值流的展开改写为异类级数和装饰级数，揭示这两类展开之间的组合联系，并运用现代组合方法研究流的泰勒展开的阶条件及代数性质。

本文结构如下。我们在第2节推导随机 Runge-Kutta 方法的一般阶条件，并提出一组新的随机Runge-Kutta系数，大幅减少了阶条件的数量。第3节介绍一系列阶段数和函数求值次数均达到最优的新方法。第4节通过数值示例验证我们的理论结果。随后，第5节详细介绍阶条件的计算，以及利用异类与装饰森林对其进行的代数研究。第6节讨论展望与未来工作。

2 随机 Runge-Kutta 方法的简化阶条件

为了构造弱二阶方法，使其系数只需满足相对较少的阶条件，我们将先推导一般阶条件，再为系数选取一种恰当的试探形式，将龙格–库塔系数与随机变量的作用分离。这样便能得到一系列函数求值次数最少的新型随机龙格－库塔积分器。

2.1 弱二阶的一般阶条件

令$\mathcal{C}_P^\infty(\mathbb{R}^d)$ 表示满足以下形式多项式估计的光滑函数空间 ϕ

$$|\phi^{(k)}(x)| \leqslant C(1+|x|^K), \quad k=0,1,\dots.$$

类似地，令 $\mathfrak{X}_P(\mathbb{R}^d)$ 表示其连通分量属于$\mathcal{C}_P^\infty(\mathbb{R}^d)$的全局利普希茨向量场空间。在下文中，为简便起见，我们假设 $f^p \in \mathfrak{X}_P(\mathbb{R}^d)$，并采用以下记号表示 f^p的偏导数的第 i个分量：

$$f^{p,i}_{j_1\dots j_k}(x) := \frac{\partial f^{p,i}}{\partial x_{j_1}\dots\partial x_{j_k}}(x).$$

由于我们的方法侧重于数值积分器的高阶分析，为简便起见，我们使用光滑映射；关于较弱的假设，请参阅 [65] 。

用于求解 (1.1)/(1.2) 的单步数值积分器 $X_{n+1}=\psi_h(X_n)$ 具有局部弱阶p，是指对于足够小的 $h \leqslant h_0$ 以及所有 $\phi \in \mathcal{C}_P^\infty(\mathbb{R}^d)$，以下估计成立

$$|\mathbb{E}[\phi(X(h))|X(0)=x] - \mathbb{E}[\phi(X_1)|X_0=x]| \leqslant C(1+|x|^K)h^{p+1}.$$

对于测试函数 $\phi \in \mathcal{C}_P^\infty(\mathbb{R}^d)$，弱近似旨在逼近 $u(x,t) = \mathbb{E}[\phi(X(t))|X(0)=x]$。研究方程 (1.1)/(1.2) 的经典工具是后向柯尔莫哥洛夫方程（例如参见 [37, 65, 33, 1, 49, 50, 51]）。该方程指出，$u(x,t)$ 满足以下确定性抛物型偏微分方程，其中 $\mathbb{R}^d$，

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{L}u, \quad u(x,0)=\phi(x), \quad x\in\mathbb{R}^d, \quad t>0, \tag{2.1}$$

其中，伊藤随机微分方程 (1.1) 的生成元 $\mathcal{L}$ 定义为

$$\mathcal{L}_{\text{Itô}}\phi = \sum_{i=1}^{d} \phi_i f^{0,i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{d} \sum_{p=1}^{m} \phi_{ij}(f^{p,i}, f^{p,j}),$$

对于 Stratonovich 随机微分方程 (1.2)，则有

$$\mathcal{L}_{\text{Strato}}\phi = \sum_{i=1}^{d} \phi_i f^{0,i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{d} \sum_{p=1}^{m} \phi_{ij}(f^{p,i}, f^{p,j}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{d} \sum_{p=1}^{m} \phi_i f_j^{p,i} f^{p,j}.$$

利用 (2.1)，弱量 $u(x,\ h)$ 因而对所有 p 均有如下展开：

$$u(x,h) = \phi(x) + h\mathcal{L}\phi(x) + \cdots + \frac{h^p}{p!}\mathcal{L}^p\phi(x) + h^{p+1}R_p\phi(x), \quad |R_p\phi(x)| \leqslant C(1+|x|^K). \tag{2.2}$$

现在来考虑 $\mathbb{E}[\phi(X_1)|X_0 = x]$ 的泰勒展开。我们对龙格-库塔系数作如下自然假设，以确保该方法 (1.3) 的所有阶矩均有界，并且其泰勒展开中的非整数次幂消失。

假设 2.1。 对于任意双射 σ：$\{0,\ldots,m\} \to \{0,\ldots,m\}$，其中 $\sigma(0) = 0$，数值方法的系数 (1.3) 满足：对于 $\alpha, \beta \in \mathbb{N}$，$p_{l_1}, q_{l_2}, r_{l_2} \in \{0,1,\ldots,m\}$ 以及 $i_{l_1}, j_{l_2}, k_{l_2} \in \{1,\ldots,s\}$，对于 $l_1 \in \{1,\ldots,\alpha\}$，$l_2 \in \{1,\ldots,\beta\}$

$$\mathbb{E}[z_{i_1}^{\sigma(p_1)} \ldots z_{i_\alpha}^{\sigma(p_\alpha)} Z_{j_1,k_1}^{\sigma(q_1),\sigma(r_1)} \ldots Z_{j_\beta,k_\beta}^{\sigma(q_\beta),\sigma(r_\beta)}] = \mathbb{E}[z_{i_1}^{p_1} \ldots z_{i_\alpha}^{p_\alpha} Z_{j_1,k_1}^{q_1,r_1} \ldots Z_{j_\beta,k_\beta}^{q_\beta,r_\beta}] < \infty,$$

且以下各矩均为零：

$$\mathbb{E}[z_{i_1}^{p_1} \ldots z_{i_\alpha}^{p_\alpha} Z_{j_1,k_1}^{q_1,r_1} \ldots Z_{j_\beta,k_\beta}^{q_\beta,r_\beta}] = 0 \ \textit{if}\ |\{p_i \neq 0\}| + |\{r_i \neq 0\}| \ \textit{is odd.}$$

在假设 2.1 下，随机 Runge-Kutta 方法满足与 (2.2) 类似的展开式 [63]：

$$\mathbb{E}[\phi(X_1)|X_0 = x] = \phi(x) + h\mathcal{A}_1\phi(x) + \cdots + h^p\mathcal{A}_p\phi(x) + h^{p+1}R_p\phi(x), \tag{2.3}$$

其中余项满足 $|R_p\phi(x)| \leqslant C(1+|x|^K)$，且 $\mathcal{A}_i$ 是线性微分算子，其系数光滑地依赖于 f^p 及其偏导数（也就是说，这些系数是 f^p [44, 66] 上无穷阶喷射空间坐标的多项式）。若展开式 (2.2) 和 (2.3) 在 p 阶之前相匹配，则得到一个至少具有局部弱阶 p 的方法。以下结果给出了全局弱阶 p 的充分条件。

命题 2.2 ([63, 65])。 考虑一个单步积分器，其泰勒展开满足 (2.3)

$$\mathcal{A}_j = \frac{\mathcal{L}^j}{j!}, \quad j = 1,\ldots,p. \tag{2.4}$$

进一步假设该积分器具有任意阶的有界矩，

$$\sup_{n\geqslant 0} \mathbb{E}[|X_n|^{2k}] < \infty.$$

那么，该方法具有全局弱阶 p，也就是说，对于 $T > 0$，对于所有足够小的 $h \leqslant h_0$ 且满足$Nh = T$，对于所有测试函数 $\phi \in C_P^\infty(\mathbb{R}^d)$ 和初始条件 X_0，存在 $C > 0$ 使得

$$|\mathbb{E}[\phi(X_N)] - \mathbb{E}[\phi(X(T))]| \leqslant Ch^p.$$

借助命题 2.2，阶条件的推导十分直接。然而，这依赖于对算子 $\mathcal{A}^j$ 和 $\mathcal{L}^j$的明确了解。由于计算过程繁琐，我们使用代数对象来推导显式的组合结构。

定理 2.3。 考虑具有形式 (1.3) 的随机 *Runge-Kutta* 方法，其系数满足假设 *2.1*。进一步假设，对于 $p_1, p_2 \in \{1, \dots, m\}$，表 *1* 和表 *2* 中给出的奇异阶条件和伊瑟利斯阶条件均得到满足；也就是说，对于每个森林，龙格–库塔系数都等于伊藤（分别为 *Stratonovich*）系数。于是，该方法在求解 (1.1)（分别为 (1.2)）时具有全局弱二阶。

例如：森林	微分	RK 系数 $(p_1 \neq p_2)$	Itô	Str.
•	$\phi_{ij} f^{0,i}$	$\mathbb{E}[z_i^0]$	1	1
①①	$\phi_{ij} f^{p_1,i} f^{p_1,j}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} z_j^{p_1}]$	1	1
① ①	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1} f^{p_1,i_1}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{p_1}_{0,i_1}]$	0	$\frac{1}{2}$
• •	$\phi_i f^{0}_{,i_1} f^{0,i_1}$	$\mathbb{E}[z_i^0 Z^{0,i}{}^{}_{,i_1}]$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
• •	$\phi_{ij} f^{0,i} f^{0,j}$	$\mathbb{E}[z_i^0 z_j^0]$	1	1
① ① •	$\phi_i f^{0}_{,i_1} {}^{i} f^{p_1,}_{,i_2} {}^{i_1} f^{p_1,i_2}$	$\mathbb{E}[z_i^0 Z^{0,i}{}^{p_1}_{,i_1} Z^{p_1}_{,i_1} {}^{p_1}_{,i_2}]$	0	$\frac{1}{4}$
① • ①	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1} {}^{i} f^{0,}_{i_2} {}^{i_1} f^{p_1,i_2}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{0}_{,i_1} Z^{0}_{,i_1}{}^{p_1}_{,i_2}]$	0	0
• ① ①	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1} {}^{i} f^{p_1,}_{i_2} {}^{i_1} f^{0,i_2}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{p_1}_{,i_1} Z^{p_1}_{0,i_1 i_2}]$	0	$\frac{1}{4}$
①①	$f^{p_1,i_1} f^{p_1,i_2}$	$\mathbb{E}[z_i^0 Z^{0,i}{}^{p_1}_{,i_1} Z^{0}_{,i}{}^{p_1}_{,i_2}]$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
• ① ①	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1 i_2} {}^{i} f^{0,i_1} f^{p_1,i_2}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{0}_{,i_1} Z^{p_1}_{i}{}^{}_{,i_2}]$	0	$\frac{1}{4}$
① • ①	$\phi_{ij} f^{0,}_{,i_1} {}^{i} f^{p_1,i_1} f^{p_1,j}$	$\mathbb{E}[z_i^0 Z^{0,i}{}^{p_1}_{,i_1} z_j^{p_1}]$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
• ①①	$\phi_{ij} f^{p_1}_{,i_1} {}^{i} f^{0,i_1} f^{p_1,j}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{0}_{,i_1} z_j^{p_1}]$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
① • ①	$\phi_{ij} f^{p_1}_{,i_1} {}^{i} f^{p_1,i_1} f^{0,j}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{p_1}_{,i_1} z_j^{0}]$	0	$\frac{1}{2}$
•①①	$\phi_{ijk} f^{0,i} f^{p_1,j} f^{p_1,k}$	$\mathbb{E}[z_i^0 z_j^{p_1} z_k^{p_1}]$	1	1
② ② ① ①	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1} {}^{i} f^{p_1,}_{,i_2} {}^{i_1} f^{p_2}_{,i_3} {}^{i_2} f^{p_2,i_3}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{p_1}_{,i_1} Z^{p_1}_{,i_1} {}^{p_2}_{,i_2} Z^{p_2}_{,i_2} {}^{p_2}_{,i_3}]$	0	$\frac{1}{8}$
② ① ② ①	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1} {}^{i} f^{p_2}_{,i_2} {}^{i_1} f^{p_1}_{,i_3} {}^{i_2} f^{p_2,i_3}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{p_2}_{,i_1} Z^{p_2}_{,i_1} {}^{p_1}_{,i_2} Z^{p_1}_{,i_2} {}^{p_2}_{,i_3}]$	0	0
① ② ② ①	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1} {}^{i} f^{p_2}_{,i_2} {}^{i_1} f^{p_2}_{,i_3} {}^{i_2} f^{p_1,i_3}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{p_2}_{,i_1} Z^{p_2}_{,i_1} {}^{p_2}_{,i_2} Z^{p_2}_{,i_2} {}^{p_1}_{,i_3}]$	0	0
②② ① ①	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1} {}^{i} f^{p_1,}_{i_2 i_3} {}^{i_1} f^{p_2,i_2} f^{p_2,i_3}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{p_1}_{,i_1} Z^{p_1}_{,i_1} {}^{p_2}_{,i_2} Z^{p_1}_{,i_1} {}^{p_2}_{,i_3}]$	0	$\frac{1}{4}$
①② ② ①	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1} {}^{i} f^{p_2,}_{i_2 i_3} {}^{i_1} f^{p_1,i_2} f^{p_2,i_3}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{p_2}_{,i_1} Z^{p_2}_{,i_1} {}^{p_1}_{,i_2} Z^{p_2}_{,i_1} {}^{p_2}_{,i_3}]$	0	0
② ①② ①	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1 i_2} {}^{i} f^{p_1,i_1} f^{p_2,}_{i_3} {}^{i_2} f^{p_2,i_3}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{p_1}_{,i_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{p_2}_{,i_2} Z^{p_2}_{,i_2} {}^{p_2}_{,i_3}]$	0	$\frac{1}{8}$
② ②① ①	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1 i_2} {}^{i} f^{p_2,i_1} f^{p_1,}_{i_3} {}^{i_2} f^{p_2,i_3}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{p_2}_{,i_1} Z^{p_1}_{,i} {}^{p_1}_{,i_2} Z^{p_2}_{,i_2} {}^{p_2}_{,i_3}]$	0	$\frac{1}{4}$

	$\phi_i f^{p_1}_{,i}\, f^{p_2}_{,i_1} f^{p_2}_{,i_2} f^{p_1}_{,i_3}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_2}_{,i_1}\, Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_2}_{,i_2}\, Z^{p_2}_{,i_2}\, z^{p_1}_{i_3}]$	0	0
	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1 i_2 i_3} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_2}_{,i_2} f^{p_2}_{,i_3}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_2}_{,i_2}\, Z^{p_1}_{,i}\, z^{p_2}_{i_3}]$	0	$\frac{1}{4}$
	$\phi_{ij} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_2}_{,i_2} f^{p_1}_{,i_2} f^{p_1}_{,j}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_2}_{,i_1}\, Z^{p_2}_{,i_1}\, z^{p_1}_{i_2}\, z^{p_1}_{j}]$	0	$\frac{1}{4}$
	$\phi_{ij} f^{p_2}_{,i_1} f^{p_1}_{,i_2} f^{p_2}_{,i_2} f^{p_1}_{,j}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_2} Z^{p_2}_{,i}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, z^{p_1}_{i_2}\, z^{p_1}_{j}]$	0	0
	$\phi_{ij} f^{p_2}_{,i_1} f^{p_2}_{,i_2} f^{p_1}_{,i_2} f^{p_1}_{,j}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_2} Z^{p_2}_{,i}\, Z^{p_2}_{,i_1}\, Z^{p_2}_{,i_1}\, z^{p_1}_{i_2}\, z^{p_1}_{j}]$	0	$\frac{1}{4}$
	$\phi_{ij} f^{p_1}_{,i_1 i_2} f^{p_2}_{,i_1} f^{p_2}_{,i_2} f^{p_1}_{,j}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_2}_{,i_1}\, Z^{p_1}_{,i}\, z^{p_1}_{i_2}\, z^{p_1}_{j}]$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
	$\phi_{ij} f^{p_2}_{,i_1 i_2} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_2}_{,i_2} f^{p_1}_{,j}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_2} Z^{p_2}_{,i}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, Z^{p_2}_{,i}\, z^{p_1}_{i_2}\, z^{p_1}_{j}]$	0	$\frac{1}{4}$
	$\phi_{ij} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_2}_{,j_1} f^{p_2}_{,j_1}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_2}_{,i_1}\, z_j^{p_2} Z^{p_2}_{,j}\, z^{p_2}_{j_1}]$	0	$\frac{1}{4}$
	$\phi_{ij} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_2}_{,i_1} f^{p_1}_{,j_1} f^{p_2}_{,j_1}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_2}_{,i_1}\, z_j^{p_1} Z^{p_1}_{,j}\, z^{p_2}_{,j_1}]$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
	$\phi_{ij} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_2}_{,i_1} f^{p_2}_{,j_1} f^{p_1}_{,j_1}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_2}_{,i_1}\, z_j^{p_2} Z^{p_2}_{,j}\, z^{p_1}_{,j_1}]$	0	0
	$\phi_{ijk} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_2}_{,j} f^{p_2}_{,k}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, z_j^{p_2} z_k^{p_2}]$	0	$\frac{1}{2}$
	$\phi_{ijk} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_2}_{,i_1} f^{p_1}_{,j} f^{p_2}_{,k}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, z_j^{p_1} z_k^{p_2}]$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
	$\phi_{ijkl} f^{p_1}_{,i} f^{p_1}_{,j} f^{p_2}_{,k} f^{p_2}_{,l}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} z_j^{p_1} z_k^{p_2} z_l^{p_2}]$	1	1

表 1：形式为 (1.3) 的随机 Runge-Kutta 方法达到弱二阶时的异类阶条件。这些阶条件与问题的维数及噪声项的数量无关。为简洁起见，省略了除 p_1, p_2 以外所有涉及指标上的求和。

微分森林	微分	RK 系数	Itô	Str.
	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1} f^{p_1}_{,i_2} f^{p_1}_{,i_3} f^{p_1}_{,i_3}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, Z^{p_1}_{,i_2}\, Z^{p_1}_{,i_2}\, z^{p_1}_{i_3}]$	0	$\frac{1}{8}$
	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1} f^{p_1}_{,i_2 i_3} f^{p_1}_{,i_2} f^{p_1}_{,i_3}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, Z^{p_1}_{,i_2}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, z^{p_1}_{i_3}]$	0	$\frac{1}{4}$
	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1 i_2} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_1}_{,i_3} f^{p_1}_{,i_3}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_1}_{,i_2}\, Z^{p_1}_{,i_2}\, z^{p_1}_{i_3}]$	0	$\frac{3}{8}$
	$\phi_i f^{p_1}_{,i_1 i_2 i_3} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_1}_{,i_2} f^{p_1}_{,i_3}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_1}_{,i_2}\, Z^{p_1}_{,i}\, z^{p_1}_{i_3}]$	0	$\frac{3}{4}$
	$\phi_{ij} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_1}_{,i_2} f^{p_1}_{,i_2} f^{p_1}_{,j}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, z^{p_1}_{i_2}\, z^{p_1}_{j}]$	0	$\frac{1}{2}$
	$\phi_{ij} f^{p_1}_{,i_1 i_2} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_1}_{,i_2} f^{p_1}_{,j}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, Z^{p_1}_{,i}\, z^{p_1}_{i_2}\, z^{p_1}_{j}]$	$\frac{1}{2}$	1
	$\phi_{ij} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_1}_{,j_1} f^{p_1}_{,j_1}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, Z^{p_1}_{,i_1}\, z_j^{p_1} Z^{p_1}_{,j}\, z^{p_1}_{,j_1}]$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}$
	$\phi_{ijk} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_1}_{,i_1} f^{p_1}_{,j} f^{p_1}_{,k}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} Z^{p_1}_{,i}\, z_j^{p_1} z_k^{p_1}]$	1	$\frac{3}{2}$
	$\phi_{ijkl} f^{p_1}_{,i} f^{p_1}_{,j} f^{p_1}_{,k} f^{p_1}_{,l}$	$\mathbb{E}[z_i^{p_1} z_j^{p_1} z_k^{p_1} z_l^{p_1}]$	3	3

表 2：弱二阶随机 Runge-Kutta 方法（形式如式 (1.3)）的伊瑟利斯阶条件。这些阶条件不依赖于问题的维数和噪声项的数量。为简洁起见，省略了除 p_1 之外所有涉及指标上的求和。

弱阶条件传统上通过使用 Butcher级数推导，具体解释见[72, 73, 26]。表 1 和表 2 中给出的阶条件基于较新的

异构森林形式体系 [55]。这种形式体系降低了复杂性：它剔除了所有冗余的阶条件，并将颜色对（表示不同布朗运动）多次出现的项分别表示为独立的森林。因此，每个森林恰好对应一个唯一的阶条件。请注意，按照假设 2.1 的规定进行置换时，龙格–库塔系数的矩在分布上的不变性，是用树结构表示流的关键。我们强调，对于只关注构造高弱阶数值方法的读者而言，计算阶条件所依据的代数与组合细节可以略过。定理 2.3 的证明以及随机数值计算中基础代数结构的研究推迟至第5节。

注 2.4。 先前的随机*B*级数形式体系 *[72]* 通常依赖于形如 $_{ij\,k\,l}$的森林，其中 i、j、k、l 的取值范围为1到 m。与该森林对应的随机变量满足

$$\frac{1}{h^2}\mathbb{E}[\int_0^h W^j \star dW^i \int_0^h dW^k \int_0^h dW^l] = \begin{cases} Itô/Strat. & \\ 0\ /\ \frac{1}{2} & if\ i=j,\ k=l\ \ and\ i\neq l, \\ \frac{1}{2}\ /\ \frac{1}{2} & if\ i=l,\ j=k\ \ and\ i\neq k, \\ 1\ /\ \frac{3}{2} & if\ i=j=k=l, \\ 0\ /\ 0 & otherwise. \end{cases}$$

因此，形如 $_{ij\ k\ l}$的 m^4 森林在假设 *2.1* 下产生三个非平凡的阶条件。使用异构森林形式体系时，它们将表现为三个不同的装饰森林，分别为

$$\pi_{d_1} = \overset{①}{①②②}, \qquad \pi_{d_2} = \overset{②}{①①②}, \qquad \pi_{d_3} = \overset{①}{①①①}.$$

与 π_{d_1} 对应的弱阶条件为

$$\mathbb{E}[\sum_{i,j,k,l} z_i^{p_1} Z_{i,j}^{p_1,p_1} z_k^{p_2} z_l^{p_2}] = \begin{cases} 0 & Itô \\ \frac{1}{2} & Stratonovich \end{cases}$$

另外两个条件见表 *1* 和表 *2*。

我们称形如 $\sum\mathbb{E}[\dots]=0$ 的阶条件为可能冗余的，因为通过特定选择随机系数，它们有可能自动得到满足。请注意，在伊藤情形下，这类阶条件的数量相对较多。下一节中，我们将为龙格–库塔系数提出一种经过仔细选择的试探形式，使大多数可能冗余的阶条件都能自动得到满足。

2.2 伊藤随机微分方程的约化阶条件

我们考虑如下形式的系数

$$\begin{aligned} z^0 &= \alpha\theta_0, & z^p &= \beta\theta_p, \\ Z^{0,0} &= A^0\Theta_{0,0}, & Z^{0,q} &= B^0\Theta_{0,q}, \\ Z^{p,0} &= A^1\Theta_{p,0}, & Z^{p,q} &= B^1\Theta_{p,q}. \end{aligned} \tag{2.5}$$

其中 $\alpha\in\mathbb{R}^{s_1}$, $\beta\in\mathbb{R}^{s_2}$, $A^0\in\mathbb{R}^{s_1,\ s_1}$, $A^1\in\mathbb{R}^{s_2,\ s_1}$, $B^0\in\mathbb{R}^{s_1,\ s_2}$, $B^1\in\mathbb{R}^{s_2,\ s_2}$ 和 $(s_1,\ s_2)$ 分别表示该方法确定性部分和随机部分的阶段数。这种选择

系数可通过选择 $s = \max(s_1, s_2)$，并将龙格-库塔系数中缺失的项填为零，纳入方法（1.3）这一类。模仿强展开并使用迭代随机积分的弱近似这一标准方法既繁琐，又会得到不必要地复杂的方法。我们通过改为选择随机变量，使大多数可能多余的阶条件自动满足，从而简化这一方法。设 $\eta_p, p = 0, \ldots, m$，以及 $\theta_p, p = 1, \ldots, m$ 是满足以下条件的离散独立随机变量

$$\mathbb{P}(\eta_p = \pm 1) = \frac{1}{2}, \quad \mathbb{P}(\theta_p = \pm\sqrt{2+\sqrt{3}}) = \frac{3-\sqrt{3}}{12}, \quad \mathbb{P}(\theta_p = \pm\sqrt{2-\sqrt{3}}) = \frac{3+\sqrt{3}}{12}.$$

定义 $c \in (0, \frac{1}{2})$ -

$$\begin{aligned} &\theta_0 = 1, && \Theta_{0,p} = \theta_p + \eta_p\sqrt{\tfrac{1}{2c} - 1}, && \Theta_{p,q} = \theta_q(1+\eta_0), \quad q > p \geqslant 1, \\ &\Theta_{0,0} = 1, && \Theta_{p,0} = 1 - \eta_p\theta_p\sqrt{\tfrac{2c}{1-2c}}, && \Theta_{p,q} = \theta_q(1-\eta_0), \quad 1 \leqslant q < p, \\ &\Theta_{p,p} = -3\theta_p + \theta_p^3. \end{aligned} \tag{2.6}$$

当 c 不太接近 $\{0, \frac{1}{2}\}$时，这些随机变量对稳定性的影响并不比使用高斯随机变量或迭代随机积分更大，因为它们的矩幅度相近（甚至更小）。

在定理 2.3 中使用试探形式 (2.5) 和随机变量 (2.6)，假设 2.1 将自动满足，由此得到以下结果：大多数可能多余的阶条件都消失了，只留下 9 个用于弱二阶的约化阶条件。通过谨慎选择随机变量，我们去除了 [30]的大部分 59 个阶条件，并进一步改进了 [79]的 15 个阶条件。

定理 2.5。使用方法 (1.3) 求解伊藤随机微分方程 (1.1)时，采用方法系数 (2.5)、随机变量 (2.6) 以及 $c \in (0, \frac{1}{2})$，其弱一阶约化阶条件为：

1. $\alpha^\top \mathbb{1} = 1$,
2. $\beta^\top \mathbb{1} = 1$,

而达到弱二阶还需满足以下附加条件：

3. $\alpha^\top A^0 \mathbb{1} = -\frac{1}{2}$,
4. $\alpha^\top B^0 \mathbb{1} = -\frac{1}{2}$,
5. $\alpha^\top (B^0\mathbb{1})^{\odot 2} = c$,
6. $\beta^\top A^1 \mathbb{1} = \frac{1}{2}$,
7. $\beta^\top B^1 \mathbb{1} = \frac{1}{2}$,
8. $\beta^\top (B^1\mathbb{1})^{\odot 2} = \frac{1}{4}$,
9. $\beta^\top B^1 B^1 \mathbb{1} = 0$,

其中，我们对 $\mathbb{R}^s$ 中的向量使用阿达玛乘积：

$$y^1 \odot \ldots \odot y^n = \left(\prod_{k=1}^{n} y_i^k\right)_{i=1,\ldots,s}.$$

也可以在通过 $\Theta_{0,p} = \theta_p$, $\Theta_{p,0} = 1$ 调整 (2.6) 时选择 $c = \frac{1}{2}$，此时还需要满足以下额外的弱二阶阶条件：

10. $\beta^\top A^1 B^0 \mathbb{1} = 0$.

请注意，定理（2.5）中的条件 9，以及在 $c=\frac{1}{2}$ 的情况下的条件 10，仍然是从可能多余的条件推导出来的。还请注意，对于 $c<\frac{1}{2}$，我们总可以选择 $A^0=B^0$和 $A^1=B^1$，并且一方面的参数 α、 A^0 和 B^0 与另一方面的参数 β、 A^1 和 B^1 彼此独立。对于 c ，一个自然的选择是 $c=\frac{1}{4}$ ，这可确保条件 1 和条件 3 至 5 与条件 2 和条件 6 至 8 一致，因此我们可以选择 $B^0=B^1$ 和$\alpha=\beta$。另一种自然的选择是 $c=\frac{1}{3}$ ，这样可以构造一种方法，使其 $A^0=B^0$ 已满足确定性三阶条件之一。另一方面，选择 $c=\frac{1}{2}$ 可将每步所需的随机变量数量从 $2m+1$ 减少到 $m+1$。

注 2.6。 系数(2.5) 无法构成弱三阶方法，因为以下二阶和三阶条件相互矛盾：

$$
\begin{aligned}
(\beta^\top\mathbb{1})^2\mathbb{E}[\theta_p^2]=1 \quad &\Rightarrow \quad \beta^\top\mathbb{1}\neq 0 \ and\ \mathbb{E}[\theta_p^2]\neq 0,\\
(\beta^\top\mathbb{1})(\beta^\top B^1B^1\mathbb{1})\mathbb{E}[\theta_p^2\Theta_{pp}^2]=0 \quad &\Rightarrow \quad \beta^\top\mathbb{1}=0 \ or\ \beta^\top B^1B^1\mathbb{1}=0\\
&\qquad or\ \mathbb{E}[\theta_p^2\Theta_{pp}^2]=0,\\
(\beta^\top B^1\mathbb{1})^2\mathbb{E}[\theta_p^2\Theta_{pp}^2]=\frac{1}{2} \quad &\Rightarrow \quad \beta^\top B^1\mathbb{1}\neq 0 \ and\ \mathbb{E}[\theta_p^2\Theta_{pp}^2]\neq 0,\\
(\beta^\top B^1B^1\mathbb{1})^2\mathbb{E}[\theta_p^2\Theta_{pp}^4]=\frac{1}{6} \quad &\Rightarrow \quad \beta^\top B^1B^1\mathbb{1}\neq 0 \ and\ \mathbb{E}[\theta_p^2\Theta_{pp}^4]\neq 0.
\end{aligned}
$$

因此，三阶龙格–库塔系数需要采用更一般的试探形式。

2.3 Stratonovich 随机微分方程的约化阶条件

在 Stratonovich 情形下，可能冗余的阶条件较少，因此无法通过对随机变量作特定选择来消去大部分条件。尽管如此，与文献中的方法相比，我们仍大幅减少了阶条件。我们考虑如下形式的系数

$$
\begin{aligned}
&z^0=\alpha\theta_0, && z^p=\beta\theta_p,\\
&Z^{0,0}=A^0\Theta_{0,0}, && Z^{0,q}=B^0\Theta_{0,q},\\
&Z^{p,0}=A^1\Theta_{p,0}, && Z^{p,q}=B^1\Theta_{p,q}\mathbb{1}_{p\neq q}+\hat{B}^1\Theta_{p,p}\mathbb{1}_{p=q}.
\end{aligned}
\tag{2.7}
$$

设 η_p、 $p=0$、.....、 m 以及 θ_p、 $p=1$、.....、 m 为满足以下条件的离散独立随机变量

$$
\mathbb{P}(\eta_p=\pm 1)=\frac{1}{2},\quad \mathbb{P}(\theta_p=\pm\sqrt{3})=\frac{1}{6},\quad \mathbb{P}(\theta_p=0)=\frac{2}{3}.
$$

定义

$$
\begin{aligned}
&\theta_0=1, && \Theta_{0,p}=\theta_p+\eta_p\sqrt{\tfrac{1}{2c}-1}, && \Theta_{p,q}=\theta_q(1+\eta_0), \quad q>p\geqslant 1,\\
&\Theta_{0,0}=1, && \Theta_{p,0}=1-\eta_p\theta_p\sqrt{\tfrac{2c}{1-2c}}, && \Theta_{p,q}=\theta_q(1-\eta_0), \quad 1\leqslant q<p.\\
&\Theta_{p,p}=\theta_p, &&&&
\end{aligned}
\tag{2.8}
$$

在定理 2.3 中使用试探形式 (2.7) 和随机变量 (2.8)，即可自动满足假设 2.1，并得到以下 26 个约化阶条件。这些条件相比 [74]中的 55 个阶条件有了显著改进。

定理 2.7。 采用方法 (1.3) 求解 *Stratonovich* 随机微分方程 (1.2) ，其中方法系数为 (2.7)，随机变量为 (2.8) ，且 $c\in(0、\frac{1}{2})$ 满足弱一阶的约化阶条件：

1. $\alpha^\top \mathbb{1} = 1$, *2.* $\beta^\top \mathbb{1} = 1$, *3.* $\beta^\top \hat{B}^1 \mathbb{1} = \frac{1}{2}$,

弱二阶还需满足以下附加条件：

4. $\alpha^\top A^0 \mathbb{1} = \frac{1}{2}$, *12.* $\beta^\top (B^1 \mathbb{1})^{\odot 2} = \frac{1}{4}$, *20.* $\beta^\top B^1 \hat{B}^1 \mathbb{1} = \frac{1}{4}$, *5.* $\alpha^\top B^0 \mathbb{1} = \frac{1}{2}$, *13.* $\beta^\top \hat{B}^1 B^1 \hat{B}^1 \mathbb{1} = \frac{1}{8}$, *21.* $\beta^\top (\hat{B}^1 \mathbb{1} \odot \hat{B}^1 \hat{B}^1 \mathbb{1}) = \frac{1}{8}$, *6.* $\alpha^\top (B^0 \mathbb{1})^{\odot 2} = c$, *7.* $\alpha^\top B^0 \hat{B}^1 \mathbb{1} = \frac{1}{4}$, *8.* $\beta^\top A^1 \mathbb{1} = \frac{1}{2}$, *14.* $\beta^\top (\hat{B}^1 \mathbb{1} \odot B^1 \hat{B}^1 \mathbb{1}) = \frac{1}{8}$, *15.* $\beta^\top (\hat{B}^1 \mathbb{1} \odot (B^1 \mathbb{1})^{\odot 2}) = \frac{1}{8}$, *16.* $\beta^\top (B^1 \mathbb{1} \odot \hat{B}^1 B^1 \mathbb{1}) = \frac{1}{8}$, *22.* $\beta^\top \hat{B}^1 (\hat{B}^1 \mathbb{1})^{\odot 2} = \frac{1}{12}$, *23.* $\beta^\top \hat{B}^1 \hat{B}^1 \hat{B}^1 \mathbb{1} = \frac{1}{24}$, *9.* $\beta^\top (\hat{B}^1 \mathbb{1} \odot A^1 \mathbb{1}) = \frac{1}{4}$, *17.* $\beta^\top \hat{B}^1 (B^1 \mathbb{1})^{\odot 2} = \frac{1}{8}$, *24.* $\beta^\top (\hat{B}^1 \mathbb{1})^{\odot 3} = \frac{1}{4}$, *10.* $\beta^\top \hat{B}^1 A^1 \mathbb{1} = \frac{1}{4}$, *18.* $\beta^\top (B^1 \mathbb{1} \odot \hat{B}^1 \mathbb{1}) = \frac{1}{4}$, *25.* $\beta^\top (\hat{B}^1 \mathbb{1})^{\odot 2} = \frac{1}{3}$, *11.* $\beta^\top B^1 \mathbb{1} = \frac{1}{2}$, *19.* $\beta^\top \hat{B}^1 B^1 \mathbb{1} = \frac{1}{4}$, *26.* $\beta^\top \hat{B}^1 \hat{B}^1 \mathbb{1} = \frac{1}{6}$.

在通过 $\Theta_{0,p} = \theta_p$、$\Theta_{p,0} = 1$ 调整 （2.8） 时，也可以选择 $c = \frac{1}{2}$；在这种情况下，若要达到弱二阶，还需要满足以下附加阶条件：

27. $\beta^\top A^1 B^0 \mathbb{1} = 0$.

类似于伊藤情形，通过添加条件27，可以将每一步所需的随机变量数量从 $2m+1$ 减少到 $m+1$。

3 新的随机二阶龙格-库塔方法

我们利用第2节中的约化阶条件，提出了几种新的随机方法，以最少的函数求值次数求解具有弱二阶的（1.1）—（1.2）。我们重点研究显式方法和具有高确定性阶的方法。附录A还给出了进一步的IMEX方法。

3.1 最优随机龙格-库塔方法

借助约化阶条件，我们提出了多种新的简单弱二阶随机 Runge-Kutta 方法。我们强调，与确定性情形类似，显式方法每步至少需要对 f^0 进行两次求值，并对每个 f^p 进行两次求值。伊藤和 Stratonovich 情形下的 Butcher 表采用以下形式。

Itô:
A^0	B^0
A^1	B^1
$\alpha^\top$	$\beta^\top$

Stratonovich:
A^0	B^0	
A^1	B^1	$\hat{B}^1$
$\alpha^\top$	$\beta^\top$	

伊藤显式A $(2,\ 2)$-阶段方法是 Heun 方法与显式中点法的如下混合。

$$
\begin{aligned}
X_{n+1} &= X_n + \tfrac{h}{2} f^0(X_n) + \tfrac{h}{2} f^0\Big(X_n + h f^0(X_n) \\
&\quad + \sqrt{h} \textstyle\sum_{q=1}^m \theta_q f^q(X_n)\Big) \\
&\quad + \sqrt{h} \textstyle\sum_{p=1}^m \theta_p f^p\Big(X_n + \tfrac{h}{2} f^0(X_n) + \tfrac{\sqrt{h}}{2} \sum_{q=1}^m \Theta_{p,q} f^q(X_n)\Big)
\end{aligned}
\qquad
\begin{array}{cc|cc}
0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 1 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\
\hline
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 1
\end{array}
$$

以下将该方法记为 BDK1。与 [30] 和 [79], 中介绍的方法相比，该方法有所改进，因为它每步仅使用 $m+1$ 个随机变量，并且在阶段数达到最优的情况下，求解 (1.1)（其中 $c = \frac{1}{2}$，见定理 2.5）时可达到 2 阶。

伊藤隐式 在构造一个用于求解 (1.1) 的 $(1,\ 2)$ 阶段、2 阶方法时，我们注意到定理 2.5 中的条件 1 意味着 $\alpha = 1$，而这一点结合条件 4 和 5 表明，此时必须选择 $c = \frac{1}{4}$。因此，一种可行的方法如下:

$$
\begin{aligned}
H_1^0 &= X_n + \tfrac{h}{2} f^0(H_1^0) + \tfrac{\sqrt{h}}{2} \textstyle\sum_{q=1}^m \Theta_{0,q} f^q(H_1^q) \\
H_1^p &= X_n + \sqrt{h} \textstyle\sum_{q=1}^m \Theta_{p,q} f^q(H_1^q) \\
H_2^p &= X_n + \tfrac{h}{2} \Theta_{p,0} f^0(H_1^0) + \sqrt{h} \textstyle\sum_{q=1}^m \Theta_{p,q}\Big(f^q(H_2^q) - \tfrac{1}{2} f^q(H_1^q)\Big) \\
X_{n+1} &= X_n + h f^0(H_1^0) + \sqrt{h} \textstyle\sum_{p=1}^m \theta_p f^p(H_2^p)
\end{aligned}
\qquad
\begin{array}{c|cc}
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\
\hline
0 & 1 & 0 \\
\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 1 \\
\hline
1 & 0 & 1
\end{array}
$$

一般而言，随机部分只有一个阶段的 2 阶方法是不可能实现的，因为定理 2.3 中针对森林 τ_1 和 $\tau_1\tau_1$ 的 1 阶条件无法同时满足。不过，如果噪声是加性的，则可以直接实现 [25, 55]。

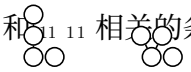
Stratonovich 显式 我们提出以下 $(2,\ 4)$ 阶段显式方法，用 $c = \frac{1}{2}$ 求解 (1.2)，其弱阶为二阶。与 [74] 中的方法相比，该方法略有改进，因为它在确定性部分使用的阶段更少，并且每步仅需 $m+1$ 个随机变量，而非 $2m-1$。

$$
\begin{array}{cc|cccc|cccc}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & & & & \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & 0 & -1 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & 0 & -1 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & -\frac{3}{2} & \frac{3}{2} & 1 & 0 \\
\hline
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & & & &
\end{array}
$$

由于定理 2.3 中针对τ_1的条件，随机阶段数已达到最小。

Stratonovich 隐式 与伊藤情形类似，由定理 2.7 中的条件 1、5 和 6 可知，求解 (1.2) 的 $(1,\ 2)$ 阶段方法若要达到弱二阶，就需要 $c = \frac{1}{4}$。下面给出这类方法的一个例子。注意，A^0 和 B^1 都对应于众所周知的高斯–勒让德方法。$(1,1)$ 阶段方法无法实现，因为阶

1定理 2.3 中与 11 1 和 11 11 相关的条件会导致矛盾。



$$\begin{array}{c|ccc|cc}
\frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & & \\
\hline
\frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{3+2\sqrt{3}}{12} \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{3-2\sqrt{3}}{12} & \frac{1}{4} \\
\hline
1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & &
\end{array}$$

3.2 具有高确定性阶的随机龙格-库塔方法

现在，我们介绍几种显式方法，它们具有二阶弱阶、最优的函数求值次数和三阶确定性阶。这些方法在处理确定性动力学的随机扰动时，往往能表现出更优的误差常数和收敛速率。

确定性阶为 3 的伊藤显式方法 我们提出以下两种方法 BDK2 和 BDK3（分别具有 $c = \frac{1}{2}$ 和 $c = \frac{1}{3}$），它们的阶为 2，确定性阶为 3。请注意，这些方法的确定性部分与 Kutta 的 RK32 [19] 一致。

$$\begin{array}{ccc|cc}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{3}{5}-\frac{\sqrt{6}}{10} & 0 \\
-1 & 2 & 0 & \frac{3}{5}+\frac{2}{5}\sqrt{6} & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\
\hline
\frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 & 1
\end{array}
\qquad
\begin{array}{ccc|cc}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\
-1 & 2 & 0 & 1 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\
\hline
\frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 & 1
\end{array}$$

确定性阶为 3 的 Stratonovich 显式方法（$c = \frac{1}{2}$） –

$$\begin{array}{ccc|ccccc}
0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}-\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 & \\
\frac{1}{3} & 0 & 0 & \sqrt{3}-1 & 0 & 0 & 0 & \\
0 & \frac{2}{3} & 0 & \frac{1}{6}+\frac{\sqrt{3}}{6} & 0 & 0 & \frac{1}{3} & \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\
-\frac{1}{2} & 1 & 0 & -1 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \\
\frac{1}{2} & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & -\frac{3}{2} \\
\hline
\frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4} & 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} &
\end{array}
\begin{array}{cccc}
0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\
\frac{3}{2} & \frac{3}{2} & 1 & 0 \\
\hline
 & & &
\end{array}$$

4 数值应用

本节中，我们先在例 4.1 和例 4.2 中通过两个测试问题对理论结果进行数值验证，最后以例 4.3 展示不变测度采样的应用。

在例 4.1 和例 4.2 中，我们将比较新推导出的方法 BDK1、BDK2 和 BDK3 与文献中的一些积分器的计算工作量和精度，即 [30], 中的 DRI1、 [79], 中的 W2Ito1，以及 [75]中的 RI5 和 RI6。注意，RI6 与$m = 1$ 的 Platen 的二阶方法 [70]一致。新方法每步对被积函数 f^0和 f^p 的求值次数 N_d 和 N_s ， ,…, m，以及随机变量的数量 N_r均较少，如表 3 所示。

新方法的每个时间步的计算量更低，如表 3 所示。在数值示例中，解$\mathbb{E}[\phi(X(t))]$ 将采用步长 $2^{-1},\ldots,2^{-5}$进行近似。我们将每个时间步的计算工作量定义为 $N_d + mN_s + N_r$ [30]，并将数值观测到的收敛阶 $\hat{}p$ 定义为双对数图中近似弱误差相对于步长的回归直线斜率。误差项 $|\mathbb{E}[\phi(X_N) - \phi(X(T_N))]|$ 中的期望将通过蒙特卡洛模拟 $\widehat{\mathbb{E}}[\phi(X_N) - \phi(X(T_N))]$|近似，使用 40000 批次，每批进行 25000 次模拟。

方法	p_D	p_S	N_d	N_s	N_r 如果 $m=1$	N_r 对于 $m>1$
RI6	2	2	2	5	1	$2m-1$
BDK1	2	2	2	2	1	$m+1$
RI5,DRI1	3	2	3	5	1	$2m-1$
W2Ito1	3	2	3	3	2	$m+2$
BDK3	3	2	3	2	2	$2m+1$
BDK2	3	2	3	2	1	$m+1$

表 3：针对确定性阶 p_D 和随机阶 p_S、函数求值次数 N_d 和 N_s 以及随机变量数量 N_r，比较用于求解 (1.1) 的各显式随机 Runge-Kutta 方法。

例 4.1. 作为第一个例子，我们考虑非线性随机微分方程 *[43, 60, 30]*

$$dX(t) = \left(\tfrac{1}{2}X(t) + \sqrt{X(t)^2+1}\right)dt + \sqrt{X(t)^2+1}\,dW(t), \qquad X(0) = 0, \tag{4.1}$$

在时间区间 $I = [0,2]$ 上，其解为 $X(t) =$双曲正弦$(t + W(t))$。取 $\phi(x) =$$p$(反双曲正弦$(x)$)，其中 $p(z) = z^3 - 6z^2 + 8z$，解的期望为

$$\mathbb{E}[\phi(X(t))] = t^3 - 3t^2 + 2t. \tag{4.2}$$

图 *1* 和图 *2* 展示了时间 $t = 2$ 的模拟结果。结果表明，对于一个噪声项，新方法的收敛表现与文献中的方法相似，但计算成本略低。方法 *BDK3* 的收敛阶高于预期。

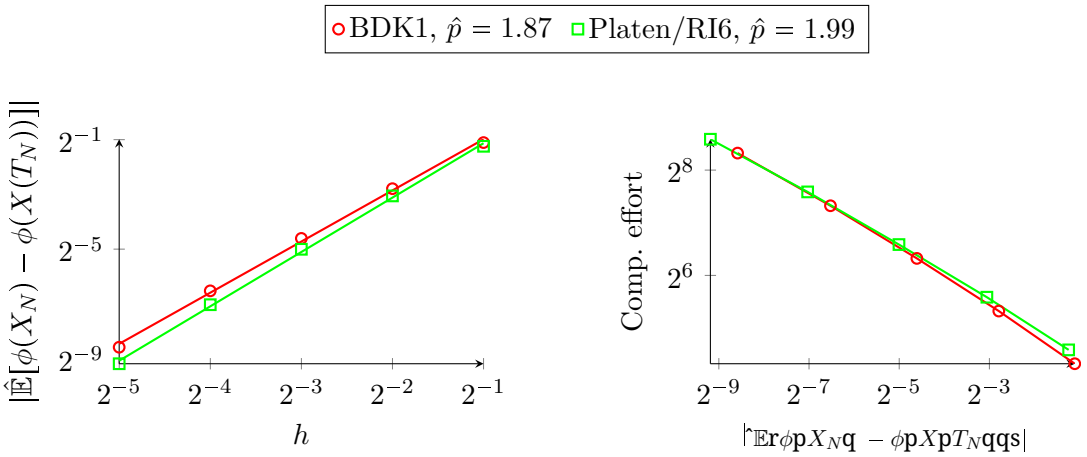


图 1：例 4.1 的数值结果，阶数为(2,2)的方法

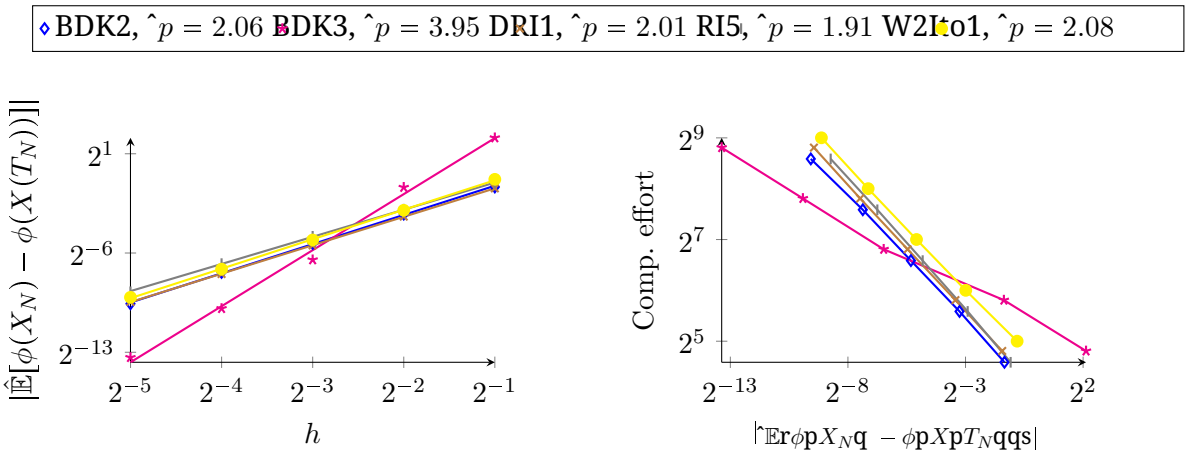


图 2：例 4.1 的数值结果，阶数为(3,2)的方法

例 4.2. 作为第二个例子，我们考虑一个含有 *10* 个维纳过程的非线性随机微分方程*[30, 79]*

$$\begin{aligned} dX(t) = X(t)\,dt &+ \frac{1}{10}\sqrt{X(t)+\frac{1}{2}}\,dW_1(t) + \frac{1}{15}\sqrt{X(t)+\frac{1}{4}}\,dW_2(t) \\ &+ \frac{1}{20}\sqrt{X(t)+\frac{1}{5}}\,dW_3(t) + \frac{1}{25}\sqrt{X(t)+\frac{1}{10}}\,dW_4(t) + \frac{1}{40}\sqrt{X(t)+\frac{1}{20}}\,dW_5(t) \\ &+ \frac{1}{25}\sqrt{X(t)+\frac{1}{2}}\,dW_6(t) + \frac{1}{20}\sqrt{X(t)+\frac{1}{4}}\,dW_7(t) + \frac{1}{15}\sqrt{X(t)+\frac{1}{5}}\,dW_8(t) \\ &+ \frac{1}{20}\sqrt{X(t)+\frac{1}{10}}\,dW_9(t) + \frac{1}{25}\sqrt{X(t)+\frac{1}{20}}\,dW_{10}(t), \qquad X(0)=1. \end{aligned} \tag{4.3}$$

我们用精确解近似四阶矩，即 $\phi(x) = x^4$

$$\mathbb{E}[\phi(X(t))] = \frac{4625768169}{73570420483600} - \frac{2998776077847}{1137065632090000}e^{\frac{731453}{360000}t} + \frac{80235120932849}{78178246418000}e^{\frac{251453}{60000}t} \tag{4.4}$$

在时间区间 $I = [0,1]$ 上。时间 $t = 1$ 处的模拟结果如图 *3* 和图 *4* 所示。我们观察到，对于多个噪声项，新方法的收敛性与标准方法相近，但计算成本显著降低。方法 *BDK3* 的收敛常数有所改善。

例 4.3. 作为最后一个示例，我们关注在分子动力学的背景下，对以下遍历动力学的不变测度进行采样：

$$dX(t) = F(X(t))dt + \mathrm{div}(D^2(X(t)))dt + \sqrt{2}D(X(t))dW(t), \quad F(x) = -D^2(x)\nabla V(x) \tag{4.5}$$

其中 V： $\mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 是光滑势函数， W 是一个 d 维布朗运动，且 D： $\mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d\times d}$ 是光滑的。取 $D(x) = I_d$ 可得到标准的过阻尼朗之万动力学 *[59]*。在对 V 和 D作出技术性假设的条件下，方程 (4.5) 的动力学自然具有遍历性，也就是说，对所有测试函数 ϕ，

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T \phi(X(t))dt = \int_{\mathbb{R}^d}\phi(x)\rho_\infty(x)dx, \quad \rho_\infty(x) \propto \exp(-V(x)).$$

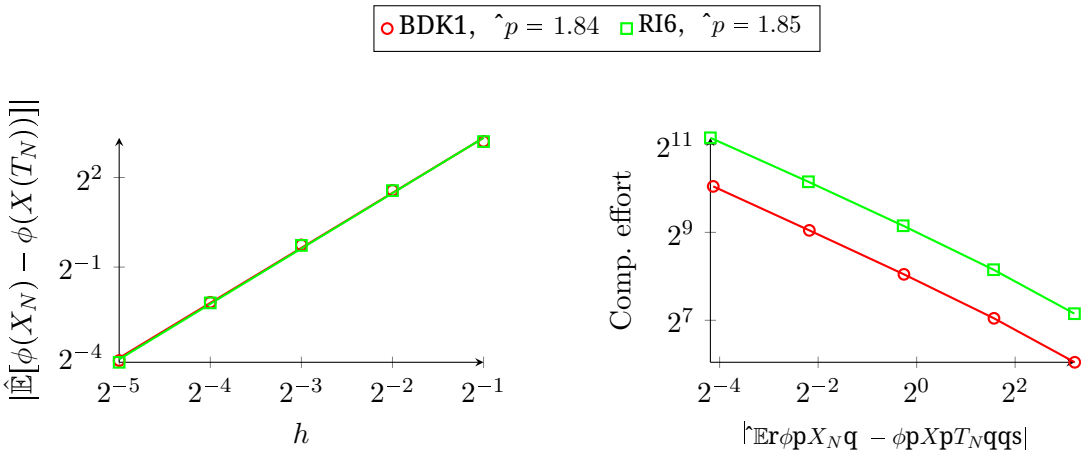


图3：例 4.2 的数值结果，阶数为(2,2)的方法

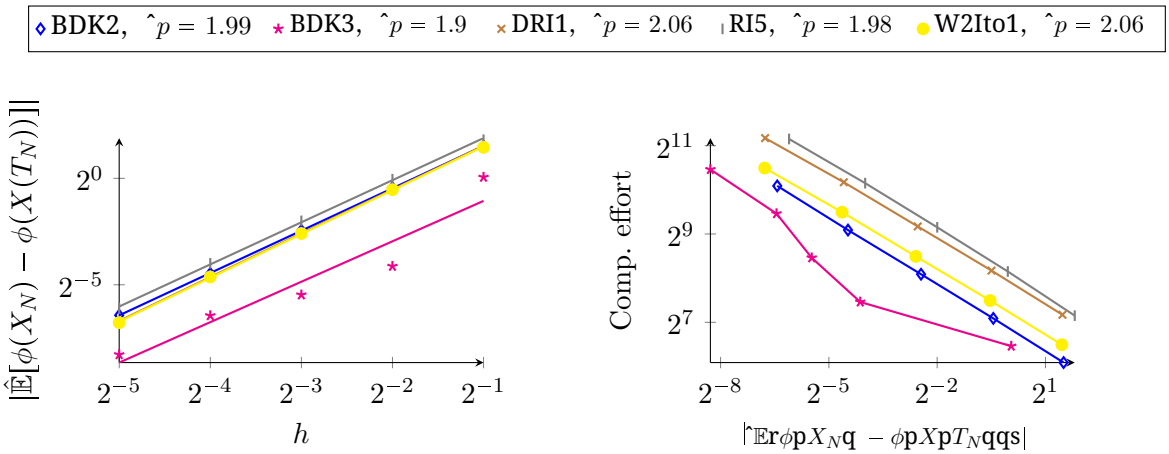


图4：例 4.2 的阶数为(3,2)的方法的数值结果

选择一个非常数 D 映射不会改变采样测度 ρ_∞，但可以提高采样效率。在 *[12]*, 中，提出了一种用于采样 (4.5)的不变测度、二阶精度的流行 ***Leimkuhler-Matthews*** 积分器*[57]*的推广形式。它是一种后处理积分器 *[81]*，并且基于以下伊藤随机微分方程的非详细平衡二阶弱积分器：

$$dX(t) = \sqrt{2}D(X(t))dW(t).$$

基于我们的分析，我们提出以下后处理方法，用于采样(4.5)的不变测度，

$$\begin{aligned}
H_n &= X_n + \frac{h}{4}F(\overline{X}_{n-1}),\\
X_{n+1} &= X_n + hF(\overline{X}_n) + \sqrt{2h}\sum_p D_{:,p}(H_n + \sqrt{\frac{h}{2}}\sum_q D_{:,q}(H_n)\Theta^n_{p,q})\theta^n_p,\\
\overline{X}_n &= X_n + \sqrt{\frac{h}{2}}\sum_p D_{:,p}(H_n)\theta^n_p,
\end{aligned}$$

其中随机变量定义见第 *2.2* 节，且初始条件 $X_{-1} = X_0$ 可以任意选取。假设该格式具有遍历性，应用 *[69]* 的分析可得，(X_n) 是一个显式方法，具有弱一阶精度，并且在采样(4.5)的不变测度时具有二阶精度。该方法每步仅需对 F 求值一次、对 D 求值两次。与 *[69]*中的方法不同，它不依赖于 D 的特定形式。

5 带装饰和异类级数的高阶分析

我们在此推导随机动力学弱近似的一般阶条件。尽管这一思想并不新颖 [72, 73], ，我们提出了一种利用异类森林的新方法，可简化分析并减少森林的数量；同时，我们还运用霍普夫代数理论中的现代代数工具来推导随机阶条件。

5.1 带装饰和异类的 Butcher 森林

我们考虑图 $\pi = (V,\ E)$，其中 V 是一个有限节点集， $E \subset V \times V$ 是一个有向边集。如果 $e = (v,\ w) \in E$，边 e 从节点 v 指向节点 w， v 是 w 的前驱，而 w 是 v 的后继。我们规定，每个节点至多有一条出边。没有后继的节点称为根，并且我们规定，称为树的连通分支恰好有一个根。这样的图称为森林。按照惯例，我们将边画成从上到下，并将根画在最底部。例如，下面的图有三个根：

$$V = \{1,2,3,4,5,6\}, \quad E = \{(4,2),(5,2),(6,3)\}, \quad \pi = (V,E) = \begin{array}{ccccc} & 4 & 5 & 6 & \\ \bullet & & \bullet & \bullet & \\ 1 & 2 & & 3 & \end{array}.$$

我们为图添加特定的装饰，在数值计算中也称为颜色。图 $\pi = (V,E)$ 的装饰是一个映射 d: $V \to \mathbb{N}$，满足对于 $n > 0$， $\left|d^{-1}(n)\right| \in 2\mathbb{N}$。带装饰的图记作 π_d。给定图 π 的两个装饰 d_1 和 d_2，若存在 α: $\mathbb{N} \to \mathbb{N}$，使得 $d_1 = \alpha \circ d_2$，且 $\alpha(n) = 0$ 当且仅当$n = 0$，则称 d_2 比d_1更精细，记作 $d_2 \leqslant d_1$。映射 α 用于标识颜色。若 $d_1 \leqslant d_2$ 且 $d_2 \leqslant d_1$，则这两个装饰等价。若 $d_1 \leqslant d_2$ 且 d_1，并且 d_2 不等价，则记作 $d_1 < d_2$。装饰为 0 的节点用黑色绘制。

例 5.1. 森林 π 可以用不同方式添加装饰：

$$\pi_{d_1} = \overset{①}{\bullet}\ \bullet\ ①,\ \pi_{d_2} = \begin{array}{ccc} ① & & \\ ① & ① & ① \end{array},\ \pi_{d_3} = \begin{array}{ccc} ① & & \\ ① & ② & ② \end{array},\ \pi_{d_4} = \begin{array}{ccc} ② & & \\ ① & ① & ② \end{array},\ \pi_{d_5} = \begin{array}{ccc} ① & & \\ ② & ② & ① \end{array},\ \pi_{d_6} = \begin{array}{ccc} ② & & \\ ① & ② & ① \end{array}. \tag{5.1}$$

在此例中，装饰 d_3、 d_4、 d_5、 d_6 比 d_2 更细。

随机微分方程的数值流和精确流可以自然地用装饰森林重写。不过，让我们按照 [55, 9] 的思路，引入一组更简单的森林，足以展开精确流。

定义 5.2。 如果两个装饰图 $\pi^1_{d_1}$ 和 $\pi^2_{d_2}$ 之间存在一个节点集合的双射，保持有向边不变，并将装饰 d_1 映射为与 d_2 等价的装饰，则称这两个装饰图等价。我们将这类图的等价类称为装饰森林，并将空森林*1*也包括在内。

类似地，我们将满足以下条件的装饰森林的等价类称为异类森林： π_d 对所有 $n > 0$, $\left|d^{-1}(n)\right| \in \{0, 2\}$均成立。一对装饰相同且非零的节点称为藤蔓。

我们将装饰森林和异类森林分别收集到集合 DF 和 EF 中，并记作 $DF = \text{张成}_{\mathbb{R}}(DF)$、$EF = \text{张成}_{\mathbb{R}}(EF)$。

装饰森林的阶为

$$|\pi_d| = \left|d^{-1}(0)\right| + \frac{1}{2}\sum_{n>0}\left|d^{-1}(n)\right|.$$

给定装饰森林 π_d 的自同构数即为对称系数 $\sigma(\pi_d)$。

例 5.3。 在例 *5.1* 中，除非装饰 1 出现超过两次，否则所有森林都是异类森林。例 *5.1* 中装饰森林的阶为

$$|\pi_{d_1}| = 3, \quad |\pi_{d_2}| = |\pi_{d_3}| = |\pi_{d_4}| = |\pi_{d_5}| = |\pi_{d_6}| = 2,$$

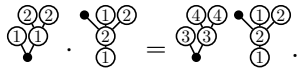
且对称系数满足

$$\sigma(\pi_{d_1}) = \sigma(\pi_{d_4}) = \sigma(\pi_{d_5}) = \sigma(\pi_{d_6}) = 1, \quad \sigma(\pi_{d_2}) = \sigma(\pi_{d_3}) = 2.$$

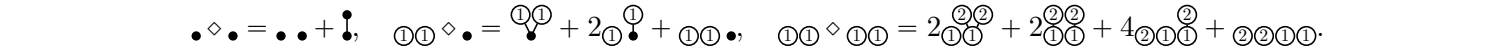
阶为一和二的所有异类与装饰森林列于表 *1* 和表 *2* 中。

注 5.4。 请注意，两个装饰森林可能等价，但其装饰并不等价。例如，在例 *5.1* 中，森林 π_{d_4}、π_{d_5} 和 π_{d_6} 等价，但只有装饰 d_4 和 d_5 等价。给定两个装饰森林 π_{d_1}、π_{d_2}，满足 $d_2 \leqslant d_1$，我们记 $m(\pi_{d_2}、\pi_{d_1})$ 为 π_{d_1} 的不同更细装饰的数量，这些装饰会生成一个与 π_{d_2} 等价的装饰森林。

现在，我们为$\mathcal{EF}$ 赋予代数结构。一方面，两个装饰森林的拼接乘积，记作 $\pi_{d_1} \cdot \pi_{d_2}$，得到一个装饰森林，其图是这两个图的并集；其装饰保留 π_{d_1} 和 π_{d_2}中具有相同装饰的节点，但不会为 $\pi_{d_1} \cdot \pi_{d_2}$中的节点使用相同的非零装饰：



另一方面，Grossman-Larson 乘积 $\pi^1_{d_1} \diamond \pi^2_{d_2}$ 将 $\pi^1_{d_1}$ 的根以所有可能的方式拼接并嫁接到 $\pi^2_{d_2}$ 的所有节点上（按重数计数），并为 d_1 和 d_2中的节点使用不同的非零装饰。例如，我们得到



令去洗牌余乘法 $\Delta\colon \mathcal{EF} \to \mathcal{EF} \otimes \mathcal{EF}$:

$$\Delta\pi = \sum_{\pi_1,\pi_2 \in EF, \pi_1 \cdot \pi_2 = \pi} \pi_1 \otimes \pi_2, \quad \Delta\mathbf{1} = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}.$$

例如，我们得到（请注意，藤蔓不能拆分到张量积的两侧）



异类森林自然地具有两种 Hopf 代数结构。关于随机微分方程加性噪声这一较简单情形中的类似结构，请参见[9, 10] 。

命题 5.5. 配备拼接乘积和 *Grossman-Larson* 乘积的异构森林构成 *Hopf* 代数 $(EF \cdot, \Delta)$和 $(EF \diamond, \Delta)$，并按阶分级。

注记 5.6. 如果一个异构森林 π_d 满足

$$\Delta\pi_d = \mathbf{1} \otimes \pi_d + \pi_d \otimes \mathbf{1}.$$

与确定性情形不同，本原森林并非异构树。例如，$_{1\ 1}$ 和 $_{12\ 12}$ 都是本原的，因为它们不能表示为异构树的接。在各种数值情境中，本原元素恰好对应于数值方法的阶条件，因此阶条件的数量由本原元素的数量给出 *[32, 10]*。对于一般 *SDEs* 而言，随机数值计算的一大难点在于，随机 *Runge-Kutta* 方法的系数映射通常不是关于拼接的特征，因此必须考虑所有装饰森林的阶条件。这也解释了定理 *2.3* 中阶条件数量较多的原因。

5.2 利用装饰森林和异类森林对流进行代数展开

装饰森林和异类森林通过使用初等微分映射 F^{dec}来表示初等微分。

定义 5.7。 设有一个装饰森林 $\pi_d = (V, E, d)$。则，装饰初等微分映射 F^{dec} 是作用于测试函数 $\phi \in C_P^\infty(\mathbb{R}^d)$ 的微分算子，满足$F^{dec}(\mathbf{1})[\phi](x) = \phi(x)$ 以及

$$F^{dec}(\pi_d)[\phi](x) = \sum_{\substack{i_w=1,\dots,d \\ w\in V}} \sum_{\substack{p_n=1,\dots,m,\ n\in \mathrm{Im}(d)\setminus 0 \\ p_0=0,\ p_{n_1}\neq p_{n_2}\ if\ n_1\neq n_2}} \phi_{I_R}(x) \prod_{v\in V} f_{I_{\Pi(v)}}^{p_{d(v)},i_v}(x),$$

其中， $R \subset V$是根的集合， $\Pi(v)$ 表示 v的前驱集合，且 $I_S = i_{w_1} \dots i_{w_n}$适用于 $S = \{w_1$、……、 $w_n\}$。类似地， $\pi_d \in EF$上的异构初等微分映射满足$F^{exo}(\mathbf{1})[\phi](x) = \phi(x)$ ，并且

$$F^{exo}(\pi_d)[\phi](x) = \sum_{\substack{i_w=1,\dots,d \\ w\in V}} \sum_{\substack{p_n=1,\dots,m,\ n\in \mathrm{Im}(d)\setminus 0 \\ p_0=0}} \phi_{I_R}(x) \prod_{v\in V} f_{I_{\Pi(v)}}^{p_{d(v)},i_v}(x).$$

两个初等微分映射 F^{dec}和 $F_{\text{异构}}$ 非常相似，唯一的区别在于 F^{dec}的定义中增加了求和限制 $p_{n_1} \neq p_{n_2}$。例如，例 5.1 中的森林 π_{d_3} 给出

$$F^{\mathrm{dec}}(\pi_{d_3})[\phi] = \sum_{i,j,k,l=1}^{d} \sum_{\substack{p,q=1 \\ p\neq q}}^{m} \phi_{ijk} f_l^{p,i} f^{p,l} f^{q,j} f^{q,k},$$

$$F^{\mathrm{exo}}(\pi_{d_3})[\phi] = \sum_{i,j,k,l=1}^{d} \sum_{p,q=1}^{m} \phi_{ijk} f_l^{p,i} f^{p,l} f^{q,j} f^{q,k}.$$

我们特别注意到

$$F^{\mathrm{exo}}(\pi_{d_3}) = F^{\mathrm{dec}}(\pi_{d_3}) + F^{\mathrm{dec}}(\pi_{d_2}).$$

更多示例请参见表 1 和表 2。异构形式体系更简单，因为它不需要根据 p_n中的相等值分别处理不同情形；随着方法阶数提高，这很快就会变得繁琐。

以下结果遵循 [78]，的思路，使我们能够在异类形式体系与带装饰形式体系之间转换初等微分。

命题 sition 5.8. 设 $\pi_d \in EF$ 为一个异构森林，则异类微分映射满足 *es*

$$F^{exo}(\pi_d) = \sum_{\substack{\pi_{d_0} \in DF \\ d \leqslant d_0}} F^{dec}(\pi_{d_0}),$$

并且借助此恒等式， F^{exo} 可扩展至 *DF*。于是，莫比乌斯反演公式对 $\pi_d \in DF$成立，

$$F^{dec}(\pi_d) = \sum_{\substack{\pi_{d_0} \in DF \\ d \leqslant d_0}} \mu(\pi_d, \pi_{d_0}) F^{exo}(\pi_{d_0}),$$

其中莫比乌斯函数为

$$\mu(\pi_{d_1}, \pi_{d_1}) = 1, \quad \mu(\pi_{d_1}, \pi_{d_2}) = - \sum_{\substack{\pi_d \in DF \\ d_1 \leqslant d < d_2}} \mu(\pi_{d_1}, \pi_d).$$

初等微分将森林上的运算转化为微分算子上的运算。

引理 5.9. 微分算子的复合由 *Grossman-Larson* 乘积给出：对于 π_d, $\hat{}\pi_{\hat{d}} \in EF$，对所有 $\phi \in C_P\infty(\mathbb{R}^d)$ 均有，

$$(F^{exo}(\pi_d) \circ F^{exo}(\hat{\pi}_{\hat{d}}))[\phi] = F^{exo}(\pi_d)[F^{exo}(\hat{\pi}_{\hat{d}})[\phi]] = F^{exo}(\pi_d \diamond \hat{\pi}_{\hat{d}})[\phi].$$

随机微分方程 (1.1)/(1.2) 的生成元可表示为异构森林，如下所示

$$\mathcal{L}_{\text{Itô}} = F^{\text{exo}}(\bullet + \frac{1}{2}\textcircled{1}\textcircled{1}), \quad \mathcal{L}_{\text{Strato}} = F^{\text{exo}}(\bullet + \frac{1}{2}\textcircled{1}\textcircled{1} + \frac{1}{2}\overset{\textcircled{1}}{\textcircled{1}}).$$

利用引理 5.9，展开式 (2.2) 可改写为异类森林的形式。

命题 5.10. 流的泰勒展开 (2.2) 可表示为 *Grossman-Larson* 指数 $\exp^{\diamond}(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\tau^{\diamond n}$，即

$$u_{Itô}(x,h) = F^{exo}(\exp^{\diamond}(h\bullet + \frac{h}{2}\textcircled{1}\textcircled{1}))[\phi],$$
$$u_{Strato}(x,h) = F^{exo}(\exp^{\diamond}(h\bullet + \frac{h}{2}\textcircled{1}\textcircled{1} + \frac{h}{2}\overset{\textcircled{1}}{\textcircled{1}}))[\phi].$$

5.3 随机数值计算中的装饰与异类 S 级数

表示我们分析中泰勒展开的主要工具是 S 级数，它将 Butcher级数 [17, 18, 35] 推广到微分算子的表示。

定义 5.11. 给定称为系数映射的 *1*-形式 $a \in DF^*$ 和 $b \in EF^*$，相应的装饰与异类 *S* 级数是以下形式幂级数

$$S_h^{dec}(a)[\phi] = \sum_{\pi_d \in DF} h^{|\pi_d|} \frac{a(\pi_d)}{\sigma(\pi_d)} F^{dec}(\pi_d)[\phi],$$
$$S_h^{exo}(b)[\phi] = \sum_{\pi_d \in EF} h^{|\pi_d|} \frac{b(\pi_d)}{\sigma(\pi_d)} F^{exo}(\pi_d)[\phi].$$

我们记作 $S^{dec}(a) = S_1^{dec}(a)$ 和 $S^{exo}(a) = S_1^{exo}(a)$。

注 5.12. 与以异类森林为指标的奇异 S 级数形式和类似，异类 B 级数是以异构树为指标的形式级数，在遍历随机动力系统的不变测度数值近似中发挥着核心作用 *[55, 56, 9, 10]*。文献 *[54]* 证明，加性噪声情形下的异类 B 级数不仅是简化繁琐计算的组合工具，还是一种具有局部性和正交等变性特征的普适几何对象（另见 *[61, 66]*）。据我们所知，本研究提出的奇异与带装饰 S 级数尚未展现出这类几何性质。

流的泰勒展开 (2.2) 以及随机 Runge-Kutta 方法 (1.3) 的相应展开 (2.3)，通常都可以用带装饰 S 级数来表示；但遗憾的是，对于数值流，一般无法用奇异S级数来表示，这与加性噪声情形相反。以往的工作依赖一组森林，其规模不必要地大于 DF。使用装饰森林可以避免重复列出相同的条件，并将条件的对称性考虑在内：每个装饰森林恰好对应一个阶条件。

定理 5.13。 (1.1)/(1.2) 的精确流由一个奇异S级数给出：

$$\mathbb{E}[\phi(X(h))|X_0 = x] = S_h^{exo}(e)[\phi](x).$$

考虑一个形式为 (1.3) 的随机 *Runge-Kutta* 方法，其系数满足假设 *2.1*。那么，积分器的展开 (2.3) 有良好定义，并由一个带装饰 S 级数给出：

$$\mathbb{E}[\phi(X_1)|X_0 = x] = S_h^{dec}(a)[\phi](x).$$

系数 e 可通过迭代 Grossman-Larson 乘积计算，如命题 5.10 所示，然后再乘以对称系数（另见 [71] 中的表达式）。例如，在伊藤情形 (1.1) 中可得：

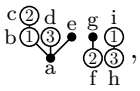
$$\exp^{\diamond}(h_{\bullet} + \frac{h}{2}{}_{①①}) = h\Big({}_{\bullet} + \frac{1}{2}{}_{①①}\Big) + h^2\Big(\frac{1}{2}{}_{\bullet}^{\bullet} + \frac{1}{2}{}_{\bullet\,\bullet} + \dots\Big) + \dots,$$

因此 e 满足

$$\frac{e}{\sigma}({}_{\bullet}) = 1, \quad \frac{e}{\sigma}({}_{①①}) = \frac{1}{2}, \quad \frac{e}{\sigma}({}^{①}_{①}) = 0, \quad \frac{e}{\sigma}({}_{\bullet}^{\bullet}) = \frac{1}{2}, \quad \frac{e}{\sigma}({}_{\bullet\,\bullet}) = \frac{1}{2}, \dots$$

或者，我们在命题 5.18 和公式 (5.2) 中，利用 Butcher-Connes-Kreimer Hopf 代数的一种扩展，给出了 e 的显式表达式。表 1 列出了阶不超过二的异类森林对应的 e 值。

随机 Runge-Kutta 方法 (1.3) 的系数映射可根据带装饰的图推导得出，方式与确定性文献 [35, 第 III 章]类似。任意标记森林中的节点，并记作 $z_r^{p_d}$若一个根的标记为 r 且其装饰为 d，约定 $p_0 = 0$。类似地，若一条边从装饰为q 的节点 w 指向装饰为 p的节点 v，则记作 $Z^{p,\ v}{}^{q,\ w}$。系数 a 随后通过对所有涉及的指标求和并取期望得到。我们给出一个例子，并请读者参阅 [9, 命题 4.3] 和 [72, 26]，了解更多细节，

$\pi_d =$ 

,

$$a(\pi_d) = \sum_{a,b,c,\cdots=1}^{s} \sum_{p_1,p_2,p_3=1}^{m} \mathbb{E}[z_a^0 Z_{a,b}^{0,p_1} Z_{b,c}^{p_1,p_2} Z_{a,d}^{0,p_3} Z_{a,e}^{0,0} z_f^{p_2} Z_{f,g}^{p_2,0} z_h^{p_3} Z_{h,i}^{p_3,p_1}].$$

注 5.14。 代数 $(H\ \cdot)$ 上的 *1*-形式 $a \in H^*$ 称为特征标，如果

$$a(x \cdot y) = a(x)a(y), \quad x, y \in \mathcal{H}.$$

精确流的系数映射 $e \in EF^*$ 自然是一个特征标。在大多数数值情境中，方法都用某个 *Hopf* 代数上的特征标来表示。乘性噪声随机数值计算的一大难点在于，随机龙格–库塔方法的系数映射 a 并非特征标（一般而言，如 $\mathbb{E}[XY] \neq \mathbb{E}[X]\mathbb{E}[Y]$）。

对于加性噪声随机微分方程的近似，只需使用高斯随机 Runge-Kutta 系数。在这种情境下，伊瑟利斯定理 [42, 67]（亦称维克公式）保证数值解的 S 级数可改写为异类级数。对于乘性噪声情形，高阶近似仅靠高斯随机 Runge-Kutta 系数是不够的。因此，我们采用装饰森林，并在定理 2.3 中将阶条件分为两组，即奇异阶条件和伊瑟利斯阶条件。伊瑟利斯阶条件使泰勒展开 (2.3) 能够在所研究的阶数范围内写成奇异 S 级数，其计算依据以下结果。

定理 5.15。 考虑一个展开具有带装饰 *S* 级数形式、系数映射为 a 的数值方法。若对所有 $\pi_d \in DF$，下列称为伊瑟利斯条件的条件均成立，则该展开可写成奇异 *S* 级数，

$$a(\pi_d) = \sum_{\substack{\pi_{d_0} \in EF \\ d_0 \leqslant d}} \frac{\sigma(\pi_d)}{\sigma(\pi_{d_0})} a(\pi_{d_0}) = \sum_{\substack{d_0 \leqslant d \\ \pi_{d_0} \in EF}} a(\pi_{d_0}).$$

定理 5.15 是恒等式 $m(\pi_{d_0}, \pi_d) = \frac{\sigma(\pi_d)}{\sigma(\pi_{d_0})}$ 和命题 5.8 的直接推论。我们强调，定理 5.15 中的第一个求和以所有装饰比 d 更精细的异类森林为指标，而第二个求和以所有比 d 更精细的异类装饰为指标，因此其中允许出现重复项。例如，二阶伊瑟利斯条件如下：

$$a(\overset{①}{①①①}) = a(\overset{②}{①①②}) + a(\overset{②}{①②①}) + a(\overset{①}{①②②}) = 2a(\overset{②}{①①②}) + a(\overset{①}{①②②}).$$

根据精确流和数值流的奇异与带装饰 S 级数展开，以及对伊瑟利斯条件的刻画，我们推导出定理 2.3 的弱阶条件。

定理 *2.3* 的证明。根据定理 5.13，精确流和数值流分别可表示为奇异S级数 $S_h^{\mathrm{exo}}(e)$ 和带装饰 S 级数 $S_h^{\mathrm{dec}}(a)$。定理 5.15 中的伊瑟利斯阶条件要求数值流表示为奇异S级数 $S_h^{\mathrm{exo}}(a)$。随后，通过比较异类森林上的系数映射，得到阶条件： $a(\pi) = e(\pi)$对于 $\pi \in EF$。结合假设 2.1，这些条件确保满足命题 2.2 的前提。

□

为了完整描述奇异S级数，我们来描述由奇异S级数表示的微分算子的复合，这要借助著名的 Butcher-Connes-Kreimer (BCK) Hopf 代数 [23, 24]。

定义 5.16. c 的割是对 $\pi \in EF$ 的边 π的一种选择（可以为空）。移除这些边后会得到一个森林 $W_c(\pi)$；包含 π 的根的 $W_c(\pi)$ 连通分量记作$R_c(\pi)$，其余连通分量汇集成森林 $P_c(\pi)$。若从根到 π 叶的任一路径上至多有一处割，且 $R_c(\pi), P_c(\pi) \in EF$，则该割是容许的，记作$c \in \mathrm{Adm}(\pi)$。

我们在以下结果中定义 BCK Hopf代数的奇异扩张。证明与加性噪声情形 [9, 10]类似，因此略去（另见 [68, 38]）。

命题5.17. 在 *EF* 上定义 *BCK*余乘如下：

$$\Delta_{BCK}\mathbf{1} = \mathbf{1}\otimes\mathbf{1}, \quad \Delta_{BCK}\pi = \pi\otimes\mathbf{1} + \sum_{c\in\mathrm{Adm}(\pi)} P_c(\pi)\otimes R_c(\pi).$$

那么，$(EF\ ,\Delta_{BCK})$是一个分次连通交换*Hopf*代数，其分次对偶与 *Grossman-Larson Hopf*代数同构（相差一个对称系数）$(EF\ \diamond,\Delta)$。

与确定性情形 [21]以及基于装饰森林的标准 Hopf代数形式体系 [34]相比，主要区别在于：具有相同装饰的节点不能通过 Butcher-Connes-Kreimer 余乘拆分：

$$\Delta_{BCK}\ \mathbf{1}\otimes\ +\ \otimes\ +\ \otimes\ +\ \otimes\ +\ \otimes\mathbf{1}.$$

奇异S级数的复合由 BCK余乘描述（另见 [27]，其中以类似方式描述了不借助 Hopf代数形式体系的复合）。

命题 5.18. 设 $a,b\in EF^*$，则奇异*S*级数的复合满足 es

$$S^{exo}(a)\circ S^{exo}(b) = S^{exo}(a*b), \quad a*b = \mu\circ(a\otimes b)\circ\Delta_{BCK},$$

其中 μ 是乘法，$*$ 称为复合法则。

定义伊藤生成元 l 的系数映射：$\mathcal{EF}\ \to\ \mathbb{R}$ 由 $l = \delta_{\bullet} + \delta_{\bigcirc\bigcirc}$ 给出（Stratonovich 情形则由 $l = \delta_{\bullet} + \delta_{\bigcirc\bigcirc} + \frac{1}{2}\delta_{\bigcirc}$ 给出），其中 $\delta_\tau(\hat{\tau}) = \mathbb{1}_{\tau=\hat{\tau}}$。相应的 S 级数给出1生成元 $S^{\mathrm{exo}}(l) = \mathcal{L}$。于是，精确流的系数映射 e 满足

$$u(x,h) = S^{\mathrm{exo}}(e)[\phi](x), \quad e = \exp^*(hl). \tag{5.2}$$

6 结论

本文提出了一种新方法，通过对随机Runge-Kutta系数作特定选择，大幅减少乘性噪声情况下高弱阶随机龙格–库塔方法所需的阶条件数量。我们还给出了一系列新方法，与文献中的方法精度相近，但计算成本更低。这些方法在函数求值次数最少的意义下是最优的。阶条件的分析基于奇异与带装饰S级数及其相关的 Hopf 代数结构。这种代数方法建立了一套形式体系，使每个森林恰好对应一个阶条件；它凸显了异类级数在随机数值计算中的核心作用，并揭示了乘性噪声带来的主要代数难题。

本研究从代数和数值两个角度提出了若干关于设计高效离散化方法的新问题。首先，若能找到一类可直接写成异类级数的泰勒展开的方法，将极大简化分析。此外，随机变量的设计是手工完成的；若能形式化定义满足给定矩恒等式的随机变量，将有助于应对高阶计算中的挑战。本文提出的简化方法和新方法可以

拓展至其他领域，例如，为遍历动力学构造不变测度保持方法 [12], ，或构造用于研究随机哈密顿系统的辛格式 [39], ，亦或用于流形上的随机积分。针对后者，奇异 Butcher 级数形式体系已在 [11] 中拓展，用于研究具有加性噪声的随机李群方法。将这类方法拓展至乘性噪声，用于遍历动力学的采样，并研究相关的代数结构（参照 [15, 16] 的思路），都是值得未来探索的课题。

致谢。A. Busnot Laurent 感谢 ANR- 25-CE40-2862-01（MaStoC - 流形与随机计算）和 ANR-11-LABX-0020（Labex Lebesgue）项目的支持，并感谢 E. Bronasco 和 P. Catoire 的真知灼见。

参考文献

[1] A. Abdulle, G. Vilmart 和 K. C. Zygalakis. 遍历随机微分方程不变测度的高阶数值近似. *SIAM J. Numer. Anal.*, 52(4):1600–1622, 2014.[2] A. Abdulle, G. Vilmart 和 K. C. Zygalakis. 李-特罗特分裂方法对朗之万动力学的长时间精度. *SIAM J. Numer. Anal.*, 53(1):1–16, 2015.[3] Y. Alama Bronsard, Y. Bruned 和 K. Schratz. 存在低正则性随机性的色散型偏微分方程近似. 计算数学基础, 第1–51页, 2024.[4] S. Anmarkrud, K. Debrabant 和 A. Kværnø. 随机分区龙格-库塔方法的一般阶条件. *BIT*, 58(2):257–280, 2018.[5] G. Bogfjellmo. 芳香 B 级数的代数结构. 计算动力学杂志, 6(2):199–222, 2019.[6] G. Bogfjell mo, E. Celledoni, R. I. McLachlan, B. Owren 和 G. R. W. Quispel. 利用芳香树寻找 Kahan 方法保持的测度和积分. 数学计算, 93(348):1633–1653, 2024.[7] A. Bonicelli. 伊藤扩散过程的费勒半群及 MSR 路径积分的异类 B 级数表示. *arXiv* 预印本 *arXiv:2510.23102*, 2025.[8] N. Bou-Rabee 和 H. Owhadi. 随机背景下变分积分器的长时间精度. *SIAM J. Numer. Anal.*, 48(1):278–297, 2010.[9] E. Bronasco. 异类 B 级数与 S 级数：不变测度采样的代数结构与阶条件. *Found. Comput. Math.*, 第1–31页, 2024.[10] E. Bronasco 和 A. Busnot Laurent. 遍历随机微分方程后向误差分析的 Hopf代数结构. *Numer. Math.*, 第1–61页, 2026.[11] E. Bronasco, A. Busnot Laurent 和 B. Huguet. 利用冻结流方法在黎曼流形上高阶积分随机动力学. *arXiv:2503.21855*, 2025.[12] E. Bronasco, B. Leimkuhler, D. Phillips 和 G. Vilmart. 利用位置依赖扩散实现高效朗之万采样. *arXiv* 预印本 *arXiv:2501.02943*, 2025.

[13] K. Burrage 和 P. M. Burrage. 随机常微分方程的高强阶显式龙格-库塔方法. *Appl. Numer. Math.*, 22(1-3):81–101, 1996. 龙格-库塔方法百年纪念特刊.[14] K. Burrage 和 P. M. Burrage. 基于 B 级数的随机 Runge-Kutta 方法阶条件. *SIAM J. Numer. Anal.*, 38(5):1626–1646, 2000.[15] A. Busnot Laurent, Y. Li 和 Y. Sheng. Post-Hopf拟双代数、post-Lie-Rinehart代数与几何数值积分. *arXiv:2512.21971*, 2025.[16] A. Busnot Laurent, H. Munthe-Kaas 和 G. S. Venkatesh. 用于通过李群方法数值保持体积形式的平面芳香树自由迹 post-Lie-Rinehart 代数. 已提交, 2026.[17] J. C. Butcher. 龙格-库塔方法的有效阶. 载于微分方程数值求解会议（邓迪，*1969*年）, 第133–139页. Springer, 柏林, 1969.[18] J. C. Butcher. 积分方法的代数理论. 数学计算, 26:79–106, 1972.[19] J. C. Butcher. 常微分方程数值方法. John Wiley & Sons, Ltd., 奇切斯特, 第三版, 2016.[20] J. C. Butcher. *B* 级数：数值方法的代数分析. Springer, 2021.[21] P. Chartier, E. Hairer 和 G. Vilmart. B 级数的代数结构. *Found. Comput.Math.*, 10(4):407–427, 2010.[22] P. Chartier 和 A. Murua. 保持加性分裂系统的第一积分和体积形式. *IMA*数值分析杂志, 27(2):381–405, 2007.[23] A. Connes 和 D. Kreimer. Hopf代数、重整化与非交换几何.*Comm. Math. Phys.*, 199(1):203–242, 1998.[24] A. Connes 和 D. Kreimer. 量子场论的启示：Hopf代数与时空几何. *Letters in Mathematical Physics*, 48(1):85–96, 1999.[25] K. Debrabant. 具有多维加性噪声的随机微分方程三阶弱近似的龙格-库塔方法. *BIT Numer. Math.*, 50(3):541–558, 2010.[26] K. Debrabant 和 A. Kværnø. 使用迭代格式计算内部阶段值的随机 Runge-Kutta 方法的 B级数分析. *SIAM J. Numer. Anal.*, 47(1):181–203, 2008/09.[27] K. Debrabant 和 A. Kværnø. 随机B级数的复合及其在隐式泰勒方法中的应用. *Appl. Numer. Math.*, 61(4):501–511, 2011.[28] K. Debrabant 和 A. Kværnø. 单积分项随机微分方程的低成本任意高阶方法. *BIT*, 57(1):153–168, 2017.[29] K. Debrabant 和 A. Rößler. 用于随机微分方程弱近似的随机 Runge-Kutta 方法分类. *Math. Comput. Simulation*, 77(4):408–420, 2008.

[30] K. Debrabant and A. Rößler. 用于伊藤随机微分方程弱近似的高效二阶龙格-库塔方法族。*Appl. Numer. Math.*, 59(3-4):582–594, 2009.[31] Y. Deng and Z. Hani. 波动动力学方程的完整推导。*Inventiones mathemat-icae*, 233(2):543–724, 2023.[32] K. Ebrahimi-Fard and L. Rahm. Munthe-Kaas–Wright Hopf 代数综述。计算动力学杂志, 2024.[33] E. Faou and T. Lelièvre. 守恒随机微分方程：数学与数值分析。数学计算, 78(268):2047–2074, 2009.[34] L. Foissy. 带类型装饰根树上的代数结构。*SIGMA Symmetry Inte-grability Geom. Methods Appl.*, 17:论文编号 086，28页，2021.[35] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner. 几何数值积分，数学计算丛书第31卷。Springer-Verlag，柏林，第二版，2006年。常微分方程的保结构算法。[36] E. Hairer and G. Wanner. 关于 Butcher 群与一般多值方法。*Com-puting (Arch. Elektron. Rechnen)*, 13(1):1–15, 1974.[37] R. Z. Hasminskii. 微分方程的随机稳定性，固体与流体力学专著和教科书：力学与分析第7卷。Sijthoff & Noordhoff，阿尔芬 aan den Rijn—日耳曼敦，马里兰州，1980年。D. Louvish 从俄文译出。[38] M. E. Hoffman. 根树组合学与 Hopf 代数。*Trans. Amer. Math.Soc.*, 355(9):3795–3811, 2003.[39] J. Hong and L. Sun. 随机哈密顿系统的辛积分，数学讲义第2314卷。Springer，新加坡， [2022]©2022.[40] A. Is erles, H. Z. Munthe-Kaas, S. P. Nørsett, and A. Zanna. 李群方法。载于数值学报，*2000*年，Acta Numer. 第9卷，第215–365页。剑桥大学出版社，剑桥，2000年。[41]A. Iserles, G. R. W. Quispel, and P. S. P. Tse. B级数方法不可能保体积。*BIT Numer. Math.*, 47(2):351–378, 2007.[42] L. Isserlis. 关于任意多个变量的正态频率分布中任意阶乘积矩系数的一个公式。生物统计学, 12, 1918年11月。[43] P. E. Kloeden and E. Platen. 随机微分方程的数值解，数学应用（纽约）第23卷。Springer-Verlag，柏林，1992年。[44] I. Kolář, P. W. Michor, and J. Slovák. 微分几何中的自然运算。Springer-Verlag，柏林，1993年。[45] Y. Komori. 随机龙格-库塔方法族弱阶条件的多色根树分析。*Appl. Numer. Math.*, 57(2):147–165, 2007。

[46] Y. Komori. 非交换随机微分方程的弱二阶随机 Runge–Kutta 方法。计算与应用数学杂志, 206(1):158–173, 2007.[47] Y. Komori, D. Cohen, and K. Burrage. 随机微分方程的弱二阶显式指数 Runge-Kutta 方法。*SIAM* 科学计算杂志, 39(6):A2857–A2878, 2017.[48] Y. Komori, T. Mitsui, and H. Sugiura. 随机微分方程 ROW 型格式阶条件的根树分析。*BIT Numer. Math.*, 37(1):43–66, 1997.[49]M. Kopec. 朗之万过程的弱后向误差分析。*BIT Numer. Math.*, 55(4):1057–1103, 2015.[50] M. Kopec. 过阻尼朗之万过程的弱后向误差分析。*IMA*数值分析杂志, 35(2):583–614, 2015.[51]A. Laurent. 随机演化问题数值积分的代数工具与多尺度方法。博士论文，日内瓦大学，2021年。[52] A. Laurent. 利用芳香双复形研究保体积数值积分器的李导数与诺特定理。计算动力学杂志, 11(1):10–22, 2024.[53] A. Laurent, R. I. McLachlan, H. Z. Munthe-Kaas, and O. Verdier. 用于描述无散芳香形式与保体积积分器的芳香双复形。*Forum Math. Sigma*, 11:论文编号 e69，2023年。[54] A. Laurent and H. Munthe-Kaas. 奇异芳香 B 级数的普适等变性。计算数学基础, 25(5):1595–1626, 2025.[55] A. Laurent and G. Vilmart. 用奇异芳香 B 级数研究一类遍历随机微分方程的长时间积分器。数学计算, 89(321):169–202, 2020.[56] A. Laurent and G. Vilmart. 流形上遍历随机微分方程不变测度采样的阶条件。*Found. Comput. Math.*, 22(3):649–695, 2022.[57] B. Leimkuhler and C. Matthews. 分子采样随机数值方法的有理构造。应用数学研究快报（*AMRX*）, 2013(1):34–56, 2013.[58] B. Leimkuhler, C. Matthews, and G. Stoltz. 平衡与非平衡朗之万分子动力学平均值的计算。*IMA*数值分析杂志, 36(1):13–79, 2016.[59] T. Lelièvre, M. Rousset, and G. Stoltz. 自由能计算。帝国理工学院出版社，伦敦，2010年。一个数学视角。[60] V. Mackevičius and J. Navikas. 伊藤方程的二阶弱 Runge-Kutta 型方法。数学与计算机模拟, 57(1-2):29–34, 2001.[61] R. I. McLachlan, K. Modin, H. Munthe-Kaas, and O. Verdier. B级数方法恰为仿射等变方法。数值数学, 133(3):599–622, 2016。

[62] R. I. McLachlan, K. Modin, H. Munthe-Kaas 和 O. Verdier。Butcher级数：关于根树和演化方程数值方法的故事。*Asia Pac. Math. Newsl.*，7(1):1–11，2017年。[63] G. N. Milstein。随机微分方程组解的弱近似。*Teor. Veroyatnost. i Primenen.*，30(4):706–721，1985年。[64] G. N. Milstein。随机微分方程的数值积分，Mathematics and its Applications 第313卷。Kluwer Academic Publishers Group，多德雷赫特，1995年。译自并修订自1988年俄文原版。[65] G. N. Milstein 和 M. V. Tretyakov。数理物理中的随机数值计算。Scientific Computation。Springer-Verlag，柏林，2004年。[66]H. Munthe-Kaas 和 O. Verdier。芳香 Butcher 级数。*Found. Comput. Math.*，16(1):183–215，2016年。[67] H. Z. Munthe-Kaas、O. Verdier 和 G. Vilmart。Isserlis 定理的一个简短证明。*arXiv* 预印本 *arXiv:2503.01588*，2025 年。[68] F. Panaite。根树上的 Connes–Kreimer Hopf 代数与 Grossman–Larson Hopf 代数之间的联系。*Letters in Mathematical Physics*，51(3):211–219，2000年。[69] D. Phillips、B. Leimkuhler 和 C. Matthews。通过坐标变换实现高效布朗动力学模拟的数值计算。*Molecular Physics*，123(7-8):e2347546，2025年。[70] E. Platen。伊藤过程的时间离散近似。博士论文，Akad. der Wiss. Der DDR，1984年。[71] A. Rößler。扩散过程泛函期望的随机泰勒展开。*Stochastic Anal. Appl.*，22(6):1553–1576，2004年。[72] A. Rößler。用于随机微分方程弱近似的随机 Runge-Kutta 方法阶条件的根树分析。*Stoch. Anal. Appl.*，24(1):97–134，2006年。[73] A. Rößler。具有标量噪声的伊藤随机微分方程的龙格-库塔方法。*BIT Numer. Math.*，46(1):97–110，2006年。[74] A. Rößler。Stratonovich 随机微分方程的二阶龙格-库塔方法。*BIT Numer. Math.*，47(3):657–680，2007年。[75] A. Rößler。伊藤随机微分方程的二阶龙格-库塔方法。*SIAM* 数值分析杂志，47(3):1713–1738，2009年。[76] A. Rößler。扩散过程泛函的随机泰勒展开。*Stoch. Anal.Appl.*，28(3):415–429，2010年。[77] A. Rößler。随机微分方程的强近似与弱近似方法——近期的一些进展。载于应用概率与统计的最新进展，第127–153页。Physica，海德堡，2010年。[78] G.-C. Rota。组合理论的基础：I. 莫比乌斯函数理论。载于组合学经典论文，第332–360页。Springer，1964年。

[79] X. Tang 和 A. Xiao。用于伊藤随机微分方程的高效弱二阶随机 Runge-Kutta 方法。*BIT Numer. Math.*，57(1):241–260，2017年。

[80] Á. Tocino 和 J. Vigo-Aguiar。随机 Runge–Kutta 方法的弱二阶条件。*SIAM* 科学计算杂志，24(2):507–523（电子版），2002 年。

[81] G. Vilmart。用于遍历随机微分方程高阶积分的后处理积分器。*SIAM* 科学计算杂志，37(1):A201–A220，2015年。

附录

A 隐式-显式随机 Runge-Kutta 方法

本节介绍一组阶段数最优的新型 IMEX方法。这类方法通常可用于求解多尺度随机系统。

伊藤对角隐式-显式（$c = \frac{1}{4}$） –

$$\begin{array}{c|cc} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline 1 & 0 & 1 \end{array}$$

伊藤显式-对角隐式 ($c = \frac{1}{2}$) –

$$\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} & 1 \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 1 \end{array}$$

斯特拉托诺维奇对角隐式-显式 ($c = \frac{1}{4}$) –

$$\begin{array}{c|cccc|cccc} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & & & & \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{2} & -1 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & -\frac{3}{2} & \frac{3}{2} & 1 & 0 \\ \hline 1 & 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & & & & \end{array}$$

斯特拉托诺维奇显式-对角隐式 ($c = \frac{1}{2}$) –

0	0	0	0	0			
1	0	1	0	0			
0	0	0	0	0	$\frac{1}{2}$	0	0
$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{3-2\sqrt{3}}{6}$	$\frac{\sqrt{3}}{6}$	0
$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{-3+2\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3-\sqrt{3}}{6}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			

Stratonovich 对角隐式 ($c = \frac{1}{4}$) –

$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0			
0	0	0	0	$\frac{1}{2}$	0	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{3-2\sqrt{3}}{6}$	$\frac{\sqrt{3}}{6}$	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{-3+2\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3-\sqrt{3}}{6}$
1	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			