

基于源项解耦的物理信息神经网络方法 及其在放电等离子体模拟中的应用*

方泽 潘泳全 戴栋[†] 张俊勃

(华南理工大学电力学院, 广州 510641)

(2024年3月10日收到; 2024年5月14日收到修改稿)

近年来,以物理信息神经网络(PINNs)为代表的人工智能计算范式在等离子体数值模拟领域获得了极大关注,但相关研究考虑的等离子体化学体系较为简化,且基于PINNs求解更为复杂的多粒子低温等离子体流体模型的研究还尚处空白.本文提出了一个通用的PINNs框架(源项解耦PINNs, Std-PINNs),用于求解多粒子低温等离子体流体模型. Std-PINNs通过引入等效正离子,并将电流连续性方程替代各粒子输运方程作为物理约束,实现了重粒子输运方程源项与电子密度、平均电子能量的解耦,极大降低了训练复杂度.本文通过两个经典放电案例(低气压氩气辉光放电、大气压氩气辉光放电)展示了Std-PINNs在求解多粒子低温等离子体流体模型的应用,并将结果与传统PINNs和有限元(FEM)模型进行了对比.结果显示,传统PINNs输出了完全错误的训练结果,而Std-PINNs与FEM结果之间的 L_2 相对误差能达到约 10^{-2} 量级,由此验证了Std-PINNs在模拟多粒子等离子体流体模型的可行性. Std-PINNs为低温等离子体模拟提供了新的思路,并拓展了深度学习方法在复杂物理系统建模中的应用.

关键词: 物理信息神经网络, 低温等离子体, 源项解耦, 流体模型

PACS: 52.25.Dg, 02.60.Cb, 02.30.Jr

DOI: 10.7498/aps.73.20240343

1 引言

等离子体是一种准电中性物质,由等量非束缚电荷与大量中性粒子组成.其中低温等离子体凭借其高能电子与高浓度活性粒子的特性,在能源转化^[1]、生物医疗^[2]、材料合成^[3]等领域具有广阔的应用前景.在过去的几十年里,针对等离子体的实验诊断方法和数值模拟模型已取得长足进展^[4-8],然而,由于等离子体系统中的时空多尺度特性^[9-12]以及在极端操作条件下实验测量工具的局限性^[13],仅靠实验诊断难以捕捉到等离子体精细的暂态演化过程,数值模拟已逐渐成为研究等离子体微观及演化特性不可或缺的研究手段.

流体模型是一组描述低温等离子体特性的偏微分方程^[4],由 Boltzmann 方程级数展开推导而来.等离子体流体模型的传统数值解法包括有限元法(FEM)^[14]、有限体积法(FVM)^[15].为了解析等离子体放电的时空演化过程,FEM,FVM通常需要在计算域内进行精细的网格剖分,这将不可避免地带来高昂的计算成本.此外,为了能够更准确地模拟气体放电现象,研究中常需考虑多个碰撞反应和粒子种类,以建立高保真度的化学动力学模型^[16-19],这将导致传统数值方法所需的计算资源进一步增加.同时,由于各状态变量通过输运方程的源项强耦合,即使可以承受巨大的计算代价,也往往难以获得稳定的收敛解.因此,等离子体流体模型的传统求解方法受到反应体系复杂度的严重限制.

* 国家自然科学基金(批准号:52377145)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: ddai@scut.edu.cn

近年来,随着人工智能(AI)和计算机技术的快速发展,以物理信息神经网络(PINNs)^[20]为代表的AI计算范式在求解偏微分方程领域脱颖而出. PINNs将偏微分方程描述的物理规律嵌入到损失函数中,学习方程自变量与状态变量之间的非线性映射关系.这一方法巧妙地将偏微分方程求解问题转化为优化问题.与FEM和FVM相比,PINNs无需进行网格剖分和方程的空间离散化,在处理复杂计算域时展现出较高的适应性,并且避免了由离散化格式引起的数值误差.此外,PINNs的另一显著优势是能够通过融合少量观测数据显著降低物理问题的复杂度,解决传统计算方法难以或无法求解的问题.如Raissi等^[21]开发的HFM-PINNs方法,此方法通过将Navier-Stokes方程的物理规律嵌入神经网络,并结合少量的浓度标签数据,能够在边界条件未知及区域边界复杂的情况下,定量还原压力场和流场. PINNs自提出以来,已广泛应用于流体力学^[21-23]、化学动力学^[24]与热力学^[25,26]等领域的偏微分方程求解.

在等离子体AI数值模拟领域,Mathews等^[27]将湍流等离子体控制方程嵌入神经网络中,同时考虑有限的电子密度与电子温度观测数据约束,实现了湍流场的准确预测;Zhong等^[28,29]提出了子网PINN(CS-PINN)和龙格库塔-PINN(RK-PINN)框架,开创性地利用深度学习方法实现了电弧等离子体控制方程的正向求解^[28]和电晕等离子体^[29]的大时间步长准确预测.然而,在Zhong等^[29]对低温等离子体流体模型正向求解的工作中,仅考虑了较为简化的双粒子体系,并未涉及更为复杂的多粒子等离子体化学体系,而这恰恰是在真实还原等离子体物理景象时所需要考虑的^[11,30,31].并且当化学体系更为复杂时,各状态变量之间的耦合程度将更为紧密,使得神经网络对任一变量的拟合误差都会影响到其余变量的训练过程,这为PINNs在求解多粒子低温等离子体流体模型的适用性带来了新的挑战.

本文提出了一种源项解耦物理信息神经网络方法(Std-PINNs),用于数值模拟多粒子低温等离子体流体模型控制的放电现象.此方法通过引入等效正离子与等效正离子通量,并使用等效正离子表示的电流连续性方程替代各粒子输运方程作为物理约束,同时结合少量的观测数据,实现了各重粒子输运方程源项与电子密度、平均电子能量的解

耦,极大地降低了PINNs求解多粒子低温等离子体流体模型的复杂度.本文的结构如下:第2节对PINNs方法进行了简单介绍,并引入了基于神经正切核的动态权重策略;在第3节中,对等离子体模型的几何结构与控制方程进行了描述;在第4节中,针对等离子体流体系统各状态变量通过反应源项强耦合的特点,我们提出了Std-PINNs方法;在第5节中,首先以低气压氩气辉光放电为例,通过比较传统PINNs与Std-PINNs的求解结果,评估了Std-PINNs的性能,并初步分析了传统PINNs训练失败的原因,其次以反应体系更为复杂的大气压氩气辉光放电为例,展示了Std-PINNs求解多粒子等离子体流体方程的可泛化能力.

2 深度学习方法

2.1 PINNs方法

下面简单介绍PINNs的工作原理,以定常偏微分方程为例:

$$N_x[u] = f(x), \quad x \in \Omega, \quad (1)$$

$$B[u] = g(x), \quad x \in \partial\Omega, \quad (2)$$

其中 N 为关于 $u(x)$ 的非线性或线性偏微分算子, Ω 为求解空间域, $\partial\Omega$ 为求解空间域的边界, B 为方程的边界条件.

神经网络建立了从输入到输出的映射,在数学上表示为

$$f(x, \theta)_L = W_L(\cdots \sigma(W_1 \sigma(W_0 x + b_0) + b_1)) + b_L, \quad (3)$$

其中 x 代表输入向量, $f(x, \theta)_L$ 代表神经网络拟合的输出, $\theta = \{W_i, b_i\}_{i=0}^L$ 代表神经网络权重和偏置向量,通常采用Xavier方法^[32]对其进行初始化; σ 代表神经网络的激活函数,常用的激活函数有tanh函数、sigmoid函数、relu函数等.

控制方程通过以下残差形式嵌入神经网络中:

$$r_\theta(x) = N_x[f(x, \theta)_L] - f(x). \quad (4)$$

同时考虑NN拟合的输出需满足边界条件及标签数据:

$$f(x, \theta)_L(x) = g(x), \quad (5)$$

$$f(x, \theta)_L(x) = u_{\text{lab}}. \quad (6)$$

我们构造损失函数:

$$L(x, \theta) = \lambda_f L_f(x, \theta) + \lambda_b L_b(x, \theta) + \lambda_l L_{lab}(x, \theta), \quad (7)$$

其中

$$L_f(x, \theta) = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} |r_\theta(x_f^i)|^2, \quad (8)$$

$$L_b(x, \theta) = \frac{1}{N_b} \sum_{i=1}^{N_b} |f(x, \theta)_L(x_b^i) - g(x_b^i)|^2, \quad (9)$$

$$L_{lab}(x, \theta) = \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^{N_0} |f(x, \theta)_L(x_0^i) - u(x_0^i)|^2, \quad (10)$$

式中, λ_f , λ_b 和 λ_l 分别代表方程损失函数 $L_f(x, \theta)$ 、边界损失函数 $L_b(x, \theta)$ 以及标签数据损失函数 $L_{lab}(x, \theta)$ 的权重系数. N_f , N_b 和 N_0 分别代表方程残差训练集 $\{x_f^i, f(x_f^i)\}_{i=1}^{N_f}$ 、边界条件训练集 $\{x_b^i, g(x_b^i)\}_{i=1}^{N_b}$ 以及标签数据训练集 $\{x_0^i, u(x_0^i)\}_{i=1}^{N_0}$ 的配置点个数.

最后, 我们需要通过最小化损失函数 $L(x, \theta)$ 来获得一组神经网络的最优权重 θ , 常用的优化算法有 L-BFGS-B^[33] 和 Adam^[34].

2.2 基于神经正切核的动态权重策略

为平衡各损失函数的收敛速度, Wang 等^[35] 基于神经正切核 (NTK) 提出了一种自适应训练策略来提高 PINNs 的泛化能力, 即不同损失函数权重系数由不同损失项的 NTK 矩阵特征值自适应调整.

当使用无限小的学习率的梯度下降来优化 (7) 式时, 有连续梯度流系统:

$$\frac{d\theta}{dt} = -\nabla L(\theta). \quad (11)$$

设 $\mathbf{J}_f(t)$, $\mathbf{J}_b(t)$ 与 $\mathbf{J}_{lab}(t)$ 分别为 $L_f(x, \theta(t))$, $L_b(x, \theta(t))$ 以及 $L_{lab}(x, \theta(t))$ 相对于神经网络参数 θ 的雅可比矩阵, 并引入特征矩阵:

$$\mathbf{K}_f(t) = \mathbf{J}_f(t) \mathbf{J}_f(t)^\top, \quad (12)$$

$$\mathbf{K}_b(t) = \mathbf{J}_b(t) \mathbf{J}_b(t)^\top, \quad (13)$$

$$\mathbf{K}_{lab}(t) = \mathbf{J}_{lab}(t) \mathbf{J}_{lab}(t)^\top, \quad (14)$$

$$\mathbf{K}(t) = \begin{pmatrix} \mathbf{J}_f(t) \\ \mathbf{J}_b(t) \\ \mathbf{J}_{lab}(t) \end{pmatrix} \left(\mathbf{J}_f(t)^\top \mathbf{J}_b(t)^\top \mathbf{J}_{lab}(t)^\top \right). \quad (15)$$

则基于 NTK 的动态权重策略的定义如下.

1) 计算参数 $\hat{\lambda}_f$, $\hat{\lambda}_b$ 和 $\hat{\lambda}_l$:

$$\hat{\lambda}_f = \frac{\sum_{i=1}^{N_f+N_b+N_0} \lambda_i(n)}{\sum_{i=1}^{N_f} \lambda_i^f(n)} = \frac{\text{Tr}(\mathbf{K}(n))}{\text{Tr}(\mathbf{K}_f(n))}, \quad (16)$$

$$\hat{\lambda}_b = \frac{\sum_{i=1}^{N_f+N_b+N_0} \lambda_i(n)}{\sum_{i=1}^{N_b} \lambda_i^b(n)} = \frac{\text{Tr}(\mathbf{K}(n))}{\text{Tr}(\mathbf{K}_b(n))}, \quad (17)$$

$$\hat{\lambda}_l = \frac{\sum_{i=1}^{N_f+N_b+N_0} \lambda_i(n)}{\sum_{i=1}^{N_0} \lambda_i^{lab}(n)} = \frac{\text{Tr}(\mathbf{K}(n))}{\text{Tr}(\mathbf{K}_{lab}(n))}, \quad (18)$$

其中 $\lambda_i(n)$, $\lambda_i^f(n)$, $\lambda_i^b(n)$, $\lambda_i^{lab}(n)$ 分别为在第 n 次迭代时矩阵 $\mathbf{K}(n)$, $\mathbf{K}_f(n)$, $\mathbf{K}_b(n)$, $\mathbf{K}_{lab}(n)$ 的特征值.

2) 根据第 k 步迭代的 λ^k 与上一步计算的 $\hat{\lambda}$ 更新第 $k+1$ 步迭代时的 $\lambda^{(k+1)}$:

$$\lambda_f^{(k+1)} = (1 - \mu) \lambda_f^{(k)} + \mu \hat{\lambda}_f, \quad (19)$$

$$\lambda_b^{(k+1)} = (1 - \mu) \lambda_b^{(k)} + \mu \hat{\lambda}_b, \quad (20)$$

$$\lambda_l^{(k+1)} = (1 - \mu) \lambda_l^{(k)} + \mu \hat{\lambda}_l, \quad (21)$$

其中平滑系数 $\mu = 0.9$.

3 等离子体流体模型描述

下文以一维直流稳态辉光放电模型为示例来展示基于深度学习的多粒子低温等离子体流体模型求解.

图 1 为一维辉光放电模型的几何结构, 其中 d_g 为放电间隙, 计算域为 $[0, x_0]$, R_0 为镇流电阻, V_0 为外施直流电压.

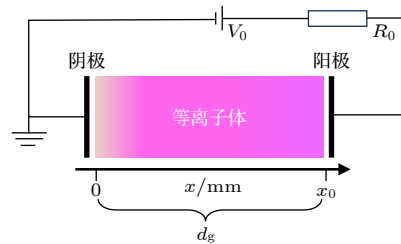


图 1 一维辉光放电模型的几何结构

Fig. 1. The geometry of the one-dimensional glow discharge model.

控制方程由描述电子能量密度、电子密度和离子密度的漂移扩散输运方程与描述电场的泊松方程强耦合组成^[36]. 对于稳态问题, 忽略暂态项时, 可得:

$$\nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_e = R_e, \quad (22)$$

$$\mathbf{\Gamma}_e = -\mu_e \mathbf{E} n_e - D_e \nabla n_e, \quad (23)$$

$$\nabla \cdot (-\mu_e \mathbf{E} n_e - D_e \nabla n_e) = R_e, \quad (24)$$

$$\nabla \cdot (z_q^k \mu_q^k \mathbf{E} n_q^k - D_q^k \nabla n_q^k) = R_q^k, \quad k \in (1, 2, \dots, Q-1), \quad (25)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = -\nabla \cdot \nabla \phi = \frac{\rho_v}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}, \quad (26)$$

式中, \mathbf{E} 和 ϕ 分别表示电场与电势, ε_0 与 ε_r 分别代表真空介电常数以及放电气体的相对介电常数; n_e 表示电子密度, n_e 表示电子能量密度, ρ_v 表示空间净电荷密度; n_q^k 表示第 k 个重粒子的密度, 下标 q 代表重粒子种类 ($q = s$ 时表示激发态粒子, $q = p$ 时表示正离子), z_q^k 表示第 k 个重粒子带电量, Q 表示重粒子总个数; μ_e , μ_q^k , μ_e 分别表示电子迁移率、重粒子迁移率以及电子能迁移率, D_e , D_q^k , D_e 分别表示电子扩散系数、第 k 个重粒子的扩散系数以及电子能扩散系数, 且有爱因斯坦关系^[37]:

$$D_e = \mu_e T_e, \quad D_q^k = \mu_q^k \frac{k_B T_q^k}{e}, \quad D_e = \frac{5}{3} \mu_e T_e, \quad (27)$$

式中, T_e 表示电子温度 (单位 V), k_B 为玻尔兹曼常数, T_q^k 表示第 k 个重粒子的温度 (单位 K), 且 T_e 与平均电子能 $\bar{\varepsilon}$ 有以下关系:

$$T_e = \frac{2}{3} \bar{\varepsilon} = \frac{n_e}{n_e}. \quad (28)$$

对于双体反应和三体反应, 粒子输运方程的源项分别为

$$R_n = \sum_j K_j r_j n_{1,j} n_{2,j}, \quad (29)$$

$$R_n = \sum_j K_j r_j n_{1,j} n_{2,j} n_{3,j}, \quad (30)$$

式中, K_j 为第 j 个反应贡献的目标粒子 (电子或重粒子 k) 净增量, $n_{1,j}$, $n_{2,j}$, $n_{3,j}$ 为参与第 j 个碰撞过程的反应粒子数密度, r_j 为第 j 个碰撞反应的反应速率系数, 其中部分反应速率系数由 Bolsig+^[38] 通过碰撞截面计算得到, 并表示为平均电子能 $\bar{\varepsilon}$ 的函数, 其余反应速率系数从相应文献 [4, 39—41] 中获得.

电子能量密度方程的源项为

$$R_e = -n_e \sum_{j=1} r_j n_j \Delta \varepsilon_j - \mathbf{E} \cdot \mathbf{\Gamma}_e - H_{en}, \quad (31)$$

$$H_{en} = r_{en} n_e n_g \frac{2m_e}{m_g} \left(\bar{\varepsilon} - 1.5 \frac{k_B T_g}{e} \right), \quad (32)$$

式中, $\Delta \varepsilon_j$ 表示第 j 个电子碰撞反应导致的能量损失, 数量积 $\mathbf{E} \cdot \mathbf{\Gamma}_e$ 表征焦耳热对电子能变化的贡献, H_{en} 表示由弹性碰撞导致的电子能量损失, m_g 表示背景气体原子或分子质量, r_{en} 表示弹性碰撞反应速率系数, m_e 表示电子质量, n_g 表示背景气体数密度, T_g 表示背景气体温度 (单位 K).

边界条件设置: 阳极 ($x = 0$) 经 R_0 镇流电阻接到直流电压 V_0 , 阴极 ($x = x_0$) 接地; 当正离子撞击阴极的表面时, 会产生二次电子发射现象, 同时考虑迁移效应与电子热运动效应, 阴极与阳极上电子与电子能通量的边界条件可表示为^[42]

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Gamma}_e = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8eT_e}{\pi m_e}} n_e - \alpha_s n_e \mu_e \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} - \sum \gamma_p (\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Gamma}_p), \quad (33)$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Gamma}_e = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8eT_e}{\pi m_e}} n_e - \alpha_s n_e \mu_e \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} - \sum \gamma_p \bar{\varepsilon}_p (\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Gamma}_p), \quad (34)$$

式中, \mathbf{n} 为单位外法向量, m_e 为电子质量, γ_p 为二次电子发射系数; $\bar{\varepsilon}_p$ 为二次发射电子能, 本研究案例中均设置为 2.5 eV; α_s 为开关函数, 代表粒子是否在电场作用下向电极迁移, 由 (35) 式决定:

$$\alpha_s = \begin{cases} 1, & (\text{sgn}(q) \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} \geq 0), \\ 0, & (\text{sgn}(q) \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} < 0). \end{cases} \quad (35)$$

同样地, 第 k 个重粒子在阴极、阳极处的边界通量为^[42]

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Gamma}_q^k = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8k_B T_g}{\pi m_q^k}} n_q^k - \alpha_s n_q^k \mu_q^k z_q^k \mathbf{E} \cdot \mathbf{n}, \quad (36)$$

其中 m_q^k 为第 k 个重粒子的质量.

4 Std-PINNs 方法

由 (29) 式与 (30) 式可见, 各粒子数密度与平均电子能通过粒子输运方程源项强耦合关联. 这种强耦合关系意味着任一变量的拟合误差都会直接影响粒子传输方程损失项的训练过程, 这对 PINNs 的正确训练来说是一个极大挑战.

下面介绍 Std-PINNs 方法. 引入等效正离子:

$$\tilde{n}_p = \sum_p n_p. \quad (37)$$

当不同离子的相对质量差别较小时, 它们的迁移率通常处于相同数量级^[39,43], 因此可以假设这些离子的迁移率近似相等, 进而引入等效离子通量:

$$\tilde{\Gamma}_p = \sum_p \Gamma_p = \mu_p \mathbf{E} \tilde{n}_p - D_p \nabla \tilde{n}_p, \quad (38)$$

$$\nabla \cdot (\mu_p \mathbf{E} \tilde{n}_p - D_p \nabla \tilde{n}_p) = \sum R_p. \quad (39)$$

并考虑到电子源项与等效正离子源项相等, 本研究采用电流连续性方程替代粒子输运方程:

$$\nabla \cdot e \mathbf{I}_{\text{tot}} = 0, \quad (40)$$

$$\mathbf{I}_{\text{tot}} = \mu_p \mathbf{E} \tilde{n}_p - D_p \nabla \tilde{n}_p + \mu_e \mathbf{E} n_e + D_e \nabla n_e. \quad (41)$$

本研究在损失约束中还考虑了等离子体系统中宏观量 (电势、电流) 的标签数据约束:

$$\phi(x_0^i) = \phi_{\text{lab}}(x_0^i), \quad (42)$$

$$Ae |\mathbf{I}_{\text{tot}}(x_f^i)| = I_{\text{lab}}, \quad (43)$$

其中 A 表示横截面积, I_{lab} 表示电流观测数据, x_f^i ($i = 1, 2, \dots, N_f$) 为残差点. 根据物理先验知识, 辉光放电结构存在陡峭的阴极位降区^[44], 故对电势的观测点 x_0^i ($i = 1, 2, \dots, N_0$) 将集中在阴极附近.

考虑标签数据约束并将等效正离子表示的电流连续性方程替代粒子输运方程后, 训练过程中将不再出现电子源项与正离子源项, 大大减弱了各粒子数密度之间、各粒子数密度与平均电子能之间的耦合关联. 同时, 根据我们以往的研究^[9,10,31,45], 在以惰性气体为背景气体的放电模拟中, 电子由于碰撞过程导致的能量损失由电子与基态背景气体原

子的弹性碰撞、激发碰撞以及直接电离碰撞主导, 因此在电子能量密度方程的源项 R_e 中可不再考虑各重粒子数密度.

需要注意的是, 各状态变量量纲不同, 且它们之间的数量级差异巨大 (如电势为 0.1—1 kV, 粒子数密度为 10^{11} — 10^{20} m^{-3}), 十分不利于神经网络训练, 应将各物理量与控制方程按照附录 A 进行无量纲化^[27], 并将无量纲化的物理变量作为直接求解变量. 为避免训练过程中出现负浓度, 我们将无量纲化的粒子数密度取对数后作为直接求解变量. 由上所述, 直接求解变量将由 $\bar{\varepsilon}$, ϕ , n_e , n_p , n_s , \tilde{n}_p 转化为 $\bar{\varepsilon}^*$, ϕ^* , $N_e = \ln(n_e^*)$, $N_p = \ln(n_p^*)$, $N_s = \ln(n_s^*)$, $\tilde{N}_p = \ln(\tilde{n}_p^*)$, 上标*代表无量纲物理变量.

Std-PINNs 的结构示意图如图 2 所示, 下面具体介绍其训练过程.

第 1 步 将无量纲化的电子能密度守恒方程、泊松方程、电流连续性方程嵌入网络 1 (以下简称 NN₁) 损失函数中, 并考虑电势与电流标签数据约束, 训练输出变量 ϕ^* , $\bar{\varepsilon}^*$, N_e , \tilde{N}_p . 同时, 考虑到平均电子能 $\bar{\varepsilon}$ 的典型值范围^[39,46,47] 为 0—30 eV, 我们在 $\bar{\varepsilon}^*$ 的输出侧使用 tanh 函数对其进行放缩操作, 使得平均电子能量规范于典型值区间内, 避免出现非物理解;

第 2 步 将无量纲化的重粒子输运方程 (正离子输运方程、激发态粒子输运方程) 嵌入网络 2 (以下简称 NN₂), 并结合 NN₁ 的输出 ϕ^* , $\bar{\varepsilon}^*$, N_e , \tilde{N}_p , 训练各重粒子数密度 N_s^k ($k = 1, 2, \dots, Q_s$), N_p^k ($k = 1, 2, \dots, Q_p$), 最终实现各重粒子输运方程源项与电子密度、平均电子能量的解耦.

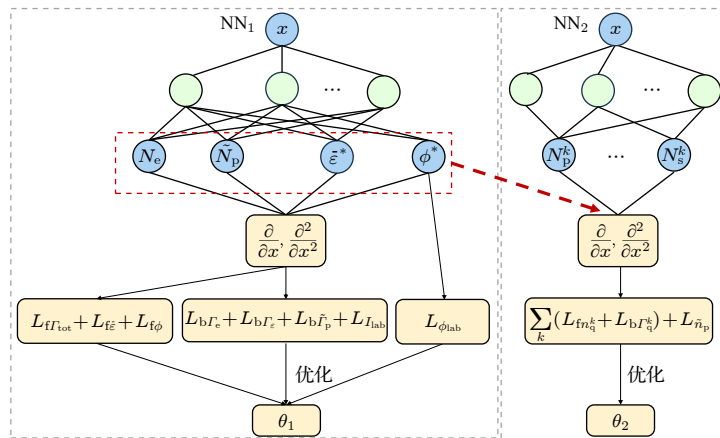


图 2 Std-PINNs 结构示意图

Fig. 2. Schematic diagram of the structure of the Std-PINNs.

以上两步训练均采用基于 NTK 的动态权重策略平衡各损失项收敛速度。

值得一提的是, 在第 2 步的训练过程中, 当电子密度、电势、平均电子能量以给定值形式嵌入 NN₂ 后, 由 (29) 式和 (30) 式可知, 各重粒子输运方程源项将仅依赖于各重粒子密度, 并且由电子与基态原子的碰撞反应贡献的源项将表现为与重粒子密度线性相关, 进而大幅降低了神经网络求解重粒子输运方程的复杂度. 此外, 尽管第 2 步训练的结果不可避免地会受到第一步结果准确度的影响, 我们将在接下来的数值实验中验证由此引起的误差是在可接受范围内的。

5 数值实验

本节首先通过低气压氩气辉光放电案例, 对比了 Std-PINNs 与传统 PINNs(将各粒子输运方程、电子能量密度方程以及泊松方程同时耦合求解, 同时采用基于 NTK 的动态权重策略调整各损失项权重系数) 的模拟结果, 初步分析了传统 PINNs 在求解多粒子模型时训练失败的原因, 然后通过两个经典放电案例 (大气压氩气辉光放电), 展示 Std-PINNs 求解多粒子等离子体流体模型的可泛化能力, 其中以商业软件 COMSOL Multiphysics (finite element method, FEM) 的计算结果作为参考解. 各案例无量纲化基准值在附录表 A1 中给出。

5.1 案例 1: 低气压氩气辉光放电

本案例中, 我们考虑的低气压氩气放电化学反应包含 6 个碰撞反应及 4 种不同粒子: (电子 (e), Ar 原子, Ar 亚稳态 (Ar*), Ar⁺), 详细的反应方程式如表 1 所示。

背景气体 Ar 粒子数密度由理想气体状态方程给定:

$$n_{\text{Ar}} = \frac{p_0}{k_B T_g}, \quad (44)$$

其中背景气体温度 T_g 设定为 300 K, p_0 为背景气体压力, 设定为 0.1 Torr (1 Torr = 1.33×10^2 Pa). 电子迁移率 μ_e 设定为 $303.63 \text{ m}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, 离子迁移率 μ_p 设定为 $5.72 \text{ m}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, 激发态粒子 Ar* 的扩散系数设置为 $0.1447 \text{ m}^2/\text{s}$. 气隙间隙 d_g 设定为 0.368 m; 二次电子发射系数在阴极设置为 0.35, 外施电压 $V_0 = 200 \text{ V}$, 镇流电阻 $R_0 = 10 \text{ k}\Omega$, 且电流标签数据 $I_{\text{lab}} = 8.72 \text{ mA}$ (由 FEM 模型计算得出)。

Std-PINNs 网络架构设置如下: NN₁ 隐藏层数为 5, 每个隐藏层有 100 个神经元, 输入变量为空间坐标, 输出变量为 ϕ^* , $\bar{\epsilon}^*$, N_e , \tilde{N}_p (在第 4 节中被定义); NN₂ 由 4 个隐藏层组成, 每个隐藏层有 50 个神经元, 输入变量为空间坐标, 输出变量为激发态粒子对数密度 N_{Ar^*} ; 两个网络均采用 tanh 函数作为非线性激活函数, 并使用 Xavier 方法初始化网络参数. 损失函数的优化策略为: 使用 Adam 优化器通过小批量方式 ($N_f = 120$) 优化损失函数, 其中 NN₁ 的迭代次数为 160000 次, 而 NN₂ 迭代次数为 50000 次; 优化器的初始学习率设置为 6×10^{-4} , 并且在训练期间每 5000 个迭代步骤衰减至原来的 0.9 倍. 电势采样策略为: [0, 0.05] (m) 区间内等距采点 96 个, [0.05, 0.368] (m) 区间内等距采点 14 个. 为了让 NN₁ 更快学习到电势标签数据, 将电势标签数据损失项权重系数乘以修正因子 10^2 . 传统 PINNs 的网络结构设置为: NN 隐藏层数设置为 5, 每个隐藏层有 200 个神经元, 输出为 ϕ^* , $\bar{\epsilon}^*$, N_e , N_p , N_s , 迭代次数为 160000 次, 其余设置与 Std-PINNs 一致。

表 1 低气压氩气辉光放电的碰撞反应

Table 1. Collision reaction of low pressure argon glow discharge.

序号	反应方程	速率常数	焓/eV	参考文献
1	$e + \text{Ar} \Rightarrow e + \text{Ar}$	$f(\bar{\epsilon})$	—	[48]
2	$e + \text{Ar} \Rightarrow e + \text{Ar}^*$	$f(\bar{\epsilon})$	11.5	[48]
3	$e + \text{Ar} \Rightarrow 2e + \text{Ar}^+$	$f(\bar{\epsilon})$	15.8	[48]
4	$e + \text{Ar}^* \Rightarrow 2e + \text{Ar}^+$	$f(\bar{\epsilon})$	4.43	[48]
5	$\text{Ar}^* + \text{Ar}^* \Rightarrow e + \text{Ar} + \text{Ar}^+$	6.2×10^{-16}	—	[40]
6	$\text{Ar}^* + \text{Ar} \Rightarrow \text{Ar} + \text{Ar}$	3×10^{-21}	—	[40]

注: 表中 $f(\bar{\epsilon})$ 代表电子碰撞反应的速率常数, 为平均电子能的函数, 通过向 Bolsig⁺ 导入电子碰撞反应截面数据计算得到; 双体反应的速率常数单位为 m^3/s .

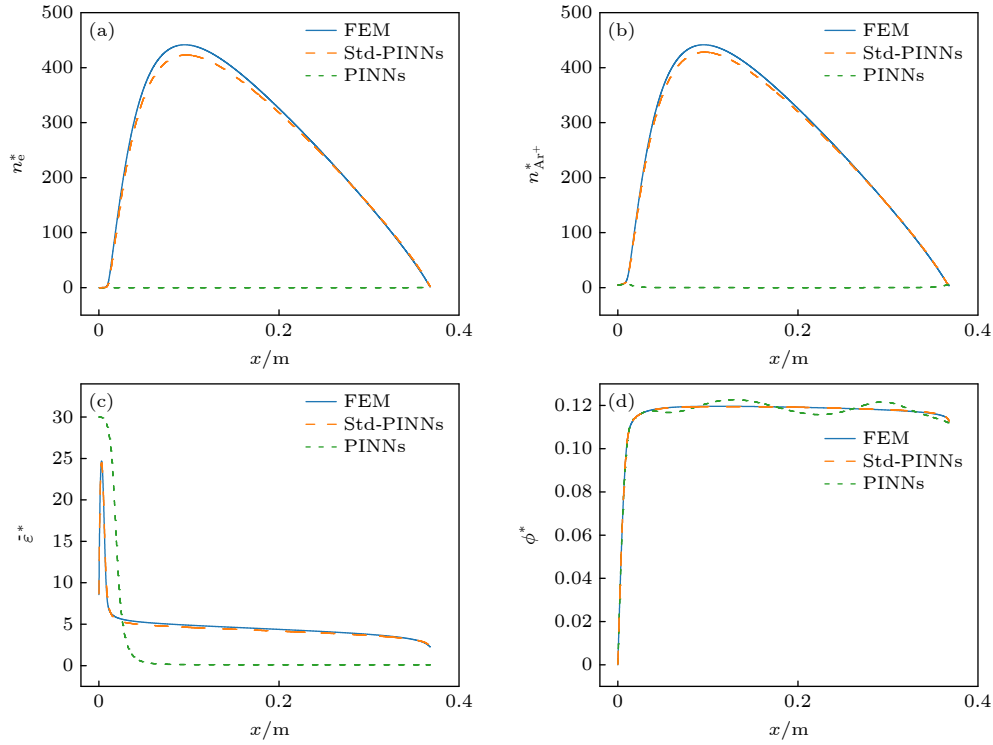

 图 3 FEM, Std-PINNs 与传统 PINNs 的数值结果比较 (NN₁ 输出)

 Fig. 3. Comparison of the numerical results of FEM, Std-PINNs (the output of NN₁) and traditional PINNs.

图 3 与图 4 对比了传统 PINNs, Std-PINNs 与 FEM 的模拟结果, 可以看出, Std-PINNs 求解的各状态变量能够很好地体现出辉光放电结构 (陡峭的阴极位降区、准电中性区), 且与 FEM 结果高度吻合. 电子密度 n_e 、正离子数密度 n_{Ar^+} 、激发态粒子数密度 n_{Ar^*} 、平均电子能量 $\bar{\epsilon}$ 以及电势 ϕ 的相对 L_2 误差分别为 3.55×10^{-2} , 2.82×10^{-2} , 4.21×10^{-2} , 5.71×10^{-2} 以及 5.86×10^{-4} . 同时, 可明显看出传统 PINNs 结果与 FEM 结果之间存在显著差异.

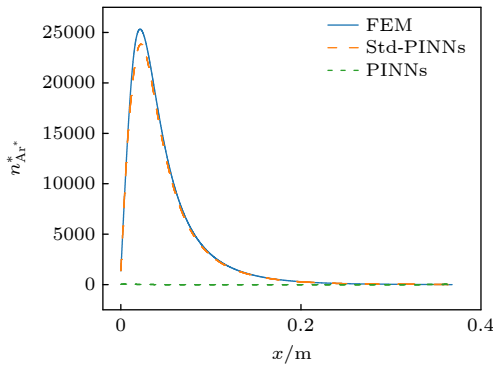

 图 4 FEM, Std-PINNs 与传统 PINNs 的数值结果比较 (NN₂ 输出)

 Fig. 4. Comparison of the numerical results of FEM, Std-PINNs (the output of NN₂) and traditional PINNs.

下面我们从损失函数训练趋势的角度初步分析传统 PINNs 训练失败的原因. 图 5 展示了电子能量密度方程与各粒子数输运方程的损失函数随训练次数的变化过程, 同时图 6 对比了平均电子能量 $\bar{\epsilon}$ 与各粒子数密度 L_2 相对误差随训练次数的变化过程. 可看出, 当平均电子能量 $\bar{\epsilon}$ 训练误差增大时, 各粒子数密度的训练误差也将迅速增大, 这一现象可归因于各粒子数密度与平均电子能量 $\bar{\epsilon}$ 体现在粒子方程源项的强耦合关系. 具体来说, 平均

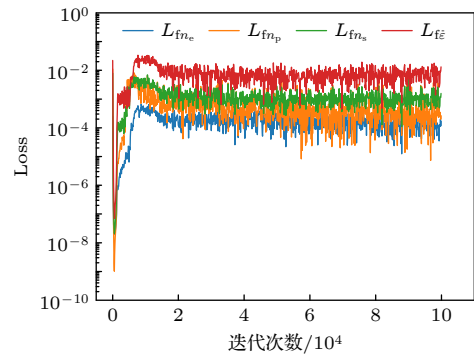


图 5 应用传统 PINNs 时, 整个迭代过程中粒子输运方程与电子能量密度方程的损失函数值

Fig. 5. When the traditional PINNs is applied, the loss function values of the particle transport equation and the electron energy density equation during the whole iteration.

电子能量 $\bar{\varepsilon}$ 的训练误差将通过影响粒子方程源项使得各粒子输运方程损失项迅速增大, 其中电子数密度的拟合误差又将通过影响电子能密度方程源项 (如焦耳热) 使得电子能量密度方程无法被正确学习, 最终导致传统 PINNs 训练失败.

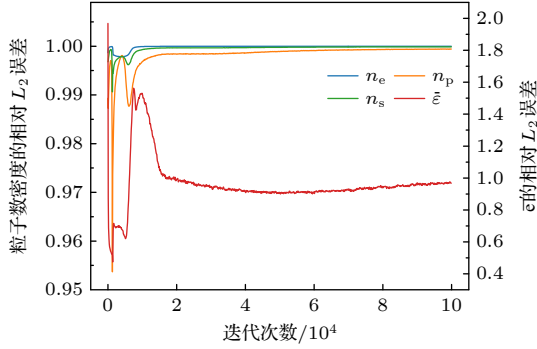


图 6 应用传统 PINNs 时, 整个迭代过程中各粒子数密度与平均电子能量的相对 L_2 误差

Fig. 6. When the traditional PINNs is applied, the relative L_2 error of each particle number density and mean electron energy during the whole iteration.

5.2 案例 2: 大气压氦气辉光放电

在低气压与大气压条件下, 粒子碰撞反应的个

数及其动力学特性存在显著差异. 首先, 在大气压下, 由于气体分子密度高, 粒子 (包括电子、离子和中性分子) 之间的碰撞频率相对于低气压条件显著增大, 这意味着在单位时间内发生的碰撞反应个数在大气压条件下要多于低气压条件^[49]. 其次, 大气压下的高密度环境促进了包括三体反应在内的各种复杂化学反应的进行, 可能生成更多种类的复杂分子和活性中间体^[49-51]. 因此, 大气压条件下可能出现的碰撞反应与粒子种类将多于低气压条件. 下面将以反应体系更为复杂的大气压氦气辉光放电模型为案例, 展现 Std-PINNs 在求解的可泛化能力. 在该放电模型中, 共考虑了 20 个碰撞过程及 6 种不同粒子 (电子 (e), He 原子, He 亚稳态 (He^*), He_2 亚稳态 (He_2^*), He^+ , He_2^+), 详细的反应方程式如表 2 所示.

背景气体 He 粒子数密度同样由理想气体状态方程 (44) 式给定, 其中背景气体温度 T_g 设定为 300 K, 背景气体压力 p_0 设定为 760 Torr, 气隙间距 d_g 设置为 0.2 mm, 横截面积为 $6 \times 10^{-7} \text{ m}^2$, 二次电子发射系数在阴极设置为 0.1, 电流标签数据 $I_{\text{lab}} = 18.92 \text{ mA}$, 外施电压 $V_0 = 400 \text{ V}$; 电子迁移

表 2 大气压氦气辉光放电的碰撞反应

Table 2. Collision reaction of atmospheric pressure helium glow discharge.

序号	反应方程	速率常数	焓/eV	参考文献
1	$e + \text{He} \Rightarrow e + \text{He}$	$f(\bar{\varepsilon})$	—	[48]
2	$e + \text{He} \Rightarrow e + \text{He}^*$	$f(\bar{\varepsilon})$	19.8	[48]
3	$e + \text{He} \Rightarrow 2e + \text{He}^+$	$f(\bar{\varepsilon})$	24.6	[48]
4	$e + \text{He}^* \Rightarrow 2e + \text{He}^+$	$1.28 \times 10^{-13} \times T_e^{0.6} \times \exp(-4.78/T_e)$	4.8	[41]
5	$e + \text{He}^* \Rightarrow e + \text{He}$	2.9×10^{-15}	-19.8	[41]
6	$e + \text{He}_2^* \Rightarrow e + 2\text{He}$	3.8×10^{-15}	-17.9	[39]
7	$2e + \text{He}^+ \Rightarrow e + \text{He}^*$	$6.0 \times 10^{-32} \times (T_e/0.026)^{-4.4}$	-4.8	[4]
8	$2e + \text{He}_2^+ \Rightarrow e + \text{He} + \text{He}^*$	$4.0 \times 10^{-32} \times (T_e/0.026)^{-1}$	—	[39]
9	$e + \text{He} + \text{He}_2^+ \Rightarrow 2\text{He} + \text{He}^*$	$5 \times 10^{-39} \times (T_e/0.026)^{-1}$	—	[39]
10	$2e + \text{He}_2^+ \Rightarrow e + \text{He}_2^*$	$4.0 \times 10^{-32} \times (T_e/0.026)^{-1}$	—	[39]
11	$e + \text{He} + \text{He}^+ \Rightarrow \text{He} + \text{He}^*$	$5.0 \times 10^{-39} \times (T_e/0.026)^{-1}$	—	[39]
12	$e + \text{He} + \text{He}_2^+ \Rightarrow \text{He} + \text{He}_2^*$	$1.0 \times 10^{-38} \times (T_e/0.026)^{-2}$	—	[39]
13	$e + \text{He}_2^* \Rightarrow 2e + \text{He}_2^+$	$5.0 \times 10^{-15} \times (T_e/0.026)^{-1}$	3.4	[39]
14	$\text{He}^* + 2\text{He} \Rightarrow 3\text{He}$	2.0×10^{-46}	—	[39]
15	$2\text{He}^* \Rightarrow e + \text{He}_2^+$	2.9×10^{-15}	—	[39]
16	$2\text{He} + \text{He}^+ \Rightarrow \text{He} + \text{He}_2^+$	1.4×10^{-43}	—	[4]
17	$2\text{He} + \text{He}^* \Rightarrow \text{He}_2^* + \text{He}$	2×10^{-46}	—	[4]
18	$\text{He}^* + \text{He}_2^* \Rightarrow e + \text{He}_2^+ + \text{He}$	5×10^{-16}	—	[4]
19	$\text{He}_2^* + \text{He}_2^* \Rightarrow e + \text{He}_2^+ + 2\text{He}$	1.2×10^{-15}	—	[4]
20	$\text{He}_2^* + \text{He} \Rightarrow 3\text{He}$	1.5×10^{-21}	—	[4]

注: 表中 He^* 代表 $\text{He}(2^3\text{S})$ 及 $\text{He}(2^1\text{S})$, He_2^* 则代表 $\text{He}_2(a^3\Sigma_u^+)$.

率 μ_e 设定为 $0.12 \text{ m}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, 离子迁移率 μ_p 设定为 $1.3 \times 10^{-3} \text{ m}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, He^+ 与 He_2^+ 的扩散系数分别设定为 $5.5 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$, $4.1 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$.

Std-PINNs 的网络结构设置为: NN_1 具有 5 层隐藏层, 且每个隐藏层有 100 个神经元, 输出为 ϕ^* , ε^* , N_e , \tilde{N}_p ; NN_2 的隐藏层具有 6 层隐藏

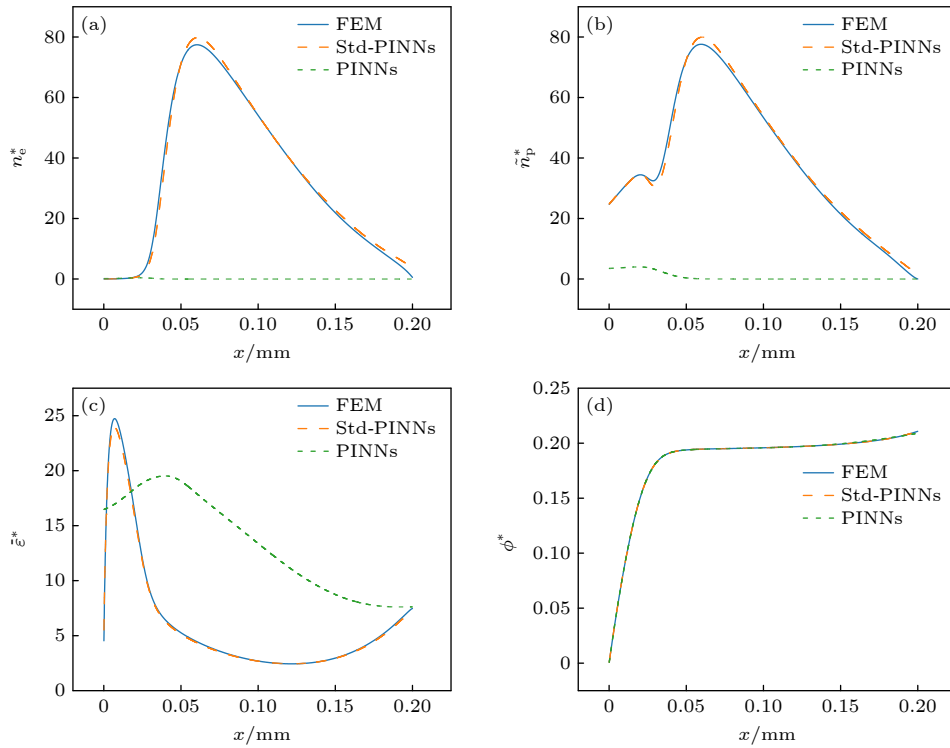


图 7 FEM, Std-PINNs (NN_1 输出) 与传统 PINNs 的数值结果比较

Fig. 7. Comparison of the numerical results between the FEM, the Std-PINNs (the output of NN_1) and traditional PINNs.

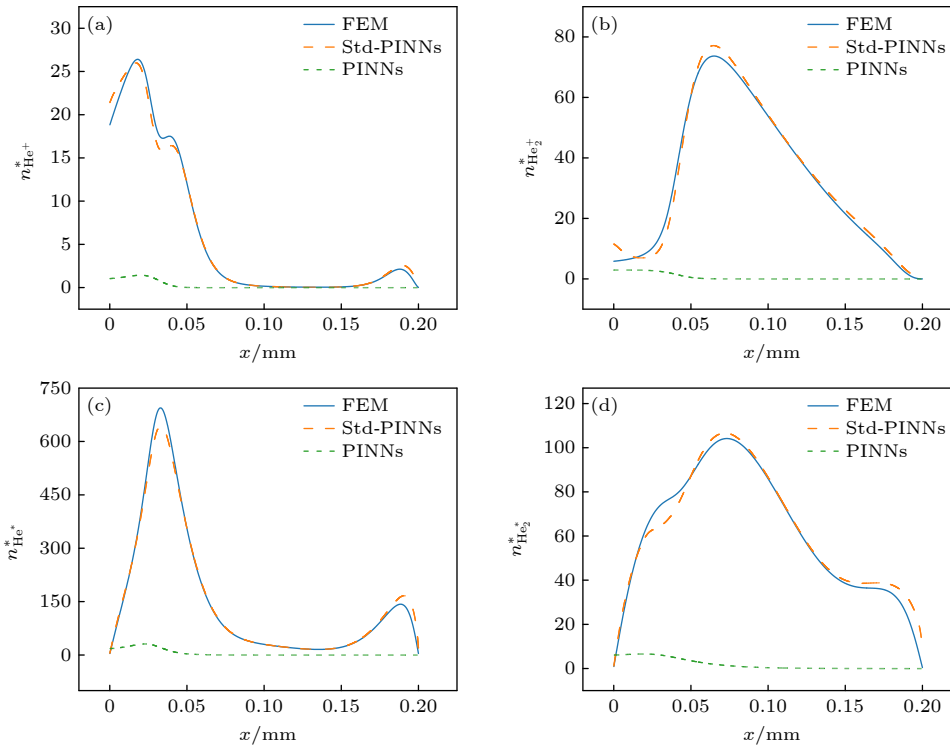


图 8 FEM, Std-PINNs (NN_2 输出) 与传统 PINNs 的数值结果比较

Fig. 8. Comparison of the numerical results between the FEM, the Std-PINNs (the output of NN_2) and traditional PINNs.

层,且每个隐藏层有 200 个神经元,输出为各重粒子对数密度 $N_{\text{He}_2^*}$, N_{He^*} , N_{He^+} , $N_{\text{He}_2^+}$; NN_1 与 NN_2 的训练迭代次数均为 160000 次. 电势采样点设置为: $[0, 0.05]$ (mm) 区间等距采点 96 个, $[0.05, 0.2]$ (mm) 区间等距采点 14 个,并且电势标签数据损失项权重系数修正因子为 10^5 . 传统 PINNs 的网络结构设置为: NN 的隐藏层具有 6 层隐藏层,且每个隐藏层有 200 个神经元,输出为 ϕ^* , $\bar{\varepsilon}^*$, N_e , $N_{\text{He}_2^*}$, N_{He^*} , N_{He^+} , $N_{\text{He}_2^+}$, 其余设置与 Std-PINNs 一致.

图 7 与图 8 对比了 FEM, Std-PINNs 以及传统 PINNs 的模拟结果,可以看出 Std-PINNs 与 FEM 结果符合得很好. 电子密度 n_e 、等效正离子数密度 \tilde{n}_p 、平均电子能量 $\bar{\varepsilon}$ 以及电势 ϕ 的相对 L_2 误差分别为 3.71×10^{-2} , 3.07×10^{-2} , 2.71×10^{-2} 以及 8.11×10^{-5} ; 各重粒子数密度 n_{He^+} , $n_{\text{He}_2^+}$, n_{He^*} , $n_{\text{He}_2^*}$ 的相对 L_2 误差分别为 5.92×10^{-2} , 5.16×10^{-2} , 6.52×10^{-2} 以及 6.09×10^{-2} . 同时,也可看出传统 PINNs 与 FEM 结果之间仍存在显著偏差.

6 结论

本项工作提出了 Std-PINNs 框架,并通过低气压氦气辉光放电(考虑 6 个碰撞过程及 4 种粒子)和大气压氦气辉光放电(考虑 20 个碰撞过程及 6 种粒子)这两个经典放电案例展示了 Std-PINNs 在求解多粒子低温等离子体流体方程的应用,通过跟踪损失函数与各变量相对 L_2 误差随迭代过程的变化,初步分析了传统 PINNs 求解多粒子等离子体模型失败的原因. 与传统 PINNs 求解思路不同的是,Std-PINNs 通过引入等效正离子表示的电流连续性方程以及对等离子体系统宏观量的观测,实现了各重粒子输运方程源项与电子密度、平均电子能量的解耦,数值结果表明,Std-PINNs 与 FEM 参考解的 L_2 相对误差能达到约 10^{-2} 量级,验证了 Std-PINNs 求解多粒子等离子体流体模型的可行性,为低温等离子体模拟提供了一个有效的新思路. 进一步地,本研究还为以 PINNs 为代表的 AI 科学计算提供了新的见解:描述物理系统状态的数学形式不止一种,可以通过引入等效物理变量,推演出适合神经网络拟合的方程,并结合可观测数据,将复杂问题“降维”成简单问题.

尽管本研究初步获得了相对满意的结果,但我们也认识到,Std-PINNs 方法与 FEM 结果依然存

在着一定误差,这可能主要源自于我们提出的两个简化假设:一是将不同正离子迁移率近似看作相等;二是忽略了复合反应、退激发反应与激发态电离反应导致的电子能量损失. 特别地,我们还观察到,在曲线峰值或极值点处 Std-PINNs 方法的拟合效果并不理想,这可能表明神经网络在学习变量的一阶导数与二阶导数方面存在不足. 为了提升求解精度,或许可以考虑采用梯度增强策略,在损失函数中进一步引入梯度约束,使得 Std-PINNs 方法在曲线的极值点处的拟合更为准确.

需要注意的是,Std-PINNs 方法所依赖的简化假设也在一定程度上限制了其在某些应用场景下的有效性. 在考虑第一点假设时,需要认识到离子与背景气体原子(分子)的相对质量比是决定其迁移率的关键因素^[43],当反应体系中存在质量比相差较大的正离子时(例如在甲烷干重整的化学体系中考虑的 H_2^+ 离子与 CO_2^+ 离子^[52]),Std-PINNs 方法可能会引入较大误差. 对于第二点假设,当激发态粒子的电离过程导致的能量损失不可忽略时,Std-PINNs 方法的可靠性将会受到限制. 以 CO_2 分子的解离^[53]为例,振动激发态下的 CO_2 分子在电离碰撞中起着关键作用,其导致的电子能量损失往往不可忽略,在此情况下 Std-PINNs 方法的可行性仍有待验证. 因此,未来的工作将集中于进一步提升 Std-PINNs 方法的求解精度,并扩展其在复杂等离子体系统中的应用范围.

附录 A

将各物理变量无量纲化:

$$n^* = \frac{n}{n_0}, \quad \phi^* = \frac{\phi}{\phi_0}, \quad \bar{\varepsilon}^* = \frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\varepsilon}_0}, \quad \nabla^* = L_0 \nabla, \quad E_0 = \frac{\phi_0}{L_0}, \quad (\text{A1})$$

其中 n_0 为粒子数密度基准值, ϕ_0 为电势基准值, $\bar{\varepsilon}_0$ 为平均电子能量基准值, L_0 为几何长度基准值, E_0 为电场强度基准值.

因此控制方程的无量纲形式为

$$\frac{1}{n_e^*} \nabla^* \cdot \left(-E^* n_e^* - \frac{D_e}{\mu_e E_0 L_0} \nabla^* n_e^* \right) = \frac{L_0 R_e}{\mu_e E_0 n_0 n_e^*}, \quad (\text{A2})$$

$$\frac{1}{n_e^*} \nabla^* \cdot \left(-E^* n_e^* - \frac{D_e}{\mu_e E_0 L_0} \nabla^* n_e^* \right) = \frac{L_0 R_e}{\mu_e E_0 n_0 n_e^*}, \quad (\text{A3})$$

$$\frac{1}{n_p^*} \nabla^* \cdot \left(E^* n_p^* - \frac{D_p}{z_p \mu_p E_0 L_0} \nabla^* n_p^* \right) = \frac{L_0 R_p}{z_p \mu_p E_0 n_0 n_p^*}, \quad (\text{A4})$$

$$\frac{1}{n_s^*} \nabla^* \cdot \left(-\frac{D_s}{\mu_p E_0 L_0} \nabla^* n_s^* \right) = \frac{L_0 R_s}{\mu_p E_0 n_0 n_s^*}, \quad (\text{A5})$$

$$\nabla^* \cdot (-\nabla^* \phi^*) = \frac{L_0^2 \rho_v^* n_0}{\varepsilon_0 \varepsilon_r \phi_0}, \quad (A6)$$

$$\nabla^* \cdot \left(\mathbf{E}^* \tilde{n}_p^* - \frac{D_p}{z_p \mu_p E_0 L_0} \nabla^* \tilde{n}_p^* + \frac{\mu_e \mathbf{E}^* n_e^*}{z_p \mu_p} + \frac{D_e}{z_p \mu_p E_0 L_0} \nabla^* n_e^* \right) = 0. \quad (A7)$$

表 A1 各案例基准值

Table A1. Reference values for each case.

案例	n_0/m^{-3}	ϕ_0/V	$\bar{\varepsilon}_0/\text{eV}$	L_0/m
1	1×10^{13}	1×10^3	1	1×10^{-2}
2	5×10^{17}	1×10^3	1	1×10^{-4}

参考文献

- [1] Sanito R C, You S J, Wang Y F 2021 *J. Environ. Manage.* **288** 112380
- [2] Cheng H, Xu J X, Li X, Liu D W, Lu X P 2020 *Phys. Plasmas* **27** 063514
- [3] Han Z J, Murdock A T, Seo D H, Bendavid A 2018 *2D Mater.* **5** 032002
- [4] Lazarou C, Belmonte T, Chiper A S, Georghiou G E 2016 *Plasma Sources Sci. Technol.* **25** 055023
- [5] Guikema J, Miller N, Niehof J, Klein M, Walhout M 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 3817
- [6] Fang Z, Wang X J, Shao T, Zhang C 2017 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **45** 310
- [7] Trelles J P 2016 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **49** 393002
- [8] Purwins H G 2011 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **39** 2112
- [9] Zhang Y H, Ning W J, Dai D, Wang Q 2019 *Plasma Sci. Technol.* **21** 074003
- [10] Wang Q, Zhou X Y, Dai D, Huang Z E, Zhang D M 2021 *Plasma Sources Sci. Technol.* **30** 05LT01
- [11] Wang Q, Ning W J, Dai D, Zhang Y H 2020 *Plasma Process. Polym.* **17** e1900182
- [12] Zhang Y H, Ning W J, Dai D, Wang Q 2019 *Plasma Sources Sci. Technol.* **28** 104001
- [13] Biel W, Albanese R, Ambrosino R, et al. 2019 *Fus. Eng. Des.* **146** 465
- [14] Logg A 2007 *Archives of Computational Methods in Engineering* (Vol.14) (Berlin: Springer) pp93–138
- [15] Eymard R, Gallouët T, Herbin R 2000 *Handbook of Numerical Analysis* (Vol. 7) (Amsterdam: Elsevier) pp713–1018
- [16] Bogaerts A, Tu X, Whitehead J C, Centi G, Lefferts L, Guaitella O, Azzolina-Jury F, Kim H H, Murphy A B, Schneider W F 2020 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **53** 443001
- [17] Neyts E C 2016 *Plasma Chem. Plasma Process.* **36** 185
- [18] Mei D H, Zhu X B, Wu C F, Ashford B, Williams P T, Tu X 2016 *Appl. Catal. B* **182** 525
- [19] Yi Y H, Li S K, Cui Z L, Hao Y Z, Zhang Y, Wang L, Liu P, Tu X, Xu X M, Guo H C, Bogaerts A 2021 *Appl. Catal. B* **296** 120384
- [20] Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis G E 2019 *J. Comput. Phys.* **378** 686
- [21] Raissi M, Yazdani A, Karniadakis G E 2020 *Science* **367** 1026
- [22] De Florio M, Schiassi E, Ganapol B D, Furfaro R 2021 *Phys. Fluids* **33** 047110
- [23] Arzani A, Wang J X, D'Souza R M 2021 *Phys. Fluids* **33** 071905
- [24] Kawaguchi S, Takahashi K, Ohkama H, Satoh K 2020 *Plasma Sources Sci. Technol.* **29** 025021
- [25] Cai S Z, Wang Z C, Wang S F, Perdikaris P, Karniadakis G E 2021 *J. Heat Transfer* **143** 102719
- [26] Laubscher R 2021 *Phys. Fluids* **33** 087101
- [27] Mathews A, Francisquez M, Hughes J W, Hatch D R, Zhu B, Rogers B N 2021 *Phys. Rev. E* **104** 025205
- [28] Zhong L L, Gu Q, Wu B Y 2020 *Comput. Phys. Commun.* **257** 107496
- [29] Zhong L L, Wu B Y, Wang Y 2022 *Phys. Fluids* **34** 087116
- [30] Wan J, Wang Q, Dai D, Ning W J 2019 *Phys. Plasmas* **26** 103510
- [31] Wang Q, Ning W J, Dai D, Zhang Y H, Ouyang J 2019 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **52** 205201
- [32] Glorot X, Bengio Y 2010 *Proceedings of the 13th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics* Sardinia, Italy, May 13–15, 2010 pp249–256
- [33] Liu D C, Nocedal J 1989 *Math. Program.* **45** 503
- [34] Kingma D P, Ba J L 2014 arXiv: 1412.6980 [cs. LG]
- [35] Wang S, Yu X, Perdikaris P 2022 *J. Comput. Phys.* **449** 110768
- [36] Hagelaar G J M, Kroesen G M W 2000 *J. Comput. Phys.* **159** 1
- [37] Blicke V, Speck T, Lutz C, Seifert U, Bechinger C 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 210601
- [38] Hagelaar G J M, Pitchford L C 2005 *Plasma Sources Sci. Technol.* **14** 722
- [39] Wang Q, Economou D J, Donnelly V M 2006 *J. Appl. Phys.* **100** 023301
- [40] Dyatko N A, Ionikh Y Z, Kochetov I V, Marinov D L, Meshchanov A V, Napartovich A P, Petrov F B, Starostin S A 2008 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** 055204
- [41] Deloche R, Monchicourt P, Cheret M, Lambert F 1976 *Phys. Rev. A* **13** 1140
- [42] Hagelaar G J M, De Hoog F J, Kroesen G M W 2000 *Phys. Rev. E* **62** 1452
- [43] Hassé H R, Cook W R 1931 *Philos. Mag. J. Sci.* **12** 554
- [44] Staack D, Farouk B, Gutsol A, Fridman A 2005 *Plasma Sources Sci. Technol.* **14** 700
- [45] Wang Q, Dai D, Ning W J, Zhang Y H 2021 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **54** 115203
- [46] Tochikubo F, Shirai N, Uchida S 2011 *Appl. Phys. Express* **4** 056001
- [47] Zhang Y H, Ning W J, Dai D, Wang Q 2019 *Plasma Sources Sci. Technol.* **28** 075003
- [48] Pitchford L C, Alves L L, Bartschat K, et al. 2017 *Plasma Process. Polym.* **14** 1600098
- [49] Zhu X M, Pu Y K 2009 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43** 015204
- [50] Riccardi C, Barni R 2012 *Chem. Kinet.* **10** 38396
- [51] Liu D X, Iza F, Wang X H, Ma Z Z, Rong M Z, Kong M G 2013 *Plasma Sources Sci. Technol.* **22** 055016
- [52] Zhu M R, Zhong A, Dai D, Wang Q, Shao T, Ostrikov K K 2022 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **55** 355201
- [53] Pietanza L D, Guaitella O, Aquilanti V, et al 2021 *Eur. Phys. J. D* **75** 237

Physics-informed neural networks based on source term decoupled and its application in discharge plasma simulation*

Fang Ze Pan Yong-Quan Dai Dong[†] Zhang Jun-Bo

(School of Electric Power, South China University of Technology, Guangzhou 510641, China)

(Received 10 March 2024; revised manuscript received 14 May 2024)

Abstract

In recent years, the artificial intelligence computing paradigm represented by physics-informed neural networks (PINNs) has received great attention in the field of plasma numerical simulation. However, the plasma chemical system considered in related research is relatively simplified, and the research on solving the more complex multi-particle low-temperature fluid model based on PINNs is still blank. In more complex chemical systems, the coupling relationship between particle densities and between particle densities and mean electron energy become more intricate. Therefore, the applicability of PINNs in dealing with sophisticated reaction systems needs further exploring and improving. In this work, we propose a general PINN framework (source term decoupled PINNs, Std-PINNs) for solving multi-particle low-temperature plasma fluid model. By introducing equivalent positive ions and replacing each particle transport equation with the current continuity equation as a physical constraint, Std-PINN splits the entire solution process into the training processes of two neural networks, realizing the decoupling of the source term of the heavy particle transport equation from the electron density and mean electron energy, which greatly reduces the complexity of neural network training. In this work, the application of Std-PINNs to solving multi-particle low-temperature plasma fluid models is demonstrated through two classic discharge cases with different complexity of reaction systems (low-pressure argon glow discharge and atmospheric-pressure helium glow discharge) and the performance of Std-PINN is compared with that of conventional PINN and finite element method (FEM). The results show that the training results output from the traditional PINN are completely incorrect due to the strong coupling correlation of each physical variable through the source terms of each particle transport equation, while the L_2 relative error between Std-PINN and FEM results can reach up to $\sim 10^{-2}$, thus verifying the feasibility of Std-PINN in simulating multi-particle plasma fluid model. Std-PINN expands the application of deep learning method to modeling complex physical systems and provides new ideas for conducting low-temperature plasma simulations. In addition, this study provides novel insights into the field of artificial intelligence scientific computing: the mathematical form that describes the state of a physical system is not unique. By introducing equivalent physical variables, equations suitable for neural network solutions can be derived and combined with observable data to simplify problems.

Keywords: physics-informed neural networks, low-temperature plasma, source term decoupled, fluid model

PACS: 52.25.Dg, 02.60.Cb, 02.30.Jr

DOI: [10.7498/aps.73.20240343](https://doi.org/10.7498/aps.73.20240343)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52377145).

[†] Corresponding author. E-mail: ddai@scut.edu.cn

基于源项解耦的物理信息神经网络方法及其在放电等离子体模拟中的应用

方泽 潘泳全 戴栋 张俊勃

Physics-informed neural networks based on source term decoupled and its application in discharge plasma simulation

Fang Ze Pan Yong-Quan Dai Dong Zhang Jun-Bo

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 145201 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240343

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240343>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于梯度优化物理信息神经网络求解复杂非线性问题

Solving complex nonlinear problems based on gradient-optimized physics-informed neural networks

物理学报. 2023, 72(10): 100202 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222381>

基于深度物理启发神经网络的微波波导器件逆设计方法

Inverse design of microwave waveguide devices based on deep physics-informed neural networks

物理学报. 2023, 72(8): 080201 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230031>

基于物理信息神经网络的金属表面吸收率测量方法

Measurement method of metal surface absorptivity based on physics-informed neural network

物理学报. 2024, 73(9): 094301 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231453>

等离子体刻蚀建模中的电子碰撞截面数据

Electron collision cross section data in plasma etching modeling

物理学报. 2024, 73(9): 095201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231598>

基于物理信息神经网络的光斑质心计算

Calculation of spot centroid based on physical informed neural networks

物理学报. 2022, 71(20): 200601 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220670>

基于前馈神经网络的等离子体光谱诊断方法

Plasma optical emission spectroscopy based on feedforward neural network

物理学报. 2021, 70(9): 095211 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202248>