

## 基于数据驱动的大气压射频放电等离子体数值模拟研究

王绪成, 李文凯, 艾飞, 刘志兵, 张远涛

### DATA-DRIVEN PLASMA SIMULATION ON ATMOSPHERIC RADIO FREQUENCY DISCHARGE PLASMAS

Wang Xucheng, Li Wenkai, Ai Fei, Liu Zhibing, and Zhang Yuantao

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.6052/0459-1879-23-347>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 基于数据驱动的流场控制方程的稀疏识别

DATA-DRIVEN SPARSE IDENTIFICATION OF GOVERNING EQUATIONS FOR FLUID DYNAMICS

力学学报. 2021, 53(6): 1543-1551

#### 基于神经网络的差分方程快速求解方法

A FAST SOLVER BASED ON DEEP NEURAL NETWORK FOR DIFFERENCE EQUATION

力学学报. 2021, 53(7): 1912-1921

#### 基于深度强化学习算法的颗粒材料应力应变关系数据驱动模拟研究

DATA-DRIVEN STRESS-STRAIN MODELING FOR GRANULAR MATERIALS THROUGH DEEP REINFORCEMENT LEARNING

力学学报. 2021, 53(10): 2712-2723

#### 基于人工神经网络的湍流大涡模拟方法

ARTIFICIAL NEURAL NETWORK-BASED SUBGRID-SCALE MODELS FOR LARGE-EDDY SIMULATION OF TURBULENCE

力学学报. 2021, 53(1): 1-16

#### 基于基因表达式编程的数据驱动湍流建模

DATA-DRIVEN TURBULENCE MODELLING BASED ON GENE-EXPRESSION PROGRAMMING

力学学报. 2021, 53(10): 2640-2655

#### 数据驱动印度洋海域全局动力学研究

DATA-DRIVEN GLOBAL DYNAMICS OF THE INDIAN OCEAN

力学学报. 2021, 53(9): 2595-2602



关注微信公众号, 获得更多资讯信息

吴承康先生纪念专刊

# 基于数据驱动的大气压射频放电等离子体 数值模拟研究<sup>1)</sup>

王绪成 李文凯 艾飞 刘志兵 张远涛<sup>2)</sup>

(山东大学电气工程学院, 济南 250014)

**摘要** 随着人工智能技术的进步, 结合低温等离子体的物理特点, 数据驱动技术由于其独特的优势在低温等离子体的研究中正逐渐兴起. 本研究以深度神经网络 (DNN) 模型在大气压射频放电中的计算研究为例, 讨论了数据驱动方法在低温等离子体模拟研究中的应用. 对于低温等离子体的研究而言, 数据驱动研究所需要的数据可以来自于实验诊断和数值计算, 根据等离子体物理特性的不同也可以选择不同的数据驱动模型. 粒子模型与流体模型是低温等离子体研究中常用的两类计算模型, 基于这两者的模拟数据组成的训练集, DNN 可以实现对大气压射频放电的动理学特性等各种特性的实时预测. 首先通过将流体模型与粒子模型计算结果与 DNN 模型的预测结果相比较, 验证了 DNN 模型在给定精度下的有效性. 然后基于流体模拟数据, 利用 DNN 探究了  $\alpha$  和  $\gamma$  模式下输入电流密度和放电间隙对大气压射频放电特性的影响, 最后借助于粒子模拟数据构建的训练集, 讨论了大气压射频微放电的频率效应, 特别是电子能量分布函数 (EEDF) 的演化. 预测结果表明, 经过大约 1 h 的训练后, DNN 只需要耗时 0.01 s 左右就能以极高的计算精度 (与数值模拟之间的相对误差小于 0.5%) 获得电子密度、电场强度和 EEDF 等大气压射频放电的特定物理信息, 而基于流体模拟或者粒子模拟中获得一组稳定的模拟结果分别需要大约半个小时和几十个小时. 可以说, 在相同的计算精度下, 经过训练后 DNN 的预测效率较传统数值模拟效率提高了约  $10^5 \sim 10^7$  倍, 可以近乎实时地给出计算结果. 另一方面, 基于有限的训练集, DNN 可以快速产生大量的特定预测数据, 这将极大丰富和强化原有的数值模拟效果, 更好地体现射频等离子体的演化规律. 本研究以 DNN 模型在大气压射频放电数值模拟中的应用为例, 表明数据驱动技术的引入将有力地推动低温等离子体研究的发展.

**关键词** 数据驱动, 深度神经网络, 流体模拟, 粒子模拟, 大气压射频放电

中图分类号: O539 文献标识码: A doi: 10.6052/0459-1879-23-347

## DATA-DRIVEN PLASMA SIMULATION ON ATMOSPHERIC RADIO FREQUENCY DISCHARGE PLASMAS<sup>1)</sup>

Wang Xucheng Li Wenkai Ai Fei Liu Zhibing Zhang Yuantao<sup>2)</sup>

(School of Electrical Engineering, Shandong University, Jinan 250014, China)

**Abstract** With the advancement of artificial intelligence, data-driven techniques are emerging in the field of low-

2023-07-28 收稿, 2023-10-10 录用, 2023-10-11 网络版发表.

1) 国家自然科学基金资助项目 (11975142).

2) 通讯作者: 张远涛, 教授, 主要研究方向为放电等离子体及其生物医学应用. E-mail: ytzhang@sdu.edu.cn

引用格式: 王绪成, 李文凯, 艾飞, 刘志兵, 张远涛. 基于数据驱动的大气压射频放电等离子体数值模拟研究. 力学学报, 2023, 55(12): 2900-2912

Wang Xucheng, Li Wenkai, Ai Fei, Liu Zhibing, Zhang Yuantao. Data-driven plasma simulation on atmospheric radio frequency discharge plasmas. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2023, 55(12): 2900-2912

temperature plasma due to their unique advantages. In this study, the application of deep neural network (DNN) in atmospheric radio frequency (RF) discharge is taken as an example to investigate the numerical simulation of low-temperature plasma based on data-driven methods. For data-driven low-temperature plasma studies, training data could be selected from experimental diagnostics and numerical simulations, and different data-driven models can also be selected according to various plasma properties. Particle model and fluid model are commonly used in low-temperature plasma simulations and based on a training dataset consisting of particle simulation and fluid simulation data, DNN enables real-time prediction of various properties of atmospheric RF discharges, including kinetic properties. The effectiveness of the DNN is verified by comparing the DNN prediction results with the numerical simulation results. Subsequently, based on the fluid simulation data, the DNN is employed to investigate the effects of input current density and electrode spacing on the atmospheric RF discharge operating in  $\alpha$  and  $\gamma$  modes, and finally the frequency effects of atmospheric RF micro-discharge, especially the evolution of the electron energy distribution function (EEDF), are discussed based on the training dataset consisting of particle simulation data. The prediction results show that after about one hour of training, DNN only takes about 0.01 second to obtain the specific discharge characteristics (such as electron density, electric field, and EEDF) with very high accuracy (relative error less than 0.5% with respect to the simulation results). In contrast, it takes about half an hour and tens of hours to obtain stable simulation results in fluid simulation and particle simulation, respectively. It can be said that the prediction efficiency of trained DNN is about  $10^5 \sim 10^7$  times higher than the computational efficiency of traditional numerical simulations, and the prediction results can be provided in near real-time. In addition, DNN can rapidly generate infinite prediction data based on limited training data, which could greatly enrich and strengthen the original numerical simulation and better describe the evolutionary behavior of the RF plasma. In this study, the application of DNN in atmospheric RF discharges is used as an example to show that data-driven techniques could strongly promote the development of low-temperature plasma.

**Key words** data-driven method, deep neural network, fluid simulation, particle simulation, atmospheric RF discharge

## 引言

近年来, 大气压非平衡等离子体的研究得到人们广泛的关注<sup>[1-4]</sup>, 特别是大气压下的容性耦合射频放电由于其结构相对简单, 耦合功率密度高, 能产生大体积均匀等离子体等优势, 成为了目前国际上放电等离子体领域的热点研究之一<sup>[5-7]</sup>. 一直以来, 射频放电等离子体在等离子体刻蚀、镀膜和生物医学等方面得到了广泛的应用<sup>[8-10]</sup>. 大量的实验和计算研究表明大气射频放电可以工作在不同的放电模式下, 即  $\alpha$  模式和  $\gamma$  模式<sup>[11-13]</sup>. 在  $\alpha$  模式下, 大气压射频放电可以产生均匀的大体积等离子体, 但当输入功率增加时, 这种均匀的等离子体很容易出现气体加热效应, 并呈现径向集聚, 导致射频放电从  $\alpha$  模式过渡到  $\gamma$  模式<sup>[14-15]</sup>. 因此需要深入研究抑制大气压射频放电模式转换的方法, 一般说来降低放电间隙至微等离子体尺度与提高放电频率至甚高频范围是常用的抑制手段, 引入脉冲调制也是近年发展起来的有效方法<sup>[16-17]</sup>.

数值模拟作为揭示放电等离子体物理特性的一种有效方法, 已被证明是探究大气压射频放电中各种物理和化学特性的有效工具, 目前常用的等离子体数值模拟方法包括粒子 (PIC-MCC) 模拟与流体模拟<sup>[18-19]</sup>. 粒子模型在整个模拟过程中追踪了放电空间内所有的宏粒子位置与速度的变化以及电场的变化, 可以详尽地描述等离子体放电过程中的动理学特征. 流体模型通过数值求解带电粒子的连续性方程、动量方程和能量方程, 并耦合泊松方程对放电的发展进行模拟. 但是在大气压下, 当放电空间尺度非常小 (比如微等离子体), 时间尺度变化非常快 (比如 ns 脉冲放电) 时, 流体模拟无法准确地描述等离子体的动理学特性. 但是粒子模拟对于大气压高密度等离子体以及密度范围变化较大的放电过程的计算耗时极大. 总的来说, 流体模型并不适于微间隙条件下的等离子体建模研究, 而粒子模型则在苛刻的时间步长与空间步长条件限制下需要极大的计算耗时<sup>[19]</sup>, 因此引入一种新的计算模式来提高数值模拟的效率与效果是非常必要的.

近年来, 由于等离子体研究和应用领域中数据科学和技术的进步, 数据驱动的等离子体科学和技术正在迅速发展<sup>[20]</sup>. 数据驱动的科学被称为发现的第四范式, 数据驱动的发展使通过人工智能实现完全自动化的科学发现成为可能<sup>[21]</sup>. 在数据驱动技术中, 神经网络已经成为实现具有非线性特征的输入-输出映射系统建模的强大手段<sup>[22-25]</sup>. 神经网络学习复杂映射的固有能力和相对容易训练的特性, 可能使其非常适合基于非线性模型的等离子体建模工作. 此外, 神经网络可以从训练数据中学习等离子体系统的性质, 进而给出反映等离子体特性的数据, 实现从输入数据到输出数据的映射, 而无需事先了解等离子体性质背后的物理方程<sup>[26]</sup>.

一般来说, 神经网络由输入层、隐藏层和输出层组成, 当隐藏层的个数超过两个时, 可以将该神经网络称为深度神经网络 (deep neural network, DNN). 目前, DNN 已成功地被应用于各种等离子体过程. 我们曾基于机器学习方法构造了一个 DNN 来探究大气压介质阻挡放电的电流电压特性、电场强度和带电粒子密度等宏观与微观放电特性<sup>[27]</sup>, 该研究表明 DNN 是研究大气压等离子体特性的有力工具. Pan 等<sup>[28]</sup>将 DNN 引入到等离子体催化动力学建模中, 他们使用 DNN 代替动力学模拟, 有效地预测了不同约化场下目标产物的密度. 此外, Nazari 等<sup>[29]</sup>开发了一个神经网络来评估介质阻挡放电反应器中 CO<sub>2</sub> 的转化率和能源效率. 计算结果表明, 神经网络在评估等离子体辅助 CO<sub>2</sub> 转化性能方面具有极大的潜力. 可以这样讲, 基于数据驱动技术的 DNN 算法不仅可以自动提取训练数据的特征, 而且在满足精度要求的前提下具有很高的计算效率, 这为低温等离子体数值模拟提供了一种很有潜力的方法.

因此, 本研究以 DNN 在大气压射频放电中的计算为例, 讨论数据驱动方法在低温等离子体模拟中的应用. 相较于我们之前研究的大气压介质阻挡放电<sup>[27]</sup>, 大气压射频放电由于放电频率较高, 带电粒子一般被束缚在放电空间内, 所以放电电流及带电粒子密度在一个周期内变化比较平缓. 在本研究中, 我们基于数据的特点, 构建了一个具有多层隐藏层的通用 DNN 结构, 并利用该 DNN 模型代替流体模型和粒子模型, 实现对于大气压射频放电等离子体的各种动力学特征的准确高效计算.

本文的主要内容如下: 第 1 节简单描述了用于

提供训练数据的流体模型和粒子模型, 并构造了一个适用于预测大气压射频放电特性的通用型 DNN 算法; 在第 2 节中通过将 DNN 模型的预测结果与传统的流体模型及粒子模型的计算结果进行比较, 证明了 DNN 模型的高效性和准确性, 同时使用该 DNN 模型对大气压射频等离子体的各种特性进行了高效的分析研究; 最后, 第 3 节给出了本工作的总结和展望.

## 1 计算方法描述

### 1.1 物理模型

#### 1.1.1 流体模型

在大气压下, 带电粒子的平均自由程非常短, 粒子之间的碰撞也非常频繁. 在射频放电的研究中, 流体模型通常用连续方程和扩散漂移近似方程来描述各种粒子的产生、消失与输运, 使用泊松方程计算放电空间中的电场强度, 基于麦克斯韦分布的假设, 通过求解电子能量平衡方程来获得电子温度. 因此, 描述大气压射频放电的主要控制方程如下<sup>[30-31]</sup>

$$\frac{\partial}{\partial t} N_i + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_i = S_i \quad (1)$$

$$\Gamma_i = q_i \mu_i N_i E - D_i \frac{\partial}{\partial x} N_i \quad (2)$$

$$\epsilon_0 \frac{\partial E}{\partial x} = \sum_i q_i N_i \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_e \bar{\epsilon}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{5}{3} \Gamma_e \bar{\epsilon} - \frac{5}{3} \frac{\partial}{\partial x} \bar{\epsilon} N_e D_e \right) = \\ -e \Gamma_e E - \sum_j V E_j R_j - 3 \frac{m_e}{m_g} k_{el} k_B (T_e - T_g) \end{aligned} \quad (4)$$

式中, 下标  $i$  表示粒子  $i$ ,  $N$ ,  $\Gamma$  和  $S$  分别表示粒子数密度、粒子通量和粒子源项,  $\mu$  和  $D$  分别为粒子迁移率和扩散系数,  $q_i$  表示粒子  $i$  的电荷量 (例如电子的电荷量为  $-1$ ).  $\epsilon_0$  和  $E$  分别为真空介电常数和电场.  $\bar{\epsilon}$ ,  $e$ ,  $m_e$ ,  $m_g$ ,  $k_{el}$ ,  $k_B$ ,  $T_e$  和  $T_g$  分别表示电子平均能量、基本电荷、电子质量、背景气体分子质量、背景分子与电子之间动量传递频率、玻尔兹曼常数、电子温度和气体温度. 具体的流体模拟方法的示意图如图 1 所示. 只是需要注意的是, 大气压下极其频繁的粒子碰撞严重限制了流体模拟中空间网格和时间步长的选择.

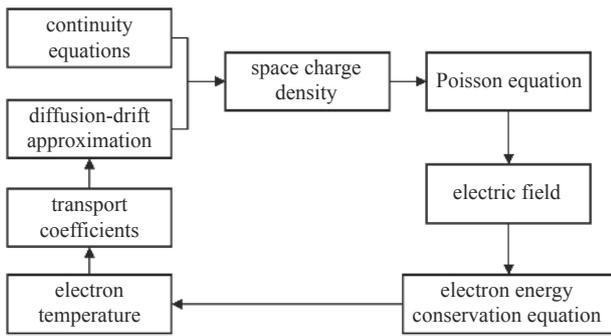


图 1 流体模拟方法

Fig. 1 Scheme of the fluid simulation

1.1.2 粒子模型

对于大气压射频放电, 特别是在微间隙中, 电子能量分布函数 (EEDF) 并不一定满足 Maxwell 分布, 另外在大气压射频放电从  $\alpha$  模式转化到  $\gamma$  模式过程中, 等离子体的动力学行为有时也较为显著, 这样, 粒子模拟就成为必需的数值模拟方法。

在粒子模型中, 为了避免数值不稳定导致的模拟发散, 必须选择合理的时间步长和空间步长, 即  $\Delta x \leq \lambda_D$ ,  $\omega_p \Delta t \leq 2$  和  $\Delta x / \Delta t \leq v_t$ , 其中  $\lambda_D$  是等离子体德拜长度,  $\omega_p$  是等离子体振荡频率,  $v_t$  是电子热速度<sup>[32]</sup>. 在粒子模拟的过程中为了保证准确地计算粒子运动轨迹, 要求运动方程的积分时间步长必须足够小, 需要成百数千个的粒子网格, 而时间步长往往被限制在  $10^{-14} \sim 10^{-12}$  s 之间. 另一方面, 空间分辨率的选择是准确描述等离子体动力学特征的关键, 每个网格内需要超过 100 个宏粒子以消除蒙特卡罗过程的随机误差<sup>[33]</sup>. 在粒子模拟的具体实现中, 隐式格式可以在保持计算精度的同时尽可能地允许更大的时间步长和空间步长, 从而可以大幅提升计算效率<sup>[34]</sup>. 一般说来, 粒子模拟循环过程如下: (1) 计算带电粒子密度; (2) 计算电势和电场; (3) 计算作用在粒子上的力; (4) 推进粒子; (5) 在边界上添加或移除粒子; (6) 执行碰撞过程. 如图 2 所示。

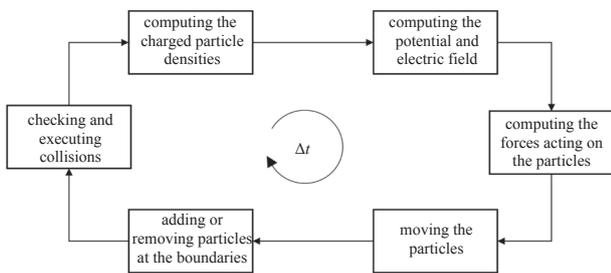


图 2 粒子模拟方法

Fig. 2 Scheme of the PIC-MCC simulation

可以说, 描述低温等离子体的粒子模型与流体模型的主要物理方程是相对明确的, 可以通过不同的数值方法求解这些物理方程, 比如根据需要选择使用有限元、有限差分及边界元等数值方法来实现; 即使使用相同的数值方法, 所采用的具体算法也可以是不同的, 如求解漂移扩散近似的 SCG 算法与 ISG 算法等. 因此, 粒子模拟与流体模拟的数值实现方式通常是比较多样性的。

1.2 数据驱动模型

基于对大气压射频放电的理解, 特别是对其动力学特性的深入分析, 本文构建了一个具有 4 层隐藏层的 DNN, 如图 3 所示. 该 DNN 是一个基于 TensorFlow 平台开发的具有 GPU 加速的全连接多层反向传播神经网络, 由输入层、隐藏层和输出层 3 层结构组成, 每个隐藏层内有 30 个神经元. 该 DNN 网络结构是经过隐藏层层数、神经元个数以及激活函数的各种组合试验而得到的. 一般来说, 增加隐藏层层数可以增加网络的表示能力和学习能力, 每一层隐藏层都可以学习到数据的不同抽象特征, 这些特征逐层组合可以形成更高级和复杂的特征表示. 增加神经元个数能够增加每个隐藏层的表示能力, 提供更多的自由度, 使网络能够学习到更复杂的函数映射. 但随着 DNN 隐藏层层数和神经元数量的增加, 网络的参数量和计算复杂性也会随之上升, 导致训练时间增加. 本文所构建的 DNN 是通过反向传播算法来更新网络参数的, 而深层网络在反向传播过程中可能面临梯度消失或梯度爆炸的问题, 这可能导致训练过程变得困难. 特别是在训练数据有限的情况下, DNN 可能会过度依赖训练数据中的噪声或不重要

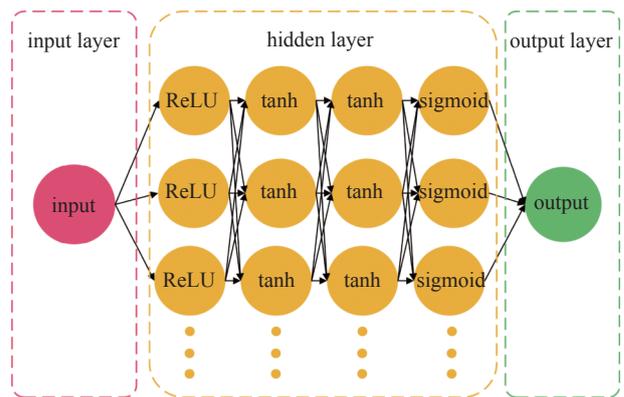


图 3 基于大气压射频放电特性构建的 DNN 示意图

Fig. 3 Schematic of DNN constructed based on the characteristics of atmospheric RF discharges

的特征, 导致过拟合问题的出现. 在对 DNN 结构的不断调整中发现, 在探究一维射频放电特征时, 增加隐藏层的层数和神经元的个数都会导致训练时间的明显提升. 与增加神经元个数相比, 增加隐藏层的层数更能明显提高训练准确度, 但是当隐藏层层数过多时, 提升效果将不再明显.

进一步说, 由于 DNN 处理的对象是数据, 因此 DNN 的隐藏层层数、神经元个数及激活函数等参数是由数据的特点决定的. 比如有的数据变化比较剧烈 (数据梯度大), 而有的数据变化比较平缓, 这就需要对隐藏层的层数与神经元的个数进行调整, 使模型训练时间及预测精度之间达到某种平衡. 一般说来, 低温等离子体数据的特点是由相应放电的物理性质来决定的, 比如本文研究的射频放电, 其电流电压的变化是连续的、比较平缓的, 而另一种常用的大气压脉冲放电的电流则是近乎突变的、非常剧烈的. 显然这两种放电所产生的电流数据具有不同的特点, 因此需要对 DNN 结构做出相应的调整. 本文研究大气压射频放电的 DNN 中将隐藏层层数设置为 4 层, 每层的神经元数目设置为 30 个, 4 个隐藏层中依次采用 ReLU 函数、tanh 函数、tanh 函数和 sigmoid 函数作为激活函数. 首先, ReLU 函数能够高效地映射放电特性的突变; 其次, 采用两个 tanh 函数能够实现对放电特性的进一步拟合, 达到较好的预测精度; 最后, 使用 sigmoid 函数对预测曲线进行平滑处理<sup>[35]</sup>. 该 DNN 的输入参数为放电条件 (如电压幅值、驱动频率和放电间隙等), 输出为大气压射频放电的各种物理量, 例如电场强度、产物粒子密度和电子温度等.

实际上, 具有  $J$  层神经网络的 DNN 的输入输出关系映射可以表示为

$$Y_{\text{out}} = Y^J = f_{\theta}^J(\dots f_{\theta}^1(X_{\text{in}})) \quad (5)$$

$$f_{\theta}^j(Y^j) = \sigma(W^j Y^j + b^j) \quad (6)$$

式中,  $Y_{\text{out}}$  和  $X_{\text{in}}$  分别表示 DNN 输出层的输出和输入层的输入;  $f_{\theta}^j$  和  $Y^j$  分别表示第  $j$  层神经元的前馈传递函数及其输入;  $\theta = \{W, b\}$  为 DNN 训练过程中需要被优化的参数,  $W$  和  $b$  分别为权重和偏置;  $\sigma$  为激活函数. DNN 通过权重  $W$ 、偏置  $b$  以及激活函数  $\sigma$  将每层神经网络相互连接, DNN 的训练就是通过不断地优化  $\theta = \{W, b\}$ , 逐步逼近 DNN 的输

入-输出映射关系, 从而使得 DNN 的输出结果接近于训练集中的给定值. 可以说, DNN 通过建立输入输出特征量之间的映射关系, 将数值模拟中控制方程的求解转化为不断更新权重和偏置参数的优化学习算法, 这极大提高了放电等离子体数值模拟的计算效率. 在本工作中, 经过训练以后的 DNN 可以通过式 (5) 和式 (6) 根据输入的放电参数直接获得相应的放电特性.

在 DNN 的训练过程中, 将标准差函数 ( $MSE$ ) 作为 DNN 的损失函数, 并使用优化器 Adam 最小化该损失函数以获得最优的权重  $W$  和偏置  $b$ . 标准差函数表示为

$$MSE = \frac{1}{N_{\text{data}}} \sum_{k=1}^{N_{\text{data}}} (y_s - y_p)^2 \quad (7)$$

式中,  $N_{\text{data}}$  表示计算域中所包含的采样点的数量;  $y_s$  为数值模拟的计算结果, 而  $y_p$  则是 DNN 模型的预测结果. 此外, 在 DNN 的验证过程中, 采用平均相对误差 ( $MRE$ ) 来直观地描述预测数据与模拟数据之间的差异

$$MRE = \frac{1}{N_{\text{data}}} \sum_{k=1}^{N_{\text{data}}} \left| \frac{y_s - y_p}{y_s} \right| \times 100\% \quad (8)$$

图 4 进一步总结了基于数据驱动技术的 DNN 算法的基本过程. 首先, 将数值模拟 (或实验诊断) 得到的数据分为训练集和测试集. 这两个数据部分彼此相互独立, 其中训练集主要是用来训练 DNN 模型中的参数, 一般来说要求其能涵盖样本空间, 即整个放电参数范围内的所有的信息; 测试集用于判断 DNN 模型的预测性能. 如果在测试集内 DNN 的预测结果满足要求, 则表明该 DNN 在给定参数范围内具有良好的泛化性能. 随后, 通过 TensorFlow 自带的命令导出 DNN 模型参数, 在 DNN 的预测过程中只要预加载模型参数后按照模型的输入层结构输入放电参数, 就可以迅速获得相应的放电物理量. 需要特别指出的是, 随着人工智能技术的发展, 针对低温等离子体的物理特点以及研究的目的, 更多新兴的数据驱动方法将会被引入到低温等离子体的研究中<sup>[36-38]</sup>, 上述 DNN 只是常用的一种神经网络模型.

需要澄清的是, 以 DNN 为代表的驱动方法能够高效地给出某特定单一物理信息, 比如 DNN 可以分别单独给出电场强度、粒子密度和电子能量分

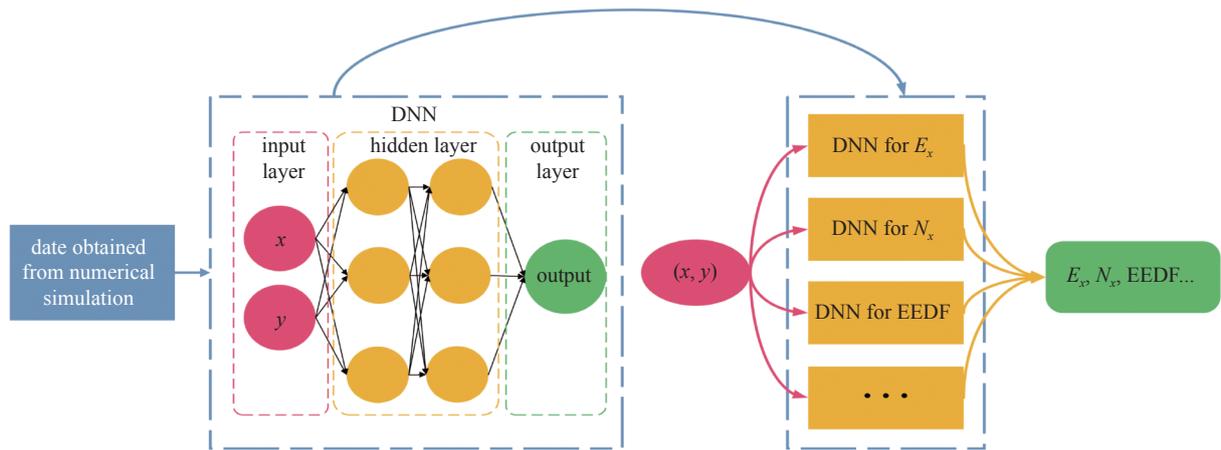


图 4 基于数据驱动技术的 DNN 算法示意图

Fig. 4 Schematic diagram of DNN algorithm based on data-driven method

布函数 (EEDF) 等放电特性; 而传统的粒子模型和流体模型等物理方程驱动的模拟方法则可以一次性给出包含全部物理信息的数据. 一般说来, DNN 对于单一放电物理量预测的训练所需要的时间从几十分钟到几小时, 但是训练后给出相应的物理信息则只需要 0.01 s, 这对于需要进行实时监测、反馈并调整的等离子体系统是非常重要的, 比如与等离子体医学相关的精准医疗过程<sup>[39]</sup>.

如图 4 所示, 也可以将单一放电物理量输出的 DNN 训练后进行耦合, 实现对于多个放电物理量的快速预测. 本工作所构建的 DNN 模型本质上也支持多放电参数的输入和多物理量的输出, 其维度可以由用户自定义, 但是多参数的输入输出必然会导致 DNN 的训练集数据需求量和训练时间的增加, 这对计算平台的计算能力构成了巨大的挑战.

需要进一步说明的是, DNN 所需要的数据可以来自于数值计算, 当然也可以来自实验诊断. 对于 DNN 而言, 主要关注的是训练数据的数量与质量, 当然在知道其来源的情况下, 可以有针对性地调整 DNN 的构建, 以便在给定数据的情况下获得更好的训练和预测效果. 比如正在兴起的小样本学习技术, 为基于实验数据进行 DNN 的训练研究等离子体性质提供了极大的方便<sup>[40-41]</sup>.

## 2 结果分析与讨论

### 2.1 基于数据驱动研究大气压射频放电演化特性

在本节中, 使用流体模拟获得的计算数据训练 DNN 以实现对于大气压射频放电演化特性的高效研究. 在这里将输入电流密度和电极间距作为 DNN

的输入, 研究二者对  $\alpha$  和  $\gamma$  模式下大气压射频放电特性的影响. 在流体模型中, 大气压射频等离子体在两个对称的平行板电极之间产生, 放电气体为纯氦气. 正弦形式的电流密度  $I = I_0 \sin(2\pi ft)$  被视为流体模拟的输入, 其中  $I_0$  是电流幅度,  $f$  是驱动频率. 在本节中, 驱动频率被固定为 13.56 MHz. 大气压氦气等离子体中考虑了电子 (e)、两种离子 ( $\text{He}^+$  和  $\text{He}_2^+$ )、两种亚稳态粒子 ( $\text{He}^*$  和  $\text{He}_2^*$ ) 以及背景气体氦气 (He). 模型中详细的化学反应和相应的反应速率系数可从参考文献 [42] 中获得.

在本节中, 选取 315 组电流密度有效值 (RMS 电流密度) 在  $0 \sim 85 \text{ mA/cm}^2$  之间、电极间距在  $1.6 \sim 3.2 \text{ mm}$  之间的流体模拟数据作为预测电流电压特性的训练数据集, 共包含约 117 万个时间采样点. 选取 280 组 RMS 电流密度在  $10 \sim 85 \text{ mA/cm}^2$  之间, 电极间距在  $1.6 \sim 3.2 \text{ mm}$  之间的时均电子密度、离子密度、电场和电子温度空间分布的模拟数据作为预测电子密度、离子密度、电场和电子温度的训练数据集, 共有约 67 万个空间采样点. 需要说明的是, 在 DNN 的训练过程中, 训练集数据的质量对 DNN 模型的预测精度和训练速度有着极大的影响. 数据量较少的训练集可能会导致 DNN 模型的预测精度达不到要求; 而如果训练集中包含了太多的数据量, 则会提高数值模拟的计算和 DNN 训练的时间成本. 因此选择合适的训练集数据对于 DNN 模型在放电等离子体中的应用是至关重要的, 这与数据本身的特点及所需的预测精度等因素都有关.

经过训练以后, 在测试集中 DNN 的预测结果与流体模拟结果吻合良好, 各种放电特征量的平均相

对误差均小于 0.5%. 为了说明 DNN 预测的有效性, 下文展示了电极间距为 2.4 mm、RMS 电流密度分别为  $30 \text{ mA/cm}^2$  ( $\alpha$  模式) 和  $80 \text{ mA/cm}^2$  ( $\gamma$  模式) 时 DNN 预测的放电特性与流体模拟结果的对比. 图 5(a) 和图 5(b) 分别给出了当驱动频率为 13.56 MHz 时, 在  $\alpha$  和  $\gamma$  模式下 DNN 预测的时均电子密度、离子密度和电场的空间分布, 并与流体模拟的结果进行了比较. 图 5 中的虚线和实线分别代表 DNN 预测结果和流体模拟结果. 如图 5(a) 所示, 当 RMS 电流密度为  $30 \text{ mA/cm}^2$  时 (即放电工作在  $\alpha$  模式下), 电子和离子聚集在体等离子体区, 其密度最大值出现在放电空间的中心区域. 而在鞘层区域, 离子密度高于电子密度, 形成空间电荷区, 导致强电场区域的出现.

此外, 图 5 中 DNN 预测的电子密度、离子密度和电场的平均相对误差分别为 0.17%, 0.11% 和 0.39%,

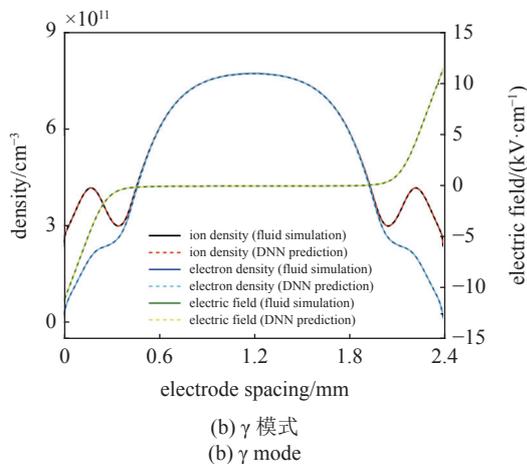
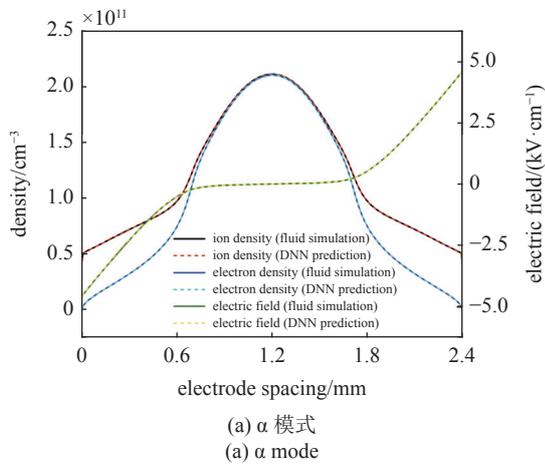


图 5 DNN 预测的  $\alpha$  和  $\gamma$  模式下的时均电子密度、离子密度和电场的空间分布与流体模拟结果的比较

Fig. 5 Spatial distributions of time-averaged electron density, ion density, and electric field in the  $\alpha$  mode and the  $\gamma$  mode predicted by DNN with comparison of the results obtained from the fluid simulation

这表明 DNN 的预测具有较好的精度. 在图 5(b) 中, 当输入电流密度为  $80 \text{ mA/cm}^2$  时, 射频放电工作在  $\gamma$  模式. 此时, 鞘层区域的电场强度较大, 大量的带电粒子在鞘层区域产生. 这说明在  $\gamma$  模式下, 电离主要由鞘层区域电子雪崩主导. 此外, 在  $\gamma$  模式下, DNN 预测的电子密度、离子密度和电场与流体模拟结果之间的相对误差分别为 0.06%, 0.03% 和 0.43%. 这意味着无论是在  $\alpha$  模式还是  $\gamma$  模式下, DNN 都能实现对于大气压射频放电中带电粒子密度和电场强度空间分布的准确预测.

同时, 图 6 给出了 RMS 电流密度分别为  $30 \text{ mA/cm}^2$  ( $\alpha$  模式) 和  $80 \text{ mA/cm}^2$  ( $\gamma$  模式) 时的 DNN 对于时均电子温度空间分布的预测, 并与相应的流体模拟结果进行了比较. 从图 6 可知, DNN 对  $\alpha$  和  $\gamma$  模式下大气压射频放电中的电子温度也具有很好的预测能力. 在  $\alpha$  和  $\gamma$  模式下, DNN 预测的电子温度的平均相对误差分别为 0.07% 和 0.05%. 与  $\alpha$  模式相比,  $\gamma$  模式下的电子温度沿电极间隙的降低更加明显. 这是因为在  $\gamma$  模式下, 电子在鞘层强电场加速, 从而在鞘层内获得较高的能量, 同时鞘层内部与边缘的碰撞频率上升, 消耗了一定的能量, 导致等离子体区的电子温度较低.

图 5 和图 6 表明, 经过训练后的 DNN 能够准确描述大气压射频放电的关键特性, 如电场分布、带电粒子密度及电子温度分布等, 预测结果与模拟结果表现出很好的一致性, 其相对误差均小于 0.5%. 更为关键的是, 与传统的数值模拟方法相比, DNN 具有极高的计算效率. 一般来说, 基于流体模型获得的训练数据, DNN 在经过大约 1 h 的训练后就可以

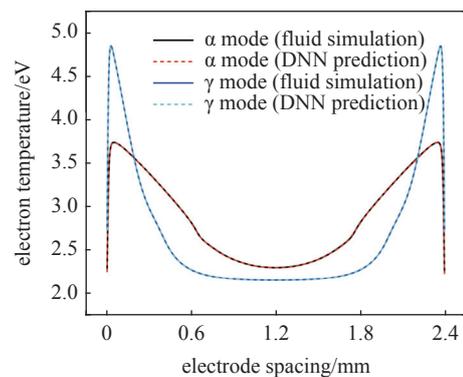


图 6 DNN 预测的  $\alpha$  和  $\gamma$  模式下的时均电子温度的空间分布与流体模拟结果的比较

Fig. 6 Spatial distributions of time-averaged electron temperature in the  $\alpha$  mode and the  $\gamma$  mode predicted by DNN with comparison of the results obtained from the fluid simulation

实现对于某一放电特征量的精准预测. 对于给定参数范围内的任一参数输入, DNN 得到某一放电特征量的真实计算时间仅为 0.01 s. 而在一维流体模型中, 基于 (improved Scharfetter-Gummel, iSG) 方法<sup>[43]</sup>, 流体模型需要运行至少 3000 个射频周期才能确保大气压射频放电达到稳态, 在给定的计算平台下 (Intel Core i7-12700 F CPU, 16 GB RAM), 这大约需要 2000 s. 与传统的流体模拟相比, 经过训练后 DNN 计算效率提高了约  $10^5$  倍. 可以说, DNN 的应用几乎实现了大气压下射频放电特性的实时预测. 此外, 经过训练后的 DNN 能够以极高的精度迅速得到给定参数范围内的任一放电参数下的大气射频放电的特性, 这将为大气压射频放电特性的研究提供足够多的数据, 有利于进一步研究大气射频等离子体的演化行为.

在经过有效性验证后, 使用该 DNN 对输入电流密度和电极间隙对大气压射频放电特性的影响进行讨论. 如图 7 所示, 经过训练后的 DNN 能够以曲面的形式在 1 s 内给出不同电极间距下的大气压射频放电的电流电压特性, 其中黑色虚线和绿色虚线分别表示不同电极间距下的大气压射频放电的击穿电压和  $\alpha$ - $\gamma$  模式转变点. 根据 DNN 的预测, 当电极间距从 1.6 mm 增加到 3.2 mm 时, 击穿电压的有效值从 148.1 V 增加到 270.5 V. 击穿电压随电极间距的增加而增加, 这与实验测量结果定性一致<sup>[15]</sup>. 在图 7 中, 等离子体的微分电导率由正变为负的点被认为是  $\alpha$ - $\gamma$  模式转变点. 当电极间距从 1.6 mm 增加到 3.2 mm 时, 模式转变点的气体电压从 448.1 V 增加到 497.6 V. 当间隙宽度较小时, 射频放电在模式转

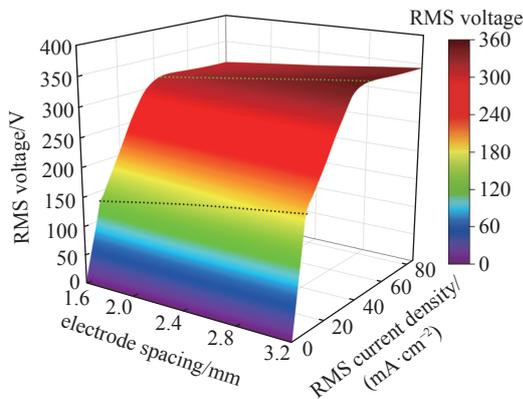


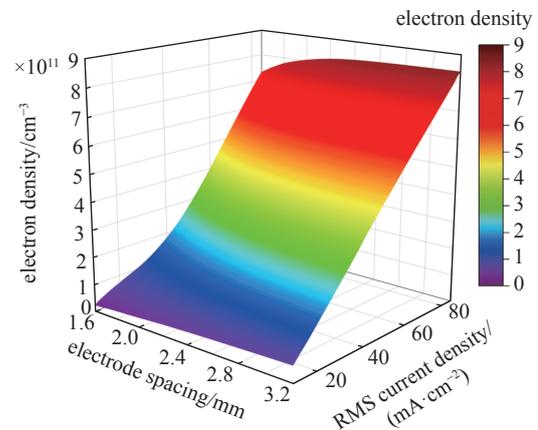
图 7 DNN 预测的不同电极间距下大气压射频放电的电流-电压特性

Fig. 7 Current-voltage characteristics of atmospheric RF discharges predicted by DNN for various electrode spacings

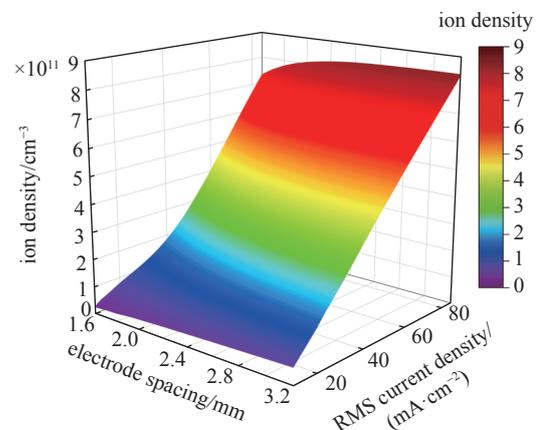
换点之前的需要的放电维持电压更低, 这意味着降低电极间距有利于提高大气压射频等离子体的稳定性.

一般说来, 基于实验数据与流体模型给出的伏安关系往往是分离的曲线, 每一条曲线上的数据点个数也是有限的<sup>[5, 31]</sup>, 而基于 DNN 的计算则可以近乎实时地给出一个伏安特性曲面, 如图 7 所示, 从而将伏安特性随放电间隙的变化更为明确地表现出来, 击穿电压与放电模式转化电压的演化规律也更加清晰. 可以说, DNN 能够实时给出任意间隙的伏安特性曲线. 即, 由于极高的计算效率, DNN 可以极大地丰富和强化计算结果, 这也是数据驱动技术应用用于低温等离子体模拟的重要优势.

如图 8(a) 和图 8(b) 所示, DNN 也可以迅速给出不同输入电流密度和电极间距下的电子和离子的最



(a) 电子密度  
(a) Electron density



(b) 离子密度  
(b) Ion density

图 8 DNN 预测的不同 RMS 电流密度和电极间距下的最大时均电子密度和离子密度

Fig. 8 The maximum time-averaged electron density and ion density predicted by DNN as a function of both the RMS current density and electrode spacing

大时均密度曲面. 基于给定的计算平台, DNN 只需不到 1 s 的时间就可以获得图 8 中的最大带电粒子密度曲面. 从图 8 中可以看到, 电子和离子的密度随输入电流密度和电极间距的增大而增大, 当 RMS 电流密度为  $85 \text{ mA/cm}^2$ 、电极间距为  $3.2 \text{ mm}$  时, 电子和离子的密度均达到最大值  $8.38 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ . 这表明在较大的输入电流密度和电极间距下大气压射频放电能够产生更多的带电粒子.

## 2.2 基于数据驱动模型研究射频微放电动理学特性

在大气压射频放电中, 增加驱动频率和减小电极间隙被认为是产生均匀的大体积等离子体的有效方法<sup>[15, 44]</sup>. 然而, 随着放电间隙减小至几百微米量级, 等离子体的空间尺度已经可以与等离子体的德拜长度相比拟, 等离子体集体效应不再显著, 同时微间隙下一般具有较强的电场, 导致等离子体呈现出明显的动理学特性<sup>[10]</sup>. 本节借助于粒子模型来讨论射频微等离子体特性, 并基于粒子模拟计算得到的结果训练 DNN 以探究驱动频率对大气压射频微放电中以 EEDF 为代表的动理学特性的影响.

在粒子模拟中, 大气压射频放电采用了平行板电极结构, 并且由正弦电压  $V(t) = V_0 \sin(2\pi ft)$  驱动, 其外加电压幅值  $V_0$  为  $300 \text{ V}$ , 电极间距固定为  $570 \mu\text{m}$ . 模型中在边界上考虑了二次电子发射过程, 为了简化计算, 固定二次电子发射系数为  $0.1$ . 在本节中, 选取 86 组驱动频率在  $55 \sim 905 \text{ MHz}$  之间的粒子模拟数据组成训练数据集.

首先通过与粒子模拟结果的对比来验证 DNN 代替粒子模型探究大气压射频微放电动理学特性的可行性. 下文中将以驱动频率为  $100 \text{ MHz}$  时的 DNN 预测结果和粒子模拟结果的对比为例说明 DNN 的有效性. 图 9 给出了 DNN 预测的大气压射频微放电的电场空间分布与粒子模型计算所得到的结果对比. 从图 9 中可以很明显地观察到, 经过良好训练的 DNN 所预测的电场空间分布与粒子模型的计算结果高度吻合, 即使是在电场的变化较为剧烈的鞘层区域中两者的相对误差也非常小. 在图 9 中, DNN 所预测的鞘层电场峰值分别为  $-15.24$  和  $15.27 \text{ kV/cm}$ , 与粒子模型计算结果的相对误差仅为  $0.05\%$ . 而从计算效率的角度出发, 粒子模型从模拟放电的开始到稳定阶段大约需要  $3.6 \times 10^5 \text{ s}$ , 而经过良好训练的 DNN 模型仅需  $0.01 \text{ s}$  左右就能以近乎相同的计算

精度得到放电空间内的电场分布, 计算效率提高了近 7 个量级.

图 10 中给出了驱动频率为  $100 \text{ MHz}$  下 DNN 预测的电子密度空间分布与粒子模型计算结果的对比. 从图 10 可以看出, DNN 对于大气压射频微放电的电子密度也具有很好的预测能力. 当驱动频率为  $100 \text{ MHz}$  时, 电子密度的空间分布呈现为一个以体等离子体区为主导的单峰分布结构, 电子大部分集中在放电空间的中心区域, 而电极两侧鞘层区域的电子密度较低. 此外, DNN 对于电子密度预测的耗时也仅为  $0.01 \text{ s}$ , 这进一步说明了 DNN 模型预测大气压射频放电等离子体特性的高效性.

图 11 中给出了 DNN 预测的驱动频率为  $100 \text{ MHz}$  时大气压射频微放电的 EEDF, 并与粒子模拟的计算结果进行比较. 从图 11 中可以观察到 DNN 预测和粒子模拟的计算结果近乎一致, 两者的相对误差仅

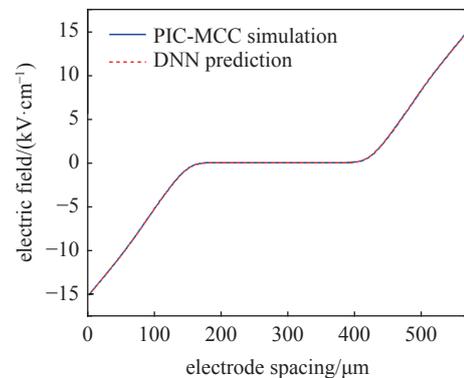


图 9 DNN 预测的大气压射频微放电中电场空间分布与粒子模拟结果的比较

Fig. 9 Spatial distribution of electric field predicted by DNN in atmospheric RF micro-discharge with comparison of the result obtained from the PIC-MCC simulation

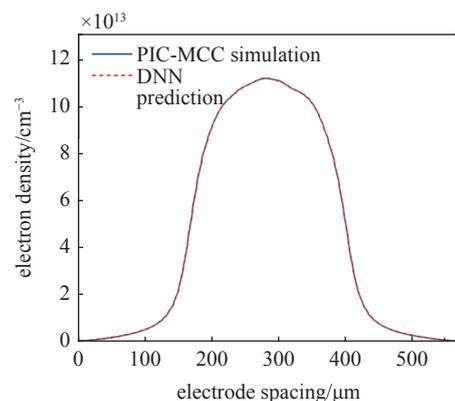


图 10 DNN 预测的电子密度空间分布与粒子模拟结果的比较

Fig. 10 Spatial distribution of electron density predicted by DNN with comparison of the result obtained from the PIC-MCC simulation

为 0.03%. 由于不同能量的电子加热过程的差异以及大气压下射频放电的非平衡特性, 此时的 EEDF 呈现一个三温度分布结构, 这种分布与低压放电中常见的 Maxwell 分布、bi-Maxwell 分布和 Druyvesteyn 分布形成对比.

在图 11 中可以观察到 3 种电子基团: 低能电子 (电子能量  $\leq 2$  eV)、中能电子 ( $2$  eV < 电子能量 <  $20$  eV) 和高能电子 ( $20$  eV  $\leq$  电子能量), 其中  $2$  eV 阈值由鞘层坍塌过程中的限制电位的最小值设定. 而中能电子与高能电子之间的  $20$  eV 的分界线则是对应于氦原子的激发阈值<sup>[45]</sup>. 此外, 在 EEDF 中高能尾部部分存在一个明显的“拐点”, 这是由于电子在非弹性碰撞范围内较快的能量弛豫所导致的结果.

以上结果表明, 经过良好训练的 DNN 模型可以快速而准确地描述大气压射频微放电的电场空间分布与电子密度空间分布, 以及 EEDF 等动力学特性. 随后, 训练好的 DNN 将用于探究大气压射频微放电的频率特性. 与传统的粒子模型相比, DNN 将计算时间从几十小时减少到了  $0.01$  s. DNN 作为一种新型的计算工具显著提高了大气压射频放电等离子体的计算效率, 可以得到更多的数据以更好地体现放电特性的演化规律.

在图 12 中, 选取 DNN 预测的 8 组不同驱动频率下的 EEDF 曲线进行定量分析. 从图 12 中可以观察到, 当驱动频率为  $100$  MHz 时, EEDF 曲线呈现一个典型的三温度分布特征, 而随着驱动频率逐渐增

加至  $800$  MHz, EEDF 曲线逐渐过渡为麦克斯韦分布. 通过对图中的 EEDF 曲线沿电子能量进行积分计算可以得到低能电子、中能电子和高能电子在每个 EEDF 曲线中的占比. 如图 12(a) 所示, 当频率为  $100$  MHz 时, 低能电子和中能电子的占比分别为  $92.83\%$  和  $7.08\%$ ; 当频率增加至图 12(d) 所示的  $400$  MHz 时, 低能电子占比降为  $80.29\%$ , 而中能电子占比升高为  $19.65\%$ ; 当频率进一步增加至图 12(h) 所示的  $800$  MHz 时, 低能电子占比下降为  $62.02\%$ , 中能电子达到了  $37.92\%$ . 在相同电压下条件下 (注意不是相同功率条件), 随着驱动频率的增加, 低能电子将被加热, 从而使放电空间内的低能电子占比降低而中能电子占比升高, 导致 EEDF 曲线的低能电子区域逐渐向中能电子区域演化.

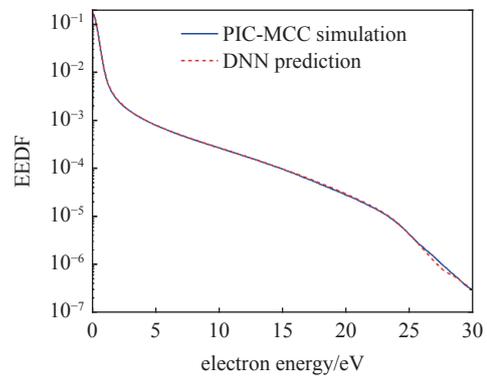


图 11 DNN 预测的 EEDF 与粒子模拟结果的比较

Fig. 11 EEDF predicted by DNN with comparison of the result obtained from the PIC-MCC simulation

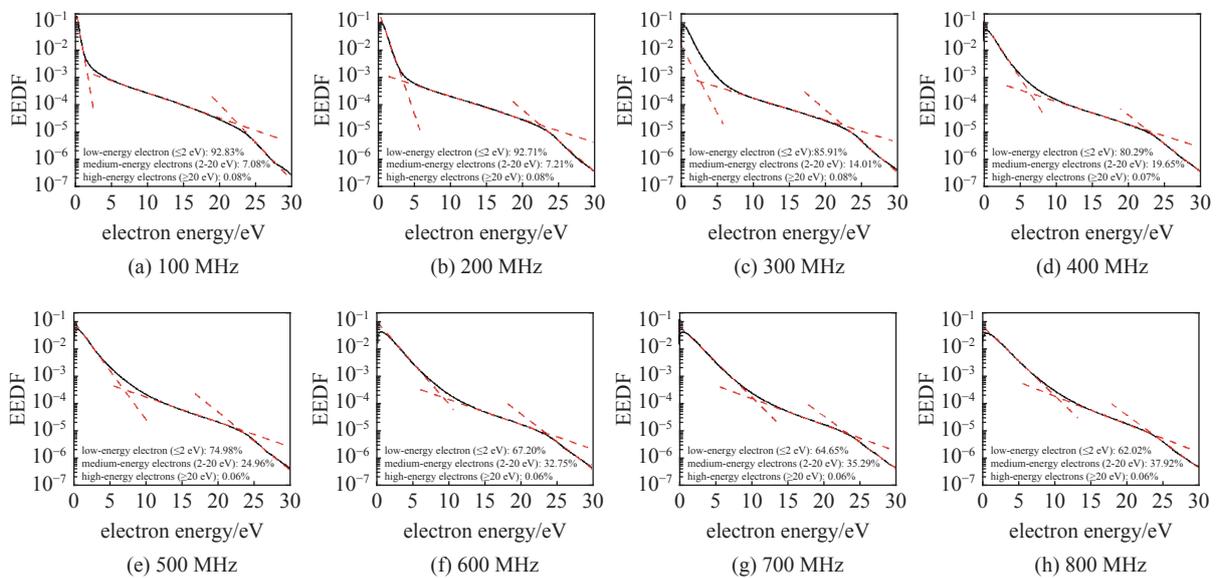


图 12 DNN 预测不同驱动频率下的 EEDF 曲线

Fig. 12 EEDF predicted by DNNs with various driving frequencies

在大气压射频微放电中,低能电子在整个射频循环周期内被双极电势捕获并被体等离子体区中较弱的电场加热.而中能电子主要由鞘层中二次电子的雪崩效应所产生,除了在射频周期中发生能量弛豫而逐渐失去能量外,在鞘层坍塌时中能电子也会进入电极而消失,因此中能电子并不会存在于整个射频周期内.另外,鞘层内部分来自介质表面的二次电子能够在鞘层区域获得很大的能量,形成高能电子,这些构成了 EEDF 曲线中的高能尾部;但由于大气压射频放电的高碰撞性,这些高能电子突破鞘层进入体等离子体区后缺少足够强的电场对其进行持续的加热,最终也会在几十皮秒内发生弛豫而最终失去能量.由于电子的能量弛豫时间明显地短于射频周期,因此 EEDF 曲线在大气压射频放电中很容易受到频率的影响.综上所述,在大气压射频微放电中随着驱动频率的增加,低能电子将逐渐转化为中能电子,而 EEDF 曲线也将由三温度分布向 Maxwell 分布而过渡.因此,借助于 DNN 可以深入细致地揭示大气压射频微等离子体的动理学特性.

进一步,基于 DNN 极高的计算效率,图 13 给出了 DNN 预测的大气压射频微放电中驱动频率变化时的 EEDF 演化曲面图. DNN 只需要 1 s 左右的时间就能获得图 13 所示的 EEDF 三维图,清晰地给出 EEDF 随驱动频率的连续变化.从图 13 中可以观察到,随着驱动频率的增加,低能电子部分呈现一个较为明显的下降趋势.在频率较低时, EEDF 曲线为一个明显的三温度分布.随着频率的增加, EEDF 曲线变得更加平滑,由三温度分布逐渐地向 Maxwell 分布过渡.而若要从粒子模拟中获得同样的大量数据,

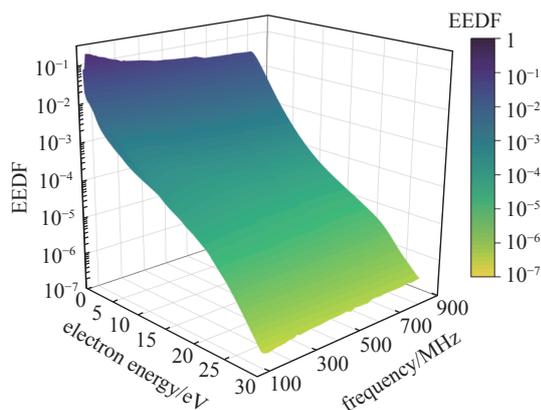


图 13 DNN 预测的大气压射频微放电中 EEDF 的频率演化趋势

Fig. 13 EEDF predicted by DNN in atmospheric RF micro-discharge with various driving frequencies

则至少需要几百小时的计算时间.这再次说明,基于 DNN 的计算可以快速给出海量数据以强化展示模拟效果.

### 3 结论与展望

本研究以 DNN 在大气压射频放电等离子体中的计算为例,讨论了数据驱动方法在低温等离子体模拟中的应用.在这项研究中,将流体模拟和粒子模拟获得的计算数据作为 DNN 的训练数据.通过将预测结果与数值模拟结果进行比较,验证了 DNN 预测大气压射频放电特性的可行性.对于 DNN 自身结构的构建而言,需要综合考虑预测精度、训练时间及训练集数据量等因素.本研究中,在通常的计算工作站上经过大约 1 h 的训练后, DNN 只需要约 0.01 s 即可获得大气压下射频放电的特定物理信息,比如电子密度、电场强度和电子温度等.可以说,随着放电参数的输入, DNN 几乎可以实时地输出放电特征量.而流体模拟和粒子模拟分别需要大约半个小时和几十个小时才能获得一组稳定的模拟结果.在与传统的数值模拟相同的计算精度下(相对误差小于 0.5%),经过训练后 DNN 的预测效率较传统数值模拟方法的计算效率提高了约  $10^5 \sim 10^7$  倍,当然这里并不包括训练 DNN 所需的时间.这意味数据驱动的计算模型可以近乎实时地给出低温等离子体的物理信息,这对于在大气压下一一些需要实时监测与调控的等离子体应用具有重要的价值,特别是与智能化相关的应用中会起到关键性的作用.此外,经过训练后的 DNN 可以迅速地获得给定范围内任一放电参数下的大气压射频放电特性,这意味着 DNN 能够在有限的训练数据的基础上,给出大量的计算数据,从而可以极大地强化数值模拟效果.比如图 7 给出的伏安特性曲面与图 13 给出的 EEDF 曲面.

简单地说,以流体模拟与粒子模拟为代表的传统低温等离子体物理模拟方法虽然受限于计算效率,但是可以一次性给出放电等离子体的全部物理信息,甚至如粒子模拟可以精确地给出放电等离子体的动理学特性,是揭示等离子体物理特性的根本方法.以 DNN 为代表的驱动方法,虽然可以大幅提高计算效率,乃至可以做到“实时”给出放电等离子体的物理信息,但是一般只能给出特定的单一物理信息,比如对于预测电子密度的 DNN,由于只通过训练获得了电子密度数据信息,也就只能预测

电子密度的信息, 而对电场强度、电子温度等信息则需要训练其他 DNN 给出。

从另一个角度来看, 本文讨论的 DNN 数据驱动模型, 虽然有极高的计算效率, 能够给出海量的反映等离子体性质的计算数据, 但是训练数据本身来源于粒子模型或流体模型, 这意味着 DNN 给出的数据信息一般不会超出现有粒子模型与流体模型所能给出的物理现象, 即现有的 DNN 模型可能不具备发现新物理规律的能力。然而, 随着人工智能技术的进一步发展, 新的神经网络技术, 比如 PINNs<sup>[36]</sup>, DeepONet<sup>[37]</sup>, FNO<sup>[38]</sup> 等将有可能进一步提升与优化现有的粒子模型与流体模型的实现方式, 比如借助于神经网络逼近而不是传统的离散化方法来实现粒子模拟与流体模拟, 这可能会极大地提高计算效率, 并平滑推进高维模拟, 大幅优化模拟结果, 进而推动发现新的等离子体物理规律。

可以说, 以 DNN 为代表的驱动技术为低温等离子体的计算带来了一种全新的且极具发展前景的工具。可以预见, 在未来的研究中, 粒子模型与流体模型将继续在揭示等离子体物理性质方面发挥重要作用, 先进的数据驱动技术也会有效弥补现有流体模型和粒子模型在数值实现方式上的不足, 为发现新的等离子体物理规律提供可能。另一方面, 在许多需要实时检测与反馈的等离子体应用中, 尤其是以智能化为特色的放电等离子体应用中, 数据驱动技术将成为不可或缺的工具。

本研究中的 Python 程序及训练数据集已开源: <https://github.com/SDU-HV-Plasma/DNN2RF.git>。

## 参 考 文 献

- 林烈, 吴承康. 大气压非平衡等离子体中非平衡度的探讨. 核聚变与等离子体物理, 1998, 18(2): 57-60 (Lin Lie, Wu Chengkang. Study of degree of nonequilibrium in plasma at atmospheric pressure. *Nuclear Fusion and Plasma Physics*, 1998, 18(2): 57-60 (in Chinese))
- Massines F, Rabehi A, Decomps P, et al. Experimental and theoretical study of a glow discharge at atmospheric pressure controlled by dielectric barrier. *Journal of Applied Physics*, 1998, 83(6): 2950-2957
- Zhang YT, Wang DZ, Kong MG. Complex dynamic behaviors of nonequilibrium atmospheric dielectric-barrier discharges. *Journal of Applied Physics*, 2006, 100(6): 063304
- Bruggeman PJ, Iza F, Brandenburg R. Foundations of atmospheric pressure non-equilibrium plasmas. *Plasma Sources Science and Technology*, 2017, 26(12): 123002
- Park J, Henins I, Herrmann HW, et al. Gas breakdown in an atmospheric pressure radio-frequency capacitive plasma source. *Journal of Applied Physics*, 2001, 89(1): 15-19
- Wang XL, Gao SH, Zhang YT. Numerical study on optimization of atmospheric pulse-modulated radio frequency discharges in the very high frequency range. *Physics of Plasmas*, 2021, 28(7): 073511
- 高书涵, 王绪成, 张远涛. 脉冲调制条件下介质阻挡高频放电特性的数值模拟. 物理学报, 2020, 69(11): 242-251 (Gao Shuhan, Wang Xucheng, Zhang Yuantao. Numerical study on discharge characteristics in ultra-high frequency band modulated by pulses with electrodes covered by barriers. *Acta Physica Sinica*, 2020, 69(11): 242-251 (in Chinese))
- Zhao K, Wen DQ, Liu YX, et al. Observation of nonlinear standing waves excited by plasma-series-resonance-enhanced harmonics in capacitive discharges. *Physical Review Letters*, 2019, 122(18): 185002
- 吴承康. 我国等离子体工艺研究进展. 物理, 1999, 28(7): 8-13 (Wu Chengkang. Plasma processing research in China. *Physics*, 1999, 28(7): 8-13 (in Chinese))
- Iza F, Kim GJ, Lee SM, et al. Microplasmas: Sources, particle kinetics, and biomedical applications. *Plasma Processes and Polymers*, 2008, 5(4): 322-344
- Shi JJ, Kong MG. Mechanisms of the  $\alpha$  and  $\gamma$  modes in radio-frequency atmospheric glow discharges. *Journal of Applied Physics*, 2005, 97(2): 023306
- Yang X, Moravej M, Nowling GR, et al. Comparison of an atmospheric pressure, radio-frequency discharge operating in the  $\alpha$  and  $\gamma$  modes. *Plasma Sources Science and Technology*, 2005, 14(2): 314
- Moon SY, Rhee JK, Kim DB, et al.  $\alpha$ ,  $\gamma$ , and normal, abnormal glow discharge modes in radio-frequency capacitively coupled discharges at atmospheric pressure. *Physics of Plasmas*, 2006, 13(3): 033502
- Zhang YT, Cui SY. Frequency effects on the electron density and  $\alpha$ - $\gamma$  mode transition in atmospheric radio frequency discharges. *Physics of Plasmas*, 2011, 18(8): 083509
- Walsh JL, Zhang YT, Iza F, et al. Atmospheric-pressure gas breakdown from 2 to 100 MHz. *Applied Physics Letters*, 2008, 93(22): 221505
- Gao SH, Cheng RG, Zhang YT. Numerical study on operation optimization of atmospheric radio-frequency glow discharges modulated by pulses. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2022, 50(3): 609-618
- He J, Hu J, Liu D, et al. Experimental and numerical study on the optimization of pulse-modulated radio-frequency discharges. *Plasma Sources Science and Technology*, 2013, 22(3): 035008
- Lee SH, Iza F, Lee JK. Particle-in-cell Monte Carlo and fluid simulations of argon-oxygen plasma: comparisons with experiments and validations. *Physics of Plasmas*, 2006, 13(5): 057102
- Hong YJ, Yoon M, Iza F, et al. Comparison of fluid and particle-in-cell simulations on atmospheric pressure helium microdischarges. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2008, 41(24): 245208
- Alves EP, Fiuza F. Data-driven discovery of reduced plasma physics models from fully kinetic simulations. *Physical Review Research*, 2022, 4(3): 033192
- Tole KM, Tansley DSW, Hey AJG. The fourth paradigm: Data-intensive scientific discovery. *Proceedings of the IEEE*, 2011, 99(8): 1334-1337
- 查文舒, 李道伦, 沈路航等. 基于神经网络的偏微分方程求解方法研究综述. 力学学报, 2022, 54(3): 543-556 (Zha Wenshu, Li

- Daolun, Shen Luhang, et al. Review of neural network-based methods for solving partial. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2022, 54(3): 543-556 (in Chinese))
- 23 Kanta AF, Montavon G, Planche MP, et al. Plasma spray process on-line control by artificial intelligence methodology. *Advanced Engineering Materials*, 2007, 9(1-2): 105-113
- 24 毋振华, 王者超, 郭玫志等. 平面交叉裂隙非线性渗流模型参数人工神经网络预测. *工程地质学报*, 2020, 28(5): 982-988 (Wu Zhenhua, Wang Zhechao, Guo Wenzhi, et al. Artificial neural network prediction of parameters of non-linear seepage model with planar intersecting fractures. *Journal of Engineering Geology*, 2020, 28(5): 982-988 (in Chinese))
- 25 吴磊, 肖左利. 基于人工神经网络的亚格子应力建模. *力学学报*, 2021, 53(10): 2667-2681 (Wu Lei, Xiao Zuoli. Subgrid-scale stress modeling based on artificial neural network. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, 53(10): 2667-2681 (in Chinese))
- 26 Qin H. Machine learning and serving of discrete field theories. *Scientific Reports*, 2020, 10(1): 19329
- 27 艾飞, 刘志兵, 张远涛. 结合机器学习的大气压介质阻挡放电数值模拟研究. *物理学报*, 2022, 71(24): 293-303 (Ai Fei, Liu Zhibing, Zhang Yuantao. Numerical study of discharge characteristics of atmospheric dielectric barrier discharges by integrating machine learning. *Acta Physica Sinica*, 2022, 71(24): 293-303 (in Chinese))
- 28 Pan J, Liu Y, Zhang S, et al. Deep learning-assisted pulsed discharge plasma catalysis modeling. *Energy Conversion and Management*, 2023, 277: 116620
- 29 Nazari RR, Hajizadeh K. Modeling the performance of cold plasma in CO<sub>2</sub> splitting using artificial neural networks. *AIP Advances*, 2022, 12(8): 085018
- 30 Wang XC, Bai JX, Zhang TH, et al. Comprehensive study on plasma chemistry and products in CO<sub>2</sub> pulsed discharges under Martian pressure. *Vacuum*, 2022, 203: 111200
- 31 Yuan X, Raja LL. Computational study of capacitively coupled high-pressure glow discharges in helium. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2003, 31(4): 495-503
- 32 Vass M, Palla P, Hartmann P. Revisiting the numerical stability/accuracy conditions of explicit PIC/MCC simulations of low-temperature gas discharges. *Plasma Sources Science and Technology*, 2022, 31(6): 064001
- 33 Turner MM. Kinetic properties of particle-in-cell simulations compromised by Monte Carlo collisions. *Physics of Plasmas*, 2006, 13(3): 033506
- 34 Verboncoeur JP. Particle simulation of plasmas: review and advances. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 2005, 47(5A): A231
- 35 Jagtap AD, Kawaguchi K, Karniadakis GE. Adaptive activation functions accelerate convergence in deep and physics-informed neural networks. *Journal of Computational Physics*, 2020, 404: 109136
- 36 Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis GE. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 2019, 378: 686-707
- 37 Lu L, Jin P, Pang G, et al. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. *Nature Machine Intelligence*, 2021, 3(3): 218-229
- 38 Kovachki N, Lanthaler S, Mishra S. On universal approximation and error bounds for Fourier neural operators. *The Journal of Machine Learning Research*, 2021, 22(1): 13237-13312
- 39 von Woedtke T, Emmert S, Metelmann HR, et al. Perspectives on cold atmospheric plasma (CAP) applications in medicine. *Physics of Plasmas*, 2020, 27(7): 070601
- 40 曹冲, 程林松, 张向阳等. 基于多变量小样本的渗流代理模型及产量预测方法. *力学学报*, 2021, 53(8): 2345-2354 (Cao Chong, Cheng Linsong, Zhang Xiangyang, et al. Seepage proxy model and production forecast method based on multivariate and small sample. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, 53(8): 2345-2354 (in Chinese))
- 41 李建宇, 杨坤, 王博等. 小样本数据下圆柱薄壳初始缺陷不确定性量化的极大熵方法. *力学学报*, 2023, 55(4): 1028-1038 (Li Jianyu, Yang Kun, Wang Bo, et al. A maximum entropy approach for uncertainty quantification of initial geometric imperfections of thin-walled cylindrical shells with limited data. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2023, 55(4): 1028-1038 (in Chinese))
- 42 Shang W, Wang D, Zhang Y. Radio frequency atmospheric pressure glow discharge in  $\alpha$  and  $\gamma$  modes between two coaxial electrodes. *Physics of Plasmas*, 2008, 15(9): 093503
- 43 Kulikovskiy AA. A more accurate Scharfetter-Gummel algorithm of electron transport for semiconductor and gas discharge simulation. *Journal of Computational Physics*, 1995, 119(1): 149-155
- 44 Zhang YT, Lou J, Li Q, et al. Electrode-gap effects on the electron density and electron temperature in atmospheric radio-frequency discharges. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2013, 41(3): 414-420
- 45 Liu ZB, Wang XC, Zhang YT. Numerical study on kinetic effects of driving frequency in atmospheric radio frequency discharges using deep neural network. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2023, 51(5): 1212