

Approximation numérique d'ordre élevé pour la mesure invariante de solution d'équation différentielle stochastique ergodique sur variété riemannienne.

Sébastien Macé¹

6 juillet 2026

Encadrants : Adrien Busnot Laurent, Nicolas Crouseilles

Table des matières

1	Introduction	2
2	Cadre d'étude	3
2.1	Équation différentielle stochastique sur variété riemannienne	3
2.2	Analyse de l'erreur pour la mesure invariante	6
2.3	Caractérisation algébrique de l'erreur pour la mesure invariante	12
3	Nouvel intégrateur d'ordre 2 pour la méthode invariante	13
3.1	Développement de Talay-Tubaro pour l'ordre 1	14
3.2	Représentation algébrique pour l'ordre faible	16
3.3	Intégration par partie sur variété pour la mesure invariante	17
3.4	Nouvelle méthode d'ordre 2	20
3.5	Deuxième nouvelle méthode d'ordre 2	23
4	Une méthode avec postprocesseur d'ordre 2 pour la mesure invariante	24
5	Méthodes de type Runge-Kutta-Munthe-Kaas	27
5.1	Réduction générale des méthode de type Couch-Grossman	27
5.2	Réduction de nos méthodes d'ordre 2 pour la mesure invariante	31
5.3	Méthode générale de type RKMK	35
6	Expériences numériques	38
6.1	Observations numériques pour la première méthode d'ordre 2	38
6.2	Observations numériques pour la deuxième méthode d'ordre 2	41
6.3	Observations numériques pour les méthodes avec postprocesseurs	43
7	Conclusion	44

1. Univ Rennes, INRIA (Research team MINGuS), IRMAR (CNRS UMR 6625) and ENS Rennes, France.
Sébastien.Macé@ens-rennes.fr Adrien.Busnot-Laurent@inria.fr, Nicolas.Crouseilles@inria.fr

1 Introduction

Dans l'esprit de [2], on se place dans le cadre d'étude suivant. Soit $(\mathcal{M}, g)$ une variété riemannienne lisse, complète et connexe munie d'une métrique g et sa connexion de Levi-Civita ∇ . Soient $E_1, \dots, E_D$ un repère orthonormal, c'est-à-dire pour tout $x \in \mathcal{M}$, la famille $E_1(x), \dots, E_D(x)$ est une base orthonormale de l'espace tangent $T_x\mathcal{M}$.

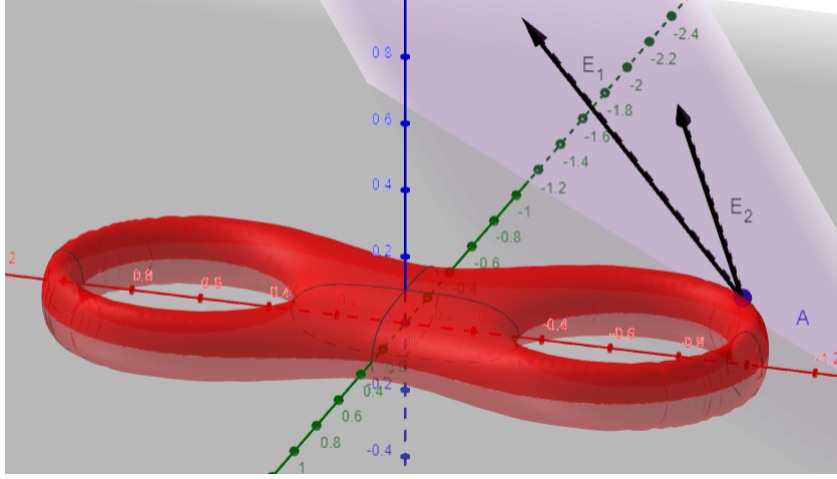


FIGURE 1 – Variété riemannienne munie du produit scalaire ambiant

Pour un champ de vecteurs lisse et Lipschitz $F : x \mapsto \sum_{d=1}^D f^d(x) E_d(x)$, on considère l'équation différentielle stochastique sur $\mathcal{M}$:

$$dX(t) = F(X(t))dt + \sqrt{2} \sum_{d=1}^D E_d(X(t)) \circ dW_d(t), X(0) = x \in \mathcal{M}. \quad (1.1)$$

On s'intéressera plus précisément à l'équation différentielle stochastique de Langevin suramortie

$$dX(t) = -\nabla V(X(t))dt + \sqrt{2} dB_{\mathcal{M}}(t), X(0) = x \in \mathcal{M}, \quad (1.2)$$

qui s'écrit sous la forme (1.1) dans le cas où $F = -\nabla V - \nabla_{E_d} E_d$ (et $B_{\mathcal{M}}(t)$ est un mouvement Brownien sur $\mathcal{M}$ [10]).

On considère un intégrateur numérique à un pas évalué sur la discrétisation $t_n = nh$ de la forme

$$X_{n+1} = \Psi_h(X_n), Nh = T, \quad (1.3)$$

où h est le pas de temps et Ψ_h une perturbation de l'identité aléatoire sur $\mathcal{M}$.

On s'intéressera à des méthodes dites de flot gelé, généralisant les méthodes de groupes de Lie [11] dans le cas de géométries quelconques avec l'aide de frame. On mentionne brièvement la méthode d'Euler géodésique qui suit le flot de l'équation le long des géodésiques :

$$X_{n+1} = \exp \left(\left(h f^d(X_n) + \sqrt{2h} \xi_n^d \right) E_d \right) X_n.$$

Maintenant que nous avons défini le cadre de nos méthodes numériques, nous allons définir la notion d'erreur qui nous intéresse.

Définition 1.1. On dit que le processus $X(t)$ est ergodique si il existe une unique mesure invariante μ_∞ de densité ρ_∞ contre $d \text{vol}_\mathcal{M}$ la forme volume riemannienne, telle que, pour toute fonction lisse φ sur $\mathcal{M}$ et toute condition initiale $X(0) = x \in \mathcal{M}$, on a

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \varphi(X(s)) ds = \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_\infty(y) d \text{vol}_\mathcal{M}(y) \text{ presque sûrement.} \quad (1.4)$$

Définition 1.2. On dit que la méthode numérique X_n est ergodique si il existe une unique mesure invariante μ^h de densité ρ^h telle que, pour toute fonction lisse φ sur $\mathcal{M}$ et toute condition initiale $X(0) = x \in \mathcal{M}$, on a

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N \varphi(X_n) = \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho^h(y) d \text{vol}_\mathcal{M}(y) \text{ presque sûrement.} \quad (1.5)$$

On dit que la méthode numérique est d'ordre $r \geq 1$ pour la mesure invariante si il existe $h_0 > 0$ tel que pour tout $h \in (0, h_0)$:

$$|e(\varphi, h)| \leq C_\varphi h^r \text{ avec } e(\varphi, h) := \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N \varphi(X_n) - \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_\infty(y) d \text{vol}_\mathcal{M}(y), \quad (1.6)$$

où $C_\varphi > 0$ dépend de φ et de h_0 .

Remarque 1.3. L'erreur faible se fait en temps court tandis que l'erreur par rapport à la mesure invariante est en temps long.

Proposition 1.4. Comme on s'intéresse à l'équation de Langevin riemannienne :

$$dX(t) = -\nabla V(X(t))dt + \sqrt{2}dB_\mathcal{M}(t),$$

on obtient la mesure de Gibbs : $\rho_\infty \propto \exp(-V)$.

Ce rapport a pour objectif de construire des méthodes numériques intrinsèques, efficaces et d'ordre élevé pour la mesure invariante et peu coûteuse. Pour ce faire, nous allons généraliser l'approche de [1] pour une variété riemannienne. En section 2, nous allons décrire le cadre de cette étude que sont les équations différentielles stochastiques sur variété et notamment quelles hypothèses nous feront. Dans cette même section, nous adapterons l'article [7] sur variété qui nous permettra de généraliser le théorème de [1]. Dans la section 3, nous présenterons une méthode de calcul par l'intermédiaire d'arbre planaire exotique afin d'appliquer ce théorème et d'obtenir un intégrateur d'ordre 2 pour la méthode invariante, dans l'esprit de [14, 15]. Enfin, la section 4 sera consacrée à la confirmation des résultats et à leurs applications par des expériences numériques.

2 Cadre d'étude

2.1 Équation différentielle stochastique sur variété riemannienne

Pour $v \in T\mathcal{M}$, on note $|v| = \sqrt{g(v, v)}$ sa norme riemannienne. Fixons un point $o \in \mathcal{M}$. On note $r = d(o, \cdot)$ la fonction distance riemannienne. Elle est 1-Lipschitz et son carré est lisse sur $\mathcal{M} \setminus \text{Cut}_o$.

On note $C_c^\infty(\mathcal{M})$, l'ensemble des fonctions lisse à support compact. Pour $\varphi \in C_c^\infty(\mathcal{M})$, on note $d\varphi$ sa différentielle et $|d\varphi|$ sa norme riemannienne. On note $v[\varphi](x)$ ou encore $v \triangleright \varphi(x)$ la différentielle $d\varphi(x) \cdot v$ de φ dans une direction $v \in T_x\mathcal{M}$. On étend notre ensemble de fonction test par $C_P^\infty(\mathcal{M})$, l'ensemble des fonctions lisse dont toutes les dérivées sont à croissance polynômiale qui satisfont les estimées de la forme

$$|E_{d_q}[\dots E_{d_1}[\varphi] \dots]|(x) \leq C(1 + r(x)^K), \text{ pour } q = 0, 1, \dots$$

Soit $F = \sum_{d=1}^D f^d E_d$ un champ de vecteur et sa décomposition dans le repère, on note $F \in \mathfrak{X}_P(\mathcal{M})$ si ses composantes sont Lipschitz, c'est-à-dire si $|df^d| \leq C$ et si $f^d \in C_P^\infty(\mathcal{M})$.

Afin d'assurer que l'équation (1.1) est bien posée et que la solution n'explose pas, nous allons faire l'hypothèse suivante.

Hypothèse 2.1. — Les champs de vecteurs $E_1, \dots, E_D$ sont lisses et bornés.

- Le champ de vecteur F est dans $\mathfrak{X}_P(\mathcal{M})$.
- $\mathcal{L}r^2 \leq \nu + \lambda r^2$ sur $\mathcal{M} \setminus \text{Cut}_o$ pour des constantes $\lambda \in \mathbb{R}$ et $\nu \geq 1$ où $\mathcal{L}$ est le générateur de l'EDS (1.1) :

$$\mathcal{L}\varphi = F[\varphi] + \sum_{d=1}^D E_d[E_d[\varphi]].$$

Hypothèse 2.2. D'après [1], sous l'hypothèse 2.1, il existe une unique mesure invariante μ_∞ dont la densité ρ_∞ est l'unique solution de l'équation

$$\mathcal{L}^* \rho_\infty = 0 \tag{2.1}$$

où $\mathcal{L}^*$ est l'opérateur adjoint de $\mathcal{L}$ dans $L^2(\mathcal{M}, \mathbb{R})$.

Dans le cas de l'équation de Langevin, la formule est explicite, la densité ρ_∞ est proportionnelle à $\exp(-V)$. C'est la mesure de Gibbs (voir par exemple [18]).

Hypothèse 2.3. Pour toute fonction $g \in C^\infty(\mathcal{M}, \mathbb{R})$ de moyenne nulle sur $\mathcal{M}$, il existe une unique fonction $\mu \in C^\infty(\mathcal{M}, \mathbb{R})$ telle que $\mathcal{L}^* \mu = g$ et $\int_{\mathcal{M}} \mu(y) \rho_\infty(y) d\text{vol}_{\mathcal{M}}(y) = 0$.

Nous allons maintenant faire une hypothèse sur la régularité du semigroupe. Cette hypothèse, proposé dans [2], est prouvable sous des hypothèses classiques sur $\mathbb{R}^d$.

Hypothèse 2.4. Pour toute fonction $\varphi \in C_P^\infty(\mathcal{M})$, la fonction $u : (x, t) \mapsto \mathbb{E}[\varphi(X(t)) | X_0 = x]$ appartient à l'ensemble $C^\infty((0, T), C_P^\infty(\mathcal{M}))$. C'est-à-dire que pour tout $k \geq 0$ il existe $C > 0$ et $\kappa \geq 0$ tels que pour tout $x \in \mathcal{M}$

$$\sup_{t \in (0, T)} |\partial_t^k u(t, x)| \leq C(1 + r^\kappa(x)).$$

Ainsi par passage à la limite en t , on a, sous l'hypothèse 2.4 :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u(t, x) = \varphi(x) + \int_0^\infty \mathcal{L}u(s, x) ds. \tag{2.2}$$

L'hypothèse suivante est un résultat d'ergodicité qui porte sur la convergence vers la mesure invariante. On introduit la norme et la seminorme

$$\|\psi\|_{C^k} = \sup_{\substack{j=(j_1, \dots, j_D) \\ 0 \leq |j| \leq k}} \sup_{x \in \mathcal{M}} |\partial_j \psi(x)| \text{ et } |\psi|_{C^k} = \sup_{\substack{j=(j_1, \dots, j_D) \\ 1 \leq |j| \leq k}} \sup_{x \in \mathcal{M}} |\partial_j \psi(x)|.$$

Hypothèse 2.5. Il existe une constante λ telle que pour tout entier k il existe un polynôme P_k tel que pour tout $t \geq 0$:

$$\left\| u(t, \cdot) - \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_{\infty}(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) \right\|_{C^k} \leq P_k(t) e^{-\lambda t} \|\varphi\|_{C^k}. \quad (2.3)$$

On introduit maintenant le développement de Taylor du semigroupe avec un reste à croissance polynômiale.

Proposition 2.6. *Sous l'hypothèse 2.4, pour toute fonction $\varphi \in C_P^{\infty}(\mathcal{M})$ et h suffisamment petit, on a le développement*

$$u(h, x) = \varphi(x) + \sum_{j=1}^p \frac{h^j}{j!} \mathcal{L}^j \varphi(x) + h^{p+1} R_p^h(\varphi, x)$$

où $|R_p^h(\varphi, x)| \leq C(1 + r^{\kappa}(x))$.

Démonstration. Par la formule de Taylor avec reste intégrale, on a :

$$u(h, x) = \varphi(x) + \sum_{j=1}^p \frac{h^j}{j!} \mathcal{L}^j \varphi(x) + \int_0^t \frac{(h-t)^p}{p!} \partial_t^{p+1} u(t, x) dt.$$

D'où, le reste vérifie

$$\begin{aligned} R_p^h(\varphi, x) &= \frac{h^{-1}}{p!} \int_0^t \left(\frac{h-t}{h} \right)^p \partial_t^{p+1} u(t, x) dt, \\ |R_p^h(\varphi, x)| &\leq \frac{h^{-1}}{p!} \int_0^t C(1 + r(x)^{\kappa}) dt \text{ par l'hypothèse 2.4,} \\ |R_p^h(\varphi, x)| &\leq \frac{C}{p!} (1 + r(x)^{\kappa}). \end{aligned}$$

Ce qui conclut la preuve de la croissance du reste. $\square$

Définition 2.7. Une méthode numérique intrinsèque à un pas X_n est dite localement d'ordre faible p si pour tout $\varphi \in C_P^{\infty}(\mathcal{M})$ il existe $C > 0$ telle que pour tout $x \in \mathcal{M}$ et h suffisamment petit, on a

$$|\mathbb{E} [\varphi(X_1) | X_0 = x] - \mathbb{E} [\varphi(X(h)) | X_0 = x]| \leq Ch^{p+1} (1 + r^{\kappa}(x)).$$

La méthode est dite d'ordre faible global p si pour tout $\varphi \in C_P^{\infty}(\mathcal{M})$ il existe $C > 0$ telle que pour tout $x \in \mathcal{M}$ et h suffisamment petit, on a

$$\sup_{n=0 \dots N} |\mathbb{E} [\varphi(X_n) | X_0 = x] - \mathbb{E} [\varphi(X(nh)) | X_0 = x]| \leq Ch^p.$$

Introduisons enfin le développement de Taylor-Talay-Tubaro [27] de la méthode numérique, ainsi qu'une hypothèse sur ses moments :

Hypothèse 2.8. Pour toute fonction $\varphi \in C_P^{\infty}(\mathcal{M})$ et h suffisamment petit, on a le développement

$$U(h, x) := \mathbb{E} [\varphi(X_1) | X_0 = x] = \varphi(x) + \sum_{j=1}^p h^j A_j \varphi(x) + h^{p+1} R_p^h(\varphi, x)$$

où

$$|R_p^h(\varphi, x)| \leq C(1 + r^{\kappa}(x)) |\varphi|_{C^{2N+2}}$$

et les A_j sont des opérateurs différentiels linéaires d'ordre $2j$.

Hypothèse 2.9. La méthode admet des moments à tout ordre :

$$\sup_{n=0\dots N} \mathbb{E} \llbracket r(X_n)^\kappa | X_0 = x \rrbracket \leq C(T).$$

2.2 Analyse de l'erreur pour la mesure invariante

On note $(P_t)_{t \geq 0}$ le semigroupe de transition associé au processus de Markov $(X(t, x))_{t \geq 0, x \in \mathcal{M}}$. Autrement dit, $(P_t)_{t \geq 0}$ associe à ψ une fonction lisse sur $\mathcal{M}$, l'unique solution v de

$$\begin{cases} \partial_t v(t, x) = \mathcal{L}v(t, x) \\ v(0, x) = \varphi(x). \end{cases}$$

Dans l'esprit de [7] et de [9], construisons un générateur modifié $\tilde{\mathcal{L}} = \mathcal{L} + \sum_{l \geq 1} L_l$ tel que $U(x, h) - \varphi(x) = \sum_{j \geq 1} \frac{h^j}{j!} \tilde{\mathcal{L}}^j \varphi(x)$. Alors $L_0 = A_1 = \mathcal{L}$ et $L_{l+1} = A_{l+2} + \sum_{j=2}^{l+2} \frac{1}{j!} \sum_{i_1 + \dots + i_j = n+2-j} L_{i_1} \dots L_{i_j}$ est un opérateur d'ordre $2(l+1) + 2$.

Théorème 2.10. . On se place sous les hypothèses 2.5 et 2.8. Soit $\varphi \in C^\infty(\mathcal{M}, \mathbb{R})$. Il existe une suite $(v_l)_{l \in \mathbb{N}}$, telle que pour tout $n \in \mathbb{N}$:

$$\begin{cases} \partial_t v_n(t, x) - \mathcal{L}v_n(t, x) = \sum_{l=1}^n L_l v_{n-l}(t, x) \\ v_n(0, x) = \begin{cases} \varphi(x) & \text{si } n = 0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \end{cases}$$

De plus, en notant pour tout $N \in \mathbb{N}$ $v^N(t, x) = \sum_{n=0}^N \tau^n v_n(t, x)$,

$$\|\mathbb{E} \llbracket v^N(t, X_1) \rrbracket - v^N(t + \tau, x)\|_\infty \leq C_N \tau^{N+1} \sup_{\substack{s \in (0, \tau) \\ n=0, \dots, N}} \|v_n(t_j + s, x)\|_{C^{4N+2}}.$$

Démonstration. Pour $n = 0$, on pose $v_0 : (t, x) \mapsto u(t, x)$. Supposons avoir construits $v_0, \dots, v_n$ et notons $F_{N+1}(t, x) = \sum_{l=1}^n L_l v_{n-l}(t, x)$. Alors par la formule de Duhamel,

$$v_{N+1}(t, x) = \int_0^t P_{t-s} F_{N+1}(s, x) ds.$$

Montrons que l'hypothèse 2.5 implique que pour tout $n \in \mathbb{N}$, on a v_n lisse et

$$\|v_n(t)\|_{C^k} \leq C \|\varphi\|_{C^{k+4n}}. \quad (2.4)$$

Le cas $n = 0$ est assuré par l'hypothèse 2.5. Supposons que la propriété soit vraie pour $0, \dots, n$. Comme L_l est d'ordre $2l + 2$, on a, pour tout $l = 1, \dots, n + 1$,

$$\|L_l v_{n+1-l}(t)\|_{C^k} \leq C \|v_{n+1-l}(t)\|_{C^{k+2l+2}}$$

et par l'hypothèse de récurrence $\|v_{n+1-l}(t)\|_{C^{k+2l+2}} \leq C \|\varphi\|_{C^{(k+2l+2)+4(n+1-l)}}$ c'est-à-dire

$$\|F_{n+1}(t)\|_{C^k} \leq C \|\varphi\|_{C^{k+4(n+1)}}.$$

On déduit de l'hypothèse 2.5, par inégalité triangulaire, que

$$\|P_{t-s}F_{n+1}(s)\|_{C^k} \leq P_k(t-s)e^{-\lambda(t-s)} \|F_{n+1}(s)\|_{C^k}$$

et que finalement

$$\|v_{n+1}(t)\|_{C^k} \leq C \|\varphi\|_{C^{k+4(n+1)}}.$$

D'où la preuve par récurrence.

Fixons $t \geq 0$ et posons $w_n : (s, x) \mapsto v_n(t + s, x)$. Alors elle vérifie

$$\begin{cases} \partial_s w_n(s, x) - \mathcal{L}w_n(s, x) = \sum_{l=1}^n L_l w_{n-l}(s, x) \\ w_n(0, x) = v_n(t, x). \end{cases}$$

Ainsi $\partial_s w_n(s, x) = \sum_{l=0}^n L_l w_{n-l}(s, x),$

$$\partial_s^2 w_n(s, x) = \sum_{l=0}^n L_l \sum_{k=0}^{n-l} L_k w_{n-l-k}(s, x) = \sum_{k=0}^n \sum_{l_1+l_2=k} L_{l_1} L_{l_2} w_{n-k}(s, x),$$

et par récurrence sur m , on a

$$\partial_s^m w_n(s, x) = \sum_{l_1+\dots+l_{m+1}=n} L_{l_1} \dots L_{l_m} w_{l_{m+1}}(s, x).$$

En observant que les L_l sont d'ordre $2l + 2$ et qu'il n'y a pas de terme d'ordre 0, on obtient la majoration

$$\|\partial_s^m w_n(s, x)\|_{\infty} \leq C \sup_{k=0, \dots, n} |w_k(s)|_{C^{2n+2m}}.$$

Par la formule de Taylor avec reste intégral à l'ordre $2N - n$ on a

$$\begin{aligned} w_n(\tau, x) &= \sum_{m=0}^{2N-n} \frac{\tau^m}{m!} \partial_s^m w_n(0, x) + \int_0^\tau \frac{(\tau-s)^{2N-n}}{(2N-n)!} \partial_s^{2N-n+1} w_n(s, x) ds \\ &= \sum_{m=0}^{2N-n} \frac{\tau^m}{m!} \sum_{l_1+\dots+l_{m+1}=n} L_{l_1} \dots L_{l_m} w_{l_{m+1}}(0, x) + R_{2N,n}(\tau, x), \end{aligned}$$

où $\|R_{2N,n}(\tau)\|_{\infty} \leq C \tau^{2N-n+1} \sup_{\substack{s \in (0, \tau) \\ k=0, \dots, 2N}} \|w_k(s, x)\|_{C^{4N+2}} = \mathcal{O}(\tau^{N+1})$. D'une part, on a

$$\begin{aligned} v^N(t + \tau, x) &= \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^{2N-n} \frac{\tau^{m+n}}{m!} \sum_{l_1+\dots+l_{m+1}=n} L_{l_1} \dots L_{l_m} w_{l_{m+1}}(0, x) + R_{2N}(\tau, x) \\ &= \sum_{p=0}^{2N} \tau^p \sum_{m=0}^p \frac{1}{m!} \sum_{l_1+\dots+l_m=p-m-l_{m+1}} L_{l_1} \dots L_{l_m} w_{l_{m+1}}(0, x) + R_{2N}(\tau, x) \\ &= \sum_{p=0}^{2N} \tau^p \sum_{q=0}^p \left(\sum_{m=0}^{p-q} \frac{1}{m!} \sum_{l_1+\dots+l_m=p-q-m} L_{l_1} \dots L_{l_m} \right) w_q(0, x) + R_{2N}(\tau, x) \\ &= \sum_{p=0}^{2N} \tau^p \sum_{q=0}^p A_{p-q} w_q(0, x) + R_{2N}(\tau, x). \end{aligned}$$

D'autre part, on a

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^N \tau^n A_n v^N(t + \tau, x) &= \sum_{n=0}^N \tau^n A_n \left(\sum_{q=0}^N \tau^q v_q(t + \tau, x) \right) \\
&= \sum_{n=0}^N \sum_{q=0}^N \tau^{n+q} A_n v_q(t + \tau, x) \\
&= \sum_{q=0}^N \sum_{p=0}^{N+q} \tau^p A_{p-q} v_q(t + \tau, x) \\
&= \sum_{p=0}^{2N} \tau^p \sum_{\substack{q=0 \\ p-q \leq N}}^p A_{p-q} w_q(0, x) + R_{2N}(\tau, x).
\end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned}
v^N(t + \tau, x) - \sum_{n=0}^N \tau^n A_n v^N(t + \tau, x) &= \sum_{p=0}^{2N} \tau^p \sum_{\substack{q=0 \\ p-q > N}}^p A_{p-q} w_q(0, x) + R_{2N}(\tau, x) \\
&= \sum_{p=N+1}^{2N} \tau^p \sum_{q=0}^{p-(N+1)} A_{p-q} w_q(0, x) + R_{2N}(\tau, x)
\end{aligned}$$

et

$$\left| v^N(t + \tau, x) - \sum_{n=0}^N \tau^n A_n v^N(t + \tau, x) \right| \leq C \tau^{N+1} \left(\sup_{n=0, \dots, N} \|v_n(t, x)\|_{C^{4N}} + \sup_{\substack{s \in (0, \tau) \\ k=0, \dots, 2N}} \|w_k(s, x)\|_{C^{4N+2}} \right).$$

Enfin en appliquant l'hypothèse 2.8 avec $\varphi = v^N(t)$, on a

$$\begin{aligned}
\|\mathbb{E} [v^N(t, X_1)] - v^N(t + \tau, x)\|_\infty &\leq \left\| \mathbb{E} [v^N(t, X_1)] - \sum_{n=0}^N \tau^n A_n v^N(t + \tau, x) \right\|_\infty \\
&\quad + \left\| \sum_{n=0}^N \tau^n A_n v^N(t + \tau, x) - v^N(t + \tau, x) \right\|_\infty \\
&\leq C_N \tau^{N+1} \sup_{\substack{s \in (0, \tau) \\ n=0, \dots, N}} \|v_n(t_j + s, x)\|_{C^{4N+2}}.
\end{aligned}$$

□

Toujours dans l'esprit de [7], nous allons construire une suite de mesure qui converge faiblement vers la mesure invariante de la méthode numérique.

Lemme 2.11. *Sous les hypothèses 2.2, 2.3, 2.5 et 2.8, on se donne les suites $(v_n)_{n \in \mathbb{N}}$ et $(v^N)_{N \in \mathbb{N}}$ définies dans le théorème 2.10. Il existe $(\rho_n)_{n \in \mathbb{N}}$ telle que $\rho_0 = \rho_\infty$, et pour tout $N \geq 1$:*

$$\int_{\mathcal{M}} \rho_N(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) = 0 \text{ et } \mathcal{L}^* \rho_N = \sum_{n=1}^N L_n^* \rho_{N-n}.$$

Démonstration. Montrons, par récurrence, l'existence de la suite $(\rho_n)_{n \in \mathbb{N}}$. Pour $n = 0$, on pose $\rho_0 := \rho_\infty$.

Supposons avoir construit $\rho_0, \dots, \rho_N$ qui vérifient ces conditions. Posons alors la fonction $G_{N+1} := \sum_{n=1}^N L_n^* \rho_{N-n}$. La fonction G_{N+1} est lisse et d'intégrale

$$\int_{\mathcal{M}} G_{N+1}(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) = - \sum_{n=1}^N \int_{\mathcal{M}} \rho_{N-n}(x) L_n \mathbb{1}(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) = 0,$$

car L_n est un opérateur d'ordre $2n + 2$.

Donc par l'hypothèse 2.3, on dispose de $\mu_{N+1} \in C^\infty(\mathcal{M}, \mathbb{R})$ telle que $\mathcal{L}^* \mu_{N+1} = G_{N+1}$ et $\int_{\mathcal{M}} \mu_{N+1}(y) \rho_\infty(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) = 0$, ce qui conclut la récurrence. $\square$

Théorème 2.12. *Sous les hypothèses 2.2, 2.3, 2.5 et 2.8, on se donne les suites $(v_n)_{n \in \mathbb{N}}$ et $(F_n)_{n \in \mathbb{N}}$ définies dans le théorème 2.10. Pour tout $n, k \in \mathbb{N}$, il existe un polynôme $P_{k,n}$ tel que*

$$\left\| v_n(t, x) - \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_n(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) \right\| \leq P_{k,n}(t) e^{-\lambda t} \|\varphi - \langle \varphi \rangle\|_{C^{k+4n}}.$$

Démonstration. Pour $n = 0$, on a $v_0 = u$ et $\rho_0 = \rho_\infty$ et par l'hypothèse 2.5, on a, pour tout entier k

$$\|u - \langle \varphi \rangle\|_{C^k} \leq P_k(t) e^{-\lambda t} \|\varphi - \langle \phi \rangle\|_{C^k}.$$

Supposons que la propriété soit vraie aux rang $0, \dots, n$. Notons

$$c_{n+1}(t) = \sum_{m=0}^{n+1} \int_{\mathcal{M}} v_{n+1-m}(t, x) \rho_m(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x).$$

Alors c_{n+1} est dérivable, de dérivée :

$$\begin{aligned} c'_{n+1}(t) &= \sum_{m=0}^{n+1} \int_{\mathcal{M}} (\partial_t v_{n+1-m}(t, x)) \rho_m(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) \\ &= \sum_{m=0}^{n+1} \int_{\mathcal{M}} (\partial_t v_m(t, x)) \rho_{n+1-m}(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) \\ &= \sum_{m=0}^{n+1} \int_{\mathcal{M}} \left(\sum_{l=0}^m L_{m-l} v_l(t, x) \right) \rho_{n+1-m}(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) \\ &= \sum_{m=0}^{n+1} \sum_{l=0}^m \int_{\mathcal{M}} v_l(t, x) L_{m-l}^* \rho_{n+1-m}(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) \\ &= \sum_{l=0}^{n+1} \int_{\mathcal{M}} v_l(t, x) \left(\sum_{m=l}^{n+1} L_{m-l}^* \rho_{n+1-m}(x) \right) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) \\ &= \sum_{l=0}^{n+1} \int_{\mathcal{M}} v_l(t, x) \left(\sum_{r=0}^{n+1-l} L_r^* \rho_{n+1-r-l}(x) \right) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x). \end{aligned}$$

Or par définition de $\mathcal{L}^* \rho_{n+1-r-l}$, on a $\sum_{r=0}^{n+1-l} L_r^* \rho_{n+1-r-l} = 0$, donc c_{n+1} est constante et

$$\int_{\mathcal{M}} \partial_t v_{n+1}(t, x) \rho_{\infty}(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) = - \sum_{m=1}^{n+1} \int_{\mathcal{M}} \partial_t v_{n+1-m}(t, x) \rho_m(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x).$$

De plus, on va pouvoir calculer la moyenne de F_{n+1} par rapport à la mesure ρ_{∞}

$$\begin{aligned} \langle F_{n+1}(t) \rangle &= \int_{\mathcal{M}} F_{n+1}(t, x) \rho_{\infty}(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) \\ &= \int_{\mathcal{M}} \partial_t v_{n+1}(t, x) \rho_{\infty}(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) - \int_{\mathcal{M}} \mathcal{L} v_{n+1}(t, x) \rho_{\infty}(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) \text{ par le théorème 2.10} \\ &= - \sum_{m=1}^{n+1} \int_{\mathcal{M}} \partial_t v_{n+1-m}(t, x) \rho_m(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) \text{ car } \mathcal{L}^* \rho_{\infty} = 0 \end{aligned}$$

et calculer l'expression de la fonction v_{n+1}

$$\begin{aligned} v_{n+1}(t, x) &= \int_0^t \langle F_{n+1}(s) \rangle ds + \int_0^t P_{t-s} (F_{n+1}(s, x) \langle F_{n+1}(s) \rangle) ds \\ &= - \sum_{m=1}^{n+1} \int_{\mathcal{M}} v_{n+1-m}(t, x) \rho_m(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) + \int_{\mathcal{M}} \varphi(x) \rho_{n+1}(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) \\ &\quad + \int_0^t P_{t-s} (F_{n+1}(s, x) \langle F_{n+1}(s) \rangle) ds. \end{aligned}$$

Or on peut écrire

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{n+1} \int_{\mathcal{M}} v_{n+1-m}(t, x) \rho_m(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) &= \\ \sum_{m=1}^{n+1} \int_{\mathcal{M}} \left(v_{n+1-m}(t, x) - \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_{n+1-m}(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) \right) \rho_m(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) \end{aligned}$$

car ρ_m est de moyenne nulle.

D'autre part, on a la majoration

$$\begin{aligned} \|F_{n+1}(s) - \langle F_{n+1}(s) \rangle\|_{C^k} &\leq \sum_{l=1}^{n+1} \|L_l v_{n+1}(s) - \langle L_l v_{n+1}(s) \rangle\|_{C^k} \\ &\leq C_k \sum_{l=1}^{n+1} \|v_{n+1-l}(s) - \langle v_{n+1-l}(s) \rangle\|_{C^{k+2l+2}} \\ &\leq C_k \sum_{l=0}^n \|v_l(s) - \langle v_l(s) \rangle\|_{C^{k+2(n+1-l)+2}} \end{aligned}$$

et finalement, la démonstration est termin   par

$$\begin{aligned}
& \|v_{n+1}(t, x) - \int_{\mathcal{M}} \varphi(x) \rho_{n+1}(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x)\|_{C^k} \\
& \leq \sum_{m=1}^{n+1} \left\| v_{n+1-m}(t, x) - \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_{n+1-m}(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) \right\|_{C^k} \int_{\mathcal{M}} |\rho_m(x)| d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) \\
& \quad + \int_0^t p_k(t-s) e^{-\lambda(t-s)} \|F_{n+1}(s) - \langle F_{n+1}(s) \rangle\|_{C^k} ds \\
& \leq P_{k,n+1}(t) e^{-\lambda t} \|\varphi - \langle \varphi \rangle\|_{C^{4+4(n+1)}},
\end{aligned}$$

par r  currence et par l'hypoth  se 2.5. $\square$

Enfin, on se donne la deuxi  me partie d'un lemme propos   dans [1] dont la premi  re partie est le lemme 2.11. Il s'agit du r  sultat central pour la d  monstration du th  or  me 2.14 que nous pr  senterons dans la sous-section suivante.

Lemme 2.13. *Sous les m  mes hypoth  ses du lemme 2.11 et du th  or  me 2.12 et en notant $\rho_N^h = \sum_{n=0}^N h^n \rho_n$, il existe $C > 0$ telle que*

$$\left| \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho^h(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) - \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_N^h(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) \right| \leq C h^{N+1}.$$

D  monstration. Majorons maintenant la diff  rence entre $\mathbb{E} [\varphi(X_p)]$ et la moyenne de φ par rapport    la mesure ρ_N^h .

$$\begin{aligned}
\mathbb{E} [\varphi(X_p)] - v^{N+1}(t_p, x) &= \mathbb{E} [v^{N+1}(0, X_p)] - v^{N+1}(t_p, x) \\
&= \mathbb{E} \left[\sum_{j=0}^{p-1} \mathbb{E} [v^{N+1}(t_j, X_{p-j}) - v^{N+1}(t_{j+1}, X_{p-(j+1)}) | X_{p-(j+1)}] \right] \\
&= \mathbb{E} \left[\sum_{j=0}^{p-1} \mathbb{E} [v^{N+1}(t_j, X_1(X_{p-(j+1)})) - v^{N+1}(t_{j+1}, X_{p-(j+1)}) | X_{p-(j+1)}] \right].
\end{aligned}$$

Or

$$\begin{aligned}
\mathbb{E} [v^{N+1}(t_j, X_1(X_{p-(j+1)})) - v^{N+1}(t_{j+1}, X_{p-(j+1)}) | X_{p-(j+1)}] \\
\leq C_N \tau^{N+2} \sup_{\substack{s \in (0, \tau) \\ n=0, \dots, N}} \|v_n(t_j + s, x)\|_{C^{4N+6}}.
\end{aligned}$$

On en d  duit que

$$\begin{aligned}
\mathbb{E} [\varphi(X_p)] - v^{N+1}(t_p, x) &\leq C_N \tau^{N+2} \sum_{j=0}^{p-1} \sup_{\substack{s \in (0, \tau) \\ n=0, \dots, N}} \|v_n(t_j + s, x)\|_{C^{4N+6}} \\
&\leq C_N \tau^{N+2} \sum_{j=0}^{p-1} Q_N(t_j) e^{-\lambda t_j} \|\varphi\|_{C^{8N+10}}
\end{aligned}$$

$$\leq C_N \tau^{N+1} \|\varphi\|_{C^{8N+10}}.$$

Puisque $v^{N+1}(t_p, x) = v^N(t_p, x) + \tau^{N+1}v_{N+1}(t_p, x)$ et $\|v_{N+1}(t_p, x)\|_{C^0} \leq C_N \|\varphi\|_{C^{4(N+1)}}$, on a finalement

$$|\mathbb{E} [\varphi(X_p)] - v^N(t_p, x)| \leq C_N \tau^{N+1} \|\varphi\|_{C^{8N+10}}.$$

D'où, par inégalité triangulaire

$$\begin{aligned} & \left| \mathbb{E} [\varphi(X_p)] - \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_N^h(y) d\text{vol}_{\mathcal{M}}(y) \right| \\ & \leq |\mathbb{E} [\varphi(X_p)] - v^N(t_p, x)| + \left| v^N(t_p, x) - \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_N^h(y) d\text{vol}_{\mathcal{M}}(y) \right| \\ & \leq C_N \tau^{N+1} \|\varphi\|_{C^{8N+10}} + \sum_{n=0}^N P_{0,N}(t_p) e^{-\lambda t_p} \|\varphi\|_{C^{0+4n}} \\ & \leq \left(C_N \tau^{N+1} + P_N(t_p) e^{-\lambda t_p} \right) \|\varphi\|_{C^{8N+10}}. \end{aligned}$$

D'où le résultat par passage à la limite sur p . □

2.3 Caractérisation algébrique de l'erreur pour la mesure invariante

Dans cette sous-section, nous terminons par la généralisation sur variété de la caractérisation de l'ordre pour la mesure invariante issue de [1]. Elle nous permettra de construire des méthodes d'ordre élevé dans la section suivante.

Théorème 2.14. *On se place sous les hypothèses du lemme 2.13 et on se donne la suite $(\rho_n)_{n \in \mathbb{N}}$ définie dans le lemme 2.11. On considère l'équation différentielle stochastique (1.1) sur $\mathcal{M}$ vérifiant les hypothèses 2.1 et 2.5 et résolu par une méthode numérique ergodique satisfaisant les hypothèses 2.2 et 2.8 et*

$$A_j^* \rho_\infty = 0 \text{ pour } j = 2 \dots r.$$

Alors, elle est au moins d'ordre r pour la mesure invariante. Plus précisément l'erreur de la mesure invariante $e(\varphi, h)$ vérifie pour tout $\varphi \in C^\infty$ et $h \rightarrow 0$:

$$e(\varphi, h) = h^r \int_0^\infty \int_{\mathcal{M}} u(x, t) A_{r+1}^* \rho_\infty(x) d\text{vol}_{\mathcal{M}}(x) + \mathcal{O}(h^{r+1}).$$

Démonstration. Par définition

$$e(\varphi, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N \varphi(X_n) - \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_\infty(y) d\text{vol}_{\mathcal{M}}(y)$$

et puisque $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est ergodique,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N \varphi(X_n) = \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho^h(y) d\text{vol}_{\mathcal{M}}(y).$$

Donc le théorème est prouvé si

$$\int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho^h(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) = \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_{\infty}(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) + h^r \int_0^{\infty} \int_{\mathcal{M}} u(x, t) A_{r+1}^* \rho_{\infty}(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) + \mathcal{O}(h^{r+1}).$$

Par le lemme 2.11, on dispose de $(\rho_n)_{n \in \mathbb{N}}$ telle que $\rho_0 = \rho_{\infty}$, et pour tout $N \geq 1$

$$\int_{\mathcal{M}} \rho_N(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) = 0 \text{ et } \mathcal{L}^* \rho_N = \sum_{l=1}^N L_l^* \rho_{N-l}.$$

De plus,

$$\left| \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho^h(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) - \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_N^h(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) \right| \leq Ch^{N+1}.$$

Par récurrence, pour tout $n = 1, \dots, r-1$, on a $\mathcal{L}^* \rho_n = A_n^* \rho_{\infty} = L_n^* \rho_{\infty} = 0$ et $\rho_n = 0$. Ainsi

l'inégalité du lemme assure que $\left| \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho^h(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) - \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_r^h(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) \right| \leq Ch^{r+1}$, or $\rho_r^h(y) = \rho_{\infty} + h^r \rho_r$, d'où

$$\left| e(\varphi, h) - h^r \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_r(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) \right| \leq Ch^{r+1}$$

Par intégration de $\partial_t u(t, x) = \mathcal{L}u(t, x)$, on a $u(t, x) = \varphi(x) + \int_0^t \mathcal{L}u(s, x) ds$ et par ergodicité

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u(t, x) = \int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_{\infty}(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y).$$

Donc, en utilisant que ρ_r est de moyenne nulle :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{M}} \varphi(x) \rho_r(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) &= \int_{\mathcal{M}} \left(\int_{\mathcal{M}} \varphi(y) \rho_{\infty}(y) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(y) - \int_0^{\infty} \mathcal{L}u(s, x) ds \right) \rho_r(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) \\ &= - \int_{\mathcal{M}} \int_0^{\infty} \mathcal{L}u(s, x) \rho_r(x) ds d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) \\ &= - \int_0^{\infty} \int_{\mathcal{M}} u(s, x) \mathcal{L}^* \rho_r(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) ds \\ &= \int_0^{\infty} \int_{\mathcal{M}} u(s, x) A_{r+1}^* \rho_{\infty}(x) d \text{vol}_{\mathcal{M}}(x) ds, \end{aligned}$$

où l'on a utilisé que $\mathcal{L}^* \rho_r = A_{r+1}^* \rho_{\infty}$ comme dans la récurrence. $\square$

3 Nouvel intégrateur d'ordre 2 pour la méthode invariante

Nous allons nous intéresser aux méthodes de flot gelé [2] et simplifier leurs conditions d'ordre dans le cas de l'erreur pour la mesure invariante.

Remarque 3.1. On considère l'équation différentielle : $X'(t) = G(X(t))$. La méthode d'Euler explicite repose sur l'approximation par différences finies :

$$X'(t) \sim \frac{X(t + \delta t) - X(t)}{\delta t} \text{ devient } X_{n+1} = X_n + hG(X_n)$$

Sur une variété, $X_n + hG(X_n)$ n'appartient pas forcément à la variété, car $G(X_n)$ vit dans l'espace tangent en X_n .

On s'intéressera à des méthodes dites de flot gelé, généralisant les méthodes de groupes de Lie [11] dans le cas de géométries quelconques avec l'aide de frame. On « gèle » le champ de vecteurs : on résout

$$Y'(t) = g^d(X_n)E_d(Y(t)), \quad Y(0) = X_n$$

et on pose $X_{n+1} = Y(h)$.

Remarque 3.2. Dans $\mathbb{R}^d$, on retrouve $X_{n+1} = X_n + hg^d(X_n)E_d$.

Définition 3.3. Sur une variété, on note $\exp(hg^d(X_n)E_d) \cdot X_n$ la solution, ce qui donne :

$$X_{n+1} = \exp(hg^d(X_n)E_d) \cdot X_n$$

où $\exp$ désigne une version généralisée de l'exponentielle, adaptée à la géométrie de la variété.

L'appellation $\exp$ vient du fait que nous résolvons un flot, mais on a même mieux.

Remarque 3.4. Sur la sphère (ou tout espace de matrice), le repère est de la forme $E_d(y) = A_dy$ et $\exp$ correspond à l'exponentielle matricielle

$$\exp\left(\left(hf^d(X_n) + \sqrt{2h}\xi_n^d\right)E_d\right)X_n = \text{Exp}\left(\left(hf^d(X_n) + \sqrt{2h}\xi_n^d\right)A_d\right)X_n$$

Définition 3.5. La méthode la plus simple pour résoudre l'équation (1.1) est celle appelée **frozen flow Euler method** :

$$X_{n+1} = \exp\left(\left(hf^d(X_n) + \sqrt{2h}\xi_n^d\right)E_d\right)X_n.$$

3.1 Développement de Talay-Tubaro pour l'ordre 1

Dans cette sous-section, nous allons donner une première idée des calculs en calculant $A_1^*\mu_\infty = 0$ même si nous imposerons par la suite $A_1 = \mathcal{L}$ pour avoir la consistance de notre méthode.

Considérons la méthode générale proche de celle d'Euler

$$X_{n+1} = \exp\left(\sum_{d=1}^D \left(\alpha hf^d(X_n) + \beta \sqrt{h}\xi_n^d\right)E_d\right)X_n$$

et φ une fonction test.

On a alors $\varphi(X_{n+1}) = \exp\left(\sum_{d=1}^D \left(\alpha hf^d(X_n) + \beta \sqrt{h}\xi_n^d\right)E_d\right) \triangleright \varphi(X_n)$. On admettra ce résultat présenté dans [2].

Remarque 3.6. Nous introduirons juste après la définition de l'opération $\cdot$, mais il est important de noter que si X, Y sont deux champs de vecteurs et x, y deux points de $\mathcal{M}$ alors $y = (Y \cdot X)x$ donne, pour toute fonction test ϕ ,

$$\phi(y) = (X \cdot Y) \triangleright \phi(x).$$

En effet, sur les points de $\mathcal{M}$, il s'agit d'une composition, on applique d'abord X à x puis Y au résultat, cependant, sur ϕ , il s'agit d'une dérivation, d'abord dans la direction de X puis dans celle de Y .

On fait apparaître une différentielle d'ordre 1 nous allons introduire une notion de différentielle d'ordre supérieur qui dépend de la géométrie de la variété et ne peut pas être définie de la même manière que dans un espace plat. Remarquons que sur $\mathbb{R}^d$, on a $d^2\phi \cdot (X, Y) = (\phi' \cdot X)' \cdot Y - \phi' \cdot (X' \cdot Y)$.

Définition 3.7. On définit la Hessienne de ϕ dans les directions des champs de vecteurs " X puis Y " :

$$\begin{aligned} (X \cdot Y) \triangleright \phi(p) &:= X \triangleright (Y \triangleright \phi)(p) - (X \triangleright Y) \triangleright \phi(p) \\ &= d(d\phi(p) \cdot Y(p)) \cdot X(p) - d\phi(p) \cdot [(dY^d(p) \cdot X(p))E_d(p)]. \end{aligned}$$

Le premier, le deuxième et le quatrième $\triangleright$ correspondent à la dérivation d'une fonction par un champs de vecteurs, définie dans la sous-section 2.1. Définissons maintenant le troisième entre deux champs de vecteurs.

Définition 3.8. On définit l'opérateur par linéarité sur les composantes, c'est-à-dire pour X et $Y = Y^d E_d$ deux champs de vecteurs sur $\mathcal{M}$, on a

$$(X \triangleright Y) := (X \triangleright Y^d)E_d.$$

Il s'agit d'une connexion affine, objet que nous définirons plus en détails en 3.16 dans la sous-section 3.3, la connexion de Weitzenböck.

L'opération $(X \cdot Y)$ induit une structure d'algèbre d'opérateurs différentiels comme présenté dans la reformulation algébrique de l'extension post-Lie d'une opération sur l'espace des opérateurs différentiels [24, 8].

Définition 3.9. On définit l'exponentielle d'un opérateur G sur $\mathcal{M}$ par

$$\exp(G) := i_d + G + \frac{1}{2}(G \cdot G) + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!}(G \cdot^n G).$$

Nous pouvons alors effectuer un développement de Taylor à l'ordre 1 :

$$\varphi(X_{n+1}) = \varphi(X_n) + \sqrt{h}\beta\xi_n^d E_d \triangleright \varphi(X_n) + h \left(\alpha f^d(X_n) E_d + \frac{\beta^2}{2} (\xi_n^d)^2 (E_d \cdot E_d) \right) \triangleright \varphi(X_n) + h^{\frac{3}{2}} R_h,$$

où $\mathbb{E} \left[\left[|R_h|^2 \right] \right] \leq C$.

3.2 Représentation algébrique pour l'ordre faible

Pour simplifier les notations et introduire des techniques de calculs différentiels plus efficace, on va représenter nos termes différentiels par des forêts planaires exotiques de Butcher, dans l'esprit du travail [2] généralisant les B-séries standards [3, 9, 4] au cas stochastique sur variété.

Définition 3.10. Un arbre planaire décoré (π, α) est la donnée d'un graphe connexe et orienté π dont chaque noeud a une arrête sortante à l'exception d'un seul nommé la racine et une application α de π dans un ensemble de décoration D . Un ensemble ordonné, potentiellement vide, d'arbres planaires décorés est appelé une forêt planaire décorée.

Une forêt exotique est une forêt planaire décorée avec les décorations $D = \{\bullet\} \cup \mathbb{N}^*$, qui suit les règles suivantes : si un entier naturel est utilisé comme une décoration alors il doit décorer exactement deux feuilles. Deux arbres exotiques (π_1, α_1) et (π_2, α_2) sont identiques si $\pi_1 = \pi_2$ et s'il existe une application $\psi : D \mapsto D$ tel que $\psi(\bullet) = \bullet$, $\psi|_{\mathbb{N}}$ est un automorphisme de $\mathbb{N}$ et $\alpha_1 = \psi \circ \alpha_2$.

On étend cette définition aux combinaisons linéaires de forêts exotiques pour construire l'espace vectoriel des forêts exotiques $\mathcal{EF}$.

Définition 3.11. On définit l'opérateur linéaire $\mathbb{F}$ sur $\mathcal{EF}$ telle que

- $\mathbb{F}(\bullet) = F$
- $\mathbb{F}(\textcircled{1}) = E_{d_1}$
- $\mathbb{F}(\pi_1 \pi_2) = \mathbb{F}(\pi_1) \cdot \mathbb{F}(\pi_2)$
- $\mathbb{F}([\pi_1, \dots, \pi_n]_\bullet) = (\mathbb{F}(\pi_1) \cdot \dots \cdot \mathbb{F}(\pi_n))[F]$ où $[\pi_1 \dots \pi_n]_\bullet$ désigne l'arbre de racine $\bullet$ et de feuilles, dans l'ordre, $\pi_1, \dots, \pi_n$.

Exemple 3.12. Considérons un exemple que nous allons construire dans le prochain paragraphe.

$$f^k(E_{d_2} \triangleright f^j)((E_k \cdot E_{d_1}) \triangleright f^i)((E_{d_1} \cdot E_i \cdot E_{d_2} \cdot E_j) \triangleright \phi) \text{ est représenté par } \textcircled{1} \textcircled{2} \textcircled{3} \textcircled{4}.$$

Constructions des forêts exotiques planaires On commence par factoriser les termes différentiels par concaténation pour obtenir des produits de différentiels d'une seule fonction.

Exemple 3.13.

$$(E_d \cdot ((E_d \triangleright f^j)E_j)) \triangleright \phi = (E_d \triangleright f^j)((E_d \cdot E_j) \triangleright \phi).$$

Dans une étude postérieure, nous aborderons le cas où la factorisation se fait par la règle du dérivation d'un produit :

$$(E_d \cdot ((E_d \triangleright f^j)E_j)) \triangleright \phi = (E_d \triangleright f^j)((E_d \cdot E_j) \triangleright \phi) + ((E_d \cdot E_d) \triangleright f^j)(E_j \triangleright \phi).$$

Puis on indice nos termes selon la convention :

- les termes issus du potentiel $f^d E_d$ sont indicés par des lettres : $f^i E_i$,
- les termes probabilistes possèdent un produit de puissances paires de gaussiennes, on les séparent en produit de carrés de gaussiennes et on numérote chaque paire : $(\xi^{d_1})^2 (E_{d_1} \cdot E_{d_1})$.

Lemme 3.14. *Revenons brièvement un résultat mentionné plus haut et présent dans [12] : les termes probabilistes possèdent un produit de puissances paires de gaussiennes, on les séparent en produit de carrés de gaussiennes. Les moments paires d'une gaussienne sont $\mathbb{E}[\xi^{2k}] = \frac{(2k)!}{2^k k!}$. Prenons $2k$ chaussettes identiques et faisons des paires : pour la première chaussette de la*

première paire, on a $2k$ choix, pour la deuxième chaussette, on a $2k - 1$ choix et ainsi de suite, on a en tout $(2k)!$ choix. Puisque les chaussettes sont identiques, pour chaque paire, on peut inverser les chaussettes donc il faut diviser par 2 k fois, de plus chaque paire étant identique, il faut diviser par le nombre de permutation des k paires de chaussettes. On retrouve alors $\mathbb{E} \llbracket \xi^{2k} \rrbracket$.

Un fois indicés selon cette convention, il suffit de suivre les indications : on commence par prendre le terme de φ et on écrit dans l'ordre un point noir pour les lettres et le numéro pour les termes numérotés. Pour notre exemple 3.12, on a alors $\textcircled{1}\bullet\textcircled{2}\bullet$. Ensuite, pour chaque point noir représentant E_i , on lui attache la forêt associée à f^i . Dans l'exemple, le point de E_j devient $\textcircled{2}$ et celui de E_i devient $\textcircled{1}$, ce dernier introduit un nouveau point associé à E_k dont le terme f^k n'est pas dérivé donc l'arbre est terminé.

Définition 3.15. On définit l'ordre d'une forêt π par

$$|\pi| = \text{Card}\{\bullet \text{ dans } \pi\} + \text{Card}\{\textcircled{1}\textcircled{1} \text{ dans } \pi\}$$

Ainsi l'ensemble des forêts associées à l'ordre n dans le développement de Taylor est l'ensemble des forêts d'ordre n .

On a déjà vu l'ordre 1 : $\textcircled{1}\textcircled{1}$ et $\bullet$. Pour l'ordre 2, on a **11** forêts :

$$\begin{array}{cccccccccccccccc} \bullet & \textcircled{1}\textcircled{1} & \bullet\bullet & \textcircled{1}\textcircled{1} & \textcircled{1}\textcircled{1} & \bullet\textcircled{1}\textcircled{1} & \textcircled{1}\bullet\textcircled{1} & \textcircled{1}\textcircled{1}\bullet & \textcircled{2}\textcircled{1}\textcircled{1} & \textcircled{2}\textcircled{1}\textcircled{2}\textcircled{1} & \textcircled{1}\textcircled{2}\textcircled{2}\textcircled{1} \end{array}$$

Et pour l'ordre 3 on a **95** forêts.

3.3 Intégration par partie sur variété pour la mesure invariante

On se référera à [23] et à [16] pour les preuves de cette sous-section.

Définition 3.16. Soit $\mathcal{M}$ une variété lisse et $\mathfrak{X}\mathcal{M}$ l'ensemble des champs de vecteurs tangents lisse sur $\mathcal{M}$. Alors une connexion affine sur $\mathcal{M}$ est une application bilinéaire $(\mathfrak{X}\mathcal{M})^2 \rightarrow \mathfrak{X}\mathcal{M} : (X, Y) \mapsto \nabla_X Y$ vérifiant, pour toutes fonction lisse f sur $\mathcal{M}$ et tous $(X, Y) \in (\mathfrak{X}\mathcal{M})^2$:

- $\nabla_{fX} Y = f \nabla_X Y$, c'est-à-dire que ∇ est $C^\infty(\mathcal{M}, \mathbb{R})$ linéaire en la première variable.
- $\nabla_X (fY) = (X \triangleright f)Y + f \nabla_X Y$, c'est-à-dire que ∇ satisfait la règle de dérivation de Leibniz en la seconde variable.

Définition 3.17. Soit $(\mathcal{M}, g)$ une variété riemannienne. Une connexion affine ∇ sur est appelée une connexion de Levi-Civita si

- elle préserve la métrique, c'est-à-dire $\nabla g = 0$
- elle est sans torsion, c'est-à-dire, pour tous $(X, Y) \in (\mathfrak{X}\mathcal{M})^2$, on a $\nabla_X Y - \nabla_Y X = [X, Y]$, où $[X, Y]$ est le crochet de Lie des champs de vecteurs X et Y .

Remarque 3.18. La condition $\nabla g = 0$ est équivalente à $Z \cdot g(X, Y) = g(\nabla_Z X, Y) + g(X, \nabla_Z Y)$ et la preuve de cette équivalence est présente dans [13].

Théorème 3.19. Soit $(\mathcal{M}, g)$ une variété riemannienne. Il existe une unique connexion de Levi-Civita.

Remarque 3.20. On définit la courbure d'une connexion affine par $\mathcal{R}(X, Y)Z = \nabla_X \nabla_Y Z - \nabla_Y \nabla_X Z - \nabla_{[X, Y]} Z$ pour tous $(X, Y, Z) \in (\mathfrak{X}\mathcal{M})^3$. La courbure d'une variété riemannienne est lié à celle de la connexion de Levi-Civita. La connexion de Weitzenböck est, elle, de courbure nulle mais de torsion non nulle, c'est-à-dire $\nabla_X Y - \nabla_Y X - [X, Y] \neq 0$.

Théorème 3.21. La formule de Koszul assure que pour la connexion de Levi-Civita :

$$2g(\nabla_X Y, Z) = X(g(Y, Z)) + Y(g(Z, X)) - Z(g(X, Y)) + g([X, Y], Z) - g([Y, Z], X) - g([X, Z], Y)$$

Lemme 3.22. Soient $(\mathcal{M}, g)$ une variété riemannienne, f une fonction lisse sur $\mathcal{M}$ et v un champs de vecteurs tangents lisse sur $\mathcal{M}$. Pour la mesure volume sur $\mathcal{M}$, on a

$$\int_{\mathcal{M}} df \cdot v d\text{vol}_{\mathcal{M}} = - \int_{\mathcal{M}} f \text{div}(v) d\text{vol}_{\mathcal{M}}.$$

Définition 3.23. Pour tout champs de vecteurs tangents lisse H , la divergence est défini par :

$$\text{div}(H) = g(\nabla_{E_d} H, E_d).$$

Théorème 3.24. Soient $(\mathcal{M}, g)$ une variété riemannienne, f et g deux fonctions lisses sur $\mathcal{M}$ et $(E_1, \dots, E_d)$ un repère orthonormale de $\mathcal{M}$. Considérons un potentiel lisse V sur $\mathcal{M}$. On note alors $d\mu$ la mesure $\exp(-V)d\text{vol}_{\mathcal{M}}$. L'intégration par partie par rapport à la mesure $d\mu$ assure que :

$$\int_{\mathcal{M}} f((E_i \cdot E_i) \triangleright g) d\mu = - \int_{\mathcal{M}} E_i[f] E_i[g] d\mu - \int_{\mathcal{M}} f F[g] d\mu.$$

Démonstration. Dans un premier temps, on va se ramener au cas du lemme 3.22 :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{M}} f((E_i \cdot E_i) \triangleright g) d\mu &= \int_{\mathcal{M}} f(d(dg \cdot E_i) \cdot E_i) d\mu \\ &= \int_{\mathcal{M}} d(dg \cdot E_i) \cdot (f e^{-V} E_i) d\text{vol}_{\mathcal{M}} \\ &= - \int_{\mathcal{M}} E_i[g] \text{div}(f e^{-V} E_i) d\text{vol}_{\mathcal{M}} \\ &= - \int_{\mathcal{M}} E_i[g] (f \text{div}(E_i) + df \cdot E_i - f dV \cdot E_i) e^{-V} d\text{vol}_{\mathcal{M}} \\ &= - \int_{\mathcal{M}} E_i[f] E_i[g] d\mu - \int_{\mathcal{M}} f E_i[g] (\text{div}(E_i) - E_i[V]) d\mu. \end{aligned}$$

Rappelons que par définition $F = -\nabla V - \nabla_{E_d} E_d$, ainsi $F = -E_i[V] E_i - g(\nabla_{E_d} E_d, E_i) E_i$ par orthonormalité de la base $(E_1, \dots, E_D)$. Le théorème est donc montré si $\text{div}(E_i) = -g(\nabla_{E_d} E_d, E_i)$, or par définition de la divergence $\text{div}(H) = g(\nabla_{E_d} H, E_p)$ pour tout champs de vecteurs tangents lisse H . La formule de Koszul appliquée à $X = Z = E_d$ et $Y = E_i$ assure que

$$\begin{aligned} 2g(\nabla_{E_d} E_i, E_d) &= E_d(g(E_i, E_d)) + E_i(g(E_d, E_d)) - E_d(g(E_d, E_i)) \\ &\quad + g([E_d, E_i], E_d) - g([E_i, E_d], E_d) - g([E_d, E_d], E_i) \\ &= 2g([E_d, E_i], E_d). \end{aligned}$$

De même $2g(\nabla_{E_d} E_d \cdot E_i) = -2g([E_d, E_i], E_d)$. D'où le résultat attendu. $\square$

Exemple 3.25. Revenons sur l'ordre 1. Par intégration par partie

$$\int_{\mathcal{M}} ((E_d \cdot E_d) \triangleright \phi) \rho_{\infty} d\text{vol}_{\mathcal{M}} = - \int_{\mathcal{M}} f^d(E_d \triangleright \phi) \rho_{\infty} d\text{vol}_{\mathcal{M}}.$$

Donc, si $\alpha = \frac{\beta^2}{2}$, on a alors $A_1 = \alpha (f^d(X_n)E_d + (E_d \cdot E_d))$ et $A_1^* \rho_{\infty} = 0$.

Proposition 3.26. On va cependant imposer un ordre 1 pour la convergence faible et $\alpha = \frac{\beta^2}{2} = 1$ afin d'obtenir la consistance de notre méthode.

Définition 3.27. Donnons une notion d'arbre irréductible : par intégration par partie, on a

$$\int_{\mathcal{M}} f^d(E_d \triangleright \phi) \rho_{\infty} d\text{vol}_{\mathcal{M}} = - \int_{\mathcal{M}} (E_d \triangleright f^d) \phi \rho_{\infty} d\text{vol}_{\mathcal{M}} - \int_{\mathcal{M}} f^d f^d \phi \rho_{\infty} d\text{vol}_{\mathcal{M}}.$$

Or aucun de ces deux termes ne respectent la convention d'écriture de nos forêts, le premier car E_d dérive le f^d qui lui est associé et le second car on a deux f^d sans E_d . On considère alors les forêts dont la racine à gauche est un point noir comme irréductible.

L'objectif de notre méthode est d'écrire les forêts non irréductibles comme combinaison linéaire de forêts irréductibles et d'annuler les coefficients associés.

Définition 3.28. On dit que deux combinaisons linéaires de forêts exotiques sont faiblement équivalentes et on note $\pi_1 \sim \pi_2$ si

$$\int_{\mathcal{M}} \mathbb{F}(\pi_1)[\phi] \rho_{\infty} d\text{vol}_{\mathcal{M}} = \int_{\mathcal{M}} \mathbb{F}(\pi_2)[\phi] \rho_{\infty} d\text{vol}_{\mathcal{M}} \text{ pour toute } \phi \in C_P^{\infty}(\mathcal{M}).$$

Proposition 3.29. Si $\textcircled{1}\pi$ est une forêt alors on obtient son intégration par partie en greffant $\textcircled{1}$ à gauche de chaque $\bullet$ de π et en ajoutant la forêt obtenu en remplaçant l'unique $\textcircled{1}$ de π par $\bullet$.

Remarque 3.30. Il s'agit simplement de déplacer la dérivation de ϕ dans la direction E_d sur chaque fonction f^i et de rajouter le terme issu de la divergence.

Exemple 3.31. Par cette proposition, on a

$$\textcircled{1}\textcircled{1} \sim -(\textcircled{1}\textcircled{1} + \bullet\bullet) \text{ et } \textcircled{1}\textcircled{1}\textcircled{2} \sim -(\textcircled{1}\textcircled{1}\textcircled{2} + \textcircled{1}\textcircled{1}\textcircled{2} + \textcircled{1}\textcircled{1}\textcircled{2} + \textcircled{1}\textcircled{1}\textcircled{2}).$$

Forêt	Intégration par partie
	irréductible
	irréductible
	irréductible
	irréductible
	$-(\bullet + \text{circle with 1})$
	irréductible
	$-(\bullet + \text{circle with 1})$
	$-(\bullet + \text{circle with 1}) \sim \bullet + \text{circle with 1} - \bullet$
	$-\bullet \text{ circle with 1}$
	$-\text{circle with 1} \bullet \sim \bullet + \text{circle with 1}$
	$-\text{circle with 1} \bullet \sim \bullet - \text{circle with 1}$

TABLE 1 – Relation d'équivalence faible entre les forêts exotiques d'ordre 2 par intégration par partie

Ainsi, en notant $A_2\phi = a_1\bullet + a_2\text{circle with 1} + a_3\bullet\bullet + a_4\bullet\text{circle with 1} + a_5\text{circle with 1}\bullet + a_6\bullet\text{circle with 1} + a_7\text{circle with 1}\bullet\text{circle with 1} + a_8\text{circle with 1}\text{circle with 1}\bullet + a_9\text{circle with 1}\text{circle with 1}\text{circle with 1} + a_{10}\text{circle with 1}\text{circle with 1}\text{circle with 1} + a_{11}\text{circle with 1}\text{circle with 1}\text{circle with 1}$, l'intégration par parties des termes réductibles assurent que

$$\begin{aligned} \phi A_2^* \mu_\infty = & [(a_1 - a_5 + a_8 - a_{11})\bullet + (a_2 - a_5 + a_8 - a_{11})\text{circle with 1} + (a_3 - a_7 - a_8 + a_{10} + a_{11})\bullet\bullet \\ & + (a_4 - a_7 + a_{10})\bullet\text{circle with 1} + (a_6 - a_9)\bullet\text{circle with 1}\text{circle with 1}] \mu_\infty. \end{aligned}$$

Les conditions d'intégration par parties imposent alors

$$\begin{cases} a_1 = a_2 \\ a_6 = a_9 \\ a_4 + a_{10} = a_7 \\ a_1 + a_8 = a_5 + a_{11} \\ a_3 + a_{11} = a_4 + a_8 \end{cases}$$

Pour l'ordre 3, il y a 40 irréductibles ce qui donne un système de **40 équations à 95 inconnues**.

3.4 Nouvelle méthode d'ordre 2

Dans l'esprit des méthodes de Crouch-Grossmann et commutator-free pour les EDOs [6, 25, 5, 26], on considère la classe de méthodes générale issue de [2] :

$$\begin{aligned} H_n &= \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\alpha h f^d(X_n) + \beta \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d \right) X_n \\ X_{n+1} &= \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\alpha_2 h f^d(X_n) + \gamma_2 h f^d(H_n) + \beta_2 \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d \right) \\ &\quad \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\alpha_1 h f^d(X_n) + \gamma_1 h f^d(H_n) + \beta_1 \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d \right) X_n, \end{aligned}$$

Le développement de Taylor de cette méthode à l'ordre 1 impose les deux conditions : $\alpha_1 + \gamma_1 + \alpha_2 + \gamma_2 = 1$ et $\frac{(\beta_1 + \beta_2)^2}{2} = 1$. Pour l'ordre 2, on a l'expression des coefficients, avec la certaines valeurs numériques issues de l'ordre 1 :

Forêt	Coefficient	Expression
	a_1	$\alpha(\gamma_1 + \gamma_2)$
	a_2	$\frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)\beta^2$
	a_3	$\frac{1}{2}(\alpha_1 + \gamma_1 + \alpha_2 + \gamma_2)^2 = \frac{1}{2}$
	a_4	$\frac{1}{2}\beta(\gamma_1\beta_1 + 2\gamma_1\beta_2 + \gamma_2\beta_2)$
	a_5	$\frac{1}{2}\beta(\gamma_1\beta_1 + 2\gamma_2\beta_1 + \gamma_2\beta_2)$
	a_6	$\frac{1}{6}[(\alpha_1 + \gamma_1)(\beta_1^2 + 3\beta_1\beta_2 + 3\beta_2^2) + (\alpha_2 + \gamma_2)\beta_2^2]$
	a_7	$\frac{1}{6}[(\alpha_1 + \gamma_1)(\beta_1^2 + 3\beta_1\beta_2) + (\alpha_2 + \gamma_2)(3\beta_1\beta_2 + \beta_2^2)]$
	a_8	$\frac{1}{6}[(\alpha_1 + \gamma_1)\beta_1^2 + (\alpha_2 + \gamma_2)(3\beta_1^2 + 3\beta_1\beta_2 + \beta_2^2)]$
	a_9	$\frac{(\beta_1 + \beta_2)^4}{24} = \frac{1}{6}$
	a_{10}	$\frac{(\beta_1 + \beta_2)^4}{24} = \frac{1}{6}$
	a_{11}	$\frac{(\beta_1 + \beta_2)^4}{24} = \frac{1}{6}$

TABLE 2 – Expression des coefficients des forêts par les coefficients de la méthode

Le système d'équation des ordres 1 et 2 devient alors, en multipliant par 2 ou 6 pour simplifier les fractions :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_1 + \gamma_1 + \alpha_2 + \gamma_2 = 1 \\ (\beta_1 + \beta_2)^2 = 2 \\ 2\alpha(\gamma_1 + \gamma_2) = \beta^2(\gamma_1 + \gamma_2) \\ \beta_2^2(\alpha_2 + \gamma_2) + (\alpha_1 + \gamma_1)(\beta_1^2 + 3\beta_1\beta_2 + 3\beta_2^2) = 1 \\ 3\beta(\beta_1\gamma_1 + 2\beta_2\gamma_1 + \beta_2\gamma_2) + 1 = (\alpha_1 + \gamma_1)(\beta_1^2 + 3\beta_1\beta_2) + (\alpha_2 + \gamma_2)(3\beta_1\beta_2 + \beta_2^2) \\ 6\alpha(\gamma_1 + \gamma_2) + \beta_1^2(\alpha_1 + \gamma_1) + (\alpha_2 + \gamma_2)(3\beta_1^2 + 3\beta_1\beta_2 + \beta_2^2) = 3\beta(\beta_1\gamma_1 + 2\beta_1\gamma_2 + \beta_2\gamma_2) + 1 \\ 3\beta(\beta_1\gamma_1 + 2\beta_2\gamma_1 + \beta_2\gamma_2) + \beta_1^2(\alpha_1 + \gamma_1) + (\alpha_2 + \gamma_2)(3\beta_1^2 + 3\beta_1\beta_2 + \beta_2^2) = 4 \end{array} \right. \quad (3.1)$$

Remarque 3.32. La troisième equation $2\alpha(\gamma_1 + \gamma_2) = \beta^2(\gamma_1 + \gamma_2)$ est équivalente à $2\alpha = \beta^2$ quand $\gamma_1 + \gamma_2 \neq 0$. Si on impose la condition supplémentaire $\gamma_1 + \gamma_2 = 0$, le calcul formel assure que le système 3.1 n'admet aucune solution. Ainsi le premier étage

$$H_n = \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\alpha h f^d(X_n) + \beta \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d \right) X_n$$

est nécessairement la méthode d'Euler, au temps $\frac{\beta^2 h}{2}$ (quitte à remplacer β par $|\beta|$ par symétrie de la variable aléatoire ξ_n^d).

Simplifions ce système. Dans le cas $f = 0$, la méthode devient

$$X_{n+1} = \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\beta_2 \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d \right) \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\beta_1 \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d \right) X_n,$$

avec $(\beta_1 + \beta_2)^2 = 2$. Imposons alors $\beta_2 = 0$ pour n'avoir qu'une seule exponentielle et $\beta_1 = \sqrt{2}$ pour retrouver la méthode d'Euler, dans le cas $f = 0$. La résolution du système (3.1) avec $\beta_2 = 0$ et $\beta_1 = \sqrt{2}$ par calcul formel offre une solution paramétrée par β :

$$\left\{ \alpha = \frac{\beta^2}{2}, \alpha_1 = \frac{1}{2}, \alpha_2 = \frac{\beta(\beta - 2\sqrt{2}) + 2}{2\beta(\beta - 2\sqrt{2})}, \beta_1 = \sqrt{2}, \beta_2 = 0, \gamma_1 = 0, \gamma_2 = -\frac{1}{\beta(\beta - 2\sqrt{2})} \right\}$$

Remarquons que seuls trois coefficients dépendent de β et que $\alpha_2 + \gamma_2$ est constant égale à $\frac{1}{2}$. Pour choisir une valeur de β , on va chercher à prendre des coefficients positifs et de taille raisonnable. Pour simplifier les expressions, on va prendre β de la forme $\sqrt{2}\tilde{\beta}$.

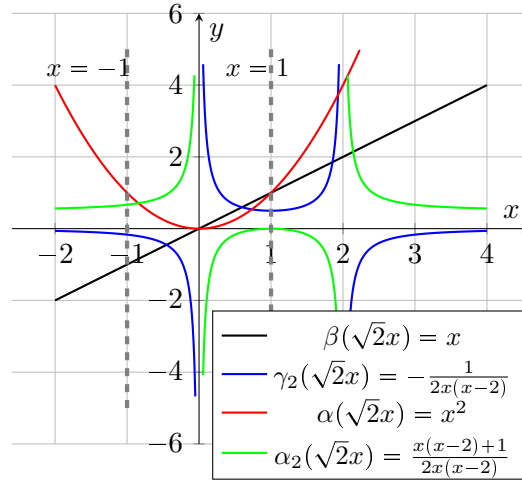


FIGURE 2 – Graphes des coefficients de la méthodes en fonction de $\sqrt{2}\beta$.

L'étude des coefficients assure que tous les coefficients positifs si et seulement si $\beta = \sqrt{2}$. Dans la suite, nous prendrons uniquement la méthode pour $\beta = \sqrt{2}$ mais nous mentionnons également celle pour $\beta = -\sqrt{2}$ dont les coefficients sont raisonnables.

α	α_1	α_2	β	β_1	β_2	γ_1	γ_2
1	$\frac{1}{2}$	0	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0	$\frac{1}{2}$
		$\frac{2}{3}$	$-\sqrt{2}$				$-\frac{1}{6}$

TABLE 3 – Présentation des valeurs des coefficients pour deux méthodes.

Théorème 3.33. *La méthode numérique intrinsèque*

$$H_n = \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(h f^d(X_n) + \sqrt{2h} \xi_n^d \right) E_d \right) X_n$$

$$X_{n+1} = \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\frac{h}{2} f^d(H_n) \right) E_d \right) \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\frac{h}{2} f^d(X_n) + \sqrt{2h} \xi_n^d \right) E_d \right) X_n,$$

est d'ordre 1 faible et d'ordre 2 pour la méthode invariante.

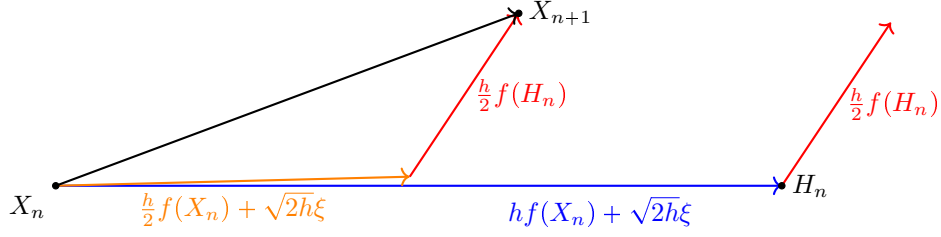


FIGURE 3 – Étapes de la nouvelle méthode d'ordre 2

3.5 Deuxième nouvelle méthode d'ordre 2

Revenons au système d'équations 3.1, nous allons le simplifier d'une manière différente. Au lieu de prendre $\beta_2 = 0$ et $\beta_1 = \sqrt{2}$ pour retrouver la méthode d'Euler, ce qui correspond à mettre le terme aléatoire seulement dans le premier pas de la méthode, nous allons partager équitablement le bruit entre les deux pas. La résolution du système (3.1) avec $\beta_1 = \beta_2$ par calcul formel offre deux solutions paramétrées par β , une avec $\beta_1 = \beta_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}$ et l'autre avec $\beta_1 = \beta_2 = -\frac{\sqrt{2}}{2}$. Nous garderons la première :

$$\left\{ \alpha = \frac{\beta^2}{2}, \alpha_1 = \frac{\beta^2 - 3\sqrt{2}\beta + 1}{6\beta(\beta - 2\sqrt{2})}, \alpha_2 = \frac{5\beta^2 - 9\sqrt{2}\beta + 5}{6\beta(\beta - 2\sqrt{2})}, \beta_1 = \beta_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}, \gamma_1 = \frac{\sqrt{2}\beta - 1}{6\beta(\beta - 2\sqrt{2})}, \gamma_2 = \frac{-\sqrt{2}\beta - 5}{6\beta(\beta - 2\sqrt{2})} \right\}$$

Remarquons que cinq coefficients dépendent de β et que $\alpha_2 + \gamma_2$ est constant égale à $\frac{5}{6}$. Pour choisir une valeur de β , on va chercher à prendre des coefficients positifs et de taille raisonnable. Pour simplifier les expressions, on va prendre β de la forme $\sqrt{2}\tilde{\beta}$.

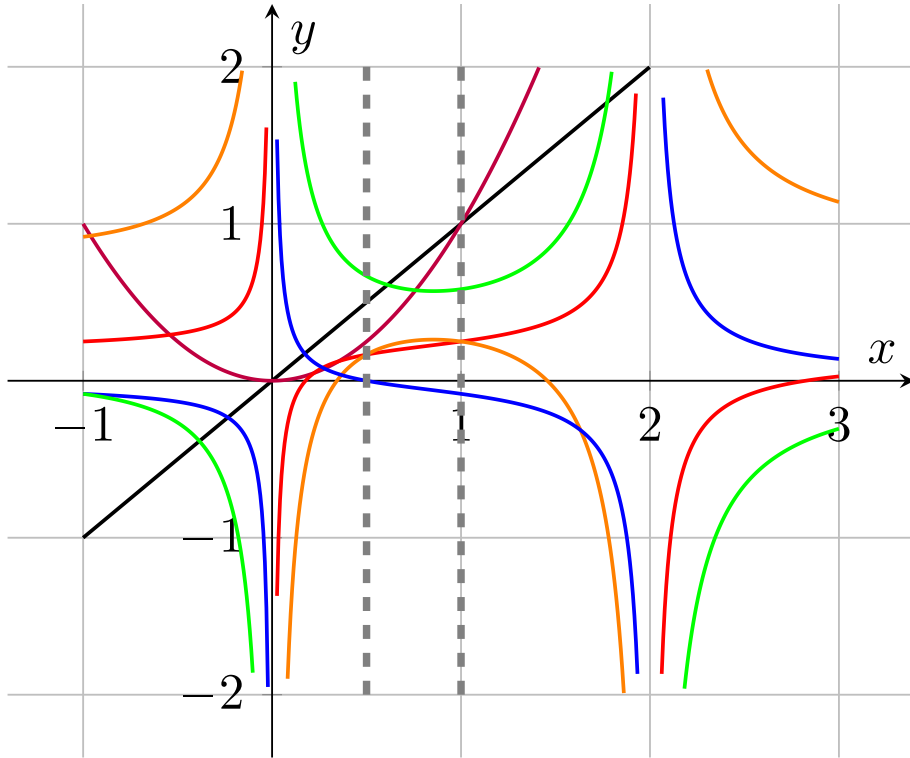


FIGURE 4 – Graphes des coefficients de la méthode en fonction de $\sqrt{2}\beta$.

D'après l'étude des coefficients, tous les coefficients sont positifs si et seulement si $\beta \in \left[\sqrt{2} \frac{9-\sqrt{31}}{10}, \frac{\sqrt{2}}{2} \right]$. Nous allons retenir deux valeurs de β : $\sqrt{2}$ et $\frac{\sqrt{2}}{2}$. La première correspond au fait que le premier étage de la méthode est Euler mais son coefficient γ_1 est négatif et la seconde valeur est celle dont les coefficients sont positifs et minimaux.

α	α_1	α_2	β	β_1	β_2	γ_1	γ_2
1	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\sqrt{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$-\frac{1}{12}$	$\frac{7}{12}$
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$			0	$\frac{2}{3}$

TABLE 4 – Présentation des valeurs des coefficients pour deux méthodes.

On ne considérera alors uniquement la méthode pour $\beta = \frac{\sqrt{2}}{2}$.

Théorème 3.34. *La méthode numérique intrinsèque*

$$\begin{aligned}
H_n &= \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\frac{h}{4} f^d(x_n) + \frac{\sqrt{2h}}{2} \xi_n^d \right) E_d \right) x_n \\
x_{n+1} &= \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\frac{h}{6} f^d(x_n) + \frac{2h}{3} f^d(H_n) + \frac{\sqrt{2h}}{2} \xi_n^d \right) E_d \right) \\
&\quad \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\frac{h}{6} f^d(x_n) + \frac{\sqrt{2h}}{2} \xi_n^d \right) E_d \right) x_n,
\end{aligned}$$

est d'ordre 1 faible et d'ordre 2 pour la méthode invariante.

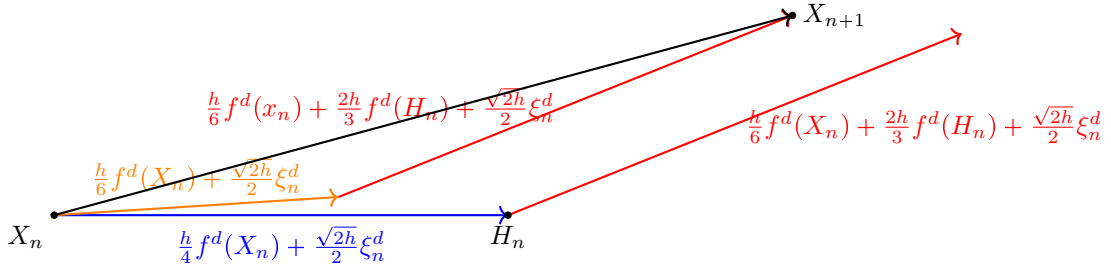


FIGURE 5 – Étapes de la nouvelle méthode d'ordre 2

4 Une méthode avec postprocesseur d'ordre 2 pour la mesure invariante

On considère un postprocesseurs $X \mapsto \overline{X}$, construit comme une perturbation de l'identité avec le développement suivant.

Hypothèse 4.1. Pour toute fonction $\varphi \in C_P^\infty(\mathcal{M})$ et h suffisamment petit, on a le développement

$$\mathbb{E} [\varphi(\overline{X}) | X] = \varphi(X) + \sum_{j=1}^p h^j \overline{A}_j \varphi(X) + h^{p+1} R_p^h(\varphi, X).$$

Dans l'esprit des méthodes avec postprocesseurs [28], on considère la classe de méthodes générale issue de type Leimkuhler-Matthews [17] :

$$\begin{aligned}
H_n &= \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\alpha h f^d(x_n) + \beta \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d \right) x_n \\
x_{n+1} &= \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\alpha_2 h f^d(x_n) + \gamma_2 h f^d(H_n) + \beta_2 \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d \right) \\
&\quad \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\alpha_1 h f^d(x_n) + \gamma_1 h f^d(H_n) + \beta_1 \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d \right) x_n \\
\bar{x}_n &= \exp \left(\sigma \sqrt{h} \xi_n^d E_d \right) x_n.
\end{aligned}$$

On cherche à construire une méthode moins coûteuse avec une seule évaluation en f^d . Ainsi on impose

$$\alpha = \alpha_1 = \alpha_2 = 0.$$

Le développement de Taylor de cette méthode à l'ordre 1 impose les deux conditions : $\gamma_1 + \gamma_2 = 1$ et $\frac{(\beta_1 + \beta_2)^2}{2} = 1$. Pour l'ordre 2, on a l'expression des coefficients, avec la certaines valeurs numériques issues de l'ordre 1 :

Forêt	Coefficient	Expression
$\bullet$	a_1	0
$\textcircled{1}\textcircled{1}$	a_2	$\frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)\beta^2$
$\bullet \bullet$	a_3	$\frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)^2 = \frac{1}{2}$
$\textcircled{1}\bullet$	a_4	$\frac{1}{2}\beta(\gamma_1\beta_1 + 2\gamma_1\beta_2 + \gamma_2\beta_2)$
$\bullet\textcircled{1}$	a_5	$\frac{1}{2}\beta(\gamma_1\beta_1 + 2\gamma_2\beta_1 + \gamma_2\beta_2)$
$\bullet\textcircled{1}\textcircled{1}$	a_6	$\frac{1}{6}[\gamma_1(\beta_1^2 + 3\beta_1\beta_2 + 3\beta_2^2) + \gamma_2\beta_2^2]$
$\textcircled{1}\bullet\textcircled{1}$	a_7	$\frac{1}{6}[\gamma_1(\beta_1^2 + 3\beta_1\beta_2) + \gamma_2(3\beta_1\beta_2 + \beta_2^2)]$
$\textcircled{1}\textcircled{1}\bullet$	a_8	$\frac{1}{6}[\gamma_1\beta_1^2 + \gamma_2(3\beta_1^2 + 3\beta_1\beta_2 + \beta_2^2)]$
$\textcircled{2}\textcircled{2}\textcircled{1}\textcircled{1}$	a_9	$\frac{(\beta_1 + \beta_2)^4}{24} = \frac{1}{6}$
$\textcircled{2}\textcircled{1}\textcircled{2}\textcircled{1}$	a_{10}	$\frac{(\beta_1 + \beta_2)^4}{24} = \frac{1}{6}$
$\textcircled{1}\textcircled{2}\textcircled{2}\textcircled{1}$	a_{11}	$\frac{(\beta_1 + \beta_2)^4}{24} = \frac{1}{6}$

TABLE 5 – Expression des coefficients des forêts par les coefficients de la méthode

Lemme 4.2. *On se place sous certaines hypothèses techniques. [28] On considère l'équation différentielle stochastique (1.1) sur $\mathcal{M}$ et résolu par une méthode numérique consistante et ergodique avec postprocesseurs satisfaisant*

$$A_j^* \rho_\infty = 0 \text{ pour } j = 2 \dots p,$$

$$\overline{A_j} = c_j \mathcal{L}^j \text{ pour } j = 1 \dots p-1$$

et

$$(A_{p+1} + [\mathcal{L}, \overline{A_p}])^* \mu_\infty = 0.$$

Alors, elle est au moins d'ordre $p+1$ pour la mesure invariante.

Proposition 4.3.

$$[\mathcal{L}, \overline{A_1}] \phi = \frac{\sigma^2}{2} \left(\bullet \circ \circ \circ - \circ \circ \circ \bullet - 2 \circ \circ \circ - \circ \circ \circ \right).$$

Proposition 4.4. *Toute solution de*

$$\begin{cases} a_1 = a_2 - \sigma^2 \\ a_6 + 3\sigma^2 = a_9 \\ a_4 + a_{10} = a_7 \\ a_1 + a_8 = a_5 - 3\sigma^2 + a_{11} \\ a_3 + a_{11} = a_4 + a_8 - 3\sigma^2 \end{cases}$$

est solution de

$$(A_2 + [\mathcal{L}, \overline{A_1}])^* \mu_\infty = 0.$$

Le système d'équation des ordres 1 et 2 devient alors, en multipliant par 2 ou 6 pour simplifier les fractions :

$$\begin{cases} \gamma_1 + \gamma_2 = 1, \\ (\beta_1 + \beta_2)^2 = 2, \\ \beta^2 (\gamma_1 + \gamma_2) - \sigma^2 = 0, \\ \beta_2^2 \gamma_2 + \gamma_1 (\beta_1^2 + 3\beta_1 \beta_2 + 3\beta_2^2) + 3\sigma^2 = 1, \\ 3\beta (\beta_1 \gamma_1 + 2\beta_2 \gamma_1 + \beta_2 \gamma_2) + 1 = \gamma_1 (\beta_1^2 + 3\beta_1 \beta_2) + \gamma_2 (3\beta_1 \beta_2 + \beta_2^2), \\ \beta_1^2 \gamma_1 + \gamma_2 (3\beta_1^2 + 3\beta_1 \beta_2 + \beta_2^2) = 3\beta (\beta_1 \gamma_1 + 2\beta_1 \gamma_2 + \beta_2 \gamma_2) - 3\sigma^2 + 1, \\ 3\beta (\beta_1 \gamma_1 + 2\beta_2 \gamma_1 + \beta_2 \gamma_2) + \beta_1^2 \gamma_1 + \gamma_2 (3\beta_1^2 + 3\beta_1 \beta_2 + \beta_2^2) - 3\sigma^2 = 4 \end{cases} \quad (4.1)$$

Proposition 4.5. *Le système (3.1) avec par calcul formel offre 4 solutions.*

β	β_1	β_2	γ_1	γ_2	σ
$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{3\sqrt{2}}{4}$	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$\frac{5}{4}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$
$-\frac{\sqrt{2}}{2}$	$-\frac{3\sqrt{2}}{4}$	$-\frac{\sqrt{2}}{4}$			$-\frac{\sqrt{2}}{2}$
$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{3\sqrt{2}}{4}$	$\frac{\sqrt{2}}{4}$			$\frac{\sqrt{2}}{2}$

TABLE 6 – Présentation des valeurs des coefficients des 4 solutions de (4.1).

Proposition 4.6. *Toute les solutions partagent un coefficient $\gamma_1 = -\frac{1}{4} < 0$ mais une seule a ses autres coefficients positifs :*

$$\left\{ \beta = \frac{\sqrt{2}}{2}, \beta_1 = \frac{3\sqrt{2}}{4}, \beta_2 = \frac{\sqrt{2}}{4}, \gamma_1 = -\frac{1}{4}, \gamma_2 = \frac{5}{4}, \sigma = \frac{\sqrt{2}}{2} \right\}.$$

Remarque 4.7. Deux de ses coefficients sont absolument plus grand que 1, ce qui pourrait induire des instabilités sur la méthode.

Théorème 4.8. *La méthode numérique intrinsèque avec postprocesseurs*

$$H_n = \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\frac{\sqrt{2h}}{2} \xi_n^d \right) E_d \right) x_n$$

$$\begin{aligned}
x_{n+1} &= \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\frac{5h}{4} f^d(H_n) + \frac{\sqrt{2h}}{4} \xi_n^d \right) E_d \right) \\
&\quad \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(-\frac{h}{4} f^d(H_n) + \frac{3\sqrt{2h}}{4} \xi_n^d \right) E_d \right) x_n \\
\bar{x}_n &= \exp \left(\frac{\sqrt{2h}}{2} \xi_N^d E_d \right) x_n.
\end{aligned}$$

est d'ordre 1 faible et d'ordre 2 pour la méthode invariante.

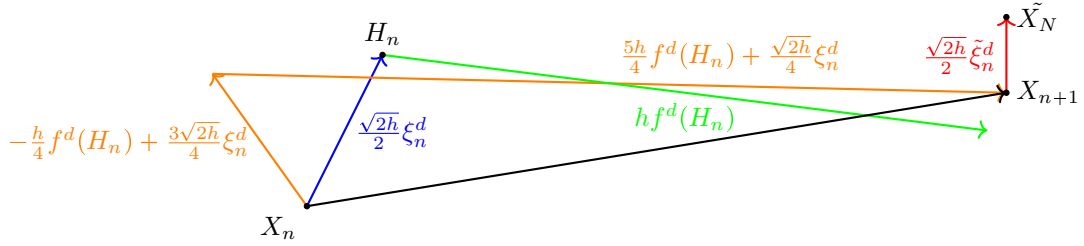


FIGURE 6 – Étapes de la nouvelle méthode d'ordre 2

Remarque 4.9. Pour $\mathcal{M} = \mathbb{R}^D$, on retrouve

$$\begin{aligned}
H_n &= x_n + \sum_{d=1}^D \frac{\sqrt{2h}}{2} \xi_n^d e_d \\
x_{n+1} &= x_n + \sum_{d=1}^D h f^d(H_n) e_d + \sqrt{2h} \xi_n^d e_d \\
\bar{x}_n &= x_n + \frac{\sqrt{2h}}{2} \xi_N^d e_d.
\end{aligned}$$

On retrouve exactement la méthode pour $\theta = 0$ proposée dans [28].

5 Méthodes de type Runge-Kutta-Munthe-Kaas

5.1 Réduction générale des méthode de type Couch-Grossman

On s'intéresse maintenant aux méthodes ne comportant qu'une seule exponentielle et utilisant des commutateurs. Pour cela, nous donnerons une formule générale pour réduire une méthode comportant deux exponentielle en une méthode avec commutateurs dont les termes d'ordre inférieur à 2 sont égaux.

Définition 5.1. On appelle commutateur ou encore crochet de deux champs de vecteurs $X = X^d E_d$ et $Y = Y^d E_d$ l'élément de l'algèbre tensorielle défini par l'opération $\cdot$:

$$\begin{aligned}
[Y, X] &= Y \cdot X - X \cdot Y \\
&= Y^i X^j (E_i \cdot E_j - E_j \cdot E_i).
\end{aligned}$$

Afin d'alléger les notations dans la suite nous noterons, exclusivement pour Y et X , YX pour désigner $Y \cdot X$. Ainsi $[Y, X] = YX - XY$.

On part d'une méthode générale de la forme $x_{n+1} = \exp(Y) \exp(X)x_n$ et on la réécrit sous la forme $x_{n+1} = \exp((Y + X) + Z)x_n$ où Z est une combinaison linéaire de crochets itérés de $X = X^d E_d$ et de $Y = Y^d E_d$. Dans un premier temps on s'intéresse à la forme générale de nos méthodes d'ordre 2 pour la mesure invariante :

$$\begin{aligned} H_n &= \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\alpha h f^d(x_n) + \beta \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d \right) x_n \\ x_{n+1} &= \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\alpha_2 h f^d(x_n) + \gamma_2 h f^d(H_n) + \beta_2 \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d \right) \\ &\quad \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\alpha_1 h f^d(x_n) + \gamma_1 h f^d(H_n) + \beta_1 \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d \right) x_n. \end{aligned}$$

On prend donc

$$Y = \sum_{d=1}^D \left(\alpha_2 h f^d(x_n) + \gamma_2 h f^d(H_n) + \beta_2 \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d$$

et

$$X = \sum_{d=1}^D \left(\alpha_1 h f^d(x_n) + \gamma_1 h f^d(H_n) + \beta_1 \sqrt{h} \xi_n^d \right) E_d$$

et on développe le produit d'exponentielles.

Lemme 5.2. *A l'ordre 2 en h , la méthode $x_{n+1} = \exp(Y) \exp(X)x_n$ se développe sous la forme*

$$\begin{aligned} \exp(Y) \exp(X) &= i_d + (Y + X) \\ &\quad + \frac{1}{2}(YY + 2YX + XX) \\ &\quad + \frac{1}{6}(YYY + 3YYX + 3YXX + XXX) \\ &\quad + \frac{1}{24}(YYYY + 4YYYX + 6YYXX + 4YXXX + XXXX) \\ &\quad + R_2, \end{aligned}$$

où $|R_2| \leq Ch^2 \sqrt{h}$.

Comme l'ordre le plus faible en h , dans Y et X , est $\sqrt{h}$, pour obtenir chaque terme d'ordre 2, nous avons besoin d'aller jusqu'à quatre champs de vecteurs dans les commutateurs itérés. Dans notre cas, il n'y a qu'une seule variable aléatoire et ce commutateur à quatre champs de vecteurs est nul pour l'ordre 2 en h , cependant, nous le prenons tout de même pour généraliser à l'utilisation futur de plusieurs variables aléatoires. Nous listons maintenant les commutateurs que nous utiliserons dans nos calculs.

Proposition 5.3. *Pour deux champs de vecteurs, on a uniquement besoin de*

$$[Y, X] = YX - XY.$$

Proposition 5.4. *Pour trois champs de vecteurs, on a uniquement besoin de*

- $[Y, [Y, X]] = YYX - 2YXY + XYY$
- $[X, [X, Y]] = XXY - 2XYX + YXX$.

Proposition 5.5. *Pour quatre champs de vecteurs, on a uniquement besoin de*

- $[Y, [Y, [Y, X]]] = YYYX - 3YYXY + 3YXYY - XYYY$
- $[Y, [X, [X, Y]]] = YYXX - 2YXYX + 2XYXY - XXYX$
- $[X, [X, [X, Y]]] = XXXY - 3XXYX + 3XYXX - YXXX$.

On se donne alors la forme candidate

$$\begin{aligned} Z = & b[Y, X] \\ & + c_1[Y, [Y, X]] + c_2[X, [X, Y]] \\ & + d_1[Y, [Y, [Y, X]]] + d_2[Y, [X, [X, Y]]] + d_3[X, [X, [X, Y]]] \end{aligned}$$

Donnons une première idée du raisonnement pour l'ordre 1.

Théorème 5.6. *Les opérateurs $\exp((Y + X) + Z)$ et $\exp(Y)\exp(X)$ coïncident à l'ordre 1 en h si et seulement si $b = \frac{1}{2}$.*

Démonstration. A l'ordre 1 en h , on a

$$\begin{aligned} \exp((Y + X) + Z) = & i_d + (Y + X) \\ & + \frac{1}{2}(YY + YX + XY + XX) + b(YX - XY) + \tilde{R}_1, \end{aligned}$$

où $|\tilde{R}_1| \leq Ch\sqrt{h}$. Pour coïncider avec le développement de $\exp(Y)\exp(X)$ à l'ordre 1 en h , on a besoin que $b + \frac{1}{2} = 1$ et $\frac{1}{2} - b = 0$ c'est-à-dire $b = \frac{1}{2}$. $\square$

Pour les commutateurs à trois et quatre champs de vecteurs, on va utiliser le même raisonnement.

Proposition 5.7. *Pour les termes avec trois opérateurs, on a les termes suivants*

- $\frac{1}{6}(Y + X)^3$
- $\frac{b}{2}((Y + X)[Y, X] + [Y, X](Y + X))$
- $c_1[Y, [Y, X]] + c_2[X, [X, Y]]$.

Ce qui donne les coefficients suivants :

Opérateurs	Coefficient dans $\exp(Y + X + Z)$	Coefficient dans $\exp(Y) \exp(X)$
YYY	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$
YYX	$\frac{1}{6} + \frac{b}{2} + c_1$	$\frac{1}{2}$
YXY	$\frac{1}{6} - 2c_1$	0
YXX	$\frac{1}{6} - \frac{b}{2} + c_1$	$\frac{1}{2}$
XYY	$\frac{1}{6} + \frac{b}{2} + c_2$	0
XYX	$\frac{1}{6} - 2c_2$	0
XXY	$\frac{1}{6} - \frac{b}{2} + c_2$	0
XXX	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$

TABLE 7 – Coefficients des termes issus de trois opérateurs dans les différents développement

La résolution de ces conditions donne que $c_1 = c_2 = \frac{1}{12}$.

Proposition 5.8. *Pour les termes avec quatre opérateurs, on a les termes suivants*

- $\frac{1}{24}(Y + X)^4$
- $\frac{b}{6} \left((Y + X)^2 [Y, X] + (Y + X) [Y, X] (Y + X) + [Y, X] (Y + X)^2 \right)$
- $\frac{b^2}{2} [Y, X][Y, X]$
- $\frac{c_1}{2} ((Y + X) [Y, [Y, X]] + [Y, [Y, X]] (Y + X))$
- $\frac{c_2}{2} ((Y + X) [X, [X, Y]] + [X, [X, Y]] (Y + X))$
- $d_1 [Y, [Y, [Y, X]]]$
- $d_2 [Y, [X, [X, Y]]]$
- $d_3 [X, [X, [X, Y]]]$.

Ce qui donne les coefficients suivants :

Opérateurs	Coefficient dans $\exp(Y + X + Z)$	Coefficient dans $\exp(Y) \exp(X)$
YYYY	$\frac{1}{24}$	$\frac{1}{24}$
YYXX	$\frac{1}{24} + \frac{b}{6} + \frac{c_1}{2} + d_1$	$\frac{1}{6}$
YYXY	$\frac{1}{24} - \frac{c_1}{2} - 3d_1$	0
YYXX	$\frac{1}{24} + \frac{b}{6} + \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{2} + d_2$	$\frac{1}{4}$
YXYX	$\frac{1}{24} - \frac{c_1}{2} + 3d_1$	0
YXXY	$\frac{1}{24} + \frac{b}{6} + \frac{b^2}{2} - c_1 - c_2 - 2d_2$	0
YXXY	$\frac{1}{24} - \frac{b^2}{2} + c_2$	0
YXXX	$\frac{1}{24} + \frac{b}{6} + \frac{c_2}{2} - d_3$	$\frac{1}{6}$
XYYY	$\frac{1}{24} - \frac{b}{6} + \frac{c_1}{2} - d_1$	0
XYXX	$\frac{1}{24} - \frac{b^2}{2} + c_1$	0
XYXY	$\frac{1}{24} - \frac{b}{6} + \frac{b^2}{2} - c_1 - c_2 + 2d_2$	0
XYXX	$\frac{1}{24} - \frac{c_2}{2} + 3d_3$	0
XXYY	$\frac{1}{24} - \frac{b}{6} + \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{2} - d_2$	0
XXYX	$\frac{1}{24} - \frac{c_2}{2} - 3d_3$	0
XXXY	$\frac{1}{24} - \frac{b}{6} + \frac{c_2}{2} + d_3$	0
XXXX	$\frac{1}{24}$	$\frac{1}{24}$

TABLE 8 – Coefficients des termes issus de quatre opérateurs dans les différents développement

La résolution de ces conditions donne que $d_1 = d_3 = 0$ et $d_2 = \frac{1}{24}$.

Maintenant que nous avons identifier les termes jusqu'à quatre champs de vecteurs, nous avons obtenu une forme réduite à une exponentielle et équivalente à l'ordre 2 de $\exp(Y) \exp(X)$.

Théorème 5.9. *Les méthodes $x_{n+1} = \exp(Y) \exp(X) x_n$ et $y_{n+1} = \exp(Y + X + Z) y_n$ coïncident à l'ordre 2 en h si et seulement si les termes avec moins de quatre champs de vecteurs de Z sont*

$$\frac{1}{2} [Y, X] + \frac{1}{12} ([Y, [Y, X]] + [X, [X, Y]]) + \frac{1}{24} [Y, [X, [X, Y]]] .$$

Remarque 5.10. Il s'agit des premiers termes de la formule de Baker-Campbell-Hausdorff

$$\begin{aligned} Z(X, Y) &= \log(\exp X \exp Y) \\ &= X + Y + \frac{1}{2} [X, Y] + \frac{1}{12} ([X, [X, Y]] + [Y, [Y, X]]) - \frac{1}{24} [Y, [X, [X, Y]]] + \dots \end{aligned}$$

5.2 Réduction de nos méthodes d'ordre 2 pour la mesure invariante

Dans la partie précédente, on ne s'est intéressé qu'aux crochets contenant des termes d'ordre inférieur à 2 mais ces crochets peuvent également contenir des termes d'ordre strictement supérieur à 2. Cette partie sert donc à réduire les méthodes déjà connues. Remarquons que nos

méthodes n'utilisant qu'un seul terme aléatoire, le commutateurs à quatre champs de vecteurs est nécessairement d'ordre strictement supérieur à 2. Mais nous réduirons la méthode SFF2 pour donner un exemple de méthode utilisant ces commutateurs. On pourrait également analyser plus finement le terme $f^d(H_n) = f^d(x_n) + hR_h$ afin de vraiment rassembler les termes de même ordre au sein de l'exponentielle.

5.2.1 Première méthode

On reprends la première méthode 3.33 que nous avons présentée et on la réduit à une exponentielle.

Lemme 5.11. *Tous les termes différentiels, jusqu'à l'ordre 2, de la méthode 3.33 sont égaux à ceux de la méthode*

$$\begin{aligned} H_n &= \exp \left(\left(hf^d(x_n) + \sqrt{2h}\xi_n^d \right) E_d \right) x_n \\ x_{n+1} &= \exp \left(\sqrt{2h}\xi_n^d E_d + \frac{h}{2} (f^d(H_n) + f^d(x_n)) E_d + \frac{h\sqrt{2h}}{4} \left[f^d(H_n) E_d, \xi_n^d E_d \right] \right. \\ &\quad \left. + h^2 \left(\frac{1}{8} \left[f^d(H_n) E_d, f^d(x_n) E_d \right] + \frac{1}{12} \left[\xi_n^d E_d, \left[\xi_n^d E_d, f^d(H_n) E_d \right] \right] \right) \right) x_n. \end{aligned}$$

En observant que $\mathbb{E} [|f(H_n) - f(x_n)|] \leq C\sqrt{h}$ et en remplaçant les variables aléatoires des termes d'ordre 2 par leurs moyennes, on peut simplifier les termes d'ordre 2.

Théorème 5.12. *Tous les termes différentiels, jusqu'à l'ordre 2, de la méthode 3.33 sont égaux à ceux de la méthode*

$$\begin{aligned} H_n &= \exp \left(\left(hf^d(x_n) + \sqrt{2h}\xi_n^d \right) E_d \right) x_n \\ x_{n+1} &= \exp \left(\sqrt{2h}\xi_n^d E_d + \frac{h}{2} (f^d(H_n) + f^d(x_n)) E_d + \frac{h\sqrt{2h}}{4} f^{d_2}(H_n) \xi_n^{d_1} [E_{d_2}, E_{d_1}] \right. \\ &\quad \left. + \frac{h^2}{12} f^{d_1}(x_n) [E_{d_2}, [E_{d_2}, E_{d_1}]] \right) x_n. \end{aligned}$$

5.2.2 Deuxième méthode

On reprends la deuxième méthode 3.34 que nous avons présentée et on la réduit à une exponentielle.

Lemme 5.13. *Tous les termes différentiels, jusqu'à l'ordre 2, de la méthode 3.33 sont égaux à ceux de la méthode*

$$\begin{aligned} H_n &= \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\frac{h}{4} f^d(x_n) + \frac{\sqrt{2h}}{2} \xi_n^d \right) E_d \right) x_n \\ x_{n+1} &= \exp \left(\sqrt{2h}\xi_n^d E_d + \frac{h}{3} (f^d(x_n) + 2f^d(H_n)) E_d + \frac{h\sqrt{2h}}{6} \left[f^d(H_n) E_d, \xi_n^d E_d \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{h^2}{18} \left[f^d(H_n) E_d, f^d(x_n) E_d \right] \right) x_n. \end{aligned}$$

Remarque 5.14. Puisque $Y = X + \frac{2h}{3} f^d(H_n) E_d$ dans ce cas, on a

$$[Y, X] = \frac{2h}{3} \left[f^d(H_n) E_d, X \right] = \frac{h\sqrt{2h}}{3} \left[f^d(H_n) E_d, \xi_n^d E_d \right] + \frac{h^2}{9} \left[f^d(H_n) E_d, f^d(x_n) E_d \right]$$

Ainsi pour rester d'ordre inférieur à deux, il faut prendre le premier terme et en faire le crochet avec $\xi_n^d E_d$ pour obtenir les crochets à trois opérateurs. Ces crochets vont alors être

$$\frac{h^2}{3} \left[\xi_n^d E_d, \left[f^d(H_n) E_d, \xi_n^d E_d \right] \right] \text{ et } \frac{h^2}{3} \left[\xi_n^d E_d, \left[\xi_n^d E_d, f^d(H_n) E_d \right] \right],$$

dont la somme est nulle.

En observant que $\mathbb{E} [|f(H_n) - f(x_n)|] \leq C\sqrt{h}$ et en remplaçant les variables aléatoires des termes d'ordre 2 par leurs moyennes, on peut simplifier les termes d'ordre 2.

Théorème 5.15. *Tous les termes différentiels, jusqu'à l'ordre 2, de la méthode 3.34 sont égaux à ceux de la méthode*

$$H_n = \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\frac{h}{4} f^d(x_n) + \frac{\sqrt{2h}}{2} \xi_n^d \right) E_d \right) x_n$$

$$x_{n+1} = \exp \left(\sqrt{2h} \xi_n^d E_d + \frac{h}{3} \left(f^d(x_n) + 2f^d(H_n) \right) E_d + \frac{h\sqrt{2h}}{6} f^{d_2}(H_n) \xi_n^{d_1} [E_{d_2}, E_{d_1}] \right) x_n.$$

Vérifions que les coefficients $a_1, \dots, a_{11}$ des arbres de cette méthode coïncident avec ceux de la méthode 3.34.

Proposition 5.16. *L'espérance de l'image de x_1 , de cette méthode, par une fonction test ϕ est donnée par*

$$\begin{aligned} \mathbb{E} [\phi(x_1) | x_0] &= \phi(x_0) + h \left(\bullet + \textcircled{1} \textcircled{1} \right) \\ &\quad + \frac{h^2}{6} \left(\bullet + \textcircled{1} \textcircled{1} \textcircled{1} - \left[\textcolor{red}{\textcircled{1}} \textcolor{red}{\bullet}, \textcolor{red}{\textcircled{1}} \right] \right) \\ &\quad + \frac{h^2}{6} \left(2 \left(\textcircled{1} \textcircled{1} \textcircled{1} + \textcircled{1} \textcircled{1} \bullet \right) - \left(\textcolor{red}{\textcircled{1}} \left[\textcolor{red}{\bullet}, \textcolor{red}{\textcircled{1}} \right] + \left[\textcolor{red}{\bullet}, \textcolor{red}{\textcircled{1}} \right] \textcolor{red}{\textcircled{1}} \right) \right) \\ &\quad + \frac{h^2}{6} \left(2 \left(\textcircled{1} \textcircled{1} \bullet + \textcircled{1} \bullet \textcircled{1} + \bullet \textcircled{1} \textcircled{1} \right) + 3 \bullet \bullet + \textcircled{2} \textcircled{2} \textcircled{1} \textcircled{1} + \textcircled{2} \textcircled{1} \textcircled{2} \textcircled{1} + \textcircled{2} \textcircled{1} \textcircled{1} \textcircled{2} \right). \end{aligned}$$

Et on retrouve bien

$$a_1 = a_2 = a_4 = a_6 = a_9 = a_{10} = a_{11} = \frac{1}{6}, a_3 = a_5 = a_8 = \frac{1}{2} \text{ et } a_7 = \frac{1}{3}.$$

Remarque 5.17. Souvenons nous de la remarque 3.6, tout les termes en noirs sont des palindromes et ne sont pas affectés par linversion lors du passage de la composition vers la dérivation mais les termes en rouge ont été renversés lors du passage à ϕ .

5.2.3 Méthode à postprocesseur

On reprends la méthode avec postprocesseurs 4.8 que nous avons présentée et on la réduit à une exponentielle.

Lemme 5.18. *Tous les termes différentiels, jusqu'à l'ordre 2, de la méthode 4.8 sont égaux à ceux de la méthode*

$$H_n = \exp\left(\frac{\sqrt{2\hbar}}{2}\xi_n^d E_d\right) x_n$$

$$\begin{aligned}
x_{n+1} &= \exp(\sqrt{2h}\xi_n^d E_d + hf^d(H_n)E_d + \frac{h\sqrt{2h}}{2} [f^d(H_n)E_d, \xi_n^d E_d] \\
&\quad + \frac{h^2}{6} [\xi_n^d E_d, [\xi_n^d E_d, f^d(H_n)E_d]]) x_n \\
\bar{x}_n &= \exp\left(\frac{\sqrt{2h}}{2} \xi_n^d E_d\right) x_n.
\end{aligned}$$

En observant que $\mathbb{E} [|f(H_n) - f(x_n)|] \leq C\sqrt{h}$ et en remplaçant les variables aléatoires des termes d'ordre 2 par leurs moyennes, on peut simplifier les termes d'ordre 2.

Théorème 5.19. *Tous les termes différentiels, jusqu'à l'ordre 2, de la méthode 4.8 sont égaux à ceux de la méthode*

$$\begin{aligned}
H_n &= \exp\left(\frac{\sqrt{2h}}{2} \xi_n^d E_d\right) x_n \\
x_{n+1} &= \exp(\sqrt{2h}\xi_n^d E_d + hf^d(H_n)E_d + \frac{h\sqrt{2h}}{2} f^{d_2}(H_n)\xi_n^{d_1} [E_{d_2}, E_{d_1}] \\
&\quad + \frac{h^2}{6} f^{d_1}(H_n) [E_{d_2}, [E_{d_2}, E_{d_1}]]) x_n \\
\bar{x}_n &= \exp\left(\frac{\sqrt{2h}}{2} \xi_n^d E_d\right) x_n.
\end{aligned}$$

5.2.4 SFF2

Introduisons une méthode présentée dans [2], la méthode SFF2 d'ordre faible 2, qui nous servira à comparer nos méthodes lors des expériences numériques :

Définition 5.20 (Méthode SFF2).

$$X_0 \in \mathcal{M}$$

Pour $n=0, \dots, N$:

$$\begin{aligned}
H_n^1 &= X_n \\
H_n^2 &= \exp\left(\left(\frac{h}{2} f^d(H_n^1) + \sqrt{h}\xi_n^{d,1}\right) E_d\right) X_n \\
X_{n+1} &= \exp\left(\left(\left(\frac{\sqrt{2}}{2} - 1\right)hf^d(H_n^1) + (2 - \sqrt{2})hf^d(H_n^2) + (1 - \sqrt{2})\sqrt{h}\xi_n^{d,1} + \sqrt{h}\xi_n^{d,2}\right) E_d\right) \\
&\quad \exp\left(\left(\left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right)hf^d(H_n^1) + (\sqrt{2} - 1)hf^d(H_n^2) + \sqrt{2h}\xi_n^{d,1}\right) E_d\right) X_n
\end{aligned}$$

On peut alors la réduire à une exponentielle.

Lemme 5.21. *Tous les termes différentiels, jusqu'à l'ordre 2, de la méthode 5.20 sont égaux à ceux de la méthode*

$$H_n = \exp\left(\left(\frac{h}{2} f^d(x_n) + \sqrt{h}\xi_n^{d,1}\right) E_d\right) x_n$$

$$\begin{aligned}
x_{n+1} = & \exp(\sqrt{h}(\xi_n^{d,1} + \xi_n^{d,2})E_d + h \left(f^d(H_n)E_d + \frac{\sqrt{2}}{2} [\xi_n^{d,2}E_d, \xi_n^{d,1}E_d] \right) \\
& + h\sqrt{h} \left\{ \frac{\sqrt{2}-2}{4} [f^d(x_n)E_d, \xi_n^{d,1}E_d] + \frac{1}{2} [f^d(H_n)E_d, \xi_n^{d,1}E_d] \right. \\
& + \frac{2-\sqrt{2}}{4} [\xi_n^{d,2}E_d, f^d(x_n)E_d] + \frac{\sqrt{2}-1}{2} [\xi_n^{d,2}E_d, f^d(H_n)E_d] \\
& + (\frac{\sqrt{2}}{2} - 2) [\xi_n^{d,1}E_d, [\xi_n^{d,2}E_d, \xi_n^{d,1}E_d]] + \frac{\sqrt{2}}{2} [\xi_n^{d,2}E_d, [\xi_n^{d,2}E_d, \xi_n^{d,1}E_d]] \Big\} \\
& + h^2 \left\{ (\frac{\sqrt{2}}{2} - 1) [f^d(x_n)E_d, f^d(H_n)E_d] \right. \\
& + (\frac{5\sqrt{2}}{2} - 3) [\xi_n^{d,1}E_d, [f^d(x_n)E_d, \xi_n^{d,1}E_d]] + (\frac{\sqrt{2}}{2} - 1) [\xi_n^{d,2}E_d, [f^d(x_n)E_d, \xi_n^{d,1}E_d]] \\
& + (1 - 2\sqrt{2}) [\xi_n^{d,1}E_d, [f^d(H_n)E_d, \xi_n^{d,1}E_d]] + [\xi_n^{d,2}E_d, [f^d(H_n)E_d, \xi_n^{d,1}E_d]] \\
& + (3 - \frac{5\sqrt{2}}{2}) [\xi_n^{d,1}E_d, [\xi_n^{d,2}E_d, f^d(x_n)E_d]] + (1 - \frac{\sqrt{2}}{2}) [\xi_n^{d,2}E_d, [\xi_n^{d,2}E_d, f^d(x_n)E_d]] \\
& + (3\sqrt{2} - 5) [\xi_n^{d,1}E_d, [\xi_n^{d,2}E_d, f^d(H_n)E_d]] + (\sqrt{2} - 1) [\xi_n^{d,2}E_d, [\xi_n^{d,2}E_d, f^d(H_n)E_d]] \\
& + 2(1 - \sqrt{2}) [f^d(x_n)E_d, [\xi_n^{d,2}E_d, \xi_n^{d,1}E_d]] + (3\sqrt{2} - 4) [f^d(H_n)E_d, [\xi_n^{d,2}E_d, \xi_n^{d,1}E_d]] \\
& + 2(1 - \sqrt{2}) [\xi_n^{d,1}E_d, [\xi_n^{d,1}E_d, [\xi_n^{d,1}E_d, \xi_n^{d,2}E_d]]] \\
& \left. + 2 [\xi_n^{d,2}E_d, [\xi_n^{d,1}E_d, [\xi_n^{d,1}E_d, \xi_n^{d,2}E_d]]] \right\} x_n.
\end{aligned}$$

En observant que $\mathbb{E} \|f(H_n) - f(x_n)\| \leq C\sqrt{h}$ et en remplaçant les variables aléatoires des termes d'ordre 2 par leurs moyennes, on peut simplifier les termes d'ordre 2.

Théorème 5.22. *Tous les termes différentiels, jusqu'à l'ordre 2, de la méthode 5.20 sont égaux à ceux de la méthode*

$$\begin{aligned}
H_n = & \exp \left(\left(\frac{h}{2} f^d(x_n) + \sqrt{h} \xi_n^{d,1} \right) E_d \right) x_n \\
x_{n+1} = & \exp(\sqrt{h}(\xi_n^{d,1} + \xi_n^{d,2})E_d + h \left(f^j(H_n)E_j + \frac{\sqrt{2}}{2} \xi_n^{d,2} \xi_n^{d,1,1} [E_{d_2}, E_{d_1}] \right) \\
& + h\sqrt{h} \left\{ \left(\frac{2-\sqrt{2}}{4} (\xi_n^{d,1} + \xi_n^{d,2}) f^j(x_n) - \frac{1}{2} \xi_n^{d,1} f^j(H_n) + \frac{\sqrt{2}-1}{2} \xi_n^{d,2} f^j(H_n) \right) [E_d, E_j] \right\} \\
& + 2h^2 \left\{ f^j(x_n) [E_d, [E_d, E_j]] + [E_{d_2}, [E_{d_1}, [E_{d_1}, E_{d_2}]] \right\} x_n.
\end{aligned}$$

5.3 Méthode générale de type RKMK

Nous allons nous intéresser aux méthodes de type Runge-Kutta-Munthe-Kaas [20, 22, 21, 19] (voir aussi la review [11]). Le principe est de d'écrire la solution comme l'exponentielle d'une nouvelle fonction et d'étudier l'évolution de cette nouvelle fonction dans l'algèbre de Lie et non dans le groupe.

5.3.1 Crochets itérés et formule de Magnus

On part de l'équation de Langevin (1.2)

$$dX(t) = -\nabla V(X(t))dt + \sqrt{2}dB_{\mathcal{M}}(t), X(0) = x \in \mathcal{M}. \quad (5.1)$$

On se place dans le cadre de groupe de Lie matriciel et le frame s'écrit $E_d(y) = A_d y$ avec A_d une base de l'espace tangent en la matrice identité.

Proposition 5.23. Notons $X(t) = \exp(\Omega(t))x$. Alors Ω suit la dynamique

$$d\Omega(t) = \left(d \exp_{\Omega(t)}\right)^{-1} \left(- (dV(\exp(\Omega(t))x) \cdot E_d) dt + \sqrt{2} dW^d(t) \right) A_d.$$

Proposition 5.24. En utilisant l'endomorphisme adjoint de Ω , $ad_\Omega : A \mapsto [\Omega, A]$ et les nombres de Bernoulli $(B_n)_{n \in \mathbb{N}}$, on obtient que

$$\left(d \exp_{\Omega(t)}\right)^{-1} : A \mapsto A + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{B_n}{n!} ad_{\Omega(t)}^n(A).$$

Définition 5.25. Une méthode générale explicite de Runge-Kutta-Munthe-Kaas est de la forme

$$\begin{aligned} G_d &= \sqrt{h} A_d \\ \Omega_i &= \sum_{j=1}^{i-1} \left(d \exp_{\Omega_j}\right)^{-1} \left(Z_{i,j}^0 F_j + Z_i^d G_d \right) \text{ pour } i = 1, \dots, s \\ F_i &= -h E_d[V] (\exp(\Omega_i) Y_n) A_d \text{ pour } i = 1, \dots, s \\ \Omega &= \sum_{j=1}^s \left(d \exp_{\Omega_j}\right)^{-1} \left(Z_j^0 F_j + Z^d G_d \right) \\ Y_{n+1} &= \exp(\Omega) Y_n, \end{aligned}$$

où s est le nombre d'étages de la méthode, les $Z_{i,j}^0$ et les Z_j^0 sont des coefficients réels déterministes, les Z_i^d sont de la forme $\sqrt{2}\beta_i \xi^d$ et les Z^d sont de la forme $\sqrt{2}\beta \xi^d$.

Notons $F : x \mapsto -E_d[V](x)A_d$ et $f^d : x \mapsto -E_d[V](x)$ et prenons $s = 3$, on a alors

$$\begin{aligned} G_d &= \sqrt{h} A_d \\ \Omega_1 &= 0 \\ F_1 &= h F(Y_0) \\ \Omega_2 &= Z_{2,1}^0 F(Y_n) + \sqrt{2h} \beta_2 \xi^d A_d \\ F_2 &= h F(Y_0) + h \sqrt{2h} \beta_2 \xi^{d_2} E_{d_2} \triangleright F(Y_n) \\ &\quad + h^2 \left(Z_{2,1}^0 F \triangleright F(Y_n) + \beta_2^2 \xi^{d_2} \xi^{d_1} (E_{d_2} \cdot E_{d_1}) \triangleright F(Y_n) \right) + \mathcal{O}(h^2 \sqrt{h}) \\ \Omega_3 &= 2\sqrt{2h} \beta_3 \xi^d A_d + h (Z_{3,1}^0 + Z_{3,2}^0) F(Y_n) \\ &\quad + h \sqrt{2h} \left(Z_{3,2}^0 \beta_2 \xi^{d_2} E_{d_2} \triangleright F(Y_n) + \frac{\beta_3 Z_{2,1}^0 - \beta_2 Z_{3,2}^0}{2} \xi^{d_2} [A_{d_2}, F(Y_n)] \right) \\ &\quad + h^2 \left(Z_{2,1}^0 Z_{3,2}^0 F \triangleright F(Y_n) + Z_{3,2}^0 \beta_2^2 \xi^{d_2} \xi^{d_1} ((E_{d_2} \cdot E_{d_1}) \triangleright F(Y_n) - [A_{d_2}, E_{d_1} \triangleright F(Y_n)]) \right) \\ &\quad + h^2 \left(\frac{Z_{3,2}^0 \beta_2^2}{6} \xi^{d_3} \xi^{d_2} [A_{d_3}, [A_{d_2}, F(Y_n)]] \right) + \mathcal{O}(h^2 \sqrt{h}) \\ F_3 &= h F(Y_0) + 2h \sqrt{2h} \beta_3 \xi^{d_2} E_{d_2} \triangleright F(Y_n) \\ &\quad + h^2 \left((Z_{3,1}^0 + Z_{3,2}^0) F \triangleright F(Y_n) + 4\beta_3^2 \xi^{d_2} \xi^{d_1} (E_{d_2} \cdot E_{d_1}) \triangleright F(Y_n) \right) + \mathcal{O}(h^2 \sqrt{h}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Omega = & 3\sqrt{2h}\beta\xi^d A_d + h(Z_1^0 + Z_2^0 + Z_3^0) F(Y_n) \\
& + h\sqrt{2h}(Z_2^0\beta_2 + Z_3^0\beta_3) \xi^d E_d \triangleright F(Y_n) \\
& + \frac{h\sqrt{2h}}{2} ((Z_{2,1}^0 + Z_{3,1}^0 + Z_{3,2}^0) \beta - Z_2^0\beta_2 - Z_3^0\beta_3) \xi^d [A_d, F(Y_n)] \\
& + h^2 (Z_{2,1}^0 Z_2^0 + Z_3^0 (Z_{3,1}^0 + Z_{3,2}^0)) F \triangleright F(Y_n) \\
& + h^2 (Z_2^0\beta_2^2 + 4Z_3^0\beta_3^2) \xi^{d_2}\xi^{d_1} (E_{d_2} \cdot E_{d_1}) \triangleright F(Y_n) \\
& + h^2 (\beta\beta_2 Z_{3,2}^0 - (Z_2^0\beta_2^2 + 4Z_3^0\beta_3^2)) \xi^{d_2}\xi^{d_1} [A_{d_2}, E_{d_1} \triangleright F(Y_n)] \\
& + h^2 \left(\frac{Z_2^0\beta_2^2}{6} + \frac{\beta}{2} (\beta_3 Z_{2,1}^0 - \beta_2 Z_{3,2}^0) + \frac{2\beta_3^2 Z_3^0}{3} + \frac{\beta_3\beta (Z_{3,1}^0 + Z_{3,2}^0)}{3} \right) \\
& \quad \xi^{d_3}\xi^{d_2} [A_{d_3}, [A_{d_2}, F(Y_n)]] + \mathcal{O}(h^2\sqrt{h}) \\
Y_{n+1} = & \exp(\Omega) Y_n.
\end{aligned}$$

Proposition 5.26. Dans ce cas, l'espérance de l'image de Y_1 par une fonction test ϕ est donnée par

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[\phi(Y_1)|Y_0] = & \mathbb{E}[\exp(\Omega) \triangleright \phi(Y_0)|Y_0] \\
= & \phi(Y_0) + \mathbb{E}[\Omega \triangleright \phi(Y_0)|Y_0] + 9h\beta^2 \mathbb{O}\mathbb{O} \\
& + \frac{h^2}{2} (Z_1^0 + Z_2^0 + Z_3^0)^2 \bullet\bullet + 3h^2\beta (Z_2^0\beta_2 + Z_3^0\beta_3) \left(\overset{\mathbb{O}}{\bullet}\overset{\mathbb{O}}{\bullet} + \overset{\mathbb{O}}{\bullet}\overset{\mathbb{O}}{\bullet} \right) \\
& + 3h^2\beta^2 (Z_1^0 + Z_2^0 + Z_3^0) (\bullet\mathbb{O}\mathbb{O} + \mathbb{O}\bullet\mathbb{O} + \mathbb{O}\mathbb{O}\bullet) \\
& - \frac{3h^2\beta}{2} ((Z_{2,1}^0 + Z_{3,1}^0 + Z_{3,2}^0) \beta - Z_2^0\beta_2 - Z_3^0\beta_3) (\mathbb{O}[\mathbb{O}\bullet] + [\mathbb{O}\bullet]\mathbb{O}) \\
& + \frac{27h^2}{2} \beta^4 (\mathbb{O}\mathbb{O}\mathbb{O}\mathbb{O} + \mathbb{O}\mathbb{O}\mathbb{O}\mathbb{O} + \mathbb{O}\mathbb{O}\mathbb{O}\mathbb{O}) + \mathcal{O}(h^2\sqrt{h}).
\end{aligned}$$

Remarque 5.27. Souvenons nous de la remarque 3.6, tout les termes en noirs sont des palindromes et ne sont pas affectés par linversion lors du passage de la composition vers la dérivation mais les termes en rouge ont été renversés lors du passage à ϕ .

Les coefficients des forêts sont alors, en notant

$$\begin{aligned}
R = & a_2 + 3\beta (\beta_3 Z_{2,1}^0 - \beta_2 Z_{3,2}^0) + 2\beta\beta_3 (Z_{3,1}^0 + Z_{3,2}^0) \\
P = & 9\beta ((Z_{2,1}^0 + Z_{3,1}^0 + Z_{3,2}^0) \beta - Z_2^0\beta_2 - Z_3^0\beta_3),
\end{aligned}$$

Forêts	Coefficient	Expression
• ①①		$Z_1^0 + Z_2^0 + Z_3^0 = 1$ $9\beta^2 = 1$
• ①①	a_1	$Z_{2,1}^0 Z_2^0 + Z_3^0 (Z_{3,1}^0 + Z_{3,2}^0)$
①①	a_2	$Z_2^0 \beta_2^2 + 4Z_3^0 \beta_3^2$
• •	a_3	$\frac{1}{2} (Z_1^0 + Z_2^0 + Z_3^0)^2 = \frac{1}{2}$
① • ①	a_4	$3\beta (Z_2^0 \beta_2 + Z_3^0 \beta_3) - a_2 + \beta \beta_2 Z_{3,2}^0$
① ① •	a_5	$3\beta (Z_2^0 \beta_2 + Z_3^0 \beta_3) + a_2 - \beta \beta_2 Z_{3,2}^0$
• ①①	a_6	$3\beta^2 (Z_1^0 + Z_2^0 + Z_3^0) + \frac{1}{6} (R + P) = 2 + \frac{1}{6} (R + P)$
① • ①	a_7	$3\beta^2 (Z_1^0 + Z_2^0 + Z_3^0) - \frac{1}{3} R = 2 - \frac{1}{3} R$
①① •	a_8	$3\beta^2 (Z_1^0 + Z_2^0 + Z_3^0) + \frac{1}{6} (R - P) = 2 + \frac{1}{6} (R - P)$
②②①①	a_9	$\frac{27\beta^4}{2} = \frac{1}{6}$
②①②①	a_{10}	$\frac{27\beta^4}{2} = \frac{1}{6}$
①②②①	a_{11}	$\frac{27\beta^4}{2} = \frac{1}{6}$

TABLE 9 – Expression des coefficients des forêts par les coefficients de la méthode

Remarque 5.28. Souvenons nous de la remarque 3.6, tout les termes en noirs sont des palindromes et ne sont pas affectés par linversion lors du passage de la composition vers la dérivation mais les termes en rouge ont été renversés lors du passage à ϕ .

6 Expériences numériques

6.1 Observations numériques pour la première méthode d'ordre 2

Afin de confirmer les résultats théoriques, on compare la nouvelle méthode aux méthodes existantes dans la littérature. On a déjà mentionné, la méthode d'Euler :

$$X_{n+1} = \exp \left(\left(h f^d(X_n) + \sqrt{2h} \xi_n^d \right) E_d \right) X_n,$$

et on comparera nos nouvelles méthodes à la méthode d'ordre 2 faible 5.20. On se focalisera dans ce rapport aux dynamiques sur le groupe spécial orthogonal en dimension 3 que l'on munira, ou non, d'un puit de potentiel quadratique en l'identité

$$V : x \mapsto 10 \operatorname{Tr}((x - I_3)^T (x - I_3))$$

et on mesurera l'erreur faible pour la fonction test

$$\phi = \exp \left(- \operatorname{Tr}((x - I_3)^T (x - I_3)/6) \right).$$

6.1.1 Trajectoire sur le groupe spécial orthogonal

Soit $\mathcal{M} = SO_3(\mathbb{R})$ le groupe spécial orthogonal des matrices de taille 3×3 .

Proposition 6.1. *La famille*

$$(A_1, A_2, A_3) := \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \right)$$

forme une base orthonormale de l'espace tangent de $\mathcal{M}$ en tout point pour le produit scalaire matriciel $\langle A|B \rangle = \text{Tr}(^tAB)$.

On s'intéresse dans un premier temps au cas $V = 0$. Ainsi on résout

$$dX(t) = \sqrt{2}dB_{\mathcal{M}}(t), X(0) = x \in \mathcal{M}, \quad (6.1)$$

et la nouvelle méthode coïncide avec celle d'Euler.

Pour représenter une telle trajectoire, nous représenterons chaque colonne de la trajectoires dans $\mathbb{R}^3$, les propriétés de SO_3 assurent alors que ces colonnes forment une famille orthonormale et évoluent sur la sphère unité.

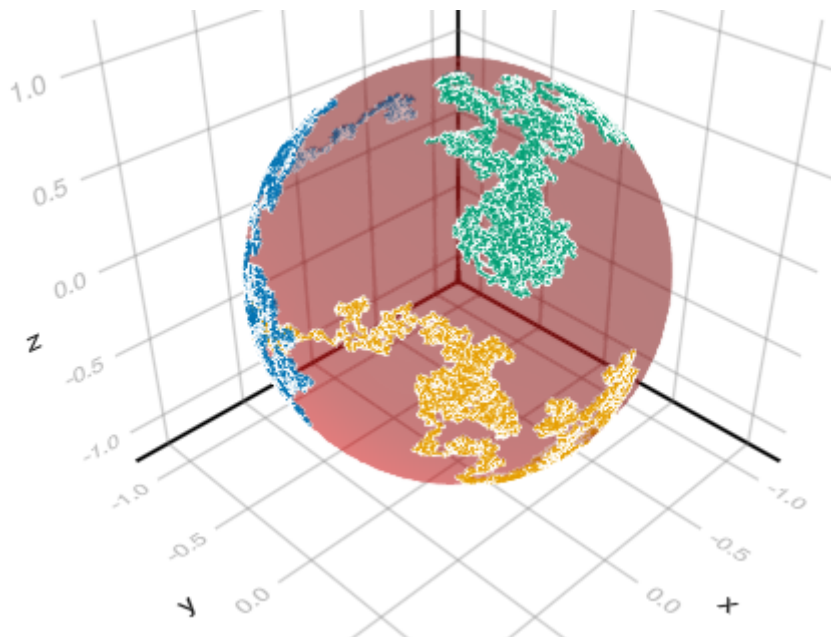
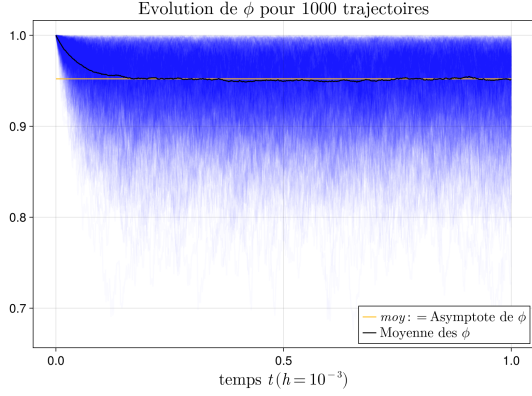


FIGURE 7 – Trajectoire d'une dynamique brownienne sur le groupe spécial orthogonal représentée par ses trois colonnes sur la sphère unité.

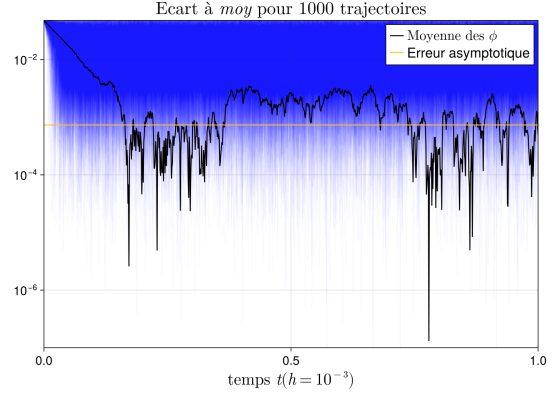
Observons l'ergodicité de notre méthode numérique. Pour cela, nous calculons l'image par ϕ de $M = 1000$ trajectoires, on représente alors l'évolution des 100 premières ainsi que de leur moyenne *moy*. Dans un second temps, nous affichons la même chose mais pour l'erreur à la moyenne

$$\text{err}(X_n^p) = |\phi(X_n^p) - \text{moy}|$$

pour toute trajectoire $(X_n^p)_{n \in \mathbb{N}}$ à chaque discrétisation.



(a) Convergence vers la mesure invariante.

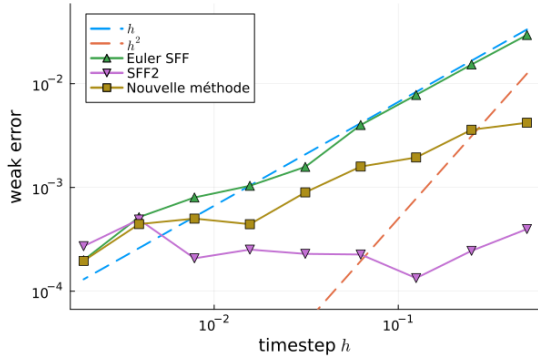


(b) Écart à la mesure invariante.

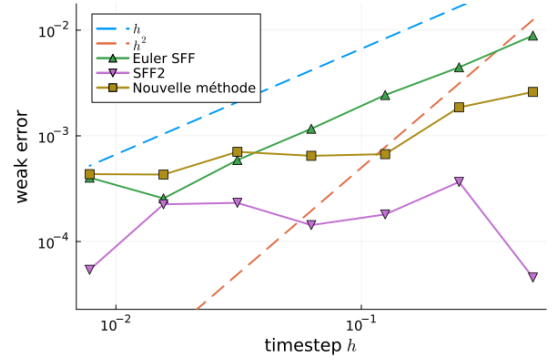
FIGURE 8 – Convergence des trajectoires vers la mesure invariante pour $V = 10 \text{Tr}((x - I_3)^T(x - I_3))$, $\phi = \exp\left(-\text{Tr}((x - I_3)^T(x - I_3)/6)\right)$ et $M = 10^3$ trajectoires

6.1.2 Ordre de convergence (dans le cas $V = 0$)

Dans l'étude de l'ordre de convergence, on va prendre pour référence la valeur de la méthode SFF2 pour le pas de temps le plus faible ($h = 2^{-10}$ pour le premier graphique et $h = 2^{-8}$ pour les autres). De plus, on prends comme fonction test $\phi : x \mapsto \exp\left(-\text{Tr}((x - I_3)^T(x - I_3)/6)\right)$ et comme condition initiale $X_0 = I_3$. La moyenne serait faite sur 10^6 trajectoires.



(a) Pour $T = 1$, la méthode est d'ordre 1.



(b) Pour $T = 3$, la méthode atteint l'erreur statistique dû au nombre restreint de trajectoires.

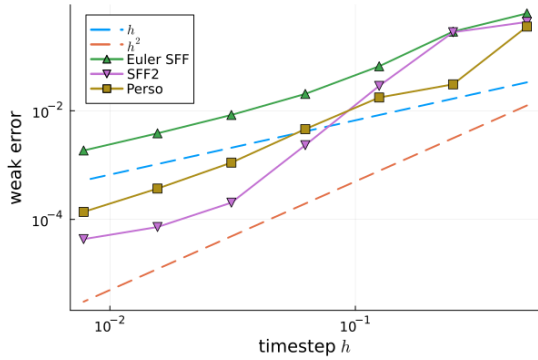
FIGURE 9 – Erreur faible par rapport à la mesure invariante pour une dynamique brownienne pour $\phi : x \mapsto \exp(-\text{Tr}((x - I_3)^T(x - I_3)/6))$ et $M = 10^6$ trajectoires

Dans le cas $V = 0$, les résultats numériques sont difficilement exploitables : le manque de trajectoires induit une erreur statistique non négligeable qui fausse complètement le comportement de la méthode SFF2 et ne permet pas de conclure pour l'ordre 2 de notre nouvelle méthode.

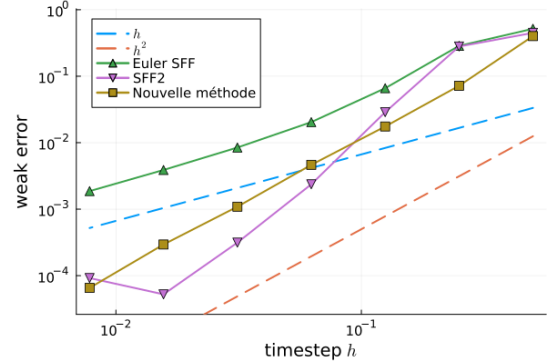
6.1.3 Ordre de convergence pour un puit de potentiel quadratique en l'identité

Pour pallier à ce problème, nous allons resserrer les trajectoires afin de réduire la dispersion des trajectoires. Pour cela, on impose le puit de potentiel quadratique

$$V : x \mapsto 10 \operatorname{Tr}((x - I_3)^T(x - I_3)).$$



(a) Pour $T = 1$, la méthode est d'ordre 2.



(b) Pour $T = 3$, la méthode est d'ordre 2.

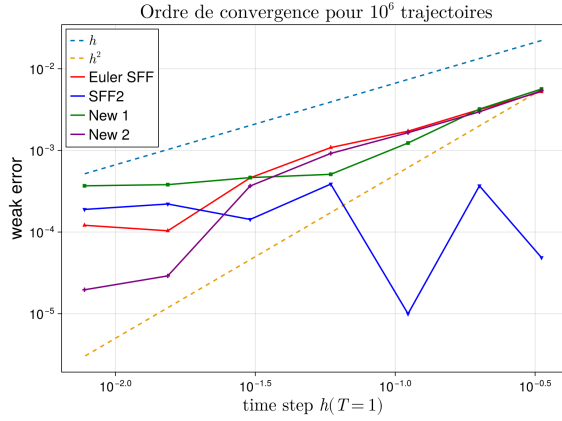
FIGURE 10 – Erreur faible par rapport à la mesure invariante pour $V = \operatorname{Tr}((x - I_3)^T(x - I_3))/6$, $\phi = \exp(-V)$ et $M = 10^6$ trajectoires.

Remarquons tout de suite que la méthode SFF2 est d'ordre au moins 2, ce qui confirme la réduction de l'erreur statistique. Notre méthode n'est pas clairement d'ordre 2 pour $T = 1$ mais l'ordre 2 est clairement atteint en $T = 3$. Ainsi nous pouvons confirmer que notre méthode de constructions de nouvelles méthodes numériques à l'aide de forêts irréductibles est satisfaisante.

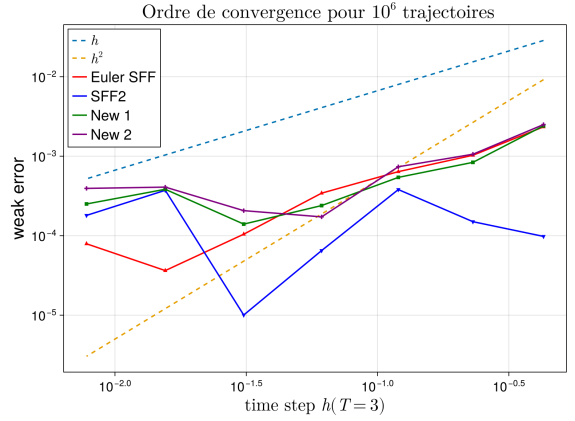
6.2 Observations numériques pour la deuxième méthode d'ordre 2

6.2.1 Ordre de convergence (dans le cas $V = 0$)

Dans l'étude de l'ordre de convergence, on va prendre pour référence la valeur de la méthode SFF2 pour le pas de temps le plus faible ($h = 2^{-8}$). De plus, on prends comme fonction test $\phi : x \mapsto \exp\left(-\operatorname{Tr}((x - I_3)^T(x - I_3)/6)\right)$ et comme condition initiale $X_0 = I_3$. La moyenne serait faite sur 10^6 trajectoires.



(a) Pour $T = 1$, la méthode est d'ordre 1.



(b) Pour $T = 3$, la méthode reste d'ordre 1 et atteint l'erreur statistique.

FIGURE 11 – Erreur faible par rapport à la mesure invariante pour une dynamique brownienne pour $\phi : x \mapsto \exp(-\text{Tr}((x - I_3)^T(x - I_3))/6)$ et $M = 10^6$ trajectoires

Pour $V = 0$, la méthode devient

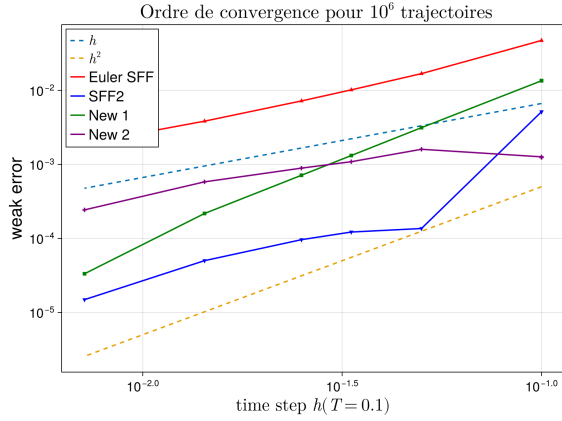
$$x_{n+1} = \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\frac{\sqrt{2h}}{2} \xi_n^d \right) E_d \right) \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\frac{2\sqrt{2h}}{2} \xi_n^d \right) E_d \right) x_n$$

et x_n converge comme la méthode d'Euler à pas $\frac{h}{2}$. Elle est donc plus précise que la méthode d'Euler pour un h fixé mais plus coûteuse. Pour $T = 3$, on atteint l'erreur statistique sans être d'ordre 2.

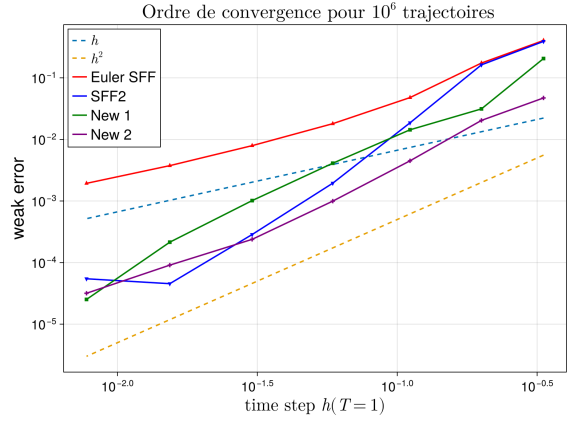
6.2.2 Ordre de convergence pour un puit de potentiel quadratique en l'identité

Pour pallier à ce problème, nous allons resserrer les trajectoires afin de réduire la dispersion des trajectoires. Pour cela, on impose le puit de potentiel quadratique

$$V : x \mapsto 10 \text{Tr}((x - I_3)^T(x - I_3)).$$



(a) Pour $T = 0.1$, la méthode est d'ordre 1.



(b) Pour $T = 1$, la méthode est d'ordre 2.

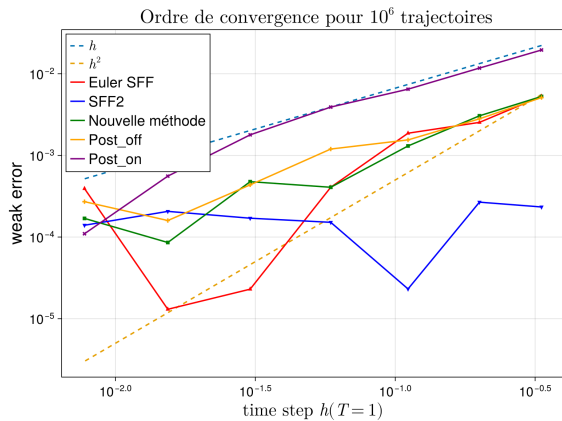
FIGURE 12 – Erreur faible par rapport à la mesure invariante pour $V = \text{Tr}((x - I_3)^T(x - I_3))/6$, $\phi = \exp(-V)$ et $M = 10^6$ trajectoires.

Dans le cas du puit de potentiel, cette deuxième méthode est d'ordre 1 faible à $T = 0.1$ malgré que la méthode précédente soit d'ordre 2. Mais, en temps plus long, à $T = 1$ les deux méthodes sont d'ordre 2 et cette nouvelle méthode est plus précise pour le même coût.

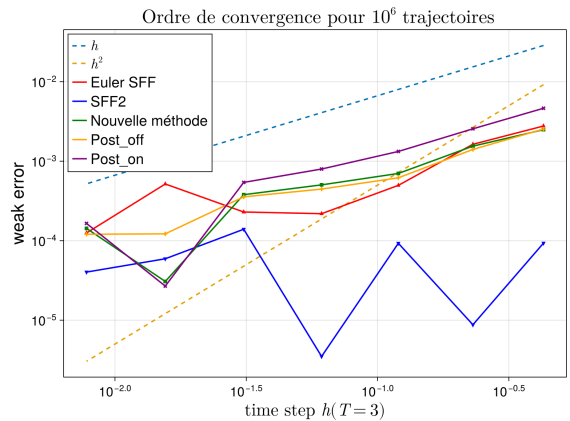
6.3 Observations numériques pour les méthodes avec postprocesseurs

6.3.1 Ordre de convergence (dans le cas $V = 0$)

Dans l'étude de l'ordre de convergence, on va prendre pour référence la valeur de la méthode SFF2 pour le pas de temps le plus faible ($h = 2^{-8}$). De plus, on prends comme fonction test $\phi : x \mapsto \exp\left(-\text{Tr}((x - I_3)^T(x - I_3)/6)\right)$ et comme condition initiale $X_0 = I_3$. La moyenne serait faite sur 10^6 trajectoires.



(a) Pour $T = 1$, la méthode est d'ordre 1.



(b) Pour $T = 3$, la méthode atteint l'erreur statistique dû au nombre restreint de trajectoires.

FIGURE 13 – Erreur faible par rapport à la mesure invariante pour une dynamique brownienne pour $\phi : x \mapsto \exp(-\text{Tr}((x - I_3)^T(x - I_3))/6)$ et $M = 10^6$ trajectoires

Pour $V = 0$, la méthode devient

$$x_{n+1} = \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\frac{\sqrt{2h}}{4} \xi_n^d \right) E_d \right) \exp \left(\sum_{d=1}^D \left(\frac{3\sqrt{2h}}{4} \xi_n^d \right) E_d \right) x_n$$

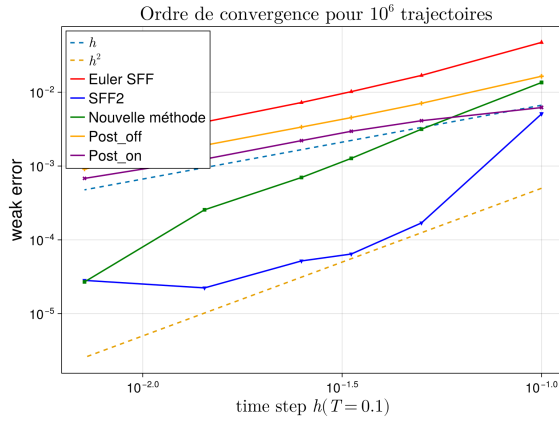
$$\bar{x}_n = \exp \left(\frac{\sqrt{2h}}{2} \bar{\xi}_N^d E_d \right) x_n.$$

et x_n converge comme la méthode d'Euler tandis que $\bar{x}_n$ est moins précise mais toujours d'ordre 1. Comme dans le cas de notre nouvelle méthode d'ordre 2, le cas $T = 3$ atteint l'erreur statistique et ne permet pas de conclure pour l'ordre 2.

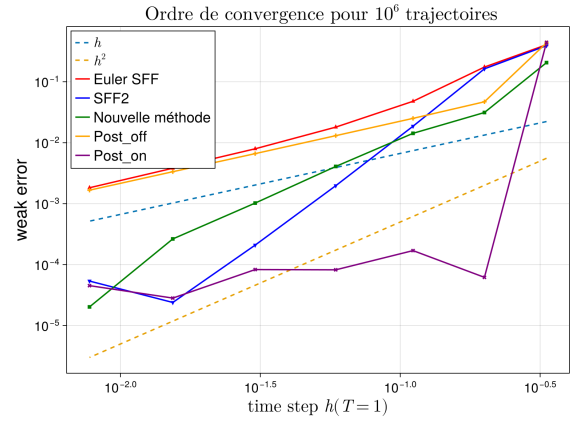
6.3.2 Ordre de convergence pour un puit de potentiel quadratique en l'identité

Pour pallier à ce problème, nous allons resserrer les trajectoires afin de réduire la dispersion des trajectoires. Pour cela, on impose le puit de potentiel quadratique

$$V : x \mapsto 10 \operatorname{Tr}((x - I_3)^T (x - I_3)).$$



(a) Pour $T = 0.1$, la méthode est d'ordre 1.



(b) Pour $T = 1$, la méthode est d'ordre 2.

FIGURE 14 – Erreur faible par rapport à la mesure invariante pour $V = \operatorname{Tr}((x - I_3)^T (x - I_3))/6$, $\phi = \exp(-V)$ et $M = 10^6$ trajectoires.

Dans le cas du puit de potentiel, la méthode avec postprocesseur devient plus précise que la méthode sans le postprocesseur. Les deux sont d'ordre 1 en $T = 0.1$ mais reste moins efficace que la première méthode 3.33 que nous avons présentée. Cependant la méthode avec postprocesseur atteint l'erreur statistique dès que $h < 0.5$ pour $T = 1$ ce qui dépasse l'efficacité de chaque méthode présentée dans ce rapport.

7 Conclusion

Dans ce rapport, nous avons généralisé un résultat issu de [1] en nous appuyant sur les outils théoriques développés dans [7]. En appliquant ce théorème, nous avons construits deux nouvelles méthodes numériques dans l'esprit de [6] d'ordre 2 pour la méthode invariante sur

variété dans l'esprit de [2], adaptées à la méthode invariante sur variété, en cohérence avec l'approche géométrique de [2]. Dans la suite, nous nous sommes intéressé aux méthodes de post-postprocesseurs dans l'esprit de [17] et de [28], afin de proposer des alternatives d'ordre 2 pour la mesure invariante, tout en réduisant les coûts de calcul. Poursuivant dans cette direction, nous avons adopté la perspective de [19] : d'une part en utilisant des commutateurs pour réduire la complexité des méthodes proposées à une seule exponentielle, et d'autre part en explorant les méthodes de type Runge-Kutta-Munthe-Kaas d'ordre 2 pour la mesure invariante. Enfin, nous avons confronté nos approches à des expériences numériques sur le groupe spécial orthogonal de dimension 3, où nous avons analysé les performances des deux méthodes inspirées de [6], ainsi que celle avec postprocesseur.

Références

- [1] Assyr ABDULLE, Gilles VILMART et Konstantinos C. ZYGALAKIS. « High order numerical approximation of the invariant measure of ergodic SDEs ». In : *SIAM J. Numer. Anal.* 52.4 (2014), p. 1600-1622.
- [2] E. BRONASCO, A. BUSNOT LAURENT et B. HUGUET. « High order integration of stochastic dynamics on Riemannian manifolds with frozen-flow methods ». In : *In preparation* (2025).
- [3] J. C. BUTCHER. « An algebraic theory of integration methods ». In : *Math. Comp.* 26 (1972), p. 79-106.
- [4] John C BUTCHER. *B-series : algebraic analysis of numerical methods*. Springer, 2021, p. x+310.
- [5] Elena CELLEDONI, Arne MARTHINSEN et Brynjulf OWREN. « Commutator-free Lie group methods ». In : *Future Generation Computer Systems* 19.3 (2003), p. 341-352.
- [6] Peter E CROUCH et R GROSSMAN. « Numerical integration of ordinary differential equations on manifolds ». In : *Journal of Nonlinear Science* 3 (1993), p. 1-33.
- [7] Arnaud DEBUSSCHE et Erwan FAOU. « Weak backward error analysis for SDEs ». In : *SIAM J. Numer. Anal.* 50.3 (2012), p. 1735-1752.
- [8] Kurusch EBRAHIMI-FARD, Alexander LUNDERVOLD et Hans Z. MUNTKE-KAAS. « On the Lie enveloping algebra of a post-Lie algebra ». In : *J. Lie Theory* 25.4 (2015), p. 1139-1165.
- [9] Ernst HAIRER, Christian LUBICH et Gerhard WANNER. *Geometric numerical integration*. Second. T. 31. Springer Series in Computational Mathematics. Structure-preserving algorithms for ordinary differential equations. Springer-Verlag, Berlin, 2006, p. xviii+644.
- [10] Elton P. HSU. *Stochastic analysis on manifolds*. T. 38. Graduate Studies in Mathematics. American Mathematical Society, Providence, RI, 2002, p. xiv+281.
- [11] Arieh ISERLES et al. « Lie-group methods ». In : *Acta numerica, 2000*. T. 9. Acta Numer. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000, p. 215-365.
- [12] L. ISSERLIS. « On a Formula for the Product-Moment Coefficient of any Order of a Normal Frequency Distribution in any Number of Variables ». In : *Biometrika* 12 (1-2 nov. 1918).
- [13] Katsumi KOBAYASHI Shoshichi ; Nomizu. *Foundations of Differential Geometry*. T. Vols. 1 (New ed.) Wiley-Interscience, 1996, p. 160.
- [14] Adrien LAURENT et Gilles VILMART. « Exotic aromatic B-series for the study of long time integrators for a class of ergodic SDEs ». In : *Math. Comp.* 89.321 (2020), p. 169-202.

- [15] Adrien LAURENT et Gilles VILMART. « Order conditions for sampling the invariant measure of ergodic stochastic differential equations on manifolds ». In : *Found. Comput. Math.* 22.3 (2022), p. 649-695.
- [16] J.M. LEE. *Introduction to Riemannian Manifolds*. Graduate Texts in Mathematics. Springer International Publishing, 2019.
- [17] Benedict LEIMKUHLER et Charles MATTHEWS. « Rational construction of stochastic numerical methods for molecular sampling ». In : *Appl. Math. Res. Express. AMRX* 2013.1 (2013), p. 34-56.
- [18] Tony LELIÈVRE, Mathias ROUSSET et Gabriel STOLTZ. *Free energy computations. A mathematical perspective*. Imperial College Press, London, 2010, p. xiv+458.
- [19] Hans MUNTKE-KAAS. « High order Runge-Kutta methods on manifolds ». In : *Applied Numerical Mathematics* 29.1 (1999), p. 115-127.
- [20] Hans MUNTKE-KAAS. « Lie-Butcher theory for Runge-Kutta methods ». In : *BIT Numer. Math.* 35 (1995), p. 572-587.
- [21] Hans MUNTKE-KAAS. « Runge-Kutta methods on Lie groups ». In : *BIT Numer. Math.* 38 (1998), p. 92-111.
- [22] Hans MUNTKE-KAAS et Antonella ZANNA. « Numerical integration of differential equations on homogeneous manifolds ». In : *Foundations of Computational Mathematics : Selected Papers of a Conference Held at Rio de Janeiro, January 1997*. Springer. 1997, p. 305-315.
- [23] B. O'NEILL. *Semi-Riemannian Geometry With Applications to Relativity*. Pure and Applied Mathematics. Academic Press, 1983.
- [24] J.-M. OUDOM et D. GUIN. « On the Lie enveloping algebra of a pre-Lie algebra ». In : *J. K-Theory* 2.1 (2008), p. 147-167.
- [25] B. OWREN et A. MARTHINSEN. « Runge-Kutta methods adapted to manifolds and based on rigid frames ». In : *BIT Numer. Math.* 39.1 (1999), p. 116-142.
- [26] Brynjulf OWREN. « Order conditions for commutator-free Lie group methods ». In : *Journal of Physics A : Mathematical and General* 39.19 (2006), p. 5585.
- [27] Denis TALAY et Luciano TUBARO. « Expansion of the global error for numerical schemes solving stochastic differential equations ». In : *Stochastic Anal. Appl.* 8.4 (1990), 483-509 (1991).
- [28] Gilles VILMART. « Postprocessed integrators for the high order integration of ergodic SDEs ». In : *SIAM J. Sci. Comput.* 37.1 (2015), A201-A220.