arXiv:2611.32929v1 [math.NA] 24 Nov 2026

相关多元 Hermite 多项式的高阶矩*

LAURA LYMAN†

摘要。 随机 Galerkin 方法通过将解表示为多项式基泛函的级数，并投影到参数空间上，将含不确定参数的微分方程重新表述为确定性的代理系统。对于相关高斯参数，Rahman（2017）在基泛函为多元厄米多项式（MHPs）的情形下证明了解的收敛性，这也是本文讨论的情形。原方程的每一项都会为代理系统贡献系数，我们称之为第 N阶矩，即基多项式乘积的期望。由于参数之间存在依赖关系，第 N阶矩无法像参数相互独立时那样通过张量化分解为一维期望；因此，通常需要以不小且不断累积的代价进行数值计算才能得到其值。具体而言，随着参数维数和截断阶数的增加，产生的第 N阶矩数量呈组合式增长。本文首先建立相关高斯参数下 MHPs 与缓慢增长函数之间的联系；缓慢增长函数是指光滑函数，其各阶导数至多呈多项式增长。为此，我们推导出 MHPs 的第 N阶矩关于可精确计算的（$N-1$）阶矩的表达式，并给出第 N阶矩为零的充分条件。数值示例展示了直接计算此类矩而不进行数值近似的优势，并证实公式预测值与基于抽样的估计相符。

关键词。 不确定性量化（UQ）、随机 Galerkin 格式（SGS）、多项式混沌、多元厄米多项式

数学主题分类代码。 68Q25, 68R10, 68U05

1. 引言。 描述自然现象的微分方程通常包含一些只能在一定确定程度上获知的项。在前向传播问题的框架下，这种不确定性通常用具有指定联合密度的随机向量表示，并将其纳入模型方程中，从而使方程的解变为随机的。不确定性量化（UQ）的一个基本目标是以可承受的成本描述解的分布[13, 49]。当传统的基于抽样的方法实施成本高得难以承受时，随机 Galerkin 格式（SGS）尤其有用；这种情况可能发生在求解模型方程、获取随机参数的单个实现时成本高昂之际

。具体而言，SGS 将解表示为随机向量的多项式泛函级数，其确定性展开系数（即随机模态）本身是一个确定性微分方程代理系统的解 [1, 6, 14, 26, 37]。关于 SGS 及其在不确定性量化中的背景的详细介绍，请参见 [23]。

SGS 展开中的基函数通常是相对于随机向量的联合密度正交的多项式，在这种情况下，该级数通常被称为多项式混沌展开 （PCE）。Wiener [55] 首次将高斯过程写成厄米多项式的无穷级数，Ghanem 和 Spanos [14] 随后为了近似而将其截断。这一数学框架将在第 4 节中介绍。

与蒙特卡罗算法相比，早期将谱方法应用于不确定性量化问题时发现，所需计算成本降低了几个数量级，即可估计统

* **资助：** Clare Booth Luce Fellowship（2024年至今）。
†数学与统计学系，曼荷莲学院（lalyman@mtholyoke.edu）。

计量且精度相当 [58]；不过当然也存在一些例外，例如参见 [3, 12]。近年来，人们开发了多种多项式混沌展开的扩展形式 [30]，并证明它们在许多不同领域的应用中都很有效，包括流体动力学 [11, 26, 32, 37]，土壤中的气水流 [50]，飞机设计 [41]，放射治疗 [35, 46]，等。此外，谱Galerkin方法的优点是能够返回输出感兴趣量的整个分布，据此可以直接计算任意描述性统计量（均值、方差等）；与之形成鲜明对比的是，抽样策略只能计算预先指定的描述性统计量。

这些优势的代价是，SGS 具有侵入性：必须从头推导并实现投影系统，而组装该系统需要计算基多项式乘积的期望；这类乘积在确定性代码中从未出现过 [7, 37, 49]。（当现有求解器必须作为黑盒处理时，通常更倾向于采用非侵入式替代方法，例如蒙特卡罗抽样或随机配置法 [57] [6]。）相关乘积由模型的非线性决定。线性项只会导致两个基多项式的内积，但未知量中多项式次数为 p 的项在投影后会产生 $p+1$个 N 基多项式乘积的期望。我们将这种 N阶矩或N阶乘积的 $\boldsymbol{\xi}$ 多项式期望称为 N。当 N的各分量相互独立时，每个基多项式都是单变量正交多项式的乘积，因此每个 N阶矩都分解为一维积分；这些积分因正交性而为零，或可由经典公式给出，例如厄米多项式的三重乘积公式(4.7) 。

在多元情形下，应用 SGS 时的一个重要假设是随机模型参数彼此独立。该假设使随机变量的联合分布能够分解为概率密度的乘积，从而可以通过将单变量正交多项式的空间进行张量化，轻松构造多元正交多项式 [39, 49, 56]。这些正交基泛函与底层测度 [10]一致，因而构成完备希尔伯特基 [39]；正如最近才明确指出的那样 [10]，，这种完备性[1] 对于截断多项式混沌展开收敛到正确极限至关重要。经典地，去相关变换 [42, 29] 会引入数值不稳定性——尽管这是一个活跃的研究领域，但本文不考虑基于变换的方法。

在相关高斯输入的特殊情况下，$\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma)$，Rahman [39]证明了，与联合密度相关的多元厄米特多项式（MHPs）构成一个完备基，并且由此得到的相关多项式混沌展开（CPCE）在均方、概率和分布意义下均收敛。问题在于，MHPs 仅是弱正交的 [9, 39]：不同总阶数的多项式彼此正交，但相同阶数的多项式通常并不正交。由于联合密度不再能够因式分解，矩也不再能够因式分解。即使是二阶矩，也需要专门的公式 [25]，，而在本工作之前，关于 $N \geq 3$尚无闭式表达式。通常只能采用暴力抽样，但其扩展性较差。对于第 7 节的时滞逻辑斯蒂模型，仅包含 $n = 2$ 个随机输入和总阶数 $M = 2$的 CPCE，就已经涉及多达 189 个二重、三重和四重乘积，而 $n = 3$ 会将该数量提升至 560。也就是说，当参数相关时，Galerkin 投影过程中出现的 N阶矩的数量会随着参数维数和截断阶数呈组合式增长。

[1]希尔伯特基的完备性等价于底层概率测度由其矩唯一确定 [10]。

1.1. 贡献概述。本文建立了在无需数值近似的情况下，计算相关高斯变量中 MHPs 的 N 阶矩所需的理论。全文中，$\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma)$ 表示具有已知对称正定（SPD）协方差矩阵 Σ 的随机向量。所有涉及 MHPs 的期望均相对于该 $\boldsymbol{\xi}$ 随机向量的分布计算。我们的主要成果如下。

- 任意缓慢增长函数（定义 A.1）$\boldsymbol{\xi}$ 的期望——也就是说，所有阶导数的增长至多为多项式级别的任意光滑函数——都是有限的。特别地，多元厄米多项式的每个 N阶矩都存在（推论 A.5）。
- 对于每个多重指标 $\boldsymbol{A}$ 和每个缓慢增长 f，都有 $\mathbb{E}(H_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{\xi}) f(\boldsymbol{\xi})) = \mathbb{E}(\partial^{\boldsymbol{A}} f(\boldsymbol{\xi}))$（定理 B.1）。因此，阶乘积中的任意一个因子都可以替换为作用于其余 N个因子上的导数（推论 B.2）。
- 相关高斯随机变量的 N 多元厄米特多项式乘积有一个显式递归公式；具体而言，对于$|\boldsymbol{\alpha}| \le |\boldsymbol{\beta}| \le |\boldsymbol{\gamma}_{(1)}| \le \cdots \le |\boldsymbol{\gamma}_{(N-2)}|$ (定理 9.1),

$$\begin{aligned}&\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}, \ldots, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}} \rangle \\ &\quad = \sum_{\boldsymbol{A} \le \boldsymbol{\alpha}} \sum_{\substack{\boldsymbol{B} \le \boldsymbol{\beta} \\ |\boldsymbol{B}| = |\boldsymbol{A}|}} \binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{A}} \binom{\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{B}} \langle H_{\boldsymbol{A}}, H_{\boldsymbol{B}} \rangle \langle H_{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}, \ldots, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}} \rangle.\end{aligned}$$

  此外，该表达式可化简为最近提供的三重乘积（$N = 3$）公式 [23]。
- 当 N其最大索引的阶数超过其他索引阶数之和时，第 th 个乘积必定为零（推论 9.2）。

本文组织如下。第 2 节 介绍全文所使用的相关定义、记号约定和首字母缩略词。第 3 节 描述形式化的概率设定。在 第 4 节，我们概述谱伽辽金展开以及 Wiener 引入的原始级数多项式混沌展开。第 5 节介绍相关多元厄米多项式，它们在第 6 节 中作为 CPCE 的基础。第 7 节 展示一个应用 CPCE 求解种群增长随机变体 Hutchinson 方程的示例，并有助于说明计算机可直接计算的三重乘积公式的实际价值。随后在 第 9 节中，我们给出本文的主要结果：一个可直接计算的 N阶乘积公式，之后将完成一些具体的示例计算。第 10 节将该公式与蒙特卡洛估计进行比较，而第 11 节 给出结论。存在性结果和各种恒等式将在 附录 A 和 B 中证明。

2. 定义与符号。我们记 $\mathbb{N} = \{1, 2, \ldots\}$，$\mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \ldots\}$以及$[n] = \{1, \ldots, n\}$ 为 $n \in \mathbb{N}$。本文通篇使用表 1中列出的缩略语。

现在给出与 [23] 中类似的符号约定和定义。

DEFINITION 2.1（多重指标）。一个 n 维多重指标 $\boldsymbol{\alpha}$ 是一个由非负整数构成的 n 元组（α_1、……、α_n）$\in \mathbb{N}_0^n$。每个 α_i 被称为该多重指标的第 i 个元素 $\boldsymbol{\alpha}$。

除非另有说明，多重指标 $\boldsymbol{\alpha}$ 均采用定义 2.1 中给出的记号。我们还将 $\boldsymbol{e}_j$ 记作第 j个单位多重指标，其 j个分量为 1，其余分量为 0。

TABLE 1
Acronyms used throughoug the paper.

SGS	随机Galerkin格式
PCE	多项式混沌展开
MHP	多元Hermite多项式
CPCE	相关多项式混沌展开

对于多重指标 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{N}_0^n$，定义 [39, 48]
1. 逐分量加法与减法： $\boldsymbol{\alpha} \pm \boldsymbol{\beta} = (\alpha_1 \pm \beta_1, \ldots, \alpha_n \pm \beta_n)$；2. 绝对值： $|\boldsymbol{\alpha}|$: $= \|\boldsymbol{\alpha}\|_1 = \alpha_1 + \cdots + \alpha_n$，我们称其为阶数 $\boldsymbol{\alpha}$；3. 阶乘： $\boldsymbol{\alpha}!$ $= \alpha_1! \cdots \alpha_n!$ $= \prod_{i=1}^n \alpha_i!$ ；4. 偏导数： $\partial^{\boldsymbol{\alpha}} = \partial_1^{\alpha_1} \cdots \partial_n^{\alpha_n}$。

下文中，除非另有说明，任何 $\boldsymbol{\alpha}$ 均表示一个阶数为 $k \geq 1$ 的多重指标。按照 [39], 的约定，本文始终采用分级字典序。

DEFINITION 2.2（分级字典序）。对于多重指标 $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{N}_0^n$，我们采用分级字典序；即

$$\boldsymbol{\alpha} \leq \boldsymbol{\beta} \Leftrightarrow |\boldsymbol{\alpha}| < |\boldsymbol{\beta}| \text{ or } (|\boldsymbol{\alpha}| = |\boldsymbol{\beta}| \text{ and the leftmost } \textit{digit of } \boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\beta} \textit{ is positive}).$$

例如，对于 $n = 2$,

$$(0,0) < \overbrace{(1,0) < (0,1)}^{|\boldsymbol{\alpha}|=1} < \overbrace{(2,0) < (1,1) < (0,2)}^{|\boldsymbol{\alpha}|=2} < \overbrace{(3,0) < (2,1) < (1,2) < (0,3)}^{|\boldsymbol{\alpha}|=3} < \cdots$$

在所有按 $\boldsymbol{\alpha}$ 编号的矩阵、向量和求和式中，如有需要，我们均假定采用分级字典序（升序）。

对于多重指标，广义乘积法则的莱布尼茨公式 [47] 如下：

$$\partial^{\boldsymbol{\alpha}}(fg) = \sum_{\boldsymbol{A} \leq \boldsymbol{\alpha}} \binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{A}} \partial^{\boldsymbol{A}}(f) \partial^{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{A}}(g). \tag{2.1}$$

有了这些记号，我们来回顾多元谱展开背后的数学理论。

3. 概率设置。

3.1. 输入。 设 $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ 为一个完备概率空间，其中 Ω 是由基本事件组成的非空样本空间，$\mathcal{A}$ 是 Ω 上的 Borel σ-代数，而 $\mathbb{P}: \mathcal{A} \to [0,1]$ 是一个概率测度。对于某个 $\mathbb{A}^n \subseteq \mathbb{R}^n$，假设给定一个取值于 $\mathbb{A}^n$ 的输入随机向量 $\boldsymbol{\xi}: (\Omega, \mathcal{A}) \to (\mathbb{A}^n, \mathcal{B}_{\mathbb{A}^n})$ 及其密度函数 $\varphi: \mathbb{A}^n \to \mathbb{R}_{\geq 0}$，其中$\mathcal{B}_{\mathbb{A}^n}$ 表示 $\mathbb{A}^n$上的 Borel σ-代数。正整数 n 表示输入随机变量的数量（即 $\boldsymbol{\xi}$ 的分量数 $\xi_1, \ldots, \xi_n$），有时也称为随机问题 [40] 的维数 。

3.2. 输出与 Nth 乘积定义。 给定随机向量 $\boldsymbol{\xi}$ 及其在 $\mathbb{A}^n$上的密度 φ，考虑某个可测函数 $f: (\mathbb{A}^n, \mathcal{B}_{\mathbb{A}^n}) \to (\mathbb{R}, \mathcal{B}_{\mathbb{R}})$，其中$\mathcal{B}_{\mathbb{R}}$ 是实数轴上的 Borel σ-代数。按照惯例，$f(\boldsymbol{\xi}): (\Omega, \mathcal{A}) \to (\mathbb{R}, \mathcal{B}_{\mathbb{R}})$ 是由 $f(\boldsymbol{\xi})(\omega) = f(\boldsymbol{\xi}(\omega))$ 定义的随机变量。

考虑平方可积函数构成的希尔伯特空间[2]，

$$L^2(\Omega,\mathcal{A},\mathbb{P})=\left\{f:\Omega\to\mathbb{R}\,\middle|\,f\text{ is }(\Omega,\mathcal{A})\text{-measurable and}\int_\Omega|f(\omega)|^2\,d\mathbb{P}(\omega)<\infty\right\}.$$

按照惯例，我们利用实现 $\omega\in\Omega$ 与 $\boldsymbol{\xi}(\omega)\in\mathbb{A}^n$ 的输出值之间的等价性，从而在 $(\Omega\ \mathcal{A})$ 中而非在像概率空间 $(\mathbb{A}^n,\mathcal{B}_{\mathbb{A}^n},\varphi(\boldsymbol{y})d\boldsymbol{y})$ [39] 中提出问题。因此，可以证明[3]， $f(\boldsymbol{\xi})\in L^2(\Omega\ \mathcal{A},\mathbb{P})$ 当且仅当 $f\in L^2(\mathbb{A}^n,\mathcal{B}_{\mathbb{A}^n},\varphi(y)dy)$，其中

$$\begin{aligned}&L^2(\mathbb{A}^n,\mathcal{B}_{\mathbb{A}^n},\varphi(\boldsymbol{y})\,d\boldsymbol{y})\\&\quad=\left\{f:\mathbb{A}^n\to\mathbb{R}\,\middle|\,f\text{ is }(\mathbb{A}^n,\mathcal{B}_{\mathbb{A}^n})\text{-measurable and}\int_{\mathbb{A}^n}|f(\boldsymbol{y})|^2\varphi(\boldsymbol{y})\,d\boldsymbol{y}<\infty\right\}.\end{aligned}$$

因此，我们可以互换地考察随机变量 $f(\boldsymbol{\xi})\in L^2(\Omega\ \mathcal{A},\mathbb{P})$ 和函数 $f\in L^2(\mathbb{A}^n,B_{\mathbb{A}^n},\varphi(\boldsymbol{y})d\boldsymbol{y})$ 的收敛。

可以在这两种 L^2 空间中的任一种上构造内积：

$$\begin{aligned}\langle f(\boldsymbol{\xi}),g(\boldsymbol{\xi})\rangle_{d\mathbb{P}(\omega)}&:=\int_\Omega f(\boldsymbol{\xi}(\omega))g(\boldsymbol{\xi}(\omega))d\mathbb{P}(\omega)\\&=\int_{\mathbb{A}^n}f(\boldsymbol{y})g(\boldsymbol{y})\varphi(\boldsymbol{y})d\boldsymbol{y}=:\langle f,g\rangle_{\varphi(\boldsymbol{y})d\boldsymbol{y}}\end{aligned}\tag{3.1}$$

其中，(3.1) 也等于 $\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(f(\boldsymbol{\xi})g(\boldsymbol{\xi}))$。该内积诱导出范数 $\|f\|^2_{\varphi(\boldsymbol{y})d\boldsymbol{y}}:=\langle f^2\rangle_{\varphi(\boldsymbol{y})d\boldsymbol{y}}$ [5, 8]。我们通常省略内积尖括号上的下标。有时，我们将 $\langle f,g\rangle$ 称为双重积。三重积 $\langle f,g,h\rangle$、四重积 $\langle f_1,f_2,f_3,f_4\rangle$ 以及 N 阶乘积 $\langle f_1,\ldots,f_N\rangle$ 的定义与此类似。

4. 谱伽辽金展开。考虑求解一个包含 $\boldsymbol{\xi}$ 随机量的微分方程。也就是说，

$$\mathcal{F}(u,\boldsymbol{d};\boldsymbol{\xi})=0,\qquad\boldsymbol{d}\in\mathcal{D}\subset\mathbb{R}^p.\tag{4.1}$$

$\mathcal{D}$ 是一个非空紧区域，表示 p 确定性方程参数所在的空间。这里， $\mathcal{F}$ 是一个微分算子，通常包含线性项和非线性项。基本假设是，使用密集采样方法直接计算 $\mathcal{F}$ 的成本高得难以承受，因此有必要找到一种成本更低的模型，使其输入输出行为与底层正向函数 [28]高度相似。因此，这种低成本模型可作为替代表示，用于研究 $\mathcal{F}$ 的不确定性传播。

在（4.1）中，我们有 $u:\ \mathcal{D}\times S_{\boldsymbol{\xi}}\to\mathbb{R}$，其中 $S_{\boldsymbol{\xi}}:=\operatorname{supp}(\boldsymbol{\xi})$ 是 $\boldsymbol{\xi}$随机向量的支撑集。对于每个 $\boldsymbol{d}\in\mathcal{D}$固定的 $u,\ \boldsymbol{d};\ \boldsymbol{\xi}:\ (\Omega\ \mathcal{A})\to(\mathbb{R},\mathcal{B}_{\mathbb{R}})$ 表示由 $u(\boldsymbol{d};\boldsymbol{\xi})(\omega)=u(\boldsymbol{d},\boldsymbol{\xi}(\omega))$ 定义的随机变量。于是， $\{u(\boldsymbol{d};\ \boldsymbol{\xi})\}_{\boldsymbol{d}\in\mathcal{D}}$ 是一个随机过程，即以 $\boldsymbol{d}\in\mathcal{D}$ [8, 49] 为索引的一族随机变量。按照一种常见的记号滥用，我们可以将 $u(\boldsymbol{d};\ \boldsymbol{\xi})$ 写作 $\{u(\boldsymbol{d};\boldsymbol{\xi})\}_{\boldsymbol{d}\in\mathcal{D}}$

[2]要精确定义 $L^p(\Omega\ \mathcal{A},\ \mathbb{P})$，就 $1\le p<\infty$ 而言，需要引入一种等价关系：若 $f=g$ 几乎处处成立，则认为 f 与 g 等价。因此，从严格意义上说， $L^2(\Omega\ \mathcal{A},\ \mathbb{P})$由有限二阶矩的$(\Omega\ \mathcal{A})$-可测函数的 *equivalence classes* 组成。不过，我们遵循标准做法，将 L^2 的元素描述为函数，而非函数的等价类，并约定所有陈述和等式均几乎处处（a.e.）成立 [10, 53]。[3]根据 [10]中的描述，这可由Doob-Dynkin 引理推出。

当 $\boldsymbol{d} \in \mathcal{D}$ 未指定时。类似地，在指称（ u、 $u(\boldsymbol{d};\ \boldsymbol{\xi})$ 、和$\{u(\boldsymbol{d};\ \boldsymbol{\xi})\}_{\boldsymbol{d}\in\mathcal{D}}$ （4.1）的“解”时，我们也常将这些术语交替使用。

随机过程 $u(\boldsymbol{d};\boldsymbol{\xi})$ 的谱*Galerkin*表示有时也称为谱展开，[6, 26, 27, 37, 45, 49, 51, 56, 58] 旨在求得如下形式的级数展开

$$u(\boldsymbol{d};\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{N}_0^n} u_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{d})\Psi_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}) \tag{4.2}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \ldots\ldots, \alpha_n)$ 是多重指标（定义2.1），并假定按分级字典序排列（定义2.2）。在（4.2）中，

- 其中 $u_{\boldsymbol{\alpha}}:\ \mathcal{D} \to \mathbb{R}$ 是确定性系数函数，而
- the $\Psi_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})$ 是基泛函。

系数函数 u_i 也称为随机节点 [56, 58]。通过利用谱展开，随机性被有效地转移到基泛函上。也就是说，我们可以观察到， $\boldsymbol{d}$ 与随机 ξ 参数 $u(\boldsymbol{d};\ \xi)$ 的确定性参数在（4.2）的级数中实现了分离。

通常， $\Psi_{\boldsymbol{\alpha}}$ 式（4.2）中的泛函选为多项式，并且相对于 $\boldsymbol{\xi}$ 密度正交——也就是说，相对于式（3.1）所定义的内积正交——从而构成一个完备的希尔伯特基；正如 [10], 所阐明的，这种完备性对于谱表示的收敛至关重要。我们将在第4.2节进一步讨论这一点。

4.1. 维纳–埃尔米特多项式混沌。 Norbert Wiener 首先将高斯过程表示为厄米多项式的可数无穷级数 [55]。概率论家厄米多项式 $H_i \in C^\infty(\mathbb{R})$ 由公式 [34] 定义

$$H_i(x) = (-1)^i e^{x^2/2}\partial_x^i\left(e^{-x^2/2}\right). \tag{4.3}$$

前几个厄米多项式列于表2中。

我们沿用第3.1 节和3.2 节中的记号，并考虑 ξ 为单变量标准正态分布的特殊情形（其中“$\boldsymbol{\xi}$”写作“ξ”，因为 $n = 1$）。公式4.3表明

$$H_i(\xi) = (-1)^i\varphi^{-1}(\xi)\partial_\xi^i\left(\varphi(\xi)\right), \tag{4.4}$$

其中， $\varphi:\ (\mathbb{R},\ \mathcal{B}_{\mathbb{R}}) \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ 是 $\xi \sim \mathcal{N}(0,\ 1)$ 的密度。已知统计量 $H_i(\xi)$ 的一阶矩如下：

$$\langle H_i\rangle = \mathbb{E}_\xi(H_i(\xi)) = \delta_{i0}, \tag{4.5}$$

二阶矩（双重积）：

$$\langle H_i, H_j\rangle = \mathbb{E}_\xi(H_i(\xi)H_j(\xi)) = i!\delta_{ij}, \tag{4.6}$$

以及三阶矩（三重乘积</style）：

$$\begin{aligned}\langle H_i, H_j, H_k\rangle &= \mathbb{E}_\xi(H_i(\xi)H_j(\xi)H_k(\xi))\\ &= \begin{cases} 0 & \text{if } i+j+k \text{ is odd or } \max(i,j,k) > s\\ \frac{i!j!k!}{(s-i)!(s-j)!(s-k)!} & \text{else.}\end{cases}\end{aligned} \tag{4.7}$$

TABLE 2*The probabilist's Hermite polynomials* H_i *for* $i = 0,$ ……, 5。

i	$H_i(x)$
0	1
1	x
2	$x^2 - 1$
3	$x^3 - 3x$
4	$x^4 - 6x^2 + 3$
5	$x^5 - 10x^3 + 15x$

在（4.5）和（4.6）中，δ_{ij} 是克罗内克δ（当 $i = j$ 时等于 1，否则等于 0）。在（4.7）中，$s := (i + j + k)/2$ 当 $i,\ j,\ k \in \mathbb{N}_0$。

厄米多项式 $\{H_i(\xi)\}_{i=0}^{\infty}$ 构成了 $L^2(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ [10, 39]的完备正交基。双乘积公式（4.6）恰好体现了相对于标准正态密度的这一正交性。

Wiener 首先提出的谱展开，

$$u(\boldsymbol{d};\xi) = \sum_{i=0}^{\infty} u_i(\boldsymbol{d}) H_i(\xi), \tag{4.8}$$

称为*Wiener-Askey*混沌、*Wiener-Hermite*级数、多项式混沌展开（PCE），或简称为混沌展开 [24, 37, 39, 49, 56]。在本文中，多项式混沌展开或（经典）*PCE*将指由（4.8）给出的表示。

将截断多项式混沌展开定义为

$$S_M(u(\boldsymbol{d};\xi)) := \sum_{k=0}^{M} u_k(\boldsymbol{d}) H_k(\xi), \tag{4.9}$$

它是 u 在空间 $\mathcal{P}_M(\xi)$ 上的投影，其中该空间由 ξ 中次数不超过 M [49] 的所有多项式构成。若 $\{u(\boldsymbol{d};\xi)\}_{d\in\mathcal{D}}$ 是一个二阶随机过程，即对于所有 $\boldsymbol{d} \in \mathcal{D}$，$u(\boldsymbol{d};\xi) \in L^2(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$，则 Cameron-Martin定理[4] 指出，多项式混沌展开在均方意义下收敛；[5] 也就是说，对于每个固定的 $\boldsymbol{d} \in \mathcal{D}$，

$$S_M(u(\boldsymbol{d};\xi)) \xrightarrow[L^2]{M\to\infty} u(\boldsymbol{d};\xi). \tag{4.10}$$

这为多项式混沌展开及其截断为有限项以便计算提供了依据；Ghanem 和 Spanos [14] 最初在随机有限元法中考虑了这一做法。

[4]Cameron 和 Martin 的原始论证 [4] 是在 $L^2(\mathcal{C})$ 的背景下进行的，其中 $\mathcal{C} = \{x \in C[0,1] \mid x(0) = 0\}$；然而，后来该定理在希尔伯特空间 $L^2(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ [10, 21] 上得到了一般性的证明。[5]注意，公式 4.10 并没有直接说明，作为随机 *process* 的 $S_M(u(\boldsymbol{d};\xi))$ 收敛于随机过程 $u(\boldsymbol{d};\xi)$；相反，均方收敛指的是：在某个 $\boldsymbol{d} \in \mathcal{D}$ 处，作为 *randomvariable* 的 S_M 收敛于随机变量 $u(\boldsymbol{d};\xi)$，其中索引保持为同一个固定但任意的 $\boldsymbol{d}$。

4.2. 无变换方法。已经有若干种变换 -
用于处理任意相关高斯随机变量的自由方法。使用Gram–Schmidt正交化 [15], Navarro等人讨论了针对相关变量，使用多元正交多项式构造多项式混沌展开 [30]。然而，多元厄米特正交多项式的存在性尚未得到认可；这类多项式可作为相关高斯测度的基 [39]。Soize和Ghanem针对随机输入的一般相关概率测度提出了正交函数基，但这些基元素不一定是 多项式 [51]；因此，在这种情况下对基于多项式混沌展开的统计量进行解析处理极其困难 [49]。此外，Navarro和Soize/Ghanem的工作都没有涉及Ernst等人提出的关于其正交基函数完备性的 根本性 问题；研究表明，完备性是收敛的必要条件 [10, 39]。

2017年，Rahman构造了一个由 弱 正交（定义见式 5.4）基泛函组成的多项式混沌展开，该展开与高斯测度一致，并已证明其在均方、概率和分布意义下收敛到正确的极限 [39]。我们将这一系列展开称为 相关多元 *PCE* （或CPCE）[6] ，并在本文其余部分始终专门使用这一称谓。

5. 相关多元 Hermite 多项式。与第 3.1 小节一样，设 $(\Omega\ \mathcal{A}, \mathbb{P})$ 为一个完备概率空间。设 $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$ 为一个 n 维随机变量，其对称正定协方差矩阵 $\Sigma = \mathbb{E}(\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}^T)$ 已知。也就是说， $\boldsymbol{\xi} : (\Omega\ \mathcal{A}) \to (\mathbb{R}^n, \mathcal{B}_{\mathbb{R}^n})$，其中 $\mathcal{B}_{\mathbb{R}^n}$ 是 $\mathbb{R}^n$ 上的 Borel σ-代数。则 $\boldsymbol{\xi}$ 具有联合概率密度函数 [31, 39, 56],

$$\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}_{\geq 0} \qquad \varphi(\boldsymbol{x}; \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\det(\Sigma)|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \Sigma^{-1} \boldsymbol{x}\right). \tag{5.1}$$

下述多元 Hermite 多项式的定义，是对式（4.4）给出的单变量对应定义的自然推广。

DEFINITION 5.1（多元 Hermite 多项式）。设 $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma)$ 满足$\Sigma \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 为对称正定（*SPD*），其联合密度函数由式 *5.1*给出。则对任意 n维多重指标 $\boldsymbol{\alpha}$，以 $\boldsymbol{\alpha}$ 为指标的多元Hermite多项式 $H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}; \Sigma)$ 是 $\boldsymbol{\xi}$ 中次数为 $|\boldsymbol{\alpha}|$ 的多项式，定义如下：

$$H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}; \Sigma) = \begin{cases} \frac{(-1)^{|\boldsymbol{\alpha}|}}{\varphi(\boldsymbol{\xi}; \Sigma)} \partial^{\boldsymbol{\alpha}}(\varphi(\boldsymbol{\xi}; \Sigma)) & \text{if } |\boldsymbol{\alpha}| \geq 1 \\ 1 & \text{if } |\boldsymbol{\alpha}| = 0. \end{cases}$$

我们通常将多元*Hermite*多项式缩写为 *MHP*。

由于每个 $H_{\boldsymbol{\alpha}}$ 都是 $|\boldsymbol{\alpha}|$阶多项式,

$$\partial^{\boldsymbol{\beta}}(H_{\boldsymbol{\alpha}}) = 0 \qquad \text{whenever } |\boldsymbol{\alpha}| < |\boldsymbol{\beta}| \tag{5.2}$$

对于 $\boldsymbol{\alpha}$，$\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{N}_0^n$. 方程（5.2）将在后续章节中发挥作用。

图 1 以图形方式展示了给定 2×2 协方差矩阵下的前六个多元厄米多项式。

[6]在 [39], 中，Rahman 将所引入的相关高斯变量的可数无穷PC级数称为 *generalized PCE*。然而，鉴于短语 *generalizedPCE*（gPCE）通常指的是 Xiu 和 Karniadakis 于2002年首次针对非高斯随机变量提出的单变量PC展开 [56, 58]，这种表述可能会引起混淆；参见 [23]中的讨论。

多元厄米多项式的一阶矩为

$$\mathbb{E}(H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})) = \begin{cases} 1 & \text{if } \boldsymbol{\alpha} = (0,\dots,0) \\ 0 & \text{else,} \end{cases} \tag{5.3}$$

如 [39]. 所确立的

对于二阶矩，Dunkl 和 Xu [9] 首先证明了

$$\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}} \rangle = \mathbb{E}(H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}) H_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\xi})) = \int H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{x}) H_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{x}) \varphi(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} = 0 \quad \text{if } |\boldsymbol{\alpha}| \neq |\boldsymbol{\beta}|, \tag{5.4}$$

这里回顾一下，双重乘积记号 $\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}} \rangle$ 由定义 3.1引入。Rahman [39]将条件（5.4）在多项式混沌的背景下命名为 弱正交性。

根据弱正交性的定义， $H_{\boldsymbol{\alpha}}$ 与所有不同阶的 MHP 正交，但不一定与同 $|\boldsymbol{\alpha}|$阶的其他 MHP 正交；事实上，大多数同阶的多重指标都会产生不正交的 MHP，因此需要明确引入双乘积公式 [39, 25]。

对于给定的 n 和 $|\boldsymbol{\alpha}| = M$，恰好有 $\binom{M+n-1}{n-1}$ 个可能的 $\boldsymbol{\beta}$，使得$|\boldsymbol{\alpha}| = |\boldsymbol{\beta}|$。[7]

当 Σ 为对角矩阵时，众所周知 [11, 37, 45, 49, 56]，我们可以将任意 $H_{\boldsymbol{\alpha}}$ 分解为一元厄米特多项式的乘积：

$$H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}) = \prod_{i=1}^{n} H_{\alpha_i}(\xi_i) \quad \text{for } \boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \operatorname{diag}(\Sigma_{11}, \dots, \Sigma_{nn})). \tag{5.5}$$

公式 5.5 直接源于概率密度函数 φ 将 $\boldsymbol{\xi}$ 分解为边缘密度的乘积 φ_i ，其中每个 ξ_i 随机变量在 $\boldsymbol{\xi}$ 具有不相关分量时成立。这就是通过对一元正交多项式进行张量化来构造多元正交多项式的含义。此外，在这种情况下， $\{H_{\boldsymbol{\alpha}}\}$ 是 正交的（而不仅仅是弱正交的），因为

$$\begin{aligned} \langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}} \rangle &= \int H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{x}) H_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{x}) \varphi(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} = \int \prod_{i=1}^{n} H_{\alpha_i}(x_i) H_{\beta_i}(x_i) \varphi_i(x_i) dx_i \\ &= \prod_{i=1}^{n} \int H_{\alpha_i}(x_i) H_{\beta_i}(x_i) \varphi(x_i) dx_i = \prod_{i=1}^{n} \langle H_{\alpha_i}, H_{\beta_i} \rangle = \boldsymbol{\alpha}! \, \delta_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} \end{aligned}$$

其中我们应用了富比尼定理 [8, 44] 以及一维H_{α_i}多项式的正交性（公式 4.6）。当 $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, I)$时，我们还可以观察到

$$H_{(0,0)} = 1, \qquad H_{(1,0)}(\xi_1, \xi_2) = \xi_1, \qquad H_{(2,0)}(\xi_1, \xi_2) = \xi_1^2 - 1, \qquad \dots$$

与表 2中的一维多项式相匹配。

6. 相关高斯变量的多项式混沌。 多元厄米多项式作为 Rahman [39] 建立的相关高斯变量多元多项式混沌展开中的基多项式。具体而言，我们考虑以下谱级数。

[7]这可由标准的 *stars and bars* 计数论证 [52, 第1节2]得出。

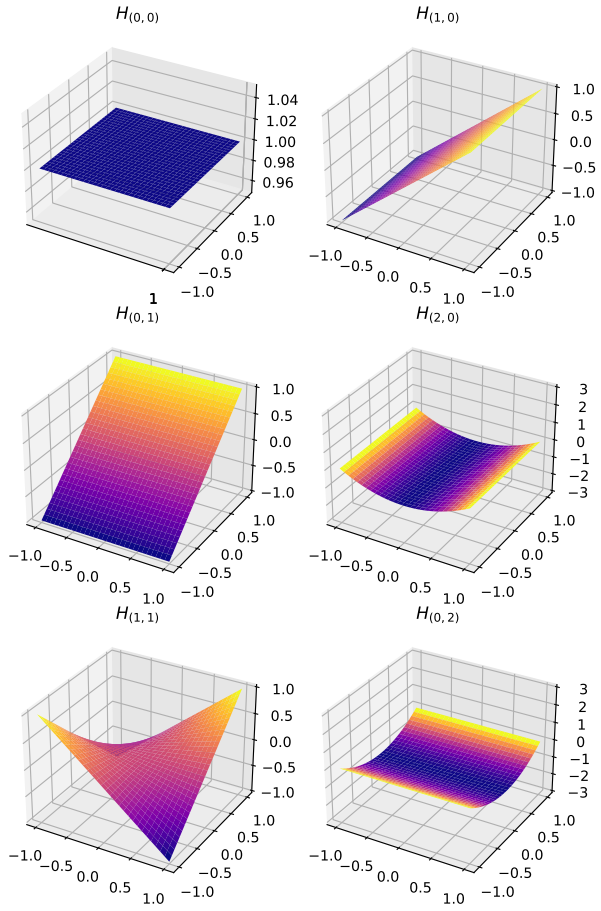

FIG. 1. *Multivariate Hermite polynomials* $H_{\boldsymbol{\alpha}}$ ξ_1 ξ_2 *for* $|\boldsymbol{\alpha}| \leq 2$ *where* $\xi_1 = \xi_2 = 1$(,) , Var( ) Var() Cov(,) *and* ξ_1 $\xi_2 = 1/2$.

DEFINITION 6.1（相关多元多项式混沌展开）。设 $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma)$ 和 $y(\boldsymbol{\xi})$ 是定义在同一完备概率空间 $(\Omega\ \mathcal{A}, \mathbb{P})$ 上的实值输出随机变量。若 $y(\boldsymbol{\xi}) \in L^2(\Omega\ \mathcal{A}, \mathbb{P})$ （即，若 $y(\boldsymbol{\xi})$ 是 平方可积的），则我们可以通过 相关多元多项式混沌展开将 $y(\boldsymbol{\xi})$ 表示为

$$y(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{N}_0^n} y_{\boldsymbol{\alpha}} H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}).$$

定义 6.1推广了 多元 PC 展开的先前概念，引入了基泛函 $H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})$，其公式包含 $\boldsymbol{\xi}$的协方差矩阵的非对角元素。[8] 下文中，我们有时将定义6.1 中的级数称为相关多元 *PCE*、相关 *PCE*或简称为*CPCE* 。提及具有相互独立的 高斯参数的多元 PCE 时，我们将使用经典 *PCE*这一术语。

[8]因此，Rahman 在其原论文中将定义 6.1 称为 *generalized PCE* [39]。而我们改用名称 *correlated PC Expansion*或 *CPCE*，以避免与 *generalizedPCE* 这一由 Xiu 和 Karniadakis 创造的术语混淆， [56, 58], 该级数仍然需要独立随机输入，但能够处理非高斯变量。

当截断到某个 M 值时，我们可以定义

$$y^{(M)}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\substack{\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{N}_0^n \\ |\boldsymbol{\alpha}|\le M}} y_{\boldsymbol{\alpha}}^{(M)} H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}), \tag{6.1}$$

它是对 y 空间 $P_M(\boldsymbol{\xi}$的投影，该空间由 M中的所有次数不超过 n的多项式构成，其中涉及随机变量 $\xi_1,\dots,\xi_n$[49]。

那么， $y^{(M)}(\boldsymbol{\xi})$ 在均方意义、概率意义和分布意义上收敛于真实的 $y(\boldsymbol{\xi})$ [39]。随机节点 $y_{\boldsymbol{\alpha}}^{(M)}$带有上标 (M)，表示它们是确定性 M 系统的解，因此依赖于 M (但在定义 6.1 中，当$y_{\boldsymbol{\alpha}}$ 时，它们会收敛于真实的6.1 ，其中 $M\to\infty$)。

截断 CPCE（6.1）中的术语数量与不相关高斯变量的经典 PCE 相同——唯一的区别是，基函数 $H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})$ 现在包含额外的（可能非零）项，其系数是 Σ. 的非对角元素。也就是说，（ n_M （6.1）中的术语总数为

$$n_M := \big|\{\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{N}_0^n \mid 0\le|\boldsymbol{\alpha}|\le M\}\big| = \frac{(M+n)!}{M!n!} = \binom{M+n}{n}, \tag{6.2}$$

正如文献中广泛指出的那样 [37, 45, 49, 56, 58]。因此，我们可以看到，相关多项式混沌也面临着与非相关情形相同的维数灾难，也就是说，随着维数增加，展开项的数量呈组合式增长 [6, 49, 56]。

因此，我们回到求解方程（4.1），此处我们现在假设参数向量服从正态分布：

$$\mathcal{F}(u,\boldsymbol{d};\boldsymbol{\xi}) = 0, \qquad \boldsymbol{d}\in\mathcal{D}\subset\mathbb{R}^p,\ \boldsymbol{\xi}\sim\mathcal{N}(\mathbf{0},\Sigma). \tag{6.3}$$

若对于每个 $\boldsymbol{d}\in\mathcal{D}$， $u(\boldsymbol{d};\boldsymbol{\xi})\in L^2(\Omega\ \mathcal{A},\mathbb{P})$，则我们可以使用截断 CPCE 近似 $u(\boldsymbol{d};\ \boldsymbol{\xi})$:

$$u(\boldsymbol{d};\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{N}_0^n} u_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{d}) H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}) \tag{6.4}$$

其中， $\Psi_{\boldsymbol{\alpha}}$ 式（4.1）中的基泛函现选为多元厄米特多项式（定义 5.1）。

7. 应用示例：逻辑斯蒂增长建模。考虑以下 Hutchinson 方程 [38]，的随机变体，该方程用于描述具有时间滞后的种群增长，

$$\partial_t X(t;\boldsymbol{\xi}) = r(\boldsymbol{\xi})X(t;\boldsymbol{\xi})\big[1-KX(t-\tau;\boldsymbol{\xi})\big] \tag{7.1}$$

$$X(t;\boldsymbol{\xi}) = 0 \text{ for } t\le 0. \tag{7.2}$$

在公式（7.1）中，

- 解 $X(t;\boldsymbol{\xi})$ 表示时间 t 的种群规模，
- $r(\boldsymbol{\xi})$ 是随机增长率（其取值为实数，且可能为负），

- $\tau>0$ 是常数离散时滞，并且
- $K>0$ 是常数承载能力。

我们假设 $X(t;\boldsymbol{\xi})\ r(\boldsymbol{\xi}) \in L^2(\Omega\ \mathcal{A},\mathbb{P})$，并且 $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}_n, \Sigma)$，其中已知对称正定协方差矩阵为 $\Sigma \in \mathbb{R}^{n\times n}$。给定截断参数 $M \geq 0$，截断 CPCE 为

$$X(t;\boldsymbol{\xi}) \approx \sum_{|\boldsymbol{i}|\leq M} x_{\boldsymbol{i}}(t) H_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{\xi})$$
$$r(\boldsymbol{\xi}) \approx \sum_{|\boldsymbol{i}|\leq M} r_i H_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{\xi})$$

将这些近似代入公式（7.1），得到

$$\sum_{|\boldsymbol{i}|\leq M} \partial_t x_{\boldsymbol{i}}(t) H_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{|\boldsymbol{i}|,|\boldsymbol{j}|\leq M} r_{\boldsymbol{i}} x_{\boldsymbol{j}}(t) H_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{\xi}) H_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{\xi}) - K \sum_{|\boldsymbol{i}|,|\boldsymbol{j}|,|\boldsymbol{k}|\leq M} r_{\boldsymbol{i}} x_{\boldsymbol{j}}(t) x_{\boldsymbol{k}}(t-\tau) H_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{\xi}) H_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{\xi}) H_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{\xi}).$$

我们将两边乘以 $H_{\boldsymbol{\ell}}$，其中 $\boldsymbol{\ell} \in \mathbb{N}_0^n$固定但任意，然后$0 \leq |\boldsymbol{\ell}| \leq M$进行积分（即 Galerkin 投影步骤）。于是得到确定性偏微分方程组

(7.3)
$$\begin{cases} \sum_{|\boldsymbol{i}|=|\boldsymbol{\ell}|} \partial_t x_{\boldsymbol{i}}(t) \langle H_{\boldsymbol{i}}, H_{\boldsymbol{\ell}} \rangle & = \sum_{|\boldsymbol{i}|,|\boldsymbol{j}|\leq M} r_{\boldsymbol{i}} x_{\boldsymbol{j}}(t) \langle H_{\boldsymbol{i}}, H_{\boldsymbol{j}}, H_{\boldsymbol{\ell}} \rangle \\ & \quad -K \sum_{|\boldsymbol{i}|,|\boldsymbol{j}|,|\boldsymbol{k}|\leq M} r_{\boldsymbol{i}} x_{\boldsymbol{j}}(t) x_{\boldsymbol{k}}(t-\tau) \langle H_{\boldsymbol{i}}, H_{\boldsymbol{j}}, H_{\boldsymbol{k}}, H_{\boldsymbol{\ell}} \rangle \end{cases}$$

对于 $0 \leq |\boldsymbol{\ell}| \leq M$. 请注意，在左侧（7.3）的求和中，我们利用弱正交性消去了 $\boldsymbol{i}$，使得 $|\boldsymbol{i}| \neq |\boldsymbol{\ell}|$。

我们很容易看出，为了表示（进而求解）上述偏微分方程组，需要计算大量的二重、三重和四重乘积系数。以下给出一些具体示例。

- 假设 $M = 2$ 且 $n = 2$。那么（7.3）中的偏微分方程组共有 $\binom{M+n}{n}$= 6 个方程（根据公式6.2），每个 $\boldsymbol{\ell}$值对应一个方程。在每个方程中，对满足 $\boldsymbol{i}$ 的 $|\boldsymbol{i}| = |\boldsymbol{\ell}|$ 求和会有 $\binom{M+n-1}{n-1}$ =3 项。对 $0 \leq |\boldsymbol{i}|,\ |\boldsymbol{j}| \leq M$ 求和最多有 12 个非零项；对 $0 \leq |\boldsymbol{i}|,\ |\boldsymbol{j}|,\ |\boldsymbol{\ell}| \leq M$求和最多有 18 个非零项。因此，每个方程最多包含 $3+12+18 = 33$ N阶乘积。由于总共有 6 个方程，因此最多需要计算 $33 \times 6 = 189$ 个系数。
- 假设 $M = 2$ 并且 $n = 3$。那么，（7.3）中的偏微分方程组总共有 $\binom{M+n}{n} =$ 10个方程。在每个方程中，对满足 $\boldsymbol{i}$ 的$|\boldsymbol{i}| = |\boldsymbol{\ell}|$ 求和将有 $\binom{M+n-1}{n-1} = 6$ 项。对 $0 \leq |\boldsymbol{i}|$、$|\boldsymbol{j}| \leq M$ 的求和至多给出20项，而对 $0 \leq |\boldsymbol{i}|$、$|\boldsymbol{j}|$、$|\boldsymbol{\ell}| \leq M$ 的求和至多给出30个非零项。
- 因此，每个方程最多有 $6 + 20 + 30 = 56$ N个乘积，并且由于总共有10个方程，这意味着需要计算的系数数量上限为560个。

因此，我们可以看到，通过蒙特卡洛采样估计每个单独的 N阶乘积系数可能会很快变得成本高昂，尤其是在每次单独的评估都需要（比如说）数分钟的情况下。因此，对于 N阶乘积拥有一个闭式方程，有望显著减少SGS中由维数灾难导致的总计算时间。

8. 多元厄米多项式的公式。本节概述了此前建立的多元厄米多项式及其导数的分解 [23]。具体而言，第 9 节将其与定理 B.1（在B 节中证明）相结合，以得到 N阶乘积递推公式。为简化记号，我们有时会省略 MHP 的自变量 $\boldsymbol{\xi}$，并且涉及 MHP 的所有期望均依据 $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0},\ \Sigma)$ 的分布计算。

在 [25]，中，我们确立了以下结果。

我们首先将一个由指标和索引的 MHP 改写为有限个低阶厄米特多项式与某些偏导数的乘积之和。

LEMMA 8.1（指标和公式 [23]）。设 $\boldsymbol{\alpha},\ \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{N}_0^n$. 则

$$H_{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}} = \sum_{\boldsymbol{q} \le \boldsymbol{\alpha}} (-1)^{|\boldsymbol{q}|} \binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{q}} H_{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{q}}\, \partial^{\boldsymbol{q}}(H_{\boldsymbol{\beta}}).$$

THEOREM 8.2（MHP 的高阶导数 [23]）。设 $\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{N}_0^n$ 使得$|\boldsymbol{A}| \le |\boldsymbol{\beta}|$. 则

$$\partial^{\boldsymbol{A}}(H_{\boldsymbol{\beta}}) = \sum_{\substack{\boldsymbol{B} \le \boldsymbol{\beta} \\ |\boldsymbol{B}| = |\boldsymbol{A}|}} \binom{\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{B}} \langle H_{\boldsymbol{A}}, H_{\boldsymbol{B}} \rangle\, H_{\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{B}}.$$

定理 8.2 还有助于解决一个技术性且微妙的遗留问题。此前，定理 8.2 确立了 $|\boldsymbol{\alpha}| = |\boldsymbol{\beta}|$ 蕴含 $\mathbb{E}(\partial^{\boldsymbol{\alpha}} H_{\boldsymbol{\beta}}) = \langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}} \rangle$. 。事实证明，一般而言，$\mathbb{E}(\partial^{\boldsymbol{\alpha}} H_{\boldsymbol{\beta}}) = \langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}} \rangle$，也就是说，即使 $|\boldsymbol{\alpha}| \neq |\boldsymbol{\beta}|$. ，情况也是如此。根据 [39]，，我们当然知道，当 $|\boldsymbol{\alpha}| \neq |\boldsymbol{\beta}|$ 时，$\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}} \rangle = 0$ 。通过证明当 $|\boldsymbol{\alpha}| \neq |\boldsymbol{\beta}|$ 时，$\mathbb{E}(\partial^{\boldsymbol{\alpha}} H_{\boldsymbol{\beta}}) = 0$，我们便证明了对于任意 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{N}_0^n$.，$\mathbb{E}(\partial^{\boldsymbol{\alpha}} H_{\boldsymbol{\beta}}) = \langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}} \rangle$。

显然，当 $|\boldsymbol{\alpha}| > |\boldsymbol{\beta}|$ 时，$H_{\boldsymbol{\beta}}$ 是一个 $|\boldsymbol{\beta}|$ 阶多项式，即 (5.2)；因此，在这种情况下，$\mathbb{E}(\partial^{\boldsymbol{\alpha}} H_{\boldsymbol{\beta}}) = 0$ 。当 $|\boldsymbol{\alpha}| < |\boldsymbol{\beta}|$ 时，定理 8.2 给出的各项都包含 $\mathbb{E}(H_{\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{B}})$，且 $\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{B} \neq \mathbf{0}$（因为 $|\boldsymbol{B}| = |\boldsymbol{\alpha}| < |\boldsymbol{\beta}|$）；因此，在这种情况下我们也有 $\partial^{\boldsymbol{\alpha}}(H_{\boldsymbol{\beta}}) = 0$ 。因此，一般导数公式（定理 8.2）表明，对于任意多重指标 $\boldsymbol{\alpha}$、$\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{N}_0^n$.，$\mathbb{E}(\partial^{\boldsymbol{\alpha}} H_{\boldsymbol{\beta}}) = \langle H_{\boldsymbol{\alpha}},\ H_{\boldsymbol{\beta}} \rangle$

9. 第 N 个乘积公式。

THEOREM 9.1（N 阶乘积）。令 $\boldsymbol{\alpha},\ \boldsymbol{\beta},\ \boldsymbol{\gamma}^{(1)},\ \ldots\ldots,\ \boldsymbol{\gamma}^{(N-2)} \in \mathbb{N}_0^n$使得 $3 \le N < \infty$且 $|\boldsymbol{\alpha}| \le |\boldsymbol{\beta}| \le |\boldsymbol{\gamma}^{(1)}| \le \cdots \le |\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}|$。则

$$\begin{aligned}
&\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}, \ldots, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}} \rangle \\
&= \sum_{\boldsymbol{A} \le \boldsymbol{\alpha}} \sum_{\substack{\boldsymbol{B} \le \boldsymbol{\beta} \\ |\boldsymbol{B}| = |\boldsymbol{A}|}} \binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{A}} \binom{\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{B}} \langle H_{\boldsymbol{A}}, H_{\boldsymbol{B}} \rangle \langle H_{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}, \ldots, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}} \rangle.
\end{aligned}$$

证明。 注意到

$$\begin{aligned}
&\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}, \ldots, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}} \rangle \\
&= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}[\partial^{\boldsymbol{\alpha}}(H_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\xi}) H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}(\boldsymbol{\xi}) \cdots H_{\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}}(\boldsymbol{\xi}))] && \text{[Corollary B.2]} \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \partial^{\boldsymbol{\alpha}}(H_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{x}) H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}(\boldsymbol{x}) \cdots H_{\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}}(\boldsymbol{x})) \varphi(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} \\
&= \sum_{\boldsymbol{A} \le \boldsymbol{\alpha}} \binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{A}} \int \partial^{\boldsymbol{A}}(H_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{x})) \partial^{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{A}}(\textstyle\prod_{i=1}^{N-2} H_{\boldsymbol{\gamma}^{(i)}}(\boldsymbol{x})) \varphi(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} && \text{[Eq. 2.1]} \\
&= \sum_{\boldsymbol{A} \le \boldsymbol{\alpha}} \sum_{\substack{\boldsymbol{B} \le \boldsymbol{\beta} \\ |\boldsymbol{B}| = |\boldsymbol{A}|}} \binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{A}} \binom{\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{B}} \langle H_{\boldsymbol{A}}, H_{\boldsymbol{B}} \rangle \int H_{\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{B}}(\boldsymbol{x})\, \partial^{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{A}} \left(\textstyle\prod_{i=1}^{N-2} H_{\boldsymbol{\gamma}^{(i)}}(\boldsymbol{x}) \right) \varphi(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x}
\end{aligned}$$

其中最后一个等式由定理 8.2得出。继续计算,

$$\begin{aligned}
&\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}, \dots, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}}\rangle \\
&= \sum_{\boldsymbol{A}\le\boldsymbol{\alpha}} \sum_{\substack{\boldsymbol{B}\le\boldsymbol{\beta}\\ |\boldsymbol{B}|=|\boldsymbol{A}|}} \binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{A}}\binom{\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{B}} \langle H_{\boldsymbol{A}}, H_{\boldsymbol{B}}\rangle\, \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}[H_{\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{B}}(\boldsymbol{\xi})\partial^{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{A}}(\textstyle\prod_{i=1}^{N-2} H_{\boldsymbol{\gamma}^{(i)}}(\boldsymbol{\xi}))] \\
&= \sum_{\boldsymbol{A}\le\boldsymbol{\alpha}} \sum_{\substack{\boldsymbol{B}\le\boldsymbol{\beta}\\ |\boldsymbol{B}|=|\boldsymbol{A}|}} \binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{A}}\binom{\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{B}} \langle H_{\boldsymbol{A}}, H_{\boldsymbol{B}}\rangle\, \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}\left[\partial^{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}}(\textstyle\prod_{i=1}^{N-2} H_{\boldsymbol{\gamma}^{(i)}}(\boldsymbol{\xi}))\right] \qquad \text{[Thm. B.1]} \\
&= \sum_{\boldsymbol{A}\le\boldsymbol{\alpha}} \sum_{\substack{\boldsymbol{B}\le\boldsymbol{\beta}\\ |\boldsymbol{B}|=|\boldsymbol{A}|}} \binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{A}}\binom{\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{B}} \langle H_{\boldsymbol{A}}, H_{\boldsymbol{B}}\rangle \langle H_{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}, \dots, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}}\rangle. \qquad \text{[Corollary B.2]}
\end{aligned}$$

定理 B.1 可以应用于上述倒数第二个等式，因为引理 A.3 确保 $\partial^{\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{A}}(\prod_{i=1}^{N-2} H_{\boldsymbol{\gamma}^{(i)}}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$。 □

COROLLARY 9.2（ N阶乘积的零点）。设 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\gamma}^{(1)}$, ..., $\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)} \in \mathbb{N}_0^n$使得 $3 \le N < \infty$且 $|\boldsymbol{\alpha}| \le |\boldsymbol{\beta}| \le |\boldsymbol{\gamma}^{(1)}| \le \cdots \le |\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}|$。如果

$$\text{for } N > 3, \qquad |\boldsymbol{\alpha}| + |\boldsymbol{\beta}| + |\boldsymbol{\gamma}^{(1)}| + \cdots + |\boldsymbol{\gamma}^{(N-3)}| < |\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}|$$

or

$$\text{for } N = 3, \qquad |\boldsymbol{\alpha}| + |\boldsymbol{\beta}| < |\boldsymbol{\gamma}^{(1)}|$$

则 $\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}、 H_{\boldsymbol{\beta}}、 H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}、 \dots..、 H_{\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}}\rangle = 0.$

证明。 我们可以通过两种方式之一得到这一结果：直接应用推论 B.2，或者使用上述定理 9.1 中的公式，然后将推论 B.2 应用于求和中的每一项。对于前一种方式，推论 B.2 给出 [9]

$$\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}, \dots, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}}\rangle = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}\left(\partial^{\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}}\left(H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})H_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\xi})\textstyle\prod_{i=1}^{N-3} H_{\boldsymbol{\gamma}^{(i)}}(\boldsymbol{\xi})\right)\right). \tag{9.1}$$

不过，请注意，$H_{\boldsymbol{\alpha}}H_{\boldsymbol{\beta}}\prod_{i=1}^{N-3} H_{\boldsymbol{\gamma}^{(i)}}$ 是 $|\boldsymbol{\alpha}| + |\boldsymbol{\beta}| + |\boldsymbol{\gamma}^{(1)}|$ +阶多项式 $\cdots + |\boldsymbol{\gamma}^{(N-3)}|$。因此，使用多重指标 $\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}$ 进行微分，其中 $|\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}| > |\boldsymbol{\alpha}| + |\boldsymbol{\beta}| + |\boldsymbol{\gamma}^{(1)}| + \cdots + |\boldsymbol{\gamma}^{(N-3)}|$，得到关于 $\boldsymbol{\xi}$ 的零多项式，其期望值也为零。

或者，我们可以使用定理 N9.1 中关于 阶乘积的公式。在这种情况下，我们应用刚才给出的相同论证（通过推论 B.2）来证明每一项都含有因子

$$\langle H_{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}, \dots, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(N-2)}}\rangle = 0.$$ □

9.1. 四重乘积计算示例。

EXAMPLE 9.3. 对于 $n = 3$, 令 $\boldsymbol{\alpha} =$（1、0、2） $\boldsymbol{\beta} =$（3、1、0），以及 $\boldsymbol{\gamma} =$（1、2、2）。于是$|\boldsymbol{\alpha}| = 3$、 $|\boldsymbol{\beta}| = 4$和 $|\boldsymbol{\gamma}| = 5$，因此我们无法根据大小或奇偶性的条件来断定三重乘积为零。在这种情况下， $k := \frac{|\boldsymbol{\alpha}|+|\boldsymbol{\beta}|-|\boldsymbol{\gamma}|}{2} = 1.$ ————

我们需要找到 $\boldsymbol{A} \le \boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{B} \le \boldsymbol{\beta}$，使得 $|\boldsymbol{A}| = |\boldsymbol{B}| = 1$，因此选项为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{e_1}$、 $\boldsymbol{e_3}$ 和 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{e_1}$、$\boldsymbol{e_2}$. 。相应的项计算结果列于表 3。

[9]请注意，如果 $N = 3$，我们将（9.1）中的乘积视为空乘积（因此等于 1），这意味着我们有 $\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}\rangle = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}\left(\partial^{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}\left(H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})H_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\xi})\right)\right)$.

TABLE 3 *Terms of the triple product formula for* $\boldsymbol{\alpha}=(1,0,2)$ $\boldsymbol{\beta}=(3,1,0)$ *and* $\boldsymbol{\gamma}=(1,2,2)$.

$\boldsymbol{A}$	$\boldsymbol{B}$	$\binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{A}}$	$\binom{\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{B}}$	$\langle H_{\boldsymbol{A}}, H_{\boldsymbol{B}}\rangle$	$H_{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}}$	Term
$\boldsymbol{e_1}$	$\boldsymbol{e_1}$	1	3	Σ_{11}^{-1}	$H_{(2,1,2)}$	$3\Sigma_{11}^{-1}\langle H_{(2,1,2)}, H_{\boldsymbol{\gamma}}\rangle$
$\boldsymbol{e_1}$	$\boldsymbol{e_2}$	1	1	Σ_{12}^{-1}	$H_{(3,0,2)}$	$\Sigma_{12}^{-1}\langle H_{(3,0,2)}, H_{\boldsymbol{\gamma}}\rangle$
$\boldsymbol{e_3}$	$\boldsymbol{e_1}$	2	3	Σ_{13}^{-1}	$H_{(3,1,1)}$	$6\Sigma_{13}^{-1}\langle H_{(3,1,1)}, H_{\boldsymbol{\gamma}}\rangle$
$\boldsymbol{e_3}$	$\boldsymbol{e_2}$	2	1	Σ_{23}^{-1}	$H_{(4,0,1)}$	$2\Sigma_{23}^{-1}\langle H_{(4,0,1)}, H_{\boldsymbol{\gamma}}\rangle$

因此，

$$\begin{aligned}\langle H_{(1,0,2)}, H_{(3,1,0)}, H_{(1,2,2)}\rangle &= \sum_{\substack{\boldsymbol{A}\le(1,0,2)\\ \boldsymbol{B}\le(3,1,0)\\ |\boldsymbol{A}|=|\boldsymbol{B}|=1}} \binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{A}}\binom{\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{B}}\langle H_{\boldsymbol{A}}, H_{\boldsymbol{B}}\rangle\langle H_{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}}, H_{\boldsymbol{\gamma}}\rangle \\ &= 3\Sigma_{11}^{-1}\langle H_{(2,1,2)}, H_{(1,2,2)}\rangle + \Sigma_{12}^{-1}\langle H_{(3,0,2)}, H_{(1,2,2)}\rangle \\ &\quad + 6\Sigma_{13}^{-1}\langle H_{(3,1,1)}, H_{(1,2,2)}\rangle + 2\Sigma_{23}^{-1}\langle H_{(4,0,1)}, H_{(1,2,2)}\rangle.\end{aligned}$$

EXAMPLE 9。*4.* 对于 $n=4$，令 $\boldsymbol{\alpha}=(1,0,0,1)$ $\boldsymbol{\beta}=(0,2,1,0)$、$\boldsymbol{\gamma}^{(1)}=(0,1,1,1)$ 以及 $\boldsymbol{\gamma}^{(2)}=(1,3,2,3)$。则 $|\boldsymbol{\alpha}|=2$、$|\boldsymbol{\beta}|=3$、$|\boldsymbol{\gamma}^{(1)}|=3$ 和 $|\boldsymbol{\gamma}^{(2)}|=9$，因此 $|\boldsymbol{\alpha}|+|\boldsymbol{\beta}|+|\boldsymbol{\gamma}^{(1)}|<|\boldsymbol{\gamma}^{(2)}|$. 我们得出推论 *9.2*：$\langle H_{(1,0,0,1)}$、$H_{(0,2,1,0)}$、$H_{(0,1,1,1)}$、$H_{(1,3,2,3)}\rangle=0$。

EXAMPLE 9.5. 对于 $n=2$，令 $\boldsymbol{\alpha}=(1,0)$、$\boldsymbol{\beta}=(1,1)$、$\boldsymbol{\gamma}^{(1)}=(1,1)$以及 $\boldsymbol{\gamma}^{(2)}=(3,2)$。则 $|\boldsymbol{\alpha}|+|\boldsymbol{\beta}|+|\boldsymbol{\gamma}^{(1)}|=|\boldsymbol{\gamma}^{(2)}|$，因此我们不能立即应用推论 *9.2* 得出四重乘积为零的结论。根据定理 *9.1*，

$$\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(2)}}\rangle = \sum_{\boldsymbol{A}\le(1,0)}\sum_{\substack{\boldsymbol{B}\le(1,1)\\ |\boldsymbol{B}|=|\boldsymbol{A}|}} \binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{A}}\binom{\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{B}}\langle H_{\boldsymbol{A}}, H_{\boldsymbol{B}}\rangle\langle H_{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(1)}}, H_{\boldsymbol{\gamma}^{(2)}}\rangle.$$

表 *4* 计算了该求和式中的每一项。

TABLE 4 *Terms of the quadruple* $(N=4)$ *product formula of Theorem* 9。1 *for* $\boldsymbol{\alpha}=(1,0)$ $\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\gamma}^{(1)}=(1,1)$ *and* $\boldsymbol{\gamma}^{(2)}=(3,2)$。

$\boldsymbol{A}$	$\boldsymbol{B}$	$\binom{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{A}}$	$\binom{\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{B}}$	$\langle H_{\boldsymbol{A}}, H_{\boldsymbol{B}}\rangle$	$H_{\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}}$	Term
$\boldsymbol{0}$	$\boldsymbol{0}$	1	1	1	$H_{(2,1)}$	$\langle H_{(1,1)}, H_{(2,1)}, H_{(3,2)}\rangle$
$\boldsymbol{e_1}$	$\boldsymbol{e_1}$	1	1	Σ_{11}^{-1}	$H_{(0,1)}$	$\Sigma_{11}^{-1}\langle H_{(0,1)}, H_{(1,1)}, H_{(3,2)}\rangle$
$\boldsymbol{e_1}$	$\boldsymbol{e_2}$	1	1	Σ_{12}^{-1}	$H_{(1,0)}$	$\Sigma_{12}^{-1}\langle H_{(1,0)}, H_{(1,1)}, H_{(3,2)}\rangle$

因此，

$$\begin{aligned}\langle H_{(1,0)}, H_{(1,1)}, H_{(1,1)}, H_{(3,2)}\rangle &= \langle H_{(1,1)}, H_{(2,1)}, H_{(3,2)}\rangle + \Sigma_{11}^{-1}\langle H_{(0,1)}, H_{(1,1)}, H_{(3,2)}\rangle \\ &\quad + \Sigma_{12}^{-1}\langle H_{(1,0)}, H_{(1,1)}, H_{(3,2)}\rangle.\end{aligned}$$

然而，这里我们可以注意到 $\langle H_{(0,1)}, H_{(1,1)}, H_{(3,2)}\rangle=\langle H_{(1,0)}, H_{(1,1)}, H_{(3,2)}\rangle=0$，因为 $|(3,2)|=5$ 大于 $|(0,1)|+|(1,1)|$ 和 $|(1,0)|+|(1,1)|$。因此，

$$\langle H_{(1,0)}, H_{(1,1)}, H_{(1,1)}, H_{(3,2)}\rangle = \langle H_{(1,1)}, H_{(2,1)}, H_{(3,2)}\rangle$$

$$= \langle H_{(3,2)}, H_{(3,2)} \rangle.$$

三重乘积等于上面的双重积 $\langle H_{(3,2)}, H_{(3,2)} \rangle$ 其上界为 [23], 因为 $k = |(1,1)| + |(2,1)| - |3,2| = 0.$ ()

下一节将通过计算验证类似于示例9.3、9.4和9.5中所考虑的矩计算。特别是，对于各种测试用例，我们将本文引入的公式所预测的矩与通过简单蒙特卡洛采样得到的估计值进行比较。

10. 与蒙特卡洛估计值的比较。测试用对称正定协方差矩阵为

$$\Sigma^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & -1/2 \\ -1/2 & 1 \end{pmatrix} \qquad \Sigma^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{5} & \frac{2}{5} \\ \frac{1}{5} & 1 & \frac{4}{5} \\ \frac{2}{5} & \frac{4}{5} & 1 \end{pmatrix}. \tag{10.1}$$

我们通过 Python 3 的 NumPy 包中的 random.multivariate normal()，模拟从 $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma)$ 中抽取的样本。给定这些实现 $\boldsymbol{\xi}^{(i)}$，对于 $i = 1, \ldots\ldots, \mathcal{N}$ 以及给定的整数 $\mathcal{N}$，我们可以通过样本均值估计 $\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}、H_{\boldsymbol{\beta}}、H_{\boldsymbol{\gamma}} \rangle = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}) H_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\xi}) H_{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{\xi}))$,

$$S_{\mathcal{N}} := \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} H_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}^{(i)}) H_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\xi}^{(i)}) H_{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{\xi}^{(i)}) \tag{10.2}$$

根据中心极限定理（CLT），以 $O(\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}})$ [6, 8,33, 49] 的速率收敛。由于 $\mathcal{N}$ 重乘积具有对称性，我们选择索引标签使得 $|\boldsymbol{\alpha}| \le |\boldsymbol{\beta}| \le |\boldsymbol{\gamma}|$.

对于 $\mathbb{N}_0^2$ 中的多重指标，我们计算样本均值，以估计四重乘积 $\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}}, H_{\boldsymbol{\gamma}}, H_{\boldsymbol{\delta}} \rangle$；对于 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\delta}$ 的全部 70 种组合，我们采用相同范围的样本数量 $\mathcal{N}$，其阶数为 $0 < |\boldsymbol{\alpha}|, |\boldsymbol{\beta}|, |\boldsymbol{\gamma}|, |\boldsymbol{\delta}| \le 2$（其中不包括 $H_{(0,0)} = 1$，因为这些情况可化为单项、二重或三重乘积）。所有 3×1 多重指标对应的数据也可获取 [22]。

图2 总结了简单蒙特卡洛方法向预测的三重乘积和四重乘积值的收敛情况。对于每个 $\mathcal{N}$ 样本数量（$\mathcal{N} = 10^4, \ldots\ldots, 10^8$），相对误差按 $\|\boldsymbol{x}_{\text{true}} - \boldsymbol{x}^{(\mathcal{N})}_{\text{估计值}}\|_2 / \|\boldsymbol{x}_{\text{true}}\|_2$ 计算。可以看到，蒙特卡洛估计与预测的乘积值相符，不过需要大量 $\boldsymbol{\xi}$ 实现——具体而言，对于两个测试相关矩阵，相对误差要降至约 $O(10^{-3})$，需要 $O(10^8)$ 个样本。

11. 结论。本文针对相关多元 Hermite 多项式（MHPs）给出了若干理论结果，具体如下。

- 我们证明了一个关于 MHP 与所谓缓慢增长的函数的期望值的公式，其中二者均以相关高斯输入为自变量；该公式用于确立第 N阶乘积的存在性（定理 B.1和推论 A.5以及B.2）。
- 我们建立了相关高斯随机变量中 MHP 的第 N阶乘积的表达式（定理 9.1）。
- 我们确定了使第 N阶乘积等于零的充分条件（推论9.2）。

在B 节中，我们证明了，对于高斯 $d\boldsymbol{\xi}$ 随机变量的任意缓慢增长统计量，关于 $\boldsymbol{\xi}$ 测度的期望值都存在（定理

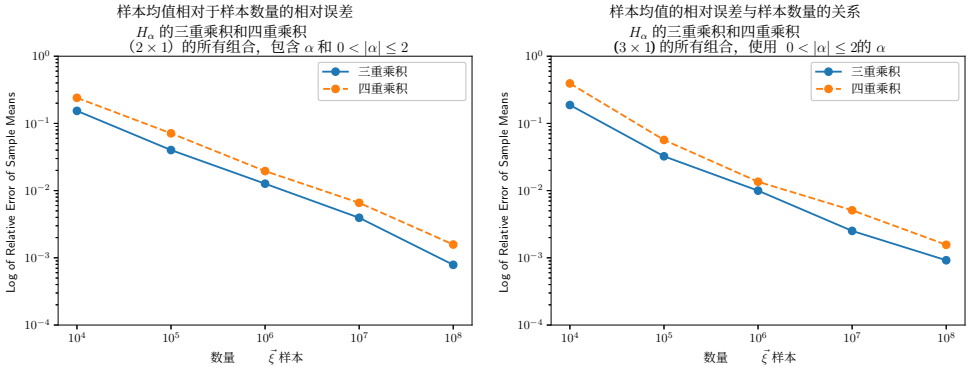

FIG. 2. *Log of relative error for the triple and quadruple products estimated by simple Monte Carlo versus the formula from Thm. 9.1 for* $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2)^T \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma^{(1)})$ *(LHS) and* $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)^T \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma^{(2)})$ *(RHS) where the covariances* $\Sigma^{(1)}$ *and* $\Sigma^{(2)}$ *are given in (10.1). For the triple products,* $\boldsymbol{x}_{true}$ *is the vector of* $\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}}, H_{\boldsymbol{\gamma}} \rangle$ *containing the 35 combinations of* $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{N}_0^2$ *(on the LHS) and the 165 combinations of* $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{N}_0^3$ *(on the RHS) such that* $0 < |\boldsymbol{\alpha}| \le |\boldsymbol{\beta}| \le |\boldsymbol{\gamma}| \le 2$. *For the quadruple products,* $\boldsymbol{x}_{true}$ *is the vector of* $\langle H_{\boldsymbol{\alpha}}, H_{\boldsymbol{\beta}}, H_{\boldsymbol{\gamma}}, H_{\boldsymbol{\delta}} \rangle$ *containing the 70 combinations of* $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\delta} \in \mathbb{N}_0^2$ *(on the LHS) and the 475 combinations of* $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\delta} \in \mathbb{N}_0^3$ *(on the RHS) such that* $0 < |\boldsymbol{\alpha}| \le |\boldsymbol{\beta}| \le |\boldsymbol{\gamma}| \le |\boldsymbol{\delta}| \le 2$. *In both cases,* $\boldsymbol{x}_{est.}^{(\mathcal{N})}$ *is the vector containing the sample means* $S_{\mathcal{N}}$ *that estimate the corresponding products for each fixed* $\mathcal{N}$ *number of samples* ($\mathcal{N} = 10^4, \ldots, 10^8$). *Note that the* $H_{\mathbf{0}} = 1$ *polynomials are excluded, since these triple and quadruple products reduce to lower-order products.*

A.4）。这进一步凸显了明确知道何时 N乘积为零的重要性。当对矩进行数值近似时，可能很难区分 M-系统中的真实微小物理效应（即系数接近于零的偏微分方程项）与估计过程中产生的数值噪声；如果这种扰动实质性地影响系统的解，这一点尤其重要。因此，若能预先知道哪些乘积为 0，就可以有把握地将 M-系统中对应的项彻底消除。

最后，第7节的延迟逻辑斯蒂增长模型说明了所需 N阶乘积的数量增长得有多快。第10节的数值实验表明，这些乘积的蒙特卡洛估计趋近于定理9.1给出的值，都只有在大约 10^8 个样本之后。改为计算公式，则可从具有相关高斯参数的非线性偏微分方程的随机伽勒金系统组装中消除这一采样成本。

附录 A. 缓增函数与施瓦茨函数。以下关于缓增与施瓦茨函数 [20] 的定义，将有助于形式化函数 f的类型，对这些函数而言， $\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(f(\boldsymbol{\xi}))$的存在性在 $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma)$条件下得以保证。

DEFINITION A.1（缓增）。我们称 $f \in C^\infty(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ 为缓增的，如果 f 及其所有导数至多具有多项式增长；也就是说，对每一个$\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{N}_0^n$，存在常数 $C_{\boldsymbol{\alpha}}$ 和整数 $N_{\boldsymbol{\alpha}} \in \mathbb{N}_0$，使得

$$|\partial^{\boldsymbol{\alpha}} f(\boldsymbol{x})| \le C_{\boldsymbol{\alpha}} (1 + |\boldsymbol{x}|^2)^{N_{\boldsymbol{\alpha}}} \qquad \text{for all } \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n.$$

我们将令 $\mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ 表示定义在 $\mathbb{R}^n$ 上的所有增长缓慢的实值函数的集合 .

DEFINITION A.2（施瓦茨函数）。集合 $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$，称为施瓦茨函数集合，由函数 $\phi \in C^\infty(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ 组成，使得对于所有多重指标 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in$

$\mathbb{N}_0^n$，$\sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} |\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{\alpha}}\partial^{\boldsymbol{\beta}}(\phi)$
$| < \infty$.
引理A.3 中给出的关系已广为人知 [19, 20]，，但我们仍在此列出，以供后续定理使用。

LEMMA A.3. 令 $\mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ 表示 $\mathbb{R}^n$ 上所有缓慢增长的实值函数的集合。那么：

1. （在<*style id=*"">逐点函数乘法下封闭） $f, g \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n) \Rightarrow fg \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$；2. （在微分下封闭） $f \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n) \Rightarrow \partial^{\boldsymbol{\alpha}} f \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ 对所有 $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{N}_0^n$ 均成立；3. （缓慢增长函数与施瓦茨函数的乘积仍为施瓦茨函数） $f \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ $\Rightarrow f\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$。

从直观上说，函数 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ 及其所有导数在无穷远处都迅速衰减。此外，注意到 $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subset L^1(\mathbb{R}^n, \mathcal{B}_{\mathbb{R}^n}, d\boldsymbol{x})$，其中 $d\boldsymbol{x}$ 是 $\mathbb{R}^n$ [8, 20] 上的勒贝格测度。根据 L^1 的定义，每个 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ 关于 $(\mathbb{R}^n, \mathcal{B}_{\mathbb{R}^n})$ 都是可测的，且在 $\mathbb{R}^n$ 上绝对可积；因此，满足富比尼定理（参见 [8] 中的定理 1.4.28）的必要条件：

(A.1)
$$\int_{\mathbb{R}^n} \phi(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} = \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \left[\int_{\mathbb{R}} \phi(\boldsymbol{x})\, dx_j\right] d\boldsymbol{x}_{-j} \qquad \text{for any } \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n),\ j \in \{1, \dots, n\}$$

其中，$d\boldsymbol{x}_{-j}$ 是 $\mathbb{R}^{n-1}$ 上的勒贝格测度，并且保证 $\int_{\mathbb{R}} \phi(\boldsymbol{x})\, dx_j$ 是有限的。请注意，这一谨慎做法是有必要的，因为当所涉及的积分中有任何一个为无穷大时，富比尼定理并不成立；有关几个经典反例中的一个，请参见 [2]。

对于增长缓慢的 $f \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$、施瓦茨 $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$以及 $j \in [n]$，定义积分

(A.2)
$$I(\boldsymbol{x}) := \int_{\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x}) \partial^{\boldsymbol{e}_j}(\phi(\boldsymbol{x}))\, d\boldsymbol{x},$$

其中，$\boldsymbol{e}_j$ 是第 j个单位多重指标（第 2 节）。根据引理 A.3，被积函数$f\partial^{\boldsymbol{e}_j}$（$\phi$）$\in \mathcal{S}$（$\mathbb{R}^n$），因此：（1）$I$（$\boldsymbol{x}$）是有限的，并且（2）富比尼定理（公式 A.1）给出

(A.3)
$$I(\boldsymbol{x}) = \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \left[\int_{\mathbb{R}} f(\boldsymbol{x}) \partial^{\boldsymbol{e}_j}(\phi(\boldsymbol{x}))\, dx_j\right] d\boldsymbol{x}_{-j}.$$

由于 $f\partial^{\boldsymbol{e}_j}\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$，当投影到一维时（即固定所有 $x_i$for all$i \neq j$），$\int_{-R}^{R} f(\boldsymbol{x})$ $\partial^{\boldsymbol{e}_j}(\phi(\boldsymbol{x}))\, dx_j$ 的被积函数属于 $\mathcal{S}(\mathbb{R})$（其中 $R > 0$ 任意）。我们还可以注意到，施瓦茨函数是利普希茨连续的 [17]，而紧区间上的利普希茨函数 $[-R, R]$ 是绝对连续的（ [43] 中的习题 5.20a），因此也是一致连续的。因此，分部积分所需的条件均已满足 [16, 18]。根据一维分部积分，

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}} f(\boldsymbol{x}) \partial^{\boldsymbol{e}_j}(\phi(\boldsymbol{x})) &= \lim_{R\to\infty} \int_{-R}^{R} f(\boldsymbol{x}) \partial^{\boldsymbol{e}_j}(\phi(\boldsymbol{x}))\, dx_j \\
&= \lim_{R\to\infty} \Big[f(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x})\Big]_{x_j=-R}^{x_j=+R} - \lim_{R\to\infty} \int_{-R}^{R} \partial^{e_j} f(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x})\, dx_j \\
&= -\int_{\mathbb{R}} \partial^{e_j} f(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x})\, dx_j.
\end{aligned}$$

验证边界项消失是一个直接的练习。因此，再次应用 Fubini（式 A.1），

$$I(\boldsymbol{x}) = \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \left[- \int_{\mathbb{R}} \partial^{e_j} f(\boldsymbol{x}) \phi(\boldsymbol{x}) \, dx_j \right] d\boldsymbol{x}_{-j} = - \int_{\mathbb{R}^n} \partial^{e_j} f(\boldsymbol{x}) \phi(\boldsymbol{x}) \, d\boldsymbol{x}$$

因此

(A.4)

$$\int_{\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x}) \partial^{\boldsymbol{e}_j} (\phi(\boldsymbol{x})) \, d\boldsymbol{x} = - \int_{\mathbb{R}^n} \partial^{e_j} f(\boldsymbol{x}) \phi(\boldsymbol{x}) \, d\boldsymbol{x} \text{ for any } f \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n), \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n), j \in [n],$$

且两个积分均为有限值。

以下陈述众所周知，但我们将其列为一个定理，以确认后续证明中所使用的积分均有良好定义（例如，均为有限值）。

THEOREM A.4. 对于 $\boldsymbol{\xi} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma)$， $\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(f(\boldsymbol{\xi}))$ 对所有 $f \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$均存在。

证明。 根据期望存在的定义，我们必须证明 $f(\boldsymbol{\xi}) \in L^1(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$，这涉及证明：(1) $f(\boldsymbol{\xi})$ 是 $(\Omega, \mathcal{A})$-可测的，以及 (2)$\int_\Omega |f(\boldsymbol{\xi}(\omega))| \, d\mathbb{P}(\omega) < \infty$. 当然，我们有映射

$$(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P}) \xrightarrow{\boldsymbol{\xi}} (\mathbb{R}^n, \mathcal{B}_{\mathbb{R}^n}, d\boldsymbol{\xi}) \xrightarrow{f} (\mathbb{R}, \mathcal{B}_{\mathbb{R}}, d\boldsymbol{x})$$

其中 $d\boldsymbol{\xi}$ 是 $\boldsymbol{\xi}$ 的分布， $d\boldsymbol{x}$ 是 $\mathbb{R}$上的勒贝格测度。由于 $\boldsymbol{\xi}$ 是一个随机变量（因此根据定义是 $(\Omega, \mathcal{A})$-可测的），且 f 是连续的，所以复合函数 $f(\boldsymbol{\xi})$ 也是 $(\Omega, \mathcal{A})$-可测的（这是因为连续函数的原像是开集，而 $\mathbb{R}^n$ 上的 Borel σ-代数由开球生成，例如参见 [36]中的命题 1）。根据 [8] 中的推论 1.3.62，$\int_\Omega |f(\boldsymbol{\xi}(\omega))| \, d\mathbb{P}(\omega) < \infty$ 当且仅当 $\int_{\mathbb{R}^n} |f(\boldsymbol{x})| \, \varphi(\boldsymbol{x}) \, d\boldsymbol{x} < \infty$，其中 $\varphi \colon \mathbb{R}^n \mathbb{R}_{\geq 0}]$是 $\boldsymbol{\xi}$的概率密度函数。由于概率密度函数 $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ 和 $f \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$，根据引理 A.3， $f\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subset L^1(\mathbb{R}^n, \mathcal{B}_{\mathbb{R}^n}, d\boldsymbol{x})$；因此， $\int_{\mathbb{R}^n} |f(\boldsymbol{x})| \, \varphi(\boldsymbol{x}) \, d\boldsymbol{x} = \int_{\mathbb{R}^n} |f(\boldsymbol{x}) \varphi(\boldsymbol{x})| \, d\boldsymbol{x} < \infty$，证明完毕。 □

COROLLARY A.5. 令 $0 \leq N < \infty$ 为一个整数。 N阶三重乘积

$$\langle H_{\boldsymbol{\alpha}^{(1)}}, \ldots, H_{\boldsymbol{\alpha}^{(N)}} \rangle = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left(\prod_{i=1}^{N} H_{\boldsymbol{\alpha}^{(i)}}(\boldsymbol{\xi}) \right)$$

存在。

证明。 由于每个 $H_{\boldsymbol{\alpha}^{(i)}} \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 都是多项式，显然 $H_{\boldsymbol{\alpha}^{(i)}} \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \in \mathcal{P}$（$\mathbb{R}^n$）；因此，根据引理 A.3，它们的乘积 $\prod_{i=1}^{N} H_{\boldsymbol{\alpha}^{(i)}} \in \mathcal{P}$（$\mathbb{R}^n$）也同样如此。根据定理 A.4， $\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left(\prod_{i=1}^{N} H_{\boldsymbol{\alpha}^{(i)}} (\boldsymbol{\xi}) \right)$ 存在。 □

附录 B。高阶乘积的存在性。 有了这些技术性结果，我们现在证明 N阶乘积，以及证明其公式（定理 9.1）时涉及的期望值，都是定义良好的。也就是说，我们将证明，本文档后续使用的积分均为有限值，且其被积函数是可测的，因此它们属于 L^1（Ω, $\mathcal{A}$, $d\boldsymbol{\xi}$）.[10] 为此，我们需要

[10] 有人可能会担心，属于 L^1（Ω, $\mathcal{A}$, $d\boldsymbol{\xi}$）的条件并不够严格，因为多项式混沌展开依赖于有限方差。然而，对于通过 CPCE 表示的 *stochastic process* 而言，有限方差是限制条件，而不是即将在后续关于 N 阶乘积的证明中涉及的积分的限制条件。正如我们将在第9节中证明的那样，基多项式 $H_{\boldsymbol{\alpha}}$（$\boldsymbol{\xi}$）自身在所有阶数上都具有有限阶矩。

关于 $\boldsymbol{\xi}$ 的任意函数及其导数至多具有多项式增长，这使得它们与概率密度函数 φ 的 $\boldsymbol{\xi}$ 乘积属于施瓦茨函数（定义 A.2 ） —— 从而衰减得足够快，使其积分为有限值。根据定义 ***A.1***，我们将导数至多呈多项式增长的光滑实值函数称为 缓慢增长函数。

首先，我们先证明，相对于 $d\boldsymbol{\xi}$ 测度的期望值对于高斯 $\boldsymbol{\xi}$ 随机变量的任意缓慢增长统计量都存在（定理 A.4）。作为该定理的推论（推论 A.5），我们还可知，多元厄米多项式的 N 阶矩同样存在。然后，利用富比尼定理/分部积分（（A.1）见 附录 A），我们可以证明本文的核心结果之一（定理 B.1）：MHP 与缓慢增长函数的乘积的期望值可以表示为该缓慢增长函数的偏导数的期望值；即：

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(H_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{\xi})f(\boldsymbol{\xi})) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(\partial^{\boldsymbol{A}} f(\boldsymbol{\xi})) \qquad \text{for } f \text{ slowly growing.} \tag{B.1}$$

借助定理 B.1，我们最终在推论 B.2 中证明，N 阶乘积是有限的，并且可以写成：

$$\langle H_{\boldsymbol{\alpha}^{(1)}}, \dots, H_{\boldsymbol{\alpha}^{(N)}} \rangle = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left(\partial^{\boldsymbol{\alpha}^{(j)}} \left(\textstyle\prod_{i \neq j} H_{\boldsymbol{\alpha}^{(i)}}(\boldsymbol{\xi}) \right) \right). \tag{B.2}$$

本质上，（B.2）表明，我们可以将 $H_{\boldsymbol{\alpha}^{(j)}}$ 从N 阶乘积（等式左侧）中的任意一个多元厄米多项式“转移”到期望值（等式右侧）中的偏导算子 $\partial^{\boldsymbol{\alpha}^{(j)}}$ 上。

THEOREM B.1. 设 $f \in C^\infty(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ 增长缓慢。设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{N}_0^n$ 为一个固定但任意的多重指标。则

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(H_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{\xi})f(\boldsymbol{\xi})) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(\partial^{\boldsymbol{A}} f(\boldsymbol{\xi})).$$

证明。 首先注意到 $\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(H_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{\xi})f(\boldsymbol{\xi}))$ 和 $\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(H_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{\xi})f(\boldsymbol{\xi}))$ 根据引理 A.3和定理 A.4均存在。如果 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{0}$，则结论立即成立，因为 $H_{\boldsymbol{0}} = 1$. 因此设$\boldsymbol{A} \neq \boldsymbol{0}$。于是 $A_j > 0$ 对于某个 $j \in [n]$. 令 φ 为 $\boldsymbol{\xi}$的密度，我们有

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(H_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{\xi})f(\boldsymbol{\xi})) &= \int_\Omega H_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{\xi}(\omega)) f(\boldsymbol{\xi}(\omega))\, d\mathbb{P}(\omega) \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} H_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x}) f(\boldsymbol{x}) \varphi(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} \\
&= (-1)^{|\boldsymbol{A}|} \int_{\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x})\, \partial^{\boldsymbol{A}} \varphi(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} \qquad [H_{\boldsymbol{A}}\varphi = (-1)^{|\boldsymbol{A}|}\partial^{\boldsymbol{A}}\varphi] \\
&= (-1)^{|\boldsymbol{A}|} \int_{\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x})\, \partial^{\boldsymbol{e}_j} \left(\partial^{\boldsymbol{A}-\boldsymbol{e}_j} \varphi(\boldsymbol{x}) \right) d\boldsymbol{x} \\
&= (-1)^{|\boldsymbol{A}|+1} \int_{\mathbb{R}^n} \partial^{\boldsymbol{e}_j} f(\boldsymbol{x})\, \partial^{\boldsymbol{A}-\boldsymbol{e}_j} \varphi(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} \quad [\text{by (A.4)}].
\end{aligned}$$

由于 $f \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ 和 $\partial^{\boldsymbol{A}-\boldsymbol{e}_j}\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ 是施瓦茨函数（因为高斯密度φ 本身就是施瓦茨函数），我们可以在上面的最后一个等式中放心地应用式 A.4——这是分部积分的推论；也就是说，涉及的积分都是有限的。事实上，我们可以总共应用式 A.4 $|\boldsymbol{A}|$ 次，因为对于任意 $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^n$，$\partial^{\boldsymbol{B}} f \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$（引理 A.3），且对于任意 $\boldsymbol{B} \in \mathbb{N}_0^n$.， $\partial^{\boldsymbol{B}}\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$。此外，注意到每个 $\int_{\mathbb{R}^n} \partial^{\boldsymbol{B}} f(\boldsymbol{x}) \partial^{\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}} \varphi(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} < \infty$，因为被积函数是施瓦茨函数。因此，通过应用

式 A.4 另外 $|\boldsymbol{A}|-1$ 次，我们得到

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(H_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{\xi})f(\boldsymbol{\xi})) &= (-1)^{|\boldsymbol{A}|+|\boldsymbol{A}|}\int_{\mathbb{R}^n}\partial^{\boldsymbol{A}}f(\boldsymbol{x})\partial^{\boldsymbol{0}}\varphi(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}\\ &= \int_{\mathbb{R}^n}\partial^{\boldsymbol{A}}f(\boldsymbol{x})\varphi(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}\\ &= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(\partial^{\boldsymbol{A}}f(\boldsymbol{\xi}))\end{aligned}$$

如所需。 □

注意，定理 B.1 依赖于 $\boldsymbol{\xi}$ 是高斯的，从而具有施瓦茨可积函数，因此能够保证所涉及的所有积分都是有限的；这种有限性是应用富比尼定理的必要要求。[11]

给定定理 B.1，推论 B.2 立即给出了 N阶乘积的公式。

Corollary B.2. 根据推论 *A.5*，我们知道 N阶乘积是有限的。此外，我们有

$$\langle H_{\boldsymbol{\alpha}^{(1)}},\dots,H_{\boldsymbol{\alpha}^{(N)}}\rangle = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}\left(\partial^{\boldsymbol{\alpha}^{(j)}}\left(\textstyle\prod_{i\neq j}H_{\boldsymbol{\alpha}^{(i)}}(\boldsymbol{\xi})\right)\right) \tag{B.3}$$

对于任意 $j\in[n]$.

证明。 定义 $f(\boldsymbol{\xi})=\prod_{i\neq j}H_{\boldsymbol{\alpha}^{(i)}}(\boldsymbol{\xi})\in\mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$。于是

$$\langle H_{\boldsymbol{\alpha}^{(1)}},\dots,H_{\boldsymbol{\alpha}^{(N)}}\rangle = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(H_{\boldsymbol{\alpha}^{(j)}}(\boldsymbol{\xi})f(\boldsymbol{\xi}))$$

应用定理 B.1，即可得到结果。 □

推论B.2 非常有用，因为它使我们能够在计算 N阶乘积时，使用关于（$N-1$）阶乘积的已知结果——这些结果将出现在公式 B.3 的右侧。现在，我们已经具备了为相关高斯随机变量的多元厄米特多项式的 N阶乘积建立迭代公式所需的全部要素。

代码。 如有需要，可向作者索取代码。

参考文献

[1] A. Alexanderian, *On spectral methods for variance based sensitivity analysis*, Probability Surveys, 10（2013），第51–68页，https://doi.org/10.1214/13-PS219。[2] J. Boardman, *A Fubini counterexample*。2001年，https://math.jhu.edu/~jmb/note/nofub.pdf（访问日期：2025-07-09）。[3] M. Branicki and A. J. Majda, *Fundamental limitations of polynomial chaos for uncertainty quantification in systems with intermittent instabilities*, Communications in Mathematical Sciences, 11（2013），第55–103页，https://api.semanticscholar.org/CorpusID:16416936。[4] R. H. Cameron and W. T. Martin, *The orthogonal development of non-linear functionals in series of Fourier-Hermite functionals* 48 1947 385 392, , Annals of Mathematics, （），第–页，http://www.jstor.org/stable/1969178。[5] P. Constantine, *A primer on stochastic Galerkin methods*, 2007年2月，https://www.cs. colorado.edu/~paco3637/docs/constantine2007primer.pdf（访问日期：2020-02-06）。[6] P. Constantine, *Spectral methods for parametrized matrix equations*, 博士学位论文，斯坦福大学，2009年。

[11] 对于具有紧支撑的非高斯随机变量，或许也可以采用类似的论证来确保有限积分，不过可能还需要考虑其他一些复杂问题。这是未来值得研究的领域。

[7] B. Debusschere, *Intrusive Polynomial Chaos Methods for Forward Uncertainty Propagation*, 施普林格国际出版, 尚, 2017年, 第617–636页, https://doi.org/10.1007/ 978-3-319-12385-1 19。[8] A. Dembo, *Probability theory: STAT310/MATH230*, 2019年, https://web.stanford.edu/class/ stats310a/lnotes.pdf（访问日期: 2025-07-10）。[9] C. F. Dunkl and Y. Xu, *Orthogonal Polynomials of Several Variables*, 数学及其应用百科全书, 剑桥大学出版社, 第2版, 2014年, https: //doi.org/10.1017/CBO9781107786134。[10] O. G. Ernst, A. Mugler, H. J. Starkloff, and E. Ullmann, *On the convergence of generalized polynomial chaos expansions* 2 46 2012 317 339, , ESAIM: M AN, （）, 第–页 https://doi.org/10.1051/m2an/2011045。[11] J. Feinberg, V. G. Eck, and H. P. Langtangen, *Multivariate polynomial chaos expansions with dependent variables* 40 2018 199 , SIAM科学计算杂志, （）, 第A–A223页, https://doi.org/10.1137/15M1020447。[12] T. Gerstner and M. Griebel, *Numerical integration using sparse grids*, Numerical Algorithms, 18（1998）, 第209–232页, https://doi-org.stanford.idm.oclc.org/10.1023/A: 1019129717644。[13] R. Ghanem, D. Higdon, and H. Owhadi, *Introduction to Uncertainty Quantification*, 施普林格国际出版, 尚, 2017年, 第3–6页, https://doi.org/10.1007/ 978-3-319-12385-1 1。[14] R. G. Ghanem and P. D. Spanos, *Stochastic Finite Elements: A Spectral Approach*, 施普林格出版社, 柏林, 海德堡, 1991年。[15] G. H. Golub and C. F. V. Loan, *Matrix Computations*, 约翰斯·霍普金斯大学出版社, 第4版, 2013年。[16] H. Grad, *Note on n-dimensional Hermite polynomials*, 纯粹与应用数学通讯, 2（1949）, 第325–330页, https://doi.org/10.1002/cpa.3160020402。[17] MathStackExchange (Answered by User: D. Giraudo), *Are derivatives of Schwartz functions uniformly continuous?* Mathematics Stack Exchange, 2014年, https : / / math . stackexchange . com / questions / 1057422 / are-derivatives-of-schwartz-functions-uniformly-continuous & amp7D & amp7B（访问日期: 2025-07-10）。[18] MathStackExchange (Answered by User: Dr. Oliver Díaz of University of Texas at Austin) *Lebesgue spaces and integration by parts* , , Mathematics Stack Exchange, 2020年, https : / / math . stackexchange . com / questions / 2419391 / lebesgue-spaces-and-integration-by-parts（访问日期: 2025-07-10）。[19] MathStackExchange (Answered by User: DreamAR), *Product of a Schwartz function and a function with polynomial bonuded [sic] derivatives is Schwartz?* Mathematics Stack Exchange, 2021年11月, https : / / math . stackexchange . com / questions / 4303036 / product-of-a-schwartz-function-and-a-function-with-polynomial-bonuded-derivative ? noredirect=1& amp;lq=1（访问日期: 2025-07-10）。[20] J. K. Hunter, *Notes on partial differential equations, appendix 5A, page 134*, 2014年6月, https://www.math.ucdavis.edu/~hunter/m218a 09/ch5A.pdf（访问日期: 2025-07-10）。[21] S. Janson, *Gaussian Hilbert Spaces*, 剑桥数学论丛, 剑桥大学出版社, 1997年, https://doi.org/10.1017/CBO9780511526169。[22] L. Lyman, *Higher order products numeric examples*, https://docs.google.com/spreadsheets/ d/1XoJo k-YSO772KoqtytVZFK4kJqttJG13DivRCkQ5uY/edit?usp= sharing（访问日期: 2025-07-10）。[23] L. Lyman, *Triple products of correlated multivariate Hermite polynomials*, 2026年, https://arxiv. org/abs/2610.30204。[24] L. Lyman and G. Iaccarino, *A bluff-and-fix algorithm for polynomial chaos methods*, 载于计算科学—ICCS 2020, V. V. Krzhizhanovskaya、G. Z´avodszky、M. H. Lees、J. J. Dongarra、P. M. A. Sloot、S. Brissos和J. Teixeira编, 尚, 2020年, 施普林格国际出版, 第742–756页, https://doi.org/0.1007/978-3-030-50436-6 55。[25] L. Lyman and G. Iaccarino, *Second order moments of multivariate Hermite polynomials in correlated random variables* , 载于计算科学—ICCS 2021, M. Paszynski、D. Kranzlm¨uller、V. V. Krzhizhanovskaya、J. J. Dongarra和P. M. A. Sloot编, 尚, 2021年, 施普林格国际出版, 第698–712页, https://doi.org/10.1007/ 978-3-030-77980-1 53。[26] O. L. Maître and O. Knio, *Spectral Methods for Uncertainty Quantification: With Applications to Computational Fluid Dynamics* 2010, 10 1007 , 1月 https://doi.org/ 。/ 978-90-481-3520-2。[27] H. Matthies and A. Keese, *Galerkin methods for linear and nonlinear elliptic stochastic*

partial differential equations, 《计算方法与应用力学和工程》, 194（2005）, 第1295–1331页, https://doi.org/10.1016/j.cma.2004.05.027。[28] J. N. Mueller、 K. Sargsyan、 C. J. Daniels and H. N. Najm、*Polynomial chaos surrogate construction for random fields with parametric uncertainty* 2024 , , https://arxiv.org/abs/ 2311.00553, https://arxiv.org/abs/2311.00553。[29] A. Nataf、 *Determination des distributions de probabiliteés dont les marges sont données*, 《巴黎科学院院刊》, 255（1962）, 第42–43页。[30] M. Navarro、 J. Witteveen、 and J. Blom、*Polynomial chaos expansion for general multivariate distributions with correlated variables* 2014 10 48550 1406 , , https://doi.org/ 。/ ARXIV。。5483。[31] S. Noreddine and L. Nourdin、*On the Gaussian approximation of vector-valued multiple integrals* 102 2011 1008 1017, , 《多元分析杂志》, （）, 第–页, https://doi.org/ 10.1016/j.jmva.2011.02.001。[32] W. Oberkampf and T. Trucano、 *Validation methodology in computational fluid dynamics*, AIAA 2000-2549, （2000）, https://doi.org/10.2514/6.2000-2549。[33] A. B. Owen、 *Monte Carlo theory*、 *methods and examples*, 2013, https://artowen.su.domains/ mc/（访问日期：2025-07-10）。[34] K. Patarroyo、 *A digression on Hermite polynomials*, 2019, https://doi.org/10.48550/ARXIV。1901.01648, https://arxiv.org/abs/1901.01648。[35] Z. Perkó、 S. R. van der Voort、 et al.、 *Fast and accurate sensitivity analysis of impttreatment plans using polynomial chaos expansion*, 《医学与生物学中的物理学》, 61（2016）, 第4646页, https://doi.org/10.1088/0031-9155/61/12/4646, https://dx.doi.org/10。1088/0031-9155/61/12/4646。[36] D. M. Petrovai、 *Some examples of non-measurable Lebesgue functions*, Procedia Manufacturing, 32（2019）, 第640–642页, https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.promfg.2019。02.264, https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2351978919302999。第12届工程领域跨学科国际会议, INTER-ENG 2018, 2018年10月4日至5日, 特尔古穆列什, 罗马尼亚。[37] M. P. Pettersson、 G. Iaccarino、 and J. Nordström、 *Polynomial Chaos Methods for Hyperbolic Partial Differential Equations: Numerical Techniques for Fluid Dynamics Problems in the Presence of Uncertainties*, 施普林格国际出版社, 瑞士, 2015, https://doi.org/https://doi.org/10.1007/978-3-319-10714-1。[38] R. Pulch、 *Methods based on polynomial chaos for quadratic delay differential equationswith random parameters*, 《应用数学与力学会议论文集》, 26（2026）, 第e70083页, https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/pamm.70083。[39] S. Rahman、 *Wiener–Hermite polynomial expansion for multivariate Gaussian probability measures* , 《数学分析与应用杂志》, （）, 第–页, https://doi.org/10.1016/j.jmaa.2017.04.062, http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022247X17304250。[40] S. Rahman、 *Dimensionwise multivariate orthogonal polynomials in general probability spaces*, 《应用数学与计算》, 362（2019）, 第124538页, https://doi.org/10.1016/j. amc.2019.06.052。[41] Z. Rosario、 *Precision margin : first-principles margins for aircraft design under uncertainty*, 博士学位论文, 斯坦福大学, 2020年。[42] M. Rosenblatt、 *Remarks on a Multivariate Transformation*, 《数理统计年刊》, 23（1952）, 第470–472页, https://doi.org/10.1214/aoms/1177729394, https: //doi.org/10.1214/aoms/1177729394。[43] H. L. Royden、 *Real Analysis*, 麦克米伦, 纽约, 第3版, 1988年。[44] W. Rudin、 *Principles of Mathematical Analysis*, 麦格劳-希尔图书公司, 纽约—多伦多—伦敦, 1953年。[45] J. Salazar、 *The Polynomial Chaos Method with Applications to Random Differential Equations* 2013 , 博士学位论文, 德克萨斯大学阿灵顿分校。[46] J. Salverda、 *Probabilistic treatment planning with polynomial chaos expansion for proton therapy* 2019 , 硕士论文, 代尔夫特理工大学, 。[47] A. Sasane、 *A Friendly Approach to Functional Analysis*, 世界科学出版社, 2007年, 第6.4章, 第248–249页, https://books.google.com/books/about/A Friendly Approach To Functional Analys.html?id=vEQyDwAAQBAJ。[48] D. Sleeman、 *On the symmetrized Kronecker power of a matrix and extensions of Mehler's formula for Hermite polynomials* 3 1972 606 , 《工业与应用数学学会数学分析杂志》, （）, 第–616页, https://doi.org/10.1137/0503060, https://arxiv.org/abs/https://doi.org/10.1137/ 0503060。[49] R. Smith、 *Uncertainty Quantification: Theory*、 *Implementation*、 *and Applications*, 工业与应用数学学会——

工业与应用数学学会，2013年。[50] P. Sochala and O. P. Le Maître、 *Polynomial chaos expansion for subsurface flows with uncertain soil parameters* 62 2013 139 154, ，《水资源进展》，（），第–页，https: //doi.org/https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2013.10.003，https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030917081300184X。[51] C. Soize and R. Ghanem、 *Physical systems with random uncertainties: Chaos representationswith arbitrary probability measure*，SIAM科学计算杂志，26（2004），第395–410页，https://doi.org/10.1137/S1064827503424505，https://doi.org/10.1137/S106482750342450，https://arxiv.org/abs/https://doi.org/10.1137/S1064827503424505。[52] R. P. Stanley、 *Enumerative Combinatorics, Vol. 2*，剑桥大学出版社，2001年。[53] E. M. Stein and R. Shakarchi、 *Functional Analysis: Introduction to Further Topics in Analysis* ，普林斯顿大学出版社，2012年，第1章，https://assets.press.princeton.edu/chapters/ s9627.pdf。[54] G. Szegő、 *Orthogonal Polynomials*，《美国数学学会：学术丛书》，美国数学学会，1975年，https://books.google.com/books?id=ZOhmnsXlcY0C。[55] N. Wiener、 *The homogeneous chaos*，《美国数学杂志》，60（1938），第897–936页，http://www.jstor.org/stable/2371268。[56] D. Xiu、 *Generalized (Wiener-Askey) Polynomial Chaos*，博士学位论文，布朗大学，2004年。[57] D. Xiu、 *Stochastic Collocation Methods: A Survey*，施普林格国际出版，尚，2017年，第699–716页，https://doi.org/10.1007/978-3-319-12385-1 26，https://doi.org/10. 1007/978-3-319-12385-1 26。[58] D. Xiu and G. E. Karniadakis、 *The Wiener–Askey polynomial chaos for stochastic differential equations* 24 2002 619 644, 10 1137 （），第–页，https://doi.org/ 。/ S1064827501387826。