

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

- 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。

- Euler-Maruyama 方法 [5, 2]: 在全局 Lipschitz 情形下具有 1/2 阶强收敛、1 阶弱收敛;
- 结合 Milstein 等高阶方法 [6, 3], 可提高收敛阶。
- 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 [1, 2]。

两类典型数值方法：时间离散与空间离散

- 空间离散方法：
 - 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 [7, 8]；
 - 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，如驯服Euler-Maruyama方法、截断Euler-Maruyama方法 [16, 19]
- 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

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 [7]。

时间离散：驯服/截断 Euler–Maruyama

- 对非全局 Lipschitz 系数，经典 EM 可能发散 [1]。
- 驯服 Euler–Maruyama (tamed EM) [15]:

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

- 截断 Euler–Maruyama (truncated EM) [16, 17]:
 - 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 [18, 19]。

本章小结：理论基础

- Itô 扩散的无穷小生成元 L 将 SDE 与偏微分方程统一到同一框架 [3, 4]。
- CTRW/ Q 过程通过离散生成元构造有限状态的马尔可夫跳跃过程 [7]。
- 驯服/截断 EM 在局部 Lipschitz 和 Khasminskii 条件下仍具有良好的强收敛性质 [15, 16, 17]。
- 这些结果为后续的 MFPT、逃逸概率以及 work-error 比较提供了理论基础。

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

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

这一思想与 Kramers 反应率理论中的漂移主导项类似 [20, 14]。

- CTRW 中，状态 x_i 的跳出速率

$$\lambda(x_i) \approx \frac{|\mu(x_i)|}{h}, \quad \Rightarrow \quad \mathbb{E}S_i = \frac{1}{\lambda(x_i)} \approx \frac{h}{|\mu(x_i)|}.$$

- 空间离散平均驻留时间 t^u 与 t^e 的比较，是评估 CTRW 在强漂移极限下时间刻画能力的核心。

定理：空间离散平均驻留时间的渐近一致性

定理

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 的平均驻留时间与解析漂移时间具有相同的主导标度。

定理：多项式漂移下的误差估计

定理

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 $\mu(x) = -x^3$, 空间离散在强漂移区域能高精度再现局部跨越时间的主导标度。

MFPT 与连续模型的 PDE 表述

- 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 [20]。

- 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。
- 空间离散 CTRW 对应在网格上求解线性方程

$$Qm = -\mathbf{1},$$

是 MFPT PDE 的有限维近似 [14]。

- 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：驯服 Euler 方法的 MFPT 渐近与误差

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 EM 方法的 MFPT 渐近与误差

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

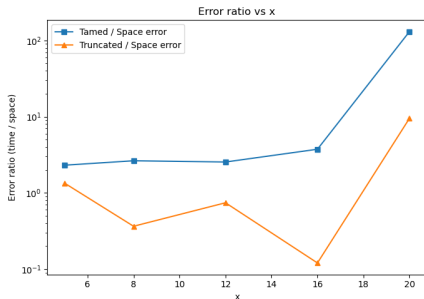
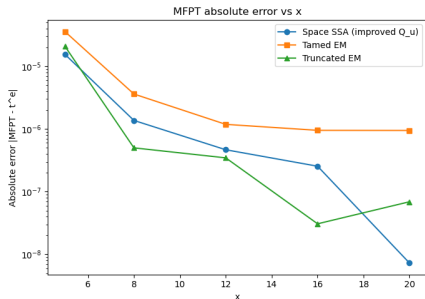
$$t^\Delta - t^e = \delta \left(\frac{1}{|\mu(h(\Delta))|} - \frac{1}{|\mu(x)|} \right) + \mathcal{O}(\delta^2).$$

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 [16, 17]。

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 [7, 19, 12];
 - 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 $t^e(x \rightarrow L)$ 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 $t^e(x \rightarrow L)$ 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。

- 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 [12]。

逃逸概率与 MFPT：连续模型

- 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

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

满足

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

这是过渡路径理论中的核心量 [9, 10, 11]。

- 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 Monte Carlo:
 - 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

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

可以推广为对逃逸概率的弱收敛控制:

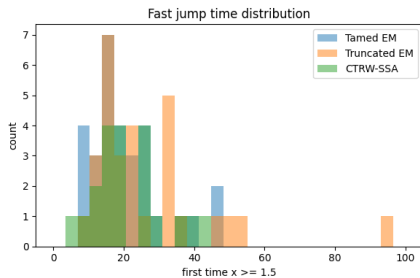
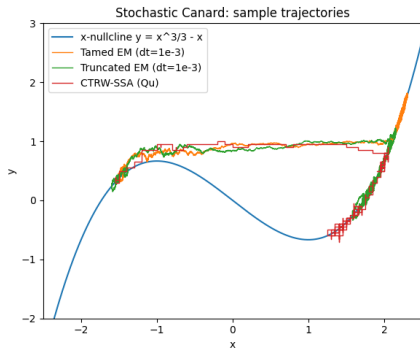
$$|q_\Delta(z) - q(z)| \leq C \Delta^{1/2},$$

误差阶受限于时间步进的强收敛阶 [2, 15, 16, 17]。

- 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。

- 模型参数与区域 A, B 的选取与论文正文保持一致 [12]。
- 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。

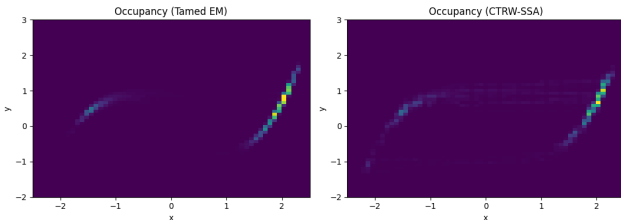
样本路径与快跳时间分布



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。

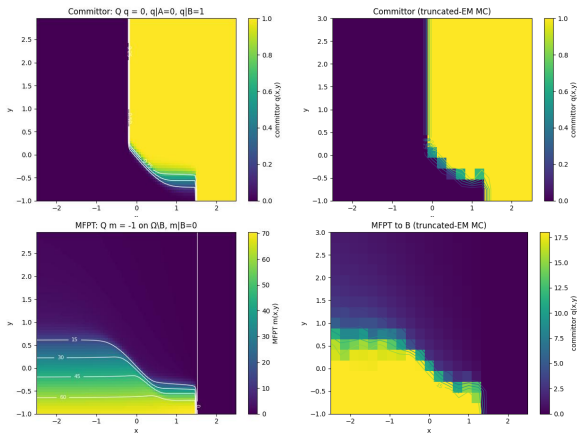
占据度热图



占据度热图刻画轨道在相空间不同区域出现的相对频率。

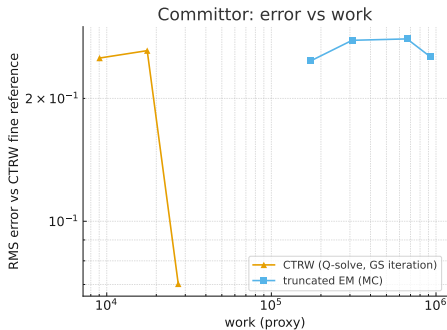
- 两种方法均在慢流形附近给出较高占据度。
- 在折叠附近的边界层结构上，CTRW 给出的驻留分布更平滑，更接近生成元刻画的理论结构。

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。

本文提出的主要定理概览

- 固定空间跨越时间方面：
 - 空间离散平均驻留时间 t^u 与漂移主导时间 t^e 渐近一致；
 - 多项式漂移下 t^u 与主部 t^* 的相对误差估计；
 - 驯服 Euler 与截断 EM 的 MFPT 渐近展开与步长约束条件。
- 随机 Canard 系统方面：
 - 基于生成元的逃逸概率和 MFPT 空间收敛定理；
 - 时间离散下逃逸概率估计的弱收敛分析；
 - 基于逃逸概率/MFPT 的 work-error 数值比较。

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。

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。

- 针对具有局部 Lipschitz 漂移的 SDE，系统比较了：
 - 驯服 EM、截断 EM 等时间离散方法；
 - 基于生成元的 CTRW 空间离散方法。
- 在固定空间跨越时间问题中：
 - 空间离散平均驻留时间在强漂移极限下与漂移主导时间一致；
 - 给出了时间离散 MFPT 的误差估计和适用步长约束。
- 在随机 Canard 系统中：
 - 建立了逃逸概率和 MFPT 的空间离散收敛性；
 - 展示了空间离散在弱量上的优势以及时间离散在路径级分析中的作用。

- 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



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.



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



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



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.



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.



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



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.

参考文献 II



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.



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.



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



Applied Stochastic Analysis (UBC) lecture.



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



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



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



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.



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.



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!