随机 Runge-Kutta 方法的多色有树根理论

2025 年 12 月 17 日

Runge-Kutta 方法将区间 (x_n, x_{n+1}) 上若干条积分曲线在若干个点上的切线斜率进行加权平均，产生新的斜率，并按照斜率从 (x_n, y_n) 出发，沿直线到达 (x_{n+1}, y_{n+1})，依次循环往复得到方程的数值近似解。Runge-Kutta 方法与 Taylor 方法相比不用增加导数次数就可以得到较高的收敛阶数 [1]。高阶随机 Runge-Kutta 方法构造的基本思路是首先将随机微分方程的解析解和 Runge-Kutta 数值解分别做随机 Taylor 展开，再根据 Runge-Kutta 方法的阶条件确定 Runge-Kutta 方法中的各个系数。对于随机微分方程

$$dy(t) = f(y(t))dt + g(y(t)) \circ dW(t),\ y(t_0) = y_0,\ t \in [0, T]\ , \tag{1}$$

其中 $f(y(t))$ 和 $g(y(t))$ 为摩擦系数和扩散系数，$W(t)$ 表示 Wiener 过程，这里我们采用的是 Stratonovich 积分符号，表示我们采用了 Stratonovich 积分。由方程 (1) 构造高阶随机数值算法的难点在于 1. 高阶随机积分的近似很难计算。2. $f(y(t))$ 和 $g(y(t))$ 这两个系数函数的导数很难计算。采用阶条件确定 Runge-Kutta 方法系数来构造高阶 Runge-Kutta 方法的复杂度主要是由随机 Taylor 展开以及随机 Taylor 展开中多重随机积分带来的。而采用多色有根树理论可以对随机 Taylor 展开以及多重随机积分进行化简。下面我们将从随机微分方程解析解和 Runge-Kutta 方法数值解的随机 Taylor 展开，多重随机积分以及双色有根树化简以及 Runge-Kutta 方法阶条件的顺序分别介绍。

1 随机微分方程的随机 Taylor 展开

对随机微分方程进行的随机 Taylor 展开的基本思路是 1. 得到随机积分的链式法则的积分形式，即 Itô 公式。2. 将随机微分方程等价积分解中的被积函数 $f(y(t))$ 和 $g(y(t))$ 通过 Itô 公式进行反复迭代而来获得随机微分方程的随机 Taylor 展开式。下面以随机微分方程 (1) 的解析解的随机 Taylor 展开为例，阐述一下随机 Taylor 展开的过程。首先介绍一下 Itô 公式，Itô 公式对应的是确定性常微分方程中的链式法则，即随机微分方程应该满足的链式法则，采用不同的积分形式将会有不同的积分法则。[2]

定理. *假如 $(y(t))_{t\in\mathbb{T}}$ 是由随机微分方程 $dy_t = f(t, y(t))dt + g(t, y(t))dW_t$ 表示的 Itô 过程，如果 $F(t, x)$ 对 $t \in \mathbb{T}, x \in \mathbb{R}$ 是一个实值确定函数并有连续偏导数 $\partial F/\partial t$, $\partial F/\partial x$, 以及 $\partial^2 F/\partial x^2$, 那么随机过程 $(F(t, y))_{t\in\mathbb{T}}$ 也是一个 Itô 过程并且满足随机微分方程*

$$dF(t, y) = [\frac{\partial F}{\partial t}dt + \frac{\partial F}{\partial y}fdt + \frac{1}{2}\mathrm{trace}(gg^T\frac{\partial^2 F}{\partial y^2})]dt + \frac{\partial F}{\partial y}gdW_t\ . \tag{2}$$

对于标量形式有

$$dF(t, y) = [\frac{\partial F}{\partial t}dt + \frac{\partial F}{\partial y}fdt + \frac{1}{2}(\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}g^2)]dt + \frac{\partial F}{\partial y}gdW_t\ . \tag{3}$$

将其写为等价的积分形式有

$$F(y(t)) - F(y(t_0)) = \int_{t_0}^{t}(\frac{\partial F}{\partial y}f + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}g^2)ds + \int_{t_0}^{t}\frac{\partial F}{\partial y}gdW(s)\ . \tag{4}$$

令算符 L^0, L^1 满足

$$L^0a(y) = \frac{\partial a}{\partial y}f + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 a}{\partial y^2}g^2,\ L^1a(y) = \frac{\partial a}{\partial y}g\ ,$$

则方程 (4) 为

$$F(y(t)) - F(y(t_0)) = \int_{t_0}^{t} L^0 F(y(s))ds + \int_{t_0}^{t} L^1 F(y(s))dW(s) \ . \tag{5}$$

因为我们之后需要采用的积分形式为 Stratonovich 积分，而 Stratonovich 积分的链式法则与 Itô 积分是不同的，即 Stratonovich 积分的 Itô 公式与 Itô 积分是不同的，其不同形式在于算符 L^0, L^1 的不同，对于 Stratonovich 积分，算符 L_S^0, L_S^1 满足

$$L^0 a(y) = \frac{\partial a}{\partial y} f,\ L^1 a(y) = \frac{\partial a}{\partial y} g \ . \tag{6}$$

将方程 (1) 中的 $f(y(t))$ 和 $g(y(t))$ 根据 Stratonovich 积分的 Itô 公式 (5)-(6) 替换，再反复迭代，即可得到随机微分方程 (1) 在 y_0 处的 Taylor 展开。为了展示其中的细节，我们将方程 (1) 展开到对应的三重随机 Stratonovich 积分。将方程 (1) 写成等价的积分形式有

$$y(t) = y(t_0) + \int_{t_0}^{t} f(y(s))ds + \int_{t_0}^{t} g(y(s)) \circ dW(s) \ , \tag{7}$$

将被积函数 $f(y(s))$ 和 $g(y(s))$ 替换有

$$\begin{aligned}
y(t) = y(t_0) &+ \int_{t_0}^{t} [f(y(t_0)) + \int_{t_0}^{s} L^0 f(y(z))dz + \int_{t_0}^{s} L^1 f(y(z)) \circ dW(z)]ds \\
&+ \int_{t_0}^{t} [g(y(t_0)) + \int_{t_0}^{s} L^0 g(y(z))dz + \int_{t_0}^{s} L^1 g(y(z)) \circ dW(z)] \circ dW(s) \ , \\
&= y(t_0) + f(y(t_0)) \int_{t_0}^{t} ds + g(y(t_0)) \int_{t_0}^{t} \circ dW(s) \\
&+ \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{s} L^0 f(y(z))dzds + \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{s} L^1 f(y(z)) \circ dW(z)ds \\
&+ \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{s} L^0 g(y(z))dz \circ dW(s) + \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{s} L^1 g(y(z)) \circ dW(z) \circ dW(s) \ ,
\end{aligned}$$

在将被积函数 $L^0f(y(z))$，$L^1f(y(z))$，$L^0g(y(z))$，$L^1g(y(z))$ 替换有

$$
\begin{aligned}
y(t) = {} & y(t_0) + f(y(t_0))\int_{t_0}^{t} ds + g(y(t_0))\int_{t_0}^{t} \circ dW(s) \\
& + \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s}[L^0f(y(t_0)) + \int_{t_0}^{z} L^0L^0f(y(u))du + \int_{t_0}^{z} L^1L^0f(y(u))\circ dW(u)]dzds \\
& + \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s}[L^1f(y(t_0)) + \int_{t_0}^{z} L^0L^1f(y(u))du + \int_{t_0}^{z} L^1L^1f(y(u))\circ dW(u)]\circ dW(z)ds \\
& + \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s}[L^0g(y(t_0)) + \int_{t_0}^{z} L^0L^0g(y(u))du + \int_{t_0}^{z} L^1L^0g(y(u))\circ dW(u)]dz\circ dW(s) \\
& + \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s}[L^1g(y(t_0)) + \int_{t_0}^{z} L^0L^1g(y(u))du + \int_{t_0}^{z} L^1L^1g(y(u))\circ dW(u)]\circ dW(z)\circ dW(s) \\
& = y(t_0) + f(y(t_0))\int_{t_0}^{t} ds + g(y(t_0))\int_{t_0}^{t} \circ dW(s) \\
& + L^0f(y(t_0))\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s} dzds + L^1f(y(t_0))\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s} \circ dW(z)ds \\
& + L^0g(y(t_0))\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s} dz\circ dW(s) + L^1g(y(t_0))\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s} \circ dW(z)\circ dW(s) \\
& + \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s}\int_{t_0}^{z} L^0L^0f(y(u))dudzds + \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s}\int_{t_0}^{z} L^1L^0f(y(u))\circ dW(u)dzds \\
& + \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s}\int_{t_0}^{z} L^0L^1f(y(u))du\circ dW(z)ds + \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s}\int_{t_0}^{z} L^1L^1f(y(u))\circ dW(u)\circ dW(z)ds \\
& + \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s}\int_{t_0}^{z} L^0L^0g(y(u))dudz\circ dW(s) + \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s}\int_{t_0}^{z} L^1L^0g(y(u))\circ dW(u)dz\circ dW(s) \\
& + \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s}\int_{t_0}^{z} L^0L^1g(y(u))du\circ dW(z)\circ dW(s) + \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{s}\int_{t_0}^{z} L^1L^1g(y(u))\circ dW(u)\circ dW(z)\circ dW(s)\ .
\end{aligned}
$$

同理,将被积函数 $L^0L^0f(y(u))$, $L^1L^0f(y(u))$, $L^1L^0f(y(u))$, $L^1L^1f(y(u))$ 以及 $L^0L^0g(y(u))$, $L^1L^0g(y(u))$, $L^1L^0g(y(u))$, $L^1L^1g($
替换，即可展开到对应的三重 Stratonovich 积分。我们以 J 表示 Stratonovich 积分，并定义 $J_0 = \int_{t_0}^{t} ds$ 表示对时间的积分，$J_1 = \int_{t_0}^{t} \circ dW(s)$ 表示对 Wiener 过程的积分。因此最终有

$$
\begin{aligned}
y(t) = {} & y(t_0) + f(y(t_0))J_0 + g(y(t_0))J_1 + L^0f(y(t_0))J_{00} + L^1f(y(t_0))J_{10} \\
& + L^0f(y(t_0))J_{01} + L^1g(y(t_0))J_{11} + L^0L^0f(y(t_0))J_{000} + L^1L^0f(y(t_0))J_{100} \\
& + L^0L^1f(y(t_0))J_{010} + L^1L^1f(y(t_0))J_{110} + L^0L^0g(y(t_0))J_{001} + L^1L^0J_{101} \\
& + L^0L^1g(y(t_0))J_{011} + L^1L^1g(y(t_0))J_{111} + R\ .
\end{aligned} \tag{8}
$$

其中 R 表示剩下的更高阶的项。随机微分方程系数的高阶导数可以进一步展开得

$$L^0f = f'f\ , \tag{9}$$

$$L^0L^0f = L^0(f'f) = (f'f)'f = f''(f,f) + f'f'f\ , \tag{10}$$

其中 f' 和 f'' 分别表示线性和双线性算符，写成分量形式为

$$(f'(f))^i = f^i_j f^j\ , \tag{11}$$

$$(f''(f,f))^i = f^i_{jk} f^j f^k = \sum_{j,k=1}^{m} \frac{\partial^2 f^i}{\partial x_j \partial x_k} f^j f^k\ . \tag{12}$$

因此令 $y_0 = y(t_0)$，方程 (8) 有

$$\begin{aligned} y(t) &= y_0 + f(y_0)J_0 + g(y_0)J_1 + f'(y_0)(f(y_0))J_{00} + f'(y_0)(g(y_0))J_{10} \\ &\quad + f'(y_0)(f(y_0))J_{01} + g'(y_0)(g(y_0))J_{11} + f''(y_0)(f(y_0), f(y_0))J_{000} \\ &\quad + f'(y_0)(f'(y_0)(f(y_0)))J_{000} + f''(y_0)(f(y_0), g(y_0))J_{100} + f'(y_0)(f'(y_0)(g(y_0)))J_{100} \\ &\quad + f''(y_0)(g(y_0), f(y_0))J_{010} + f'(y_0)(g'(y_0)(f(y_0)))J_{010} \\ &\quad + f''(y_0)(g(y_0), g(y_0))J_{110} + f'(y_0)(g'(y_0)(g(y_0)))J_{110} \\ &\quad + g''(y_0)(f(y_0), f(y_0))J_{001} + g'(y_0)(f'(y_0)(f(y_0)))J_{001} \\ &\quad + g''(y_0)(f(y_0), g(y_0))J_{101} + g'(y_0)(f'(y_0)(g(y_0)))J_{101} \\ &\quad + g''(y_0)(g(y_0), y(t_0))J_{011} + g'(y_0)(g'(y_0)(f(y_0)))J_{011} \\ &\quad + g''(g(y_0), g(y_0))J_{111} + g'(y_0)(g'(y_0)(g(y_0)))J_{111} + R\ . \end{aligned} \tag{13}$$

由此我们可以看到，如果要构造高阶随机 Runge-Kutta 方法，在展开随机微分方程的解析解和数值解过程中，使复杂度提升的主要是 Stratonovich 的多重积分和随机微分方程系数的高阶导数的求解。为了简化随机微分方程的随机 Taylor 展开，类比与确定性 Runge-Kutta 方法对应的有根树理论，可以采用多色有根树理论。

2 随机 Runge-Kutta 方法的双色有根树理论

类比于确定系统 Runge-Kutta 方法构造过程中用于简化 Taylor 展开的有根树理论，简化随机 Taylor 展开可以采用多色有根树理论，即用多种颜色来表示不同的 Wiener 过程。当只有一个 Wiener 过程时，则有双色有根树理论。双色有根树的基本思路是采用树 t 的直观表示，结合一定的规则，可以直接表示出该树对应的 Taylor 展开项中系数高阶导数的表达式以及相应多重积分的表达式。因此，只要将规则讲清楚，这些规则是规定了树，树图，系数高阶导以及多重积分的关系，而树图，系数高阶导以及多重积分都可以以树为标准进行读出。理清这些关系，就可以采用树或者树图的方式来简化随机 Taylor 展开式。

其规则是这样的：首先阐述树和树图的关系，树根为 t，当 $t = \tau$ 时表示为确定结点，在树图中用 $\bullet$ 表示，当 $t = \sigma$ 时表示随机结点，在树图中用 $\circ$ 表示。如果 $t_1, ..., t_m$ 为双色树，$[t_1, ..., t_m]$ 和 $\{t_1, ..., t_m\}$ 分别表示用 $\bullet$ 和 $\circ$ 连接这些树。树与树图的对应为树从外往里对应树图从下往上，树从左往右对应树图从左往右。例如，$t_1 = [\sigma]$，$t_2 = \sigma$，那么树 $[t_1, t_2] = [[\sigma], \sigma]$ 从外往里，将最外层的 [] 看成根，对应的是 $\bullet$，然后由 [] 连接两个树 $[\sigma]$ 和 σ，第二个树即为 $\circ$，而第一个树也是从外往里，先为 $\bullet$，然后由 [] 在连接一个 σ，即 $\circ$，则有树图1。

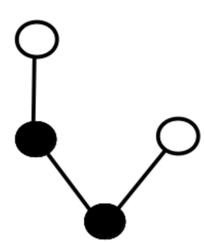

图 1: 树 $[[\sigma], \sigma]$

然后阐述树和系数函数高阶导数的关系，结点 τ 对应于 $f(y_0)$，σ 对应 $g(y_0)$，$[t_1, ..., t_m]$ 和 $\{t_1, ..., t_m\}$ 分别表示 $f^m(y_0)(t_1, ..., t_m)$ 和 $g^m(y_0)(t_1, ..., t_m)$，即为 $f(y_0)$ 和 $g(y_0)$ 的多线性映射。树从外往里对应高阶导数的从外往里，树的

从左往右对应高阶导数的从左往右。同样以 $[[\sigma],\sigma]$ 为例，则有

$$[[\sigma],\sigma] \mapsto f''(y_0)(f'(y_0)(g(y_0)),g(y_0)) \ .$$

最后阐述树与多重积分的关系，结点 τ 对应于对时间的积分，用 0 表示，σ 对应于对随机过程的积分，用 1 表示。[] 和 {} 分别表示对时间和随机过程的积分。树从外往里读，从左往右读，积分从右往左写。同样以 $[[\sigma],\sigma]$ 为例，则有

$$[[\sigma],\sigma] \mapsto J_{1100} \ .$$

根据这些规定，我们可以将方程 (13) 表示成

$$\begin{aligned}
y(t) = & \, y_0 + f(y_0)J_0 + g(y_0)J_1 + f'(y_0)(f(y_0))J_{00} + f'(y_0)(g(y_0))J_{10} \\
& + f'(y_0)(f(y_0))J_{01} + g'(y_0)(g(y_0))J_{11} + f''(y_0)(f(y_0),f(y_0))J_{000} \\
& + f'(y_0)(f'(y_0)(f(y_0)))J_{000} + f''(y_0)(f(y_0),g(y_0))J_{100} + f'(y_0)(f'(y_0)(g(y_0)))J_{100} \\
& + f''(y_0)(g(y_0),f(y_0))J_{010} + f'(y_0)(g'(y_0)(f(y_0)))J_{010} \\
& + f''(y_0)(g(y_0),g(y_0))J_{110} + f'(y_0)(g'(y_0)(g(y_0)))J_{110} \\
& + g''(y_0)(f(y_0),f(y_0))J_{001} + g'(y_0)(f'(y_0)(f(y_0)))J_{001} \\
& + g''(y_0)(f(y_0),g(y_0))J_{101} + g'(y_0)(f'(y_0)(g(y_0)))J_{101} \\
& + g''(y_0)(g(y_0),y(t_0))J_{011} + g'(y_0)(g'(y_0)(f(y_0)))J_{011} \\
& + g''(g(y_0),g(y_0))J_{111} + g'(y_0)(g'(y_0)(g(y_0)))J_{111} + R \ .
\end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned}
y(t) = & \, \phi + \tau + \sigma + [\tau] + [\sigma] + \{\tau\} + \{\sigma\} + [\tau,\tau] \\
& + [[\tau]] + [\tau,\sigma] + [[\sigma]] + [\sigma,\tau] + [\{\tau\}] + [\sigma,\sigma] \\
& + [\{\sigma\}] + \{\tau,\tau\} + \{[\tau]\} + \{\tau,\sigma\} + \{[\sigma]\} \\
& + \{\sigma,\tau\} + \{\{\tau\}\} + \{\sigma,\sigma\} + \{\{\sigma\}\} + R.
\end{aligned}$$

因此有如下定理

定理 1. *随机微分方程 (1) 解析解的 Taylor 展开级数为*

$$y(t) = \sum_{t \in T} \alpha(t) F(t)(y(t_0))\theta(t) \ ,$$

其中 $\theta(t)$ 表示对应的 Stratonovich 多重积分，$F(t)$ 为基本微分，$\alpha(t)$ 表示树 t 结点标号方法数。

并且有

$$\alpha(t) = \frac{\rho(t)!}{\gamma(t)\sigma(t)} \ .$$

$$\rho(\tau) = 1, \rho([t_1,t_2,...,t_m]) = 1 + \sum_{j=1}^{m} \rho(t_j) \ , \tag{15}$$

$$\gamma(\tau) = 1, \gamma([t_1,t_2,...,t_m]) = \rho([t_1,t_2,...,t_m]) \prod_{j=1}^{m} \gamma(t_j) \ , \tag{16}$$

参考文献

[1] 立君庞. 求解随机微分方程的三级随机 *Runge-Kutta* 方法. 硕士学位论文, 河海大学, 中国江苏南京, 2008.

[2] Pamela Marion Burrage. *Runge-Kutta Methods for Stochastic Differential Equations*. Doctor of Philosophy, The University of Queensland Brisbane, Queensland, Australia, 1999.