

基于时间离散和空间离散的两类随机微分方程数值格式比较

华光辉

东北师范大学 数学与统计学院

2025年12月

报告提纲

- 1 引言
- 2 预备知识
- 3 固定空间距离跨越时间的比较
- 4 随机 Canard 快-慢系统的动力学行为
- 5 综合比较与结论

研究背景与问题动机

- 随机微分方程 (SDE)

$$dX_t = \mu(X_t) dt + \sigma(X_t) dW_t, \quad X_0 = x_0, \quad (1)$$

其中 $\mu(x)$ 是漂移项 (drift), $\sigma(x)$ 是扩散项 (diffusion), W_t 为标准布朗运动, 在金融、物理、生物、化学、神经科学等领域刻画含噪动力学行为.

- [Maruyama, 1955, Rend. Circ. Mat. Palermo.] Euler–Maruyama 方法在全局 Lipschitz 情形下具有 1/2 阶强收敛和 1 阶弱收敛
- [Milstein, 1975, Theory Probab. Appl.] 结合高阶方法可以提高收敛阶, 例如 Milstein 方法是 1.0 阶强收敛和 1.0 阶弱收敛的
- [Hutzenthaler–Jentzen–Kloeden, 2011, Proc. R. Soc. A]. 实际模型中漂移 μ 、扩散 σ 往往只满足局部 Lipschitz 条件, 甚至具有超线性增长, 经典 Euler–Maruyama 格式可能发散

两类典型数值方法：时间离散与空间离散

- [Bou-Rabee–Vanden-Eijnden, 2018, Mem. Amer. Math. Soc.] 基于生成元的连续时间随机游走 (CTRW) 方法, 由 Bou-Rabee 和 Vanden-Eijnden 系统发展. 在空间网格上离散生成元 L 得到 Q 矩阵, 再用 SSA 等算法模拟跳跃过程.
- 改进的显式时间离散方法:
 - [Hutzenthaler–Jentzen–Kloeden, 2012, Ann. Appl. Probab.] 驯服 Euler–Maruyama (tamed EM) 方法
 - [Mao, 2015, J. Comput. Appl. Math.] 截断 Euler–Maruyama (truncated EM) 方法
- 问题: 设置合理的比较准则来进行两种数值方法的比较.

本文研究内容与主要贡献

- 在一维立方振子模型中，引入漂移主导时间 t^e ，比较：
 - 空间离散 CTRW 的平均驻留时间 t^u ；
 - 时间离散驯服/截断 EM 格式下的 MFPT t^δ, t^Δ .
- 理论贡献：
 - 证明在强漂移极限下， t^u 与 t^e 的渐近一致性；
 - 在多项式漂移情形下给出相对误差估计；
 - 给出驯服 Euler 与截断 EM 在固定空间跨越时间上的 MFPT 渐近展开和误差估计.
- 在随机 Canard 系统中：
 - 基于生成元建立逃逸概率和 MFPT 的空间离散收敛性；
 - 比较时间离散与空间离散在逃逸概率、MFPT 以及 work-error 指标下的表现.

时间离散：驯服/截断 Euler–Maruyama

- [Hutzenthaler–Jentzen–Kloeden, 2011, Proc. R. Soc. A]. 对非全局 Lipschitz 系数，经典 EM 可能发散
- [Hutzenthaler–Jentzen–Kloeden, 2012, Ann. Appl. Probab.] 驯服 Euler–Maruyama (tamed EM):

$$X_{k+1} = X_k + \frac{\mu(X_k)}{1 + \delta|\mu(X_k)|} \delta + \sigma(X_k)\Delta W_k.$$

- [Mao, 2015, J. Comput. Appl. Math.] 截断 Euler–Maruyama (truncated EM):
 - 在 $B(0, h(\Delta))$ 内截断漂移和扩散，使其有界且满足全局 Lipschitz;
 - 对截断后的系数使用标准 EM.
- 在 Khasminskii 型条件下，两者均保持 $1/2$ 阶强收敛.

定理 (驯服 Euler 方法的 MFPT 渐近与误差)

设 $\mu \in C^2$ 在 x 的邻域内单调, 且 $\mu(x) < 0$, σ 有界. 在极限 $x \rightarrow \infty$, $\delta/x \rightarrow 0$, $\Delta \rightarrow 0$ 下, 驯服 EM 下从 x 向左跨越距离 δ 的 MFPT t^δ 满足

$$t^\delta = \frac{\delta}{|\mu(x)|} + \delta \Delta + \mathcal{O}(\Delta^2 \delta) + \mathcal{O}(\delta^2 |\mu|^{-2} |\mu'|),$$
$$t^\delta - t^e = \delta \Delta - \frac{\mu'(x)}{2\mu(x)^2} \delta^2 + o(\Delta \delta) + o(\delta^2).$$

以主导项 $\delta/|\mu(x)|$ 计, 相对误差主要由 $\Delta|\mu(x)|$ 控制.

定理 (截断 Euler-Maruyama 方法的 MFPT 渐近与误差)

沿用上面的设定, 设截断半径 $h(\Delta)$ 使得在 $[x - \delta, x]$ 内截断生效 ($x \gg h(\Delta)$). 则存在常数 $c > 0$ 使得

$$t^\Delta = \frac{\delta}{|\mu(h(\Delta))|} + \mathcal{O}(\delta^2),$$

并且

$$t^\Delta - t^e = \delta \left(\frac{1}{|\mu(h(\Delta))|} - \frac{1}{|\mu(x)|} \right) + \mathcal{O}(\delta^2).$$

对立方漂移 $\mu(y) = -y^3$, 若取常用约束 $\Delta^{1/4} h(\Delta) \leq 1$, 则要求 Δ 随 x 急剧减小才能保持给定的相对误差, 这限制了截断 EM 的适用范围.

SSA (Gillespie) 算法与等待时间

- 连续时间马尔可夫链视角：

- 在当前状态 x 下，各反应道具有速率 $q_i(x)$ 。
- 等待时间 τ 服从参数为 $\lambda(x) = \sum_i q_i(x)$ 的指数分布。
- 下一次反应类型根据权重 $q_i(x)$ 随机选取。

- 这正是 Gillespie SSA 算法的核心思想。

SSA 算法伪代码（单对细菌-病毒）示意：

- ① 初始化： $t \leftarrow 0$, $X \leftarrow x_0$, $Y \leftarrow y_0$ 。
- ② 计算各反应速率 q_0, q_1, q_2, q_3 ，并令 $\lambda = q_0 + q_1 + q_2 + q_3$ 。
- ③ 生成 $\xi_1, \xi_2 \sim U(0, 1)$ ，令 $\tau = -\ln(1 - \xi_1)/\lambda$ ，更新 $t \leftarrow t + \tau$ 。
- ④ 根据 ξ_2 与累积概率选择发生的反应，并更新 (X, Y) 。
- ⑤ 重复上述步骤直到 $t \geq T$ 。

SSA 的优点：精确但在大体系和高反应速率情形下计算成本高。

随机微分方程与数值离散：时间 vs 空间

考虑 n 维随机微分方程

$$dX_t = \mu(X_t) dt + \sigma(X_t) dW_t,$$

其中 W_t 为 n 维 Wiener 过程, $\mu: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $\sigma: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ 。

常用假设:

- 全局 Lipschitz 条件:

$$|\mu(x) - \mu(y)| + |\sigma(x) - \sigma(y)| \leq K_1 |x - y|.$$

- 线性增长条件:

$$|\mu(x)|^2 + |\sigma(x)|^2 \leq K_2(1 + |x|^2).$$

- 在上述条件下, 可证明解的存在唯一性。

数值近似的两种思路:

- 时间离散格式 (time-discretization scheme)。
- 空间离散格式 (space-discretization scheme)。

时间离散：Euler–Maruyama 方法与发散例子

Euler–Maruyama 方法： 令时间步长为 Δ , $t_k = t_0 + k\Delta$, 近似解满足

$$\hat{X}_{t_{k+1}}^\Delta = \hat{X}_{t_k}^\Delta + \mu(\hat{X}_{t_k}^\Delta)\Delta + \sigma(\hat{X}_{t_k}^\Delta)(W_{t_{k+1}} - W_{t_k}),$$

其中 $W_{t_{k+1}} - W_{t_k} \sim N(0, \Delta)$ 彼此独立。

一维立方振子 (Cubic Oscillator) 加性噪声：

$$dX_t = -X_t^3 dt + \sigma dW_t, \quad X(0) \in \mathbb{R}.$$

该系统具有几何遍历性，其平稳密度为

$$\nu(x) = Z^{-1} \exp\left(-\frac{x^4}{2\sigma^2}\right),$$

其中 Z 为归一化常数。

然而，由于漂移项只满足局部 Lipschitz 条件，经典 EM 方法在长时间模拟中会发散 (Mattingly, Stuart and Higham, 2002)：

$$\mathbb{E}[|\hat{X}_{[t/\Delta]}^\Delta|^2] \rightarrow \infty, \quad t \rightarrow \infty.$$

因此需要截断 EM、tamed EM 等改进格式。

空间离散: Kolmogorov 方程与生成元

生成元 (infinitesimal generator):

设 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 为 C^2 函数, 对应 SDE 的生成元为

$$Lf(x) = \sum_{i=1}^n \mu_i(x) \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) + \sum_{i,j=1}^n M_{ij}(x) \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x),$$

其中 $M(x) = \frac{1}{2}\sigma(x)\sigma(x)^T$ 。

Kolmogorov 方程:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = Lu(t, x), \quad u(0, x) = f(x).$$

解具有随机表示

$$u(t, x) = \mathbb{E}_x[f(X_t)],$$

即条件在 $X_0 = x$ 下的期望。

空间离散思想: 通过构造一个离散空间生成元 Q 来近似 L , 然后使用连续时间随机游走 (CTRW) 在离散格点上模拟轨道, 从而实现 SDE 的数值解。

离散生成元 Q 与 CTRW 算法

离散生成元： 选定若干“反应通道” $x \rightarrow y_i(x)$, $1 \leq i \leq K$, 定义

$$Qf(x) := \sum_{i=1}^K q(x, y_i(x)) (f(y_i(x)) - f(x)),$$

其中 $q(x, y)$ 为从 x 跳到 y 的速率函数。

连续时间随机游走 (CTRW) 算法： 给定当前状态 $X(t) = x$ 。

① 生成指数分布等待时间：

$$\tau \sim \text{Exp}(\lambda(x)), \quad \lambda(x) = \sum_{i=1}^K q(x, y_i(x)).$$

② 以概率

$$\mathbb{P}(X(t + \tau) = y_i(x) \mid X(t) = x) = \frac{q(x, y_i(x))}{\lambda(x)}$$

更新状态 $x \rightarrow y_i(x)$ 。

该过程对应一个具有生成元 Q 的连续时间马尔可夫链，用来近似原

SDE 的路径行为

空间离散格式: Q_u 与 Q_c (Bou-Rabee & Vanden-Eijnden, 2018)

考虑对角扩散矩阵情形, 令 $M_{ii}(x) = \sigma_{ii}^2(x)/2$, $h_i^+(x)$ 和 $h_i^-(x)$ 为第 i 方向上的前/后向网格步长, $h_i(x)$ 为它们的平均值。

有限差分离散 (Q_u):

$$Q_u f(x) = \sum_{i=1}^n \left[\left(\frac{\mu_i(x) \vee 0}{h_i^+(x)} + \frac{M_{ii}(x)}{h_i(x)h_i^+(x)} \right) (f(x + h_i^+(x)e_i) - f(x)) \right. \\ \left. + \left(\frac{-\mu_i(x) \wedge 0}{h_i^-(x)} + \frac{M_{ii}(x)}{h_i(x)h_i^-(x)} \right) (f(x - h_i^-(x)e_i) - f(x)) \right].$$

有限体积离散 (Q_c):

$$Q_c f(x) = \sum_{i=1}^n \frac{M_{ii}(x)}{h_i(x)h_i^+(x)} \exp\left(\frac{\mu_i(x)h_i^+(x)}{2M_{ii}(x)}\right) (f(x + h_i^+(x)e_i) - f(x)) \\ + \frac{M_{ii}(x)}{h_i(x)h_i^-(x)} \exp\left(-\frac{\mu_i(x)h_i^-(x)}{2M_{ii}(x)}\right) (f(x - h_i^-(x)e_i) - f(x)).$$

空间离散方法的优缺点与改进需求

优点:

- 对 SDE 的有限时间和长时间模拟都具有数值稳定性。
- 在一定意义上可以缓解维数灾难（特别是与混合方法结合时）。
- 在构造上可以实现“无网格”（gridless）或自适应网格。

缺点:

- Q_c 具备二阶精度，但其平均等待时间的渐近行为较差，在小噪声情形下不适用。
- Q_u 在平均等待时间上表现较好，但只有一阶精度，并可能引入额外的人工扩散。

结论: 需要寻找一种兼具精度和良好渐近性质的改进 Q 格式。这也是后面 $Q_{\tilde{u}}$ 格式的出发点。

$Q_{\tilde{u}}$ 格式 (Zu, 2023)

为了补偿 Q_u 中由泊松近似引入的人工扩散, 可以通过“减小有效扩散系数”来构造改进格式 $Q_{\tilde{u}}$ 。

定义

$$Q_{\tilde{u}}f(x) = \sum_{i=1}^n \left[\left(\frac{\mu_i(x) \vee 0}{h_i(x)} + \frac{M_{ii}^+(x)}{h_i(x)h_i^+(x)} \right) (f(x + h_i^+(x)e_i) - f(x)) \right. \\ \left. + \left(\frac{-\mu_i(x) \wedge 0}{h_i(x)} + \frac{M_{ii}^-(x)}{h_i(x)h_i^-(x)} \right) (f(x - h_i^-(x)e_i) - f(x)) \right],$$

其中

$$M_{ii}^+(x) = \frac{1}{2}(\sigma_{ii}^2(x) - |\mu_i(x)|h_i^+(x)) \vee 0,$$

$$M_{ii}^-(x) = \frac{1}{2}(\sigma_{ii}^2(x) - |\mu_i(x)|h_i^-(x)) \vee 0.$$

该格式在保留二阶精度的同时, 改进了平均等待时间的渐近性质, 尤其适合小噪声情形。

CTRW 算法 (以 $h = \delta x_i^\pm = \delta x_i$ 为例)

输入: 网格上的初始值 x_0 , 终止时间 T 。

输出: 一条随机轨线 $X = \{\tilde{X}_t^h\}_{0 \leq t \leq T}$ 。

① 置 $t \leftarrow 0, X \leftarrow x_0$ 。

② 循环: 当 $t < T$ 时

① 对 $i = 1, \dots, n$, 根据选用的 Q 格式 ($Q_{\bar{u}}$ 或 Q_c 或 Q_u) 计算 q_{i1}, q_{i2} 。

② 令

$$\lambda \leftarrow \sum_{i=1}^n (q_{i1} + q_{i2}).$$

③ 生成 $\xi_1, \xi_2 \sim U(0, 1)$, 计算 $\tau \leftarrow -\ln(1 - \xi_1)/\lambda$, 更新 $t \leftarrow t + \tau$ 。

④ 根据 ξ_2 和权重 $\{q_{i1}, q_{i2}\}$ 选定要跳的坐标方向 i 和前/后向 $j \in \{1, 2\}$, 并更新

$$X \leftarrow X + (-1)^{j-1} h e_i.$$

③ 结束循环。

在实际实现中可使用 C++(Ofast, OpenMP 并行) 或 Python(numba 并行) 来加速。

$Q_{\tilde{u}}$ 与 Q_c 的二阶矩比较与平均等待时间

设 $\{\tilde{X}_t^h\}_{t \geq 0}$ 与 $\{\hat{X}_t^h\}_{t \geq 0}$ 分别为 $Q_{\tilde{u}}$ 与 Q_c 生成的马尔可夫过程, 假设 $\tilde{X}_t^h = \hat{X}_t^h = x$, 且 $\sigma(x)$ 对角、步长 h 足够小并满足

$$\sigma_{ii}^2(x) > |\mu_i(x)|h.$$

定理 (Zu, 2023): 记 τ_u 与 τ_c 为对应的平均等待时间, 则有

$$\mathbb{E}\tilde{X}_{t+\tau_u}^h = \mathbb{E}\hat{X}_{t+\tau_c}^h + O(h^4),$$

且

$$\mathbb{E}|\tilde{X}_{t+\tau_u}^h - \mathbb{E}\tilde{X}_{t+\tau_u}^h|^2 = \mathbb{E}|\hat{X}_{t+\tau_c}^h - \mathbb{E}\hat{X}_{t+\tau_c}^h|^2 + O(h^4).$$

平均等待时间的渐近分析: 对于一维 SDE

$$dX_t = \mu(X_t)dt + \sigma dW_t,$$

若 $\text{sign}(x)\mu(x) \rightarrow -\infty$ ($|x| \rightarrow \infty$), 则

- $Q_{\tilde{u}}$ 与 Q_u 的平均等待时间渐近上与真实过程一致;
- Q_c 的平均等待时间渐近行为不正确 (Bou-Rabee & Vanden-Eijnden, 2018)。

Itô 扩散与无穷小生成元

- 考虑 \mathbb{R}^d 上的 Itô 扩散

$$dX_t = \mu(X_t) dt + \sigma(X_t) dW_t, \quad X_0 = x.$$

- 对 $f \in C^2(\mathbb{R}^d)$, 无穷小生成元为

$$(Lf)(x) = \sum_i \mu_i(x) \partial_i f(x) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} a_{ij}(x) \partial_{ij} f(x), \quad a = \sigma \sigma^\top.$$

空间离散：连续时间随机游走（CTRW）

- 在空间网格 $\{x_i\}$ 上离散生成元 L ，得到 Q 矩阵：

$$(Qf)_i = \sum_j q_{ij} f(x_j), \quad q_{ij} \geq 0, \quad \sum_{j \neq i} q_{ij} = -q_{ii}.$$

- 由此得到有限状态空间上的 Q 过程 X_t ：
 - 状态 x_i 的跳出速率 $\lambda_i = -q_{ii}$ ；
 - 驻留时间服从 $\text{Exp}(\lambda_i)$ ，跳转概率为 q_{ij}/λ_i .
- 这是 Bou-Rabee 和 Vanden-Eijnden 提出的生成元离散方法的典型形式

模型与顺漂移设定

- 一维加性噪声 SDE:

$$dX_t = \mu(X_t) dt + \sigma dW_t, \quad X_0 = x, \quad |x| \gg 1.$$

- 选取立方振子模型:

$$\mu(x) = -x^3, \quad \sigma > 0.$$

- 研究从 x 向左跨越固定距离 δ 的时间:

$$L = x - \delta, \quad 0 < \delta \ll x, \quad \mu(x) < 0.$$

- 当漂移方向与目标一致（顺漂移）时，跨越时间由漂移主导，可由常微分方程

$$\dot{X}_t = \mu(X_t), \quad X(0) = x$$

定义漂移主导时间 t^e

漂移主导时间与空间离散平均驻留时间

- 漂移主导时间

$$t^e = \int_{x-\delta}^x \frac{ds}{|\mu(s)|},$$

在 $\delta \ll x$ 下可展开为

$$t^e = \frac{\delta}{|\mu(x)|} - \frac{\mu'(x)}{2\mu(x)^2} \delta^2 + \mathcal{O}(\delta^3),$$

- CTRW 中, 状态 x_i 的跳出速率

$$\lambda(x_i) \approx \frac{|\mu(x_i)|}{h}, \quad \Rightarrow \quad t^u = \frac{1}{\lambda(x_i)} \approx \frac{h}{|\mu(x_i)|}.$$

- 空间离散平均驻留时间 t^u 与 t^e 的比较, 是评估 CTRW在大漂移情况下模型刻画能力的核心.

- [Weinan E等, 2021, Applied Stochastic Analysis, Amer. Math.].
对一维 SDE, 以区间端点为吸收边界, 平均首达时间 $m(x)$ 满足

$$\mu(x)m'(x) + \frac{\sigma^2}{2}m''(x) = -1,$$

并配以吸收或反射边界条件

- 漂移主导时间 t^e 可视为该 PDE 解在强漂移极限下的主导项.
- 时间离散驯服/截断 EM 通过时间步进模拟路径, 统计首达时间样本得到 t^δ, t^Δ .

定理 (空间离散平均驻留时间的渐近一致性)

假设 $|\mu(x)|$ 足够大且

$$\frac{\mu'(x)}{\mu(x)^2} \sim o\left(\frac{1}{\mu(x)}\right), \quad |x| \rightarrow \infty.$$

则对任意 $h > 0$, 空间离散平均驻留时间 t^u 与漂移主导时间 t^e 满足

$$\frac{|t^u - t^e|}{t^e} \sim O\left(\frac{\mu'(x)}{\mu(x)}\right) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0.$$

该定理表明, 在强漂移区域, CTRW 给出的平均驻留时间 t^u 与解析漂移时间 t^e 在一阶近似上是一致的.

定理 (多项式漂移下的误差估计)

假设

$$\mu(x) = -ax^{2p+1}, \quad p \geq 0, a > 0,$$

记漂移主导时间主部 $t^* = \delta/|\mu(x)|$, 则对任意固定 $h > 0$, 有

$$\frac{|t^u - t^*|}{t^*} \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0.$$

特别地, 对立方振子模型, 空间离散方法在强漂移区域能够高精度地再现局部跨越时间的主要大小.

一维立方振子模型不同格式的比较

在一维立方振子模型中, 即 $\mu(x) = -x^3$ 时,

$$|t^u - t^e| = \mathcal{O}\left(\frac{\delta}{x^2}\right),$$

$$|t^\delta - t^e| = \delta \Delta - \frac{3}{2} \frac{\delta^2}{x^4} + o(\Delta\delta) + o(\delta^2),$$

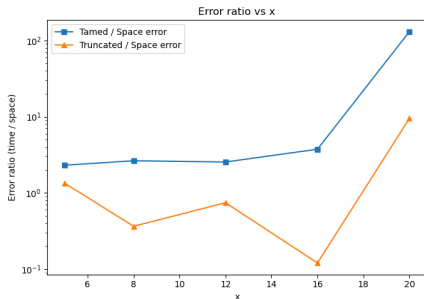
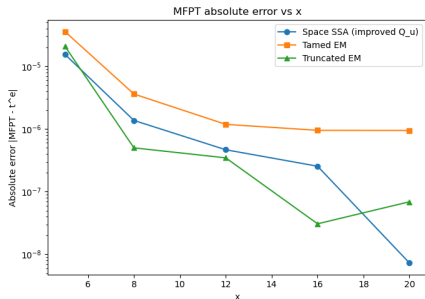
$$|t^\Delta - t^e| = \delta \left(\frac{1}{h(\Delta)^3} - \frac{1}{x^3} \right) + \mathcal{O}(\delta^2).$$

通过以上分析, 可以看到在顺漂移和大初值情形下空间离散方法在固定空间跨越距离的时间估计方面具有明显优势。

一维立方振子数值实验设置

- 模型: $dX_t = -X_t^3 dt + \sigma dW_t$, 初值 $X_0 = x \gg 1$.
- 空间离散:
 - 在一维网格上构造 Q_u 或改进的 \tilde{Q}_u 生成元
 - 通过 SSA 得到 CTRW 轨道, 并利用平均驻留时间给出 t'' .
- 时间离散:
 - 采用驯服 EM 和截断 EM, 时间步长取若干值 Δ ;
 - 通过 Monte Carlo 估计 MFPT t^δ, t^Δ .
- 误差度量:
 - 相对于 t^e 的绝对误差和相对误差;
 - 时间离散误差与空间离散误差的比值.

平均时间误差比较



左图：不同方法相对于 t^e 的绝对误差；右图：时间离散误差与空间离散误差比值。

- 随着 x 增大，三种方法的平均跨越时间均趋近 t^e ，其中 CTRW/SSA 的误差衰减最快。
- 大 x 区域下，时间离散误差与空间离散误差的比值远大于 1，说明在固定空间跨越距离问题中，空间离散在强漂移极限下具有明显优势。

随机 Canard 快-慢系统模型

- 考虑一类具有 Canard 结构的二维快-慢系统

$$\begin{cases} dX_t = f(X_t, Y_t) dt + \sigma_x dW_t^1, \\ dY_t = \varepsilon g(X_t, Y_t) dt + \sigma_y dW_t^2, \end{cases}$$

其中 $0 < \varepsilon \ll 1$.

- 相空间结构:
 - 存在吸引/排斥慢流形及折叠点;
 - 轨道沿慢流形缓慢演化, 在折叠附近发生快跳, 形成 Canard 轨道.
- 噪声引入随机性: 快跳时间与位置呈分布, 慢流形附近存在驻留与穿越的统计结构, 相关随机 Canard 模型可参见 [Slepukhina 等, 2022, Chaos, Solitons & Fractals].

逃逸概率与 MFPT

- 在相空间 D 中选取两个不相交区域 $A, B \subset D$:
 - A : 左侧稳态或代谢态;
 - B : 右侧目标区域.
- 逃逸概率 (committor) 定义为

$$q(z) = \mathbb{P}^z\{\tau_B < \tau_A\}, \quad z \in D \setminus (A \cup B),$$

[Metzner–Schütte–Vanden-Eijnden, 2009, Multiscale Model. Simul.]

[E–Vanden-Eijnden, 2010, Annu. Rev. Phys. Chem.].

$q(z)$ 满足

$$Lq = 0 \text{ in } D \setminus (A \cup B), \quad q|_A = 0, \quad q|_B = 1.$$

- 平均首达时间 $m(z) = \mathbb{E}^z[\tau_{A \cup B}]$ 满足

$$Lm = -1, \quad m|_{A \cup B} = 0.$$

空间离散下逃逸概率的收敛性

- 在二维网格 D_h 上离散生成元 L , 得到 CTRW 生成元 Q_h .
- 空间离散逃逸概率 q_h 满足线性方程

$$Q_h q_h = 0 \text{ on 内点}, \quad q_h|_A = 0, \quad q_h|_B = 1.$$

定理 (空间离散下逃逸概率的收敛)

在适当正则性与逼近假设下, 存在常数 $C > 0$, 当 $h > 0$ 足够小时, 有

$$\max_{z_i \in D_h} |q_h(z_i) - q(z_i)| \leq Ch^p,$$

其中 p 由局部离散逼近阶决定. 对改进的 \tilde{Q}_u 方案有 $p = 2$.

这说明改进的空间离散在逃逸概率上可达到二阶空间精度.

时间离散下逃逸概率估计的收敛性

- 基于驯服/截断 EM 的数值模拟：
 - 在网格节点上发射大量样本路径；
 - 统计从 z 出发首先到达 B 的频率，得到 $q_\Delta(z)$.
- 在 Khasminskii 型条件下，路径强收敛

$$\max_{0 \leq k \leq N} \left(\mathbb{E} |X_{t_k} - X_k^\Delta|^p \right)^{1/p} \leq C \Delta^{1/2}$$

的结果可见 [Mao–Szpruch, 2013, Ann. Appl. Probab.];

[Mao, 2015, J. Comput. Appl. Math.]

这可以推广为对逃逸概率的弱收敛控制

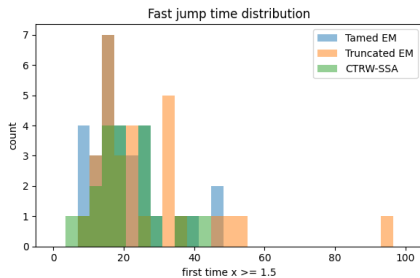
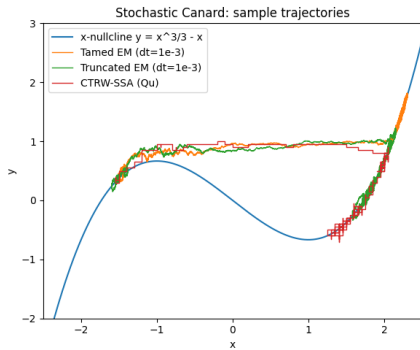
$$|q_\Delta(z) - q(z)| \leq C \Delta^{1/2},$$

误差阶受限于时间步进的强收敛阶。

- 从生成元角度看，空间离散在逃逸概率这类长期弱量上具有更高阶的空间精度。

- 空间离散：
 - 在相空间矩形区域上构造规则网格；
 - 利用 \tilde{Q}_u 生成元构造 CTRW，直接求解线性方程得到 q_h, m_h .
- 时间离散：
 - 使用驯服 EM 与截断 EM，时间步长 Δ 取若干值；
 - 在所有网格节点上独立发射 Monte Carlo 轨道，估计 q_Δ, m_Δ .
- 工作量 (work)：
 - CTRW：求解稀疏线性方程的操作数；
 - 时间离散：所有路径的总时间步数.

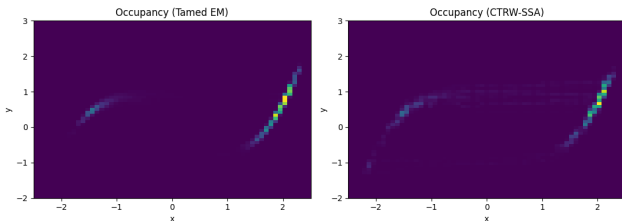
样本路径与快跳时间分布



左：三种数值方法在 $T = 40$ 内的样本路径；右：对应的快跳时间分布直方图。

- 三种方法均能再现贴靠慢流形、折叠附近快跳的几何结构。
- 快跳时间主要集中在有限区间内，各方法的分布区间相互重叠，峰值位置略有差异。

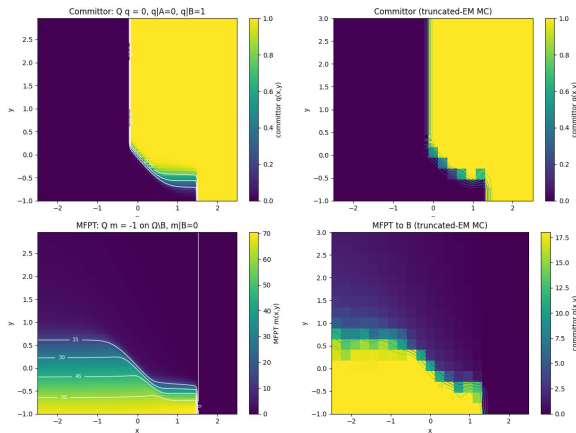
占据度热图



占据度热图刻画轨道在相空间不同区域出现的相对频率.

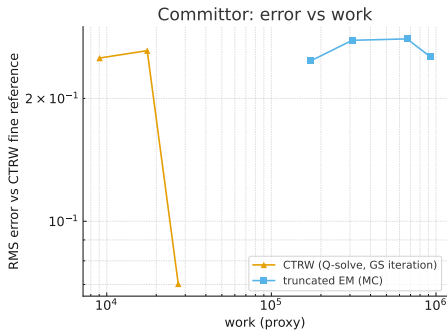
- 两种方法均在慢流形附近给出较高占据度.
- 在折叠附近的边界层结构上, CTRW 给出的驻留分布更平滑, 更接近生成元刻画的理论结构.

逃逸概率与 MFPT 热图



上：逃逸概率函数 q 的空间结构；下：MFPT m 的空间结构.左列为 CTRW/SSA，右列为截断 EM Monte Carlo.

逃逸概率的 work-error 曲线



截断 EM 方法与 CTRW 在逃逸概率 RMS 误差下的 work-error 比较.

- 在相同工作量下, CTRW 通常能提供更小的 RMS 误差.
- 时间离散方法的误差随工作量单调减小, 但斜率受限于强收敛阶和 Monte Carlo 方差.
- 在随机 Canard 系统这种快-慢模型中, 空间离散更适合求解逃逸概率和 MFPT 等弱/长期指标.

固定空间距离跨越时间上的比较小结

- 理论上, 空间离散平均驻留时间 t^u 与漂移主导时间 t^e 在强漂移极限下渐近一致.
- 多项式漂移 $\mu(x) = -ax^{2p+1}$ 下, t^u 相比主部 t^* 的相对误差随 $|x|$ 增大而消失.
- 驯服/截断 EM 的 MFPT t^δ, t^Δ 虽然可以给出渐近展开, 但相对误差受限于时间步长的选取.
- 一维立方振子数值实验表明, 在相同空间跨越距离与相近计算代价下, CTRW/SSA 的平均时间估计更稳定、更精确.

随机 Canard 系统上的比较小结

- 在有限时间窗口和路径几何上：
 - 驯服 Euler 与截断 EM 更擅长再现 Canard 轨道的几何细节；
 - CTRW 也能保持整体几何结构.
- 在逃逸概率和 MFPT 等弱/长期指标上：
 - CTRW 通过一次稀疏线性求解即可获得全场解，空间精度高、噪声小；
 - 时间离散方法在给定工作量下误差较大，受限于强收敛阶与 Monte Carlo 方差.
- work-error 曲线显示，在逃逸概率 RMS 误差固定时，空间离散往往具有更低的计算代价.

时间离散与空间离散方法的特点对比

- 时间离散（驯服/截断 EM）：
 - 优点：实现简单，易与现有代码库兼容；适合关注少量初值的路径级分析；
 - 缺点：步长受稳定性与收敛阶限制，对弱量需要大量 Monte Carlo 降低方差.
- 空间离散（CTRW/ Q 矩阵）：
 - 优点：直接在生成元层面离散，适合求解全场的逃逸概率和 MFPT，空间精度高；
 - 缺点：高维问题中网格数目巨大，需要稀疏线性代数和多重网格等技术支持.
- 本文通过理论定理与数值实验，展示了两类方法在不同指标下的适用场景.

- 将 CTRW/生成元离散方法推广到更高维、具有复杂几何约束的相空间.
- 结合自适应网格与自适应时间步长, 提高长时间模拟效率.
- 探索时间离散与空间离散的混合策略, 例如在关键区域采用高精度空间离散, 在其余区域使用时间离散.
- 将逃逸概率/MFPT 分析与机器学习方法 (如 PINN、深度强化学习) 结合, 用于复杂随机系统的稀有事件分析.

参考文献 I



P. E. Kloeden, E. Platen, P. E. Kloeden, and E. Platen, *Stochastic differential equations*. Springer, 1992.



M. Hutzenthaler, A. Jentzen, and P. E. Kloeden, "Strong and weak divergence in finite time of euler's method for stochastic differential equations with non-globally lipschitz continuous coefficients," *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 467, no. 2130, pp. 1563–1576, 2011.



D. J. Higham, X. Mao, and A. M. Stuart, "Strong convergence of euler-type methods for nonlinear stochastic differential equations," *SIAM journal on numerical analysis*, vol. 40, no. 3, pp. 1041–1063, 2002.



M. Hutzenthaler, A. Jentzen, and P. E. Kloeden, "Strong convergence of an explicit numerical method for sdes with nonglobally lipschitz continuous coefficients," 2012.



X. Wang and S. Gan, "The tamed milstein method for commutative stochastic differential equations with non-globally lipschitz continuous coefficients," *Journal of Difference Equations and Applications*, vol. 19, no. 3, pp. 466–490, 2013.



W. Liu and X. Mao, "Strong convergence of the stopped euler–maruyama method for nonlinear stochastic differential equations," *Applied Mathematics and Computation*, vol. 223, pp. 389–400, 2013.



X. Mao, "The truncated euler–maruyama method for stochastic differential equations," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 290, pp. 370–384, 2015.



X. Mao, "Convergence rates of the truncated euler–maruyama method for stochastic differential equations," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 296, pp. 362–375, 2016.



L. Hu, X. Li, and X. Mao, "Convergence rate and stability of the truncated euler–maruyama method for stochastic differential equations," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 337, pp. 274–289, 2018.



S. Sabanis, "Euler approximations with varying coefficients: the case of superlinearly growing diffusion coefficients," 2016.

参考文献 II



T. Brereton, "Stochastic simulation of processes, fields and structures," *Institute of Stochastic*, 2014.



B. Oksendal, *Stochastic differential equations: an introduction with applications*. Springer Science & Business Media, 2013.



N. Bou-Rabee and E. Vanden-Eijnden, *Continuous-time random walks for the numerical solution of stochastic differential equations*. American Mathematical Society, 2018, vol. 256, no. 1228.



E. Platen, "An introduction to numerical methods for stochastic differential equations," *Acta Numerica*, vol. 8, pp. 197–246, 1999.



J. C. Mattingly, A. M. Stuart, and D. J. Higham, "Ergodicity for sdes and approximations: locally lipschitz vector fields and degenerate noise," *Stochastic processes and their applications*, vol. 101, no. 2, pp. 185–232, 2002.



J. Zu, "Random walk numerical scheme for the steady-state of stochastic differential equations," *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, vol. 121, p. 107200, 2023.



G. Maruyama, "Continuous markov processes and stochastic equations," *Rendiconti del Circolo Matematico di Palermo*, vol. 4, no. 1, pp. 48–90, 1955.



G. N. Mil'shtejn, "Approximate integration of stochastic differential equations," *Theory of Probability and Its Applications*, vol. 19, no. 3, pp. 557–562, 1975.



L. Hu, X. Li, and X. Mao, "Convergence rate and stability of the truncated euler–maruyama method for stochastic differential equations," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 337, pp. 274–289, 2018.



K. Yosida, *Functional analysis*. Springer Science & Business Media, 2012, vol. 123.



E. Vanden-Eijnden, "Transition path theory," in *Computer Simulations in Condensed Matter Systems: From Materials to Chemical Biology, Volume 1*, ser. Lecture Notes in Physics. Springer, 2006, vol. 703, pp. 453–493.



W. E and E. Vanden-Eijnden, "Towards a theory of transition paths," *Journal of Statistical Physics*, vol. 123, pp. 503–523, 2006.



P. Metzner, C. Schütte, and E. Vanden-Eijnden, "Transition path theory for markov jump processes," *Multiscale Modeling & Simulation*, vol. 7, no. 3, pp. 1192–1219, 2009.



N. Bou-Rabee and E. Vanden-Eijnden, *Continuous-Time Random Walks for the Numerical Solution of Stochastic Differential Equations*, ser. Memoirs of the American Mathematical Society. American Mathematical Society, 2018, vol. 256, no. 1228.



E. Weinan, T. Li, and E. Vanden-Eijnden, *Applied stochastic analysis*. American Mathematical Soc., 2021, vol. 199.



Applied Stochastic Analysis (UBC) lecture.



P. Hänggi, P. Talkner, and M. Borkovec, "Reaction-rate theory: Fifty years after kramers," *Reviews of Modern Physics*, vol. 62, no. 2, pp. 251–341, 1990.

谢谢大家!