评述 N. Savard 等人发表于《等离子体物理学》32, 073903 (2025) 的《粒子数和网格单元尺寸对全隐式电荷和能量守恒粒子网格方案的影响》

L. Chacón, [1 a)] [1] [2], G. Chen, 和 L. Ricketson[1]
[1)]洛斯阿拉莫斯国家实验室，洛斯阿拉莫斯，新墨西哥州 87544 [2)]劳伦斯利弗莫尔国家实验室，利弗莫尔，加利福尼亚州 94550

arXiv:2603.02299v1 [physics.plasm-ph] 2 Mar 2026

I. 引言

我们对 Savard 等人近期发表的论文中的结论持有异议。[1] 该文中，作者实现了一种完全非线性的电荷和能量守恒隐式粒子网格方法（ECC-IPIC[2,3]），并用它研究粒子数对 ECC-IPIC 解质量的影响，涉及多个问题，包括离子声激波（IASW[2]）问题，以及有界等离子体中的若干鞘层问题。

根据这项研究，作者得出结论：“当单元尺寸大于德拜长度时，无论是周期性模拟还是有界模拟，若要复现高分辨率的收敛解，都需要在隐式方案中使用更多的每个网格单元的粒子数”（引自参考文献1的摘要）。我们将在下文证明，根据我们对离子声激波测试的分析，这一结论经不起独立审查。我们发现，若干诊断流程问题是导致他们得出这一结论的根源；修正这些问题后，研究结果会发生显著变化。

我们的目标并非研究作者在其研究中考察的 ECC-IPIC 方法的所有不同变体，也不是检视所有不同的数值示例。我们也无意证明 ECC-IPIC 相较于显式 PIC 的加速比，因为其他地方已有相关记录，[2] Savard 等人也报告了这一结果（表 I 报告了自适应网格 ECC-IPIC 相较于显式 PIC 的加速比为 $5\times$ [1]）。作者选择记录一项负面结果（当粒子数不足时，ECC-IPIC 算法的准确性不如显式对应方法），而这一结果源于其分析中的方法论问题。因此，只需聚焦于一个使用某种 ECC-IPIC 变体的代表性示例，便足以说明其分析存在关键缺陷，导致所述结论并不成立。

有鉴于此，我们选择离子声激波问题作为论据，因为这是一个我们非常熟悉的基准问题。[2] 离子声激波问题是在激波运动参考系中模拟的行进激波问题，并采用周期性边界条件。它是一个封闭系统，线动量和总能量严格守恒。参考文献1中，作者充分记录了其公式

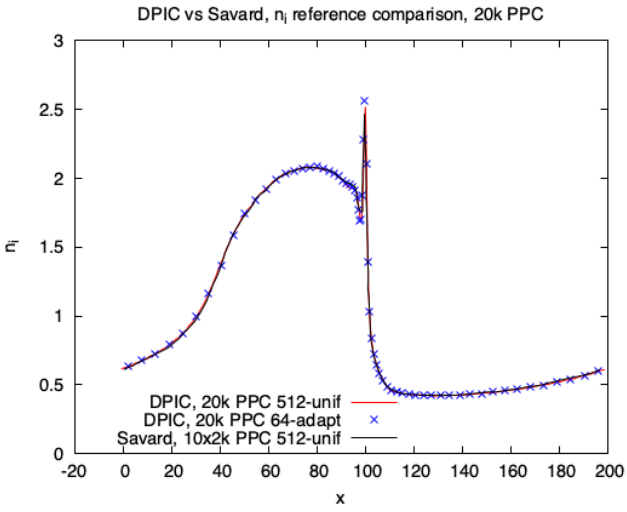


图 1. 比较我们采用 ECC-IPIC 实现（DPIC）以及 Savard 的实现（引自文献 1），在均匀网格和自适应网格上得到的充分分辨的 IASW 最终解。

和 ECC-IPIC 算法的实现。与 Savard 等人一样，我们通过对安培方程取散度来演化静电势（参考文献1中的方程1）。我们采用相同的网格设置 [、相同的可变逻辑坐标到物理坐标的映射 $x(\xi)$]，、相同的时间步长（$dt = 2\omega_{pe}^{-1}$）和初始条件（粒子初始化除外，因为参考文献1未提供相关信息），并使用参考文献中所述、被 Savard 等人称为“隐式云团网格”（ICIC）的聚集-散射策略。因此，据我们所知，我们的离散形式与他们的等价；事实上，在自适应网格和均匀网格上得到的充分分辨率解看起来也等价（见图1）。

我们转而将注意力集中在粒子初始化（模拟前）和模拟诊断（模拟后）上。虽然在 PIC 中使用映射网格能够高效分配网格自由度，但要实现这一功能，必须格外谨慎地实现这两个步骤。正如下文所述，对这两方面缺乏关注，正是 Savard 等人所观察到现象的根源。

II. 粒子初始化

Savard 等人并未真正说明他们在研究中如何初始化粒子，只是提到

[a)]电子邮箱：chacon@lanl.gov

每个网格单元的粒子数（PPC 或 N_{ppc}）“是对所有网格单元取平均得到的量”（参考文献1 第二栏底部，第 073903-6 页）。他们没有说明粒子数在空间中如何选取，也没有说明如何在速度空间中对初始麦克斯韦分布进行抽样。因此，我们无法准确复现他们的模拟。我们推测，他们可能使用了带噪声的 Box-Muller随机抽样算法[4] 来生成初始麦克斯韦分布，但他们的讨论并未明确说明粒子在空间中的分布方式。

由于密度中的粒子噪声与每个网格单元的粒子数相关，[5] 而这对应于逻辑空间密度中的均匀噪声 Jn，因此，为了使噪声均匀分布，一个自然的选择是在逻辑空间中均匀分布粒子（即每个逻辑网格单元都具有相同的粒子数，而不是“平均相同”）。然而，采用这种选择时，在自适应网格 PIC 模拟中，必须逐网格单元调整粒子权重，以匹配初始密度剖面。可变权重初始化可以通过近似设置单元 i 中的粒子权重为 $w_{p,\ i} \propto (Jn)_i / N_{ppc}$（其中 $J_i = \Delta x_i / \Delta \xi$ 是曲线坐标映射在单元 i处的雅可比因子）来实现。这样会导致密度分布的初始化带有噪声。不过，通过求解质量矩阵问题，可以更好地精确匹配密度分布。[6] 我们在此讨论这两种方法。

质量矩阵方法假设每个网格单元的粒子权重为 W_i，属于网格单元 i的任何粒子都继承该权重，即

$$w_p = \sum_j W_j S_0(x_j - x_p), \tag{1}$$

其中 S_0 为零阶（最近网格点或顶帽）B样条插值核。根据 ICIC 的密度收集表达式，引入式 1 后可得：

$$(Jn)_i = \frac{1}{\Delta \xi} \sum_p w_p S_2(x_i - x_p) = \tag{2}$$

$$\sum_j \underbrace{\frac{1}{\Delta \xi} \sum_p S_2(x_i - x_p) S_0(x_j - x_p)}_{M_{ij}} W_j = \sum_j M_{ij} W_j, \tag{3}$$

由此，通过对矩阵 $\{M_{ij}\}$ 求逆可得 $\{W_j\}$，而粒子权重 w_p 则由式 1 得出。构造该矩阵的计算成本随粒子数线性增长；在实际应用中，我们发现该矩阵条件良好，且易于通过迭代求逆，达到机器精度。此流程可确保初始条件在单元中心处与解析指定的初始条件精确匹配，达到机器精度。

关于粒子抽样，我们在构型空间和速度空间中考察了多种抽样方法，以了解它们的影响。具体而言，我们同时考虑随机抽样（随机数生成器，RNG）和静默启动（QS）。对于静默启动（QS），我们采用 Hammersley 准随机低差异序列，[7] 其收敛特性优于标准蒙特卡罗方法。[8]

III. 诊断

无论初始化细节如何，我们发现，导致参考文献1 中报告的隐式 PIC 准确性不佳的最重要因素是诊断流程。在该文中，作者进行了十次运行，并对结果进行集合平均。作者没有明确说明这样做的原因，不过这似乎是为了降低统计噪声。

我们的结果支持这样一种假设：这种系综平均流程很可能是 Savard 等人观察到解退化的根源。为证明这一点，我们不再对 10 次运行进行系综平均，而是按照 Savard 等人指定的每个网格单元的粒子数，进行一次模拟 $10\times$。对于给定网格，这两种方法的计算成本大致相同，因此选择哪种方法的唯一剩余考量因素就是准确性。由于 ECC-IPIC 是非线性的，外部集合平均算子与 ECC-IPIC 解传播算子不满足交换律，因此这两种方法并不等价。接下来我们将展示，对于 ECC-IPIC 模拟，在计算成本相近的情况下，使用 $10\times$ 更多粒子运行可获得远比 Savard 等人报告的结果更令人满意的准确性。我们还将指出导致集合平均诊断量退化的关键原因。

首先需要指出，Savard 等人提出的误差度量（参考文献1中的表 I），

$$\sigma_{ion,RMS} = \sqrt{\frac{1}{N_x} \sum_i \left(\frac{n_{ion} - n_{ref}}{n_{ref}} \right)_i^2}, \tag{4}$$

这种做法在多个方面都存在问题。这里，i 表示单元中心，n 表示离子密度，n_{ref} 表示参考解。在 Savard 的研究中，密度参考解采用均匀 512 网格 ECC-IPIC 解。将均匀网格解用作参考，会混淆两种误差来源，即空间离散误差和粒子噪声（正如我们将看到的，对于 IASW，当每单元粒子数足够大时，两者会变得相当），并可能掩盖 ECC-IPIC 真正的每单元粒子数收敛特性。此外，式（4）中的定义可能会放大真实误差，因为它没有考虑到 ECC-IPIC 激波解可能因动量守恒不完善而发生轻微相位偏移（显式 PIC 则严格满足动量守恒，不存在这一问题）。鉴于最终时刻 IASW 激波前沿十分陡峭，即使很小的偏移也会造成较大的逐点差异，从而掩盖该方案真正的收敛特性。[9]

为单独考察粒子误差的影响，我们采用每单元粒子数为 20000 的自适应网格模拟作为参考，取代 Savard 的 10×2000 每单元粒子数均匀网格参考解。为区分可能由解的偏移造成的误差，我们在一系列相移 h范围内最小化均方根误差：

$$\sigma^{opt}_{ion,RMS} = \min_{h\in(-h_0,h_0)} \sqrt{\frac{1}{N_x}\sum_i \left(\frac{n_{ion}(\xi_i+h)-n_{ref}(\xi_i)}{n_{ref}(\xi_i)}\right)^2}, \tag{5}$$

对于 $h_0 = L_x/100$，我们还跟踪随每单元粒子数变化而达到最小值的相位偏移 h_{opt}。方程 5 中的密度分布 n_{ion} 通过线性插值在 $(\xi_i + h)$ 处进行计算。

IV. 结果

我们的主要结果如图 2 所示，其中考察了几种初始化策略：采用密度匹配的静默启动、采用密度匹配的随机数生成器，以及不采用密度匹配的随机数生成器。在图中，我们绘制了：(i) 方程 5 中的均方根误差 $\sigma_{ion,\ RMS}$；(ii) 对于相同数据，使用 Savard 在方程 4 中提出的原始公式计算得到的均方根误差；(iii) Savard 在表 I 中记录的显式和隐式 PIC 均方根误差[1] ；以及 (iv) 相位偏移误差h_{opt}。我们还给出了粒子误差随 N_{ppc} 变化的参考标度关系，以及自适应网格 ECC-IPIC 模拟中的空间误差下限；后者通过比较 20k- 每单元粒子数自适应网格结果与均匀网格对应结果进行评估。空间误差的计算方法是：对 20k-每单元粒子数、512单元均匀网格 ECC-IPIC 解进行线性插值，并按照方程 5，使其相对于相位偏移的均方根与自适应网格解之间的差异最小化。图 2 展示了以下几项观察结果：

1. 对收敛数据质量影响最大的初始化特征似乎是精确密度匹配，它能降低均方根误差，并使每单元粒子数标度更加清晰。尽管如此，所有考察的初始化方式都产生了定性上相似的结果，这与 Savard 的结论不一致。

2. $\sigma^{opt}_{ion\ ,\ RMS}$ 与 Savard 等人报告的显式方法均方根误差相当，这使人们对他们关于在所考察条件下 ECC-IPIC 的准确性无法与显式 PIC 相媲美的说法产生质疑。

3. 对于较粗的粒子分辨率，平移误差 h_{opt} 较小，但不可忽略；其收敛速度与 N_{ppc} 的均方根误差相似。对于采用密度匹配的较大每单元粒子数，h_{opt} 的收敛速度显著加快。值得注意的是，在对 ECC-IPIC 运行结果进行系综平均时，相位偏移误差尤其有害，因为每次运行的相位偏移都不同，而平均会使激波剖面变得平滑并引入

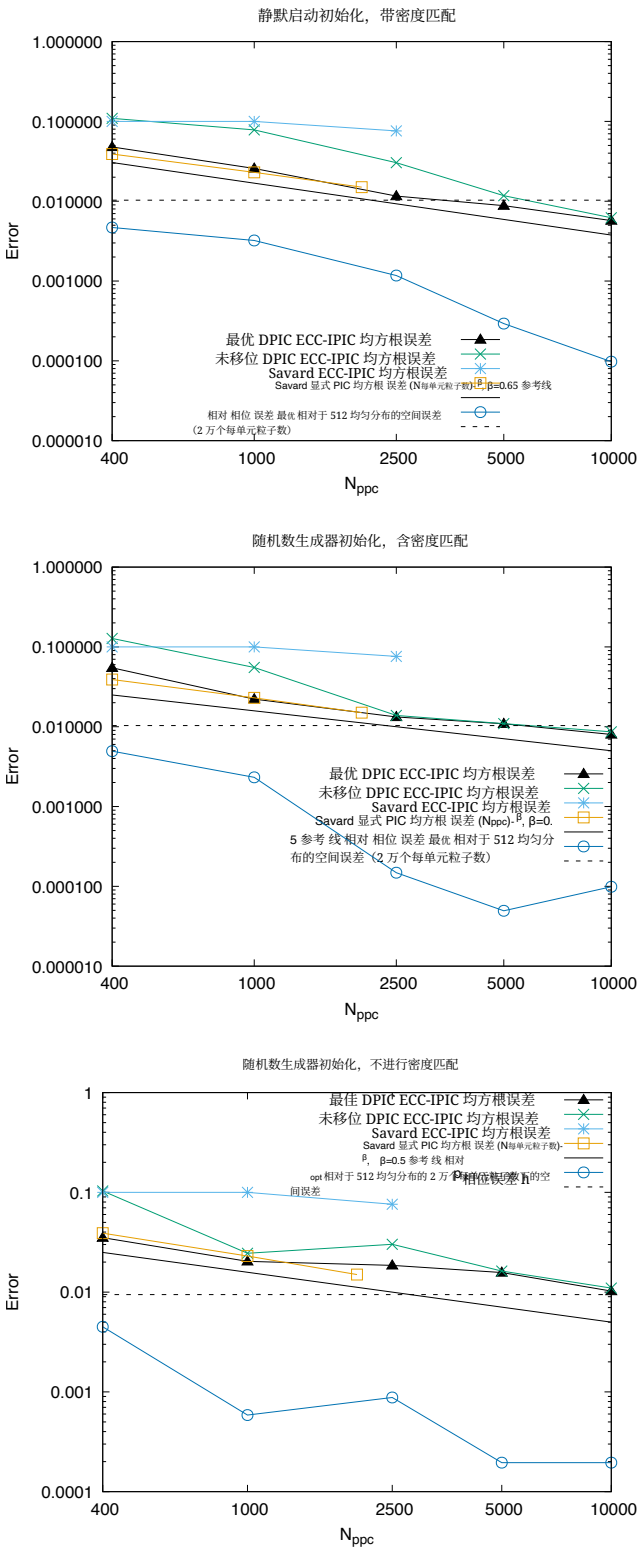


图 2. ECC-IPIC 算法的误差分析与粒子数的关系，N_{ppc}。上：采用密度匹配的静默启动（QS）初始化。中：采用密度匹配的随机初始化（随机数生成器）。下：不进行密度匹配的随机数生成器初始化。各种曲线的说明见正文。除空间误差水平线外，参考解取自每单元粒子数为 2 万的自适应网格模拟。

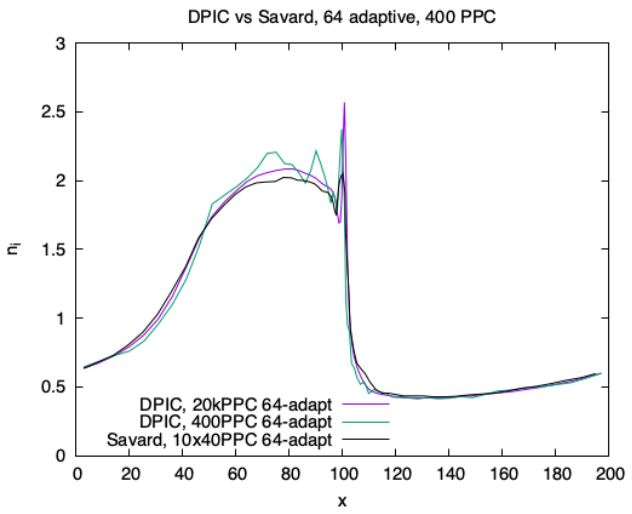


图 3. 对比 DPIC（400 个每单元粒子数）与 Savard 的研究（10×40 每单元粒子数）在自适应网格上的粒子稀缺 IASW 解，以及 2 万个每单元粒子数的参考解。Savard 的系综平均解（黑色）呈现系统性平滑偏差，而 DPIC 的解（绿色）则没有。

系统性偏差。图 3 展示了这种系综平均偏差的证据：我们比较了采用自适应网格得到的 2 万个每单元粒子数参考结果、400 个每单元粒子数的运行结果，以及 Savard 等人报告的系综平均 10×40 每单元粒子数结果的激波密度剖面。Savard 的系综平均剖面显示，激波前沿明显变得平滑，且下游密度（在 $x \in$ (60，100)中）系统性地低于参考解；相比之下，DPIC 的激波前沿仍然清晰，下游解则围绕参考解振荡。

4. 将式 5 中的平移误差分离出来，会显著影响均方根准确性。对于静默启动，$\sigma_{ion,\,RMS}^{opt}$按 $N^{-0.65}$ 缩放；由于粒子初始化采用了低差异准随机抽样，其收敛速度快于通常的蒙特卡洛（MC）缩放 $N^{-0.5}$。随机数生成器则恢复了标准的 MC 缩放。未平移均方根误差的量级显著大于优化后的指标，并且其随 N_{ppc} 的衰减趋势与所有初始化方式下的相位偏移误差高度吻合，因而掩盖了真实的收敛行为。

5. Savard 对 ECC-IPIC 的均方根误差度量并未呈现预期的 $N_{ppc}^{-0.5}$蒙特卡洛标度，这表明存在系统误差；我们认为，系综平均导致的平滑效应是其部分成因。此外，由于 ECC-IPIC 通过具有有限容差的非线性隐式求解来推进解，多个未充分解析的隐式求解在非线性收敛方面的运行间差异可能会引入系统性（非蒙特卡洛）误差，而系综平均无法消除这种误差。

6. 对于密度匹配设置，在较大的 N_{ppc} 下，自适应网格引入的空间误差超过粒子误差，这凸显了使用相同空间网格上的参考解的必要性，以便将粒子误差与空间离散误差区分开来。

V. 结论

我们研究了 Savard 及其合作者报告的电荷与能量守恒隐式 PIC（ECC-IPIC）方法在自适应网格上粒子数收敛结果不佳的根源。[1] 我们的分析不认同参考文献中的结论，即 ECC-IPIC 方法的准确性不如显式 PIC 方法；事实上，我们证明，只要初始化和诊断得当，在每个网格单元的粒子数相同的情况下，自适应网格上的 ECC-IPIC 方法能够达到与其显式对应方法相当的准确性。要获得 ECC-IPIC 中清晰的每单元粒子数收敛率，关键改进包括：1）避免对解进行系综平均，优先采用累积粒子数尽可能多的单次运行；2）优化均方根误差，同时考虑因未能严格满足动量守恒而产生的小幅相位偏移。参考文献1中观察到的收敛性缺失并非源于 ECC-IPIC 算法本身，而是源于其诊断流程，因此在很大程度上可以避免。尽管我们的分析仅关注 Savard 等人所考察的一个数值示例（IASW）以及一种 ECC-IPIC 实现（ICIC），但这已足以使人对其结论的普遍性产生怀疑。

致谢

本研究由 LANL 和 LLNL 分别在美国能源部 (DOE) 的主持下，根据合同 89233218CNA000001 和 DE-AC52- 06NA25396 开展，并获得美国能源部应用科学计算研究办公室的支持。

[1]N. Savard、G. Fubiani、D. Eremin 和 M. Dehnel，《粒子数和单元尺寸对全隐式电荷与能量守恒粒子网格方案的影响》，《等离子体物理》**32** (2025)。[2]L. Chacón、G. Chen 和 D. C. Barnes，《映射计算网格上的电荷与能量守恒隐式静电粒子网格算法》，《计算物理学杂志》**233**，1–9 (2013)。[3]L. Chacón 和 G. Chen，《多维曲线坐标下的全隐式守恒电磁 PIC 算法》，《计算物理学杂志》**316**，578–597 (2016)。[4]G. E. Box 和 M. E. Muller，《关于随机正态偏差生成的一则说明》，《数学统计年刊》**29**，610–611 (1958)。[5]P. Tranquilli、L. Ricketson 和 L. Chacón，《利用制造解方法验证静电粒子模拟算法的确定性策略，适用于

任意空间维度》，《计算物理学杂志》**448**，110751 (2022)。[6] G. Chen、L. Chacón 和 T. B. Nguyen，《一种使用高斯混合的无监督机器学习检查点重启算法，用于粒子网格模拟》，《计算物理学杂志》**436**，110185 (2021)。[7] J. M. Hammersley，《用于求解多变量问题的蒙特卡罗方法》，纽约科学院年刊**86**，844–874 (1960)。

[8] R. E. Caflisch 和 B. Moskowitz，“使用拟随机序列的改进蒙特卡洛方法”，载于《科学计算中的蒙特卡洛与拟蒙特卡洛方法：*1994*年*6*月*23*日至*25*日在美国内华达州拉斯维加斯内华达大学举行的会议论文集》（施普林格，1995），第1–16页。

[9] 事实上，激波解的数值误差按 $\mathcal{O}(\Delta x^{1/p})$的尺度变化，其中 Δx 为网格间距，p 定义所用的误差范数，例如 $p = 1$，2，∞ 分别对应绝对值范数、欧几里得范数和最大范数。请注意，这与光滑函数形成鲜明对比：对于光滑函数，$\mathcal{O}(\Delta x)$的平移会产生 $\mathcal{O}(\Delta x)$误差，无论使用何种范数。