

专题: 低温等离子体非平衡输运与主动调控

# 深度学习代理模型的容性耦合氩等离子体 流体模拟: 非对称推理与定量可信边界\*

李靖宇<sup>1)</sup> 蒋星照<sup>2)</sup> 何倩<sup>1)</sup> 张逸凡<sup>2)</sup> 吴桐<sup>1)</sup>  
姜森钟<sup>1)</sup> 宋远红<sup>2)</sup> 贾文柱<sup>1)†</sup>

1) (西南大学人工智能学院, 重庆 400715)

2) (大连理工大学物理学院, 大连 116024)

(2025年9月19日收到; 2025年10月9日收到修改稿)

容性耦合等离子体 (CCP) 的流体模拟对于理解放电物理机制非常重要, 但其高昂的计算成本制约了大范围参数化探索. 为突破该限制, 本文开发了一种深度学习代理模型, 旨在以近瞬时推理速度复现一维 CCP 流体模型的输出结果. 该模型精确预测了容性耦合氩等离子体流体模拟中关键等离子体参数的空间分布, 包括电子密度、电子温度及电场分布, 并将所需计算时间从数小时压缩至毫秒量级. 除加速优势外, 代理模型学习过程还揭示了根植于等离子体物理的非对称推理能力. 代理模型可从复杂的低压物理域外推至更简单的高压物理域, 反之则不可行, 表明低压状态具有更完整的物理信息. 进一步, 本文建立了一个模型推理的置信边界, 确保预测结果的物理可靠性. 本文的研究为创建高保真、超快速的流体模拟等离子体替代提供了方案.

**关键词:** 容性耦合等离子体, 流体模拟, 深度学习, 推理能力**PACS:** 52.65.-y**DOI:** 10.7498/aps.74.20251290**CSTR:** 32037.14.aps.74.20251290

## 1 引言

容性耦合等离子体 (CCP) 是半导体蚀刻与薄膜沉积等先进制造技术的基础, 深入理解其放电物理机制至关重要. 数值模拟方法, 特别是流体模型与粒子网格法 (PIC), 为此提供了强大的理论工具. 然而, 这些高精度仿真模型普遍受限于极高的计算成本与漫长的模拟时间<sup>[1]</sup>. 为突破该计算效率瓶颈, 以深度学习为代表的驱动范式为加速科学计算提供了一条新路径.

在等离子体科学研究中, 研究者已广泛采用多种深度学习模型, 包括深度神经网络 (DNNs)<sup>[2,3]</sup>、卷积神经网络 (CNNs)<sup>[4,5]</sup> 及循环神经网络 (RNNs)<sup>[6]</sup>.

应用范围涵盖从预测薄膜沉积速率与折射率<sup>[7]</sup>、辅助脉冲放电催化建模<sup>[8]</sup>, 到利用 RNNs 重现托卡马克装置中的关键放电参数<sup>[9]</sup>, 以及通过 CNNs 实现等离子体放电模式的智能识别<sup>[10,11]</sup>. 普林斯顿大学的研究工作尤为值得关注, 他们成功利用深度神经网络实现了托卡马克中撕裂模不稳定的早期预测, 并通过强化学习实现了主动控制<sup>[12]</sup>. 此外, 为应对实验数据稀缺的挑战, 生成对抗网络 (GANs) 已被用于合成托卡马克等离子体电流猝熄实验的训练数据, 以满足机器学习模型的需求<sup>[13]</sup>.

尽管神经网络得到广泛应用, 但现有研究往往将其视为“黑箱”, 忽视了两个关键且相互关联的挑战. 首要挑战在于神经网络的架构设计. 深度学习领域已从早期的感知机<sup>[14]</sup> 和多层感知机<sup>[15]</sup>, 发展

\* 国家自然科学基金 (批准号: 12020101005, 12475202) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [jiawenzhu@swu.edu.cn](mailto:jiawenzhu@swu.edu.cn)

到经典架构如卷积神经网络 (CNNs)<sup>[16]</sup>、循环神经网络 (RNNs)<sup>[17]</sup> 和长短期记忆网络 (LSTMs)<sup>[18]</sup>, 并进一步演进至 Transformer<sup>[19]</sup> 与 KAN 网络<sup>[20]</sup> 等前沿模型. 然而, 目前仍缺乏系统性的研究对多样化架构在等离子体模拟任务中的性能进行比较, 并探究网络结构与物理问题特性之间的适配性.

第二个且更为根本的挑战在于模型的泛化与外推能力. 泛化通常指模型在训练数据分布之外的新数据上表现良好的能力, 要求测试数据与训练数据满足相同概率分布下的样本数据, 即满足数据同分布性. 物理信息神经网络 (PINNs) 将物理方程作为正则化项, 从而在提升泛化能力方面展现出潜力<sup>[21,22]</sup>. 然而, PINNs 在处理高度耦合的复杂系统时存在显著局限性, 包括求解高阶偏微分方程时的梯度不稳定问题<sup>[23]</sup>, 以及对真实校准数据的强烈依赖性<sup>[24-26]</sup>. 更关键的是, 对直流放电问题的研究表明, PINNs 需要针对每组特定放电参数进行独立训练, 缺乏跨不同工作条件的外推能力<sup>[27]</sup>.

然而, 代理模型的核心价值在于其外推能力, 即对训练数据参数范围之外的工作条件做出可靠预测的能力. 最新研究表明, 解决外推这一核心挑战的关键恰恰植根于第一个挑战: 神经网络的结构设计<sup>[28,29]</sup>. 通过有目的地设计网络结构, 模型可以嵌入与问题底层物理相一致的归纳偏置, 从而超越单纯插值器的局限, 实现可靠的外推预测<sup>[30,31]</sup>. 例如, 特殊结构的图神经网络 (GNNs) 能将外推误差降低数个数量级<sup>[32]</sup>, 多项式网络在外推任务中的预测精度相比标准多层感知机 (MLPs) 提升约 20.8%<sup>[33]</sup>. 但需注意的是, 这种外推能力并非无限——它严格受限于训练数据分布的支持域. 当测试数据与训练分布的距离超过特定阈值时, 任何深度模型的外推误差都会呈指数级增长<sup>[34]</sup>. 因此, 深入研究纯数据驱动模型的架构如何影响其外推性能, 并明确其能力边界, 对于构建高效可靠的等离子体代理模型具有不可或缺的重要意义.

鉴于此, 本文开发了三种神经网络架构, 分别为前馈神经网络 (FNN)、注意力增强型长短期记忆网络 (ALSTM) 以及卷积-Transformer 混合网络 (CTransformer), 旨在系统评估预测精度与计算效率. 更重要的是, 通过精心设计的交叉验证与外推实验, 定量揭示这些模型在不同放电工况 (如低压与高压) 下的非对称推理特性, 并建立外推能

力的边界. 这项工作为开发高效、可靠且可信的等离子体模拟工具提供了理论指导.

## 2 方法

为系统性地探究不同神经网络架构对等离子体参数预测性能的影响, 本文构建了三种代表性的深度学习模型, 结构如图 1 所示.

### 2.1 神经网络

#### 2.1.1 前馈神经网络 (FNN)

该模型采用基础的数据驱动方法, 建立宏观放电控制参数 (如气体气压  $p$ ) 与等离子体状态 (如电子密度分布  $n_e(x)$ ) 之间的直接映射关系. 如图 1(a) 所示, 网络结构包含输入层、两个全连接隐藏层和输出层. 控制参数 (气体气压/电压) 作为输入特征, 而等离子体的空间分布数据 (如电子密度、电场强度或电子温度) 作为预测目标. FNN 通过多个隐藏层的非线性变换学习输入与输出之间的复杂关系. 值得注意的是, 为增强模型捕捉非线性关系的能力并提升其在分布外区域的外推性能, 隐藏层采用了组合激活函数<sup>[35]</sup>. 与传统 ReLU 激活在分布外区域倾向于呈现线性特性的行为相比, 该设计能更有效地处理复杂的等离子体物理过程. 前馈神经网络的计算公式为

$$\hat{Y} = \sigma_2 \{ \sigma_1 [ \sigma_0 ( \mathbf{W}_0 X + \mathbf{b}_0 ) \mathbf{W}_1 + \mathbf{b}_1 ] \mathbf{W}_2 + \mathbf{b}_2 \}, \quad (1)$$

其中  $\sigma_i$  表示第  $i$  层的激活函数,  $\mathbf{W}_i$  表示第  $i$  层的权重矩阵,  $\mathbf{b}_i$  表示第  $i$  层的偏置向量,  $X$  表示输入控制参数,  $\hat{Y}$  表示预测值.

#### 2.1.2 注意力增强的长短期记忆神经网络 (ALSTM)

长短期记忆神经网络 (LSTM) 通过门控机制 (输入门、遗忘门和输出门) 能够有效捕捉序列数据中的长程依赖关系, 并显著缓解传统循环神经网络中梯度消失问题. 此外, LSTM 模型中融合注意力机制可提升模型对长序列数据中关键特征的自适应调整, 可进一步增强预测的准确性和鲁棒性<sup>[36]</sup>. 该模型将容性耦合 Ar 等离子体状态随着气压或者电压参数的变化构建为序列预测任务, 通过前  $k$  个条件的等离子体状态输入序列, 预测条件  $k+1$  的状态. 融合了注意力机制的长短期记忆神经网络, 可以用数学公式描述如下:

$$\begin{aligned}
 f_t &= \sigma(\mathbf{W}_f \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{Y}_t] + \mathbf{b}_f), \\
 i_t &= \sigma(\mathbf{W}_i \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{Y}_t] + \mathbf{b}_i), \\
 C_t &= f_t * C_{t-1} + i_t * \tanh(\mathbf{W}_C \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{Y}_t] + \mathbf{b}_C), \\
 o_t &= \sigma(\mathbf{W}_o \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{Y}_t] + \mathbf{b}_o), \quad h_t = o_t * \tanh(C_t), \\
 h_2 &= \text{LSTM}_2(\text{LSTM}_1(Y_t)), \\
 \hat{Y} &= \sigma(\text{Attention}(h_2) \cdot \mathbf{W} + \mathbf{b}), \quad (2)
 \end{aligned}$$

其中  $i, C, f, o, h$  表示 LSTM 计算中的中间过程。 $i$  代表输入门,  $C$  代表细胞状态,  $f$  代表遗忘门,  $o$  代表输出门,  $h$  代表隐藏层状态 (为某个工况下的等离子体状态参数向量 (例如电子密度、电子温度、电场强度等));  $\sigma$  为输出激活函数;  $\mathbf{W}$  和  $\mathbf{b}$  分别为输出权重矩阵和偏置向量,  $\mathbf{W}_f$  和  $\mathbf{b}_f$  表示遗忘门的权重矩阵和偏置向量,  $\mathbf{W}_i$  和  $\mathbf{b}_i$  表示输入门的权重矩阵和偏置向量,  $\mathbf{W}_C$  和  $\mathbf{b}_C$  是细胞状态的权重矩阵和偏置向量,  $\mathbf{W}_o$  和  $\mathbf{b}_o$  对应于输出门的权重矩阵和偏置向量;  $h_t$  表示 LSTM 在第  $t$  个工况下的隐藏状态;  $Y_t$  代表第  $t$  个工况下的等离子体状态;  $\text{LSTM}_i$  表示第  $i$  个 LSTM 层; Attention 指自注意力机制;  $\hat{Y}$  表示预测值。

### 2.1.3 混合卷积的 Transformer (CTransformer)

混合卷积的 Transformer 模型融合了卷积神经网络 (CNN) 与 Transformer 架构, 旨在处理等离子体参数中的复杂时空依赖关系。Transformer 架构提供编码器并且包含了多头自注意力机制, 理论上, 可有效捕获 CCP 仿真特性数据的特征。卷积神经网络作为解码器, 采用可学习的滤波器, 在电子密度、电场强度或电子温度的空间分布上逐点扫描, 直接处理相邻空间点的放电参数, 避免了全局计算的冗余, 从而能更精准、更稳定地捕捉参数空间中那些变化剧烈的局部特征。混合卷积的 Transformer 模型, 可以用数学公式描述如下:

$$\begin{aligned}
 Y_t^* &= \frac{(Y_t + \text{Attention}(Y_t)) - \mu_1}{\sqrt{\sigma_1^2}} \cdot \gamma_1 + \beta_1, \\
 Y_t^{**} &= \frac{(Y_t^* + \max(0, Y_t W_1 + b_1) W_2 + b_2) - \mu_2}{\sqrt{\sigma_2^2}} \cdot \gamma_2 + \beta_2, \\
 \hat{Y} &= \text{Conv1D}_k(Y_t^{**}), \quad (3)
 \end{aligned}$$

其中  $\mu_i$  为第  $i$  层输入均值;  $\sigma_i$  为第  $i$  层输入的方差;  $\gamma_i, \beta_i$  为第  $i$  层可学习的转换系数;  $W_i, b_i$  为全

连接层参数; Attention 指自注意力机制; Conv1D 指  $k$  层的一维卷积操作;  $Y_t^*, Y_t^{**}$  均为中间状态;  $Y_t$  代表第  $t$  个工况下的等离子体状态;  $\hat{Y}$  表示预测值。

## 2.2 模型训练

本研究用一维流体/蒙特卡罗 (MC) 混合模型模拟了平行电极间的容性耦合氩气放电。具体放电参数如下: 放电间距 3 cm, 采用 13.56 MHz 正弦电压源驱动, 背景气体温度设置为 300 K, 具体化学反应遵循参考文献 [37]。本文以气压 (100—3000 mTorr (1 mTorr  $\approx$  0.133 Pa)) 和驱动电压 (50—400 V) 变化所产生的电子密度、电子温度及电场的空间平均轴向空间分布构成代理模型的数据集。该数据集的数据按电压/气压升序排列, 默认前 75% 数据用于训练, 后 25% 用于外推测试。同时, 为了验证流体/MC 的模拟, 也采用 PIC 模型对放电进行了复现。

图 2(a) 和图 2(b) 分别展示了流体/MC 模型 [38] 与 PIC 模型 [37] 在不同气压和电压下获得的时间平均电子密度、电场和温度的空间分布。可以看出, 在 100—1280 mTorr 气压范围内, 两种模型得到的时间平均电子密度和电场空间分布具有良好的 consistency。然而在 300 mTorr 以下气压区间, 电子温度开始出现明显差异。当电压在 50—345 V 之间变化时, 两种模型的电子密度与温度分布差异更为显著。上述差异主要源于 PIC 模型在批量运行时无法自动调整参数所引入的数值误差。为保证数值稳定性和物理准确性, 原则上 PIC 模拟的关键参数 (如时间步长、网格尺寸、宏粒子权重等) 需要根据不同的放电条件 (如气压、电压) 进行精细的手动调节, 以同时满足 Courant 条件、解析德拜长度和等离子体频率等要求。在需要进行上万次参数扫描以生成数据集的场景, 为每个工况点自动寻找并设置最优的模拟参数是一个非常棘手且耗时的工程问题, 难以实现高效、一致的自动化流程。如果采用统一的权重、时间步长以及网格尺寸, 自动化批量运行下就会出现计算误差, 采用这样批量化数据训练神经网络模型就会得到错误的结论。

本研究的神经网络采用均方误差 (MSE) 损失函数进行训练 (损失函数  $\text{Loss} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (Y_j - Y_j^*)^2$ )。图 3 展示前馈神经网络 (FNN)、注意力

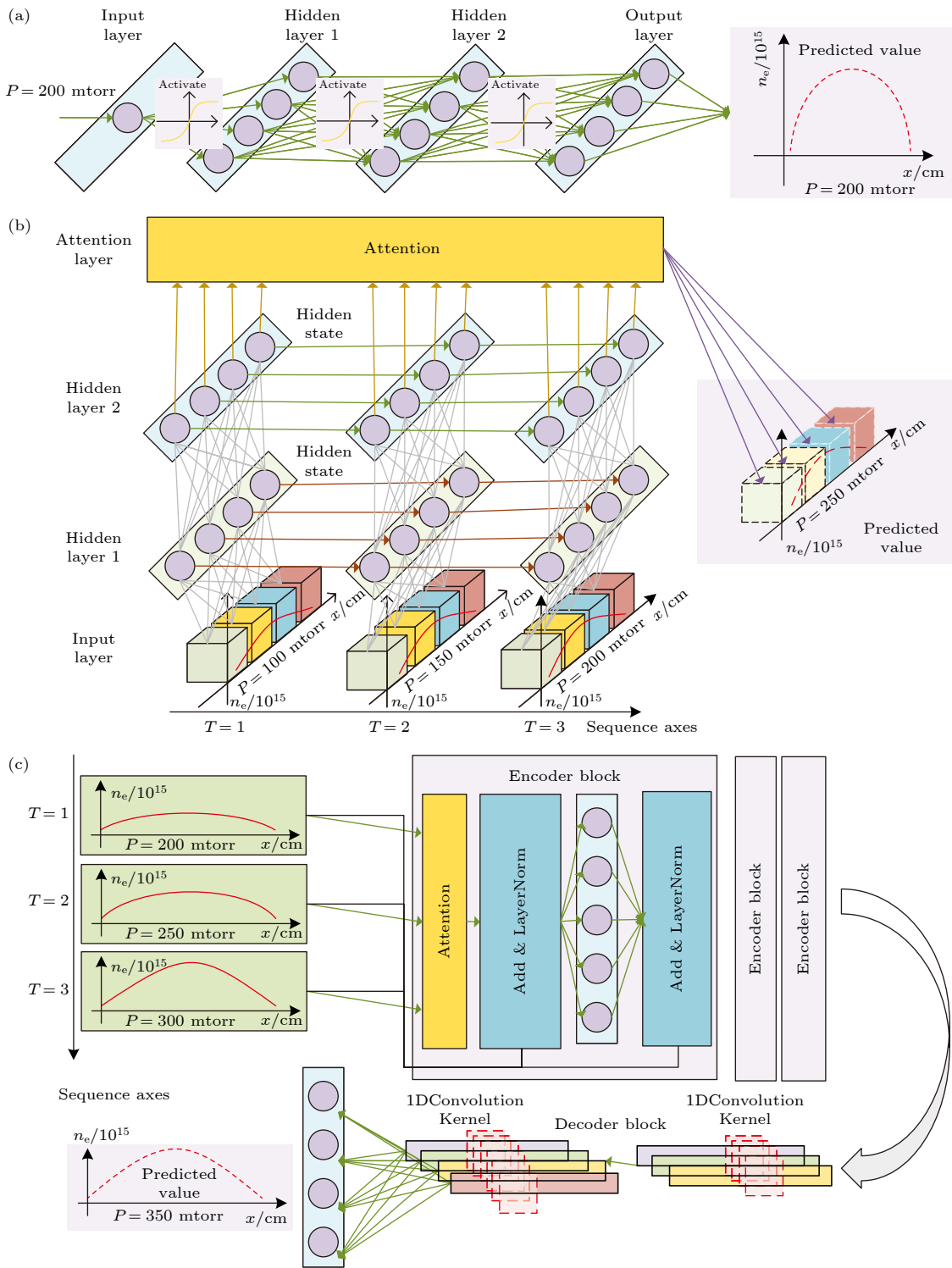


图 1 神经网络架构示意图 (a) 前馈神经网络 (FNN) 结构; (b) 注意力增强型长短期记忆网络 (ALSTM) 结构, 将等离子体状态演化视为序列预测任务; (c) 卷积-Transformer 混合网络 (CTransformer) 结构, 采用 Transformer 编码器与 CNN 解码器架构

Fig. 1. Schematic of the neural network architectures: (a) Feedforward neural network (FNN) structure; (b) attention-enhanced long short-term memory (ALSTM) structure, which treats plasma state evolution as a sequence prediction task; (c) hybrid convolutional-transformer (CTransformer) structure, employing a Transformer encoder and a CNN decoder.

增强型长短期记忆网络 (ALSTM) 和混合卷积-Transformer 网络 (CTransformer) 在气压与电压数据集上, 对电子密度 ( $n_e$ )、电场 ( $E$ ) 和电子温度 ( $T_e$ ) 训练时损失函数的收敛曲线. 图中纵轴表

示损失函数的负对数值 ( $-\log_{10} \text{Loss}$ ), 该曲线值越高代表实际训练损失越低, 模型的预测精度越高. 从图中可以观察到, 所有模型在训练初期 (约前 2500 个训练周期) 均表现出损失值快速下降

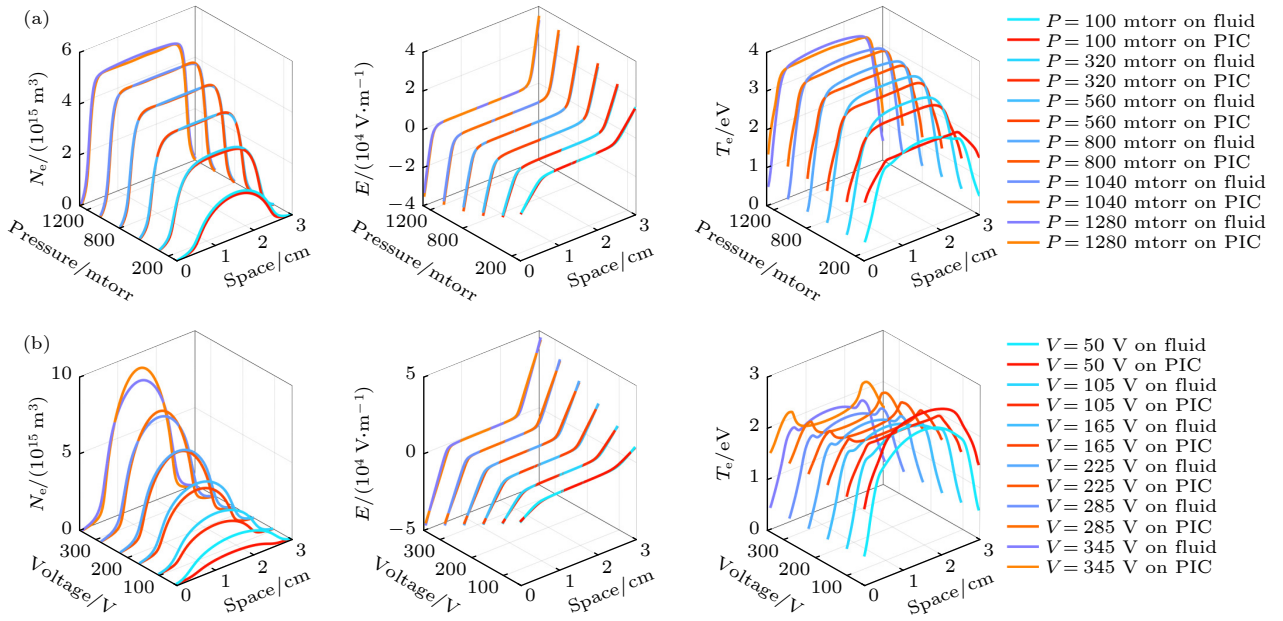


图 2 (a) 和 (b) 分别展示了不同气压和电压下, 时间平均电子密度、电场以及电子温度的轴向空间分布, 红色系为流体模型仿真结果, 蓝色系为 PIC 模型仿真结果

Fig. 2. Time-averaged spatial profiles of electron density, electric field, and temperature under scans of (a) gas pressure and (b) driving voltage, used for dataset generation. The red-colored series represents fluid model simulation results, while the blue-colored series represents PIC model results.

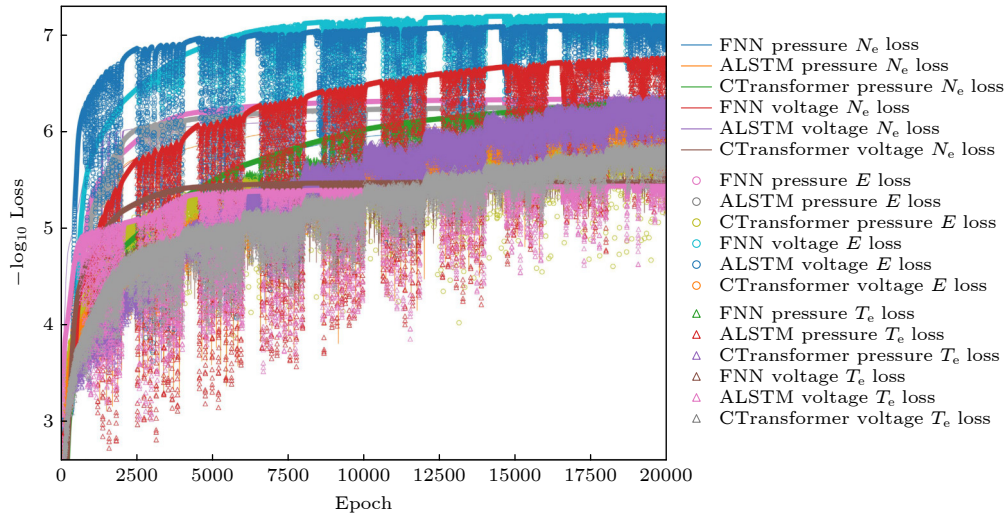


图 3 FNN, ALSTM 与 CTransformer 模型对电子密度 ( $n_e$ )、电场 ( $E$ ) 和电子温度 ( $T_e$ ) 在气压和电压数据集上的训练损失收敛曲线, 其中损失代表了模型的误差情况. 横轴代表训练迭代次数 (number of iterations), 纵轴表示损失的负对数值 ( $-\log_{10} \text{Loss}$ )

Fig. 3. Convergence curves of training loss for the FNN, ALSTM, and CTransformer models on the electron density ( $n_e$ ), electric field ( $E$ ), and electron temperature ( $T_e$ ) datasets, where the loss values reflect the models' error performance. The horizontal axis represents the number of training iterations. The vertical axis represents the negative logarithm of the loss ( $-\log_{10} \text{Loss}$ ).

(体现为曲线数值的急剧上升), 随后收敛速度减缓, 曲线进入振荡性动态平衡阶段, 说明模型训练已基本完成.

为评估下文讨论中模型的表现, 本研究采用深度学习回归任务中广泛使用的两个指标, 即归一化绝对误差 (the normalized absolute error, NAE)

和归一化平均绝对误差 (the normalized mean absolute error, NMAE), 分别用于评估单个预测结果与整体模型性能. 首先单个样本  $i$  的 NAE 定义为

$$\text{NAE}_i = \frac{|Y_i^* - Y_i|}{Y_{\max} - Y_{\min}}. \quad (4)$$

NMAE 定义为数据集中所有  $N$  个样本的 NAE 平均值, 该指标为模型整体准确度提供了统一的评估标准,

$$\text{NMAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{NAE}_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|Y_i^* - Y_i|}{Y_{\max} - Y_{\min}}, \quad (5)$$

其中,  $Y_i$  表示真实值,  $Y_i^*$  表示预测值,  $N$  为样本总数,  $Y_{\max}$  和  $Y_{\min}$  分别代表整个数据集中真实值的最大值和最小值. 采用这些标准化指标能够为模型预测精度提供全面且尺度无关的评估, 从而确保评估结果的稳健性和可比性.

### 3 结果和讨论

#### 3.1 模型结果

图 4 比较了三种神经网络模型在气压与电压数据集上的预测性能. 所有模型均成功学习了 CCP 放电的基本物理图像, 但不同架构在预测精度和效率方面表现出显著差异. 为全面评估模型的预测能力, 本文采用整体误差进行量化比较. 整体误差通过计算测试集 (包含所有电压和气压测试集) 中电子密度、电子温度及电场的归一化平均绝

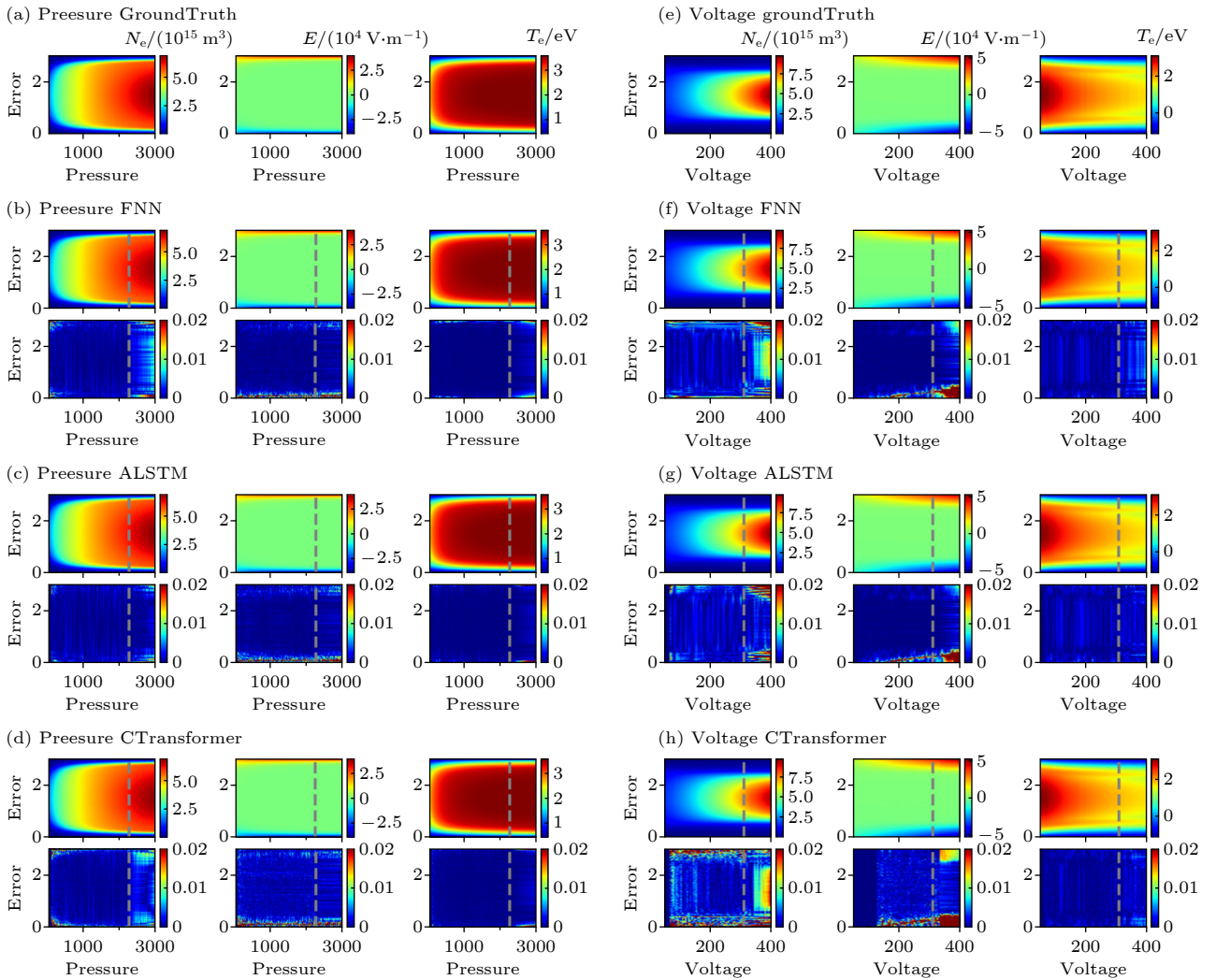


图 4 时间平均的电子密度、电场和温度的空间分布 (a), (e) 显示了流体/MC 模拟的真实值; FNN ((b), (f))、ALSTM ((c), (g)) 和 CTransformer ((d), (h)) 模型的预测结果与真实值在不同气压 (左列, (b)–(d)) 和电压 (右列, (f)–(h)) 条件下的对比. 各模型的子图中均展示了预测结果及其归一化绝对误差 (NAE) 分布. 垂直虚线将训练数据 (左侧) 与测试数据 (右侧) 分隔开来

Fig. 4. Time-averaged spatial profiles of electron density, electric field, and temperature. Panels (a), (e) show the ground truth from a fluid/MC simulation. Predictions from the FNN ((b), (f)), ALSTM ((c), (g)), and CTransformer ((d), (h)) models are compared against the ground truth under varying pressure (left columns, (b)–(d)) and voltage (right columns, (f)–(h)). Each panel for the models shows the prediction and its normalized absolute error (NAE) distribution. The vertical dashed line separates the training data (left) from the test data (right).

对误差 (NMAE) 的总和得出. 如表 1 所列, ALSTM 模型以 1.73% 的整体误差展现出最高精度, 优于 FNN(2.78%) 和 CTransformer(3.30%). 在计算效率方面, 这些数据驱动模型展现出显著优势. 与传统流体模型 (>4680 s) 和 PIC 模型 (>7200 s) 相比, CTransformer (75.6 s)、FNN (36 s) 和 ALSTM (93.6 s) 均实现了计算时间的大幅减少, 训练时间仅需分钟量级, 而后续预测仅需毫秒级时间.

表 1 神经网络与传统模型在低温等离子体仿真中的对比

Table 1. Comparison of neural network and traditional models in low-temperature plasma simulation.

算法	整体误差/%	求解时间/s	推理时间/s
Fluid model	0	> 4680	
PIC model	42.53	> 7200	
FNN	2.78	36.0	0.00041
ALSTM	1.73	93.6	0.00849
CTransformer	3.30	75.6	0.00158

为更深入地理解模型精度差异并探究模型的潜在缺陷, 本文进一步对预测结果进行了详细分析, 并探究了图 4 中归一化绝对误差 (NAE) 的空间分布. ALSTM 模型 (图 4(c)、图 4(g)) 预测的电子密度、电场强度和电子温度在视觉上与真实值 (图 4(a)、图 4(e)) 几乎无法区分, 其 NAE 分布在整个参数空间均保持在较低水平. 相比之下, FNN 模型在电子密度上 (图 4(b)、图 4(f)) 虽能较好地捕捉基本分布特征, 但在测试集 (图中虚线右侧区域) 中仍然存在明显误差, 主要集中在气压数据集的等离子体区域和鞘层区域, 以及在电压数据集的等离子体区域. 出乎意料的是, 尽管 CTransformer (图 4(d)、图 4(h)) 结构更为先进, 但其 NAE 分布与 FNN 模型相似, 并未展现出更优越的预测能力. 我们推测, 造成这一现象的原因在于 Transformer 模型的复杂性与当前数据集的特性不相匹配. Transformer 架构通常需要大规模、高维的数据才能充分发挥其优势. 然而, 本研究中的等离子体参数序列在长度和维度上均相对有限, 因此, 结构更为简洁的 ALSTM 凭借其高效的序列处理机制, 反而取得了更好的性能.

### 3.2 非对称外推

为探究神经网络模型所学物理规律的普适性, 本研究设计了严格的交叉外推实验. 数据集被严

格划分为低气压/低电压区间和高气压/高电压区间, 使模型在某一区间训练后而在另一区间测试. 图 5(a) 揭示了一种非对称推理现象. 在低气压域 (100—1540 mTorr) 训练后, 所有三种模型都能有效外推至未见的高气压域 (1540—2840 mTorr), 预测值 (彩色点) 与真实值 (黑色曲线) 几乎完全重合. 然而当任务反转时, 模型在高气压域训练后预测低压条件的能力急剧下降. 例如在 220 mTorr 工况下, 基于高气压数据训练的 FNN 和 CTransformer 模型预测的电子密度偏高, 尤其是 CTransformer 模型错误地将等离子体区的电子密度预测为近  $5 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}$  (真实值约  $2.5 \times 10^{15} \text{ m}^{-3}$ ). 虽然 ALSTM 对等离子体区电子密度的预测较为合理, 但在鞘层区域呈现出偏差.

这种非对称性源于在低气压域训练的模型, 不仅学习了以局域碰撞效应主导的高气压等离子体特性, 还学习了描述非局域效应的低气压等离子体特征. 当它被用于预测高气压工况时, 这些复杂的规律可以自然地退化为以碰撞效应为主导的高气压等离子体状态, 因此表现出优异的泛化能力. 反之, 在高气压域训练的模型, 学到的主要是基于局域碰撞的等离子体状态. 它从未见识过低气压下的非局域等离子体特征. 当要求它预测低气压等离子体状态时, 模型缺乏描述这些关键物理过程的必要信息, 相当于进行了一次物理规律超出范围的外推, 导致误差急剧增大. 这种非对称性本质上反映了从包含更多物理规律的物理模型向简化、特定模型的推理, 远比反向过程更容易.

此外, 本文从模型权重角度出发探究了导致非对称推理的可能原因. 如图 6 所示, 两个模型均在鞘层区域赋予了显著高于主体等离子体区域的权重, 形成了左右鞘层位置的两个峰值. 在主体等离子体区域, 两种模型的权重分布均呈现数值较低的振荡, 但并未表现出本质差异. 然而, 细致的比较发现, 低气压模型在鞘层峰值处的权重略高于高气压模型, 这种权重分配上的差异, 或许可解释高气压模型在预测新工况下的等离子体密度时, 其表现会因未能充分捕捉鞘层的关键动态而受到影响 (或预测精度下降).

与气压数据集形成鲜明对比的是, 电压数据集展现出稳健的对称推理特性 (图 5(b)). 无论从低电压外推至高电压还是反向推断, FNN 和 ALSTM 均表现出优异的预测精度. 这种对称性的根源在于

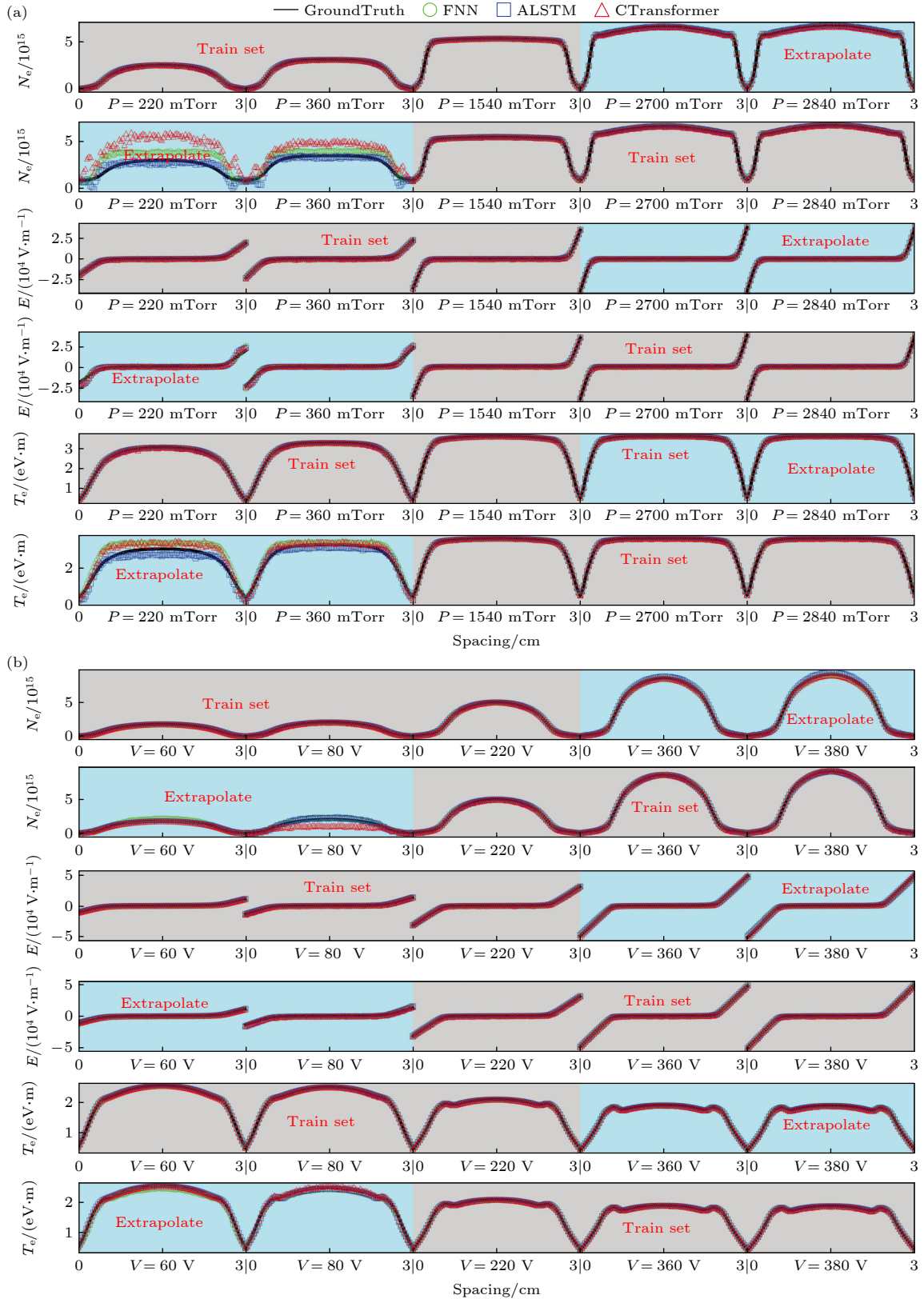


图 5 FNN, ALSTM 和 CTransformer 模型在 (a) 气压数据集和 (b) 电压数据集上对电子密度、电场和电子温度的时间平均空间分布的外推性能 (极板间距为 0—3 cm). 蓝色阴影区域表示外推集, 灰色阴影区域表示训练集

Fig. 5. Extrapolation performance of FNN, ALSTM, and CTransformer for time-averaged spatial profiles of electron density, electric field, electron temperature on (a) the pressure set and (b) the voltage set (Electrode spacing is 0–3 cm). The blue-shaded area represents the extrapolation set, while the gray-shaded area is the training set.

在固定气压下, 改变驱动电压主要影响注入等离子体的总功率, 导致电子密度等参数的量级变化, 但不会改变等离子体中的主导加热机制. 研究还观察到 CTransformer 模型在外推至 80 V 时表现不佳, 但其在 60 V 的预测再次接近真实值. 这表明 CTransformer 模型在推断低压 CCP 放电状态时存在不稳定性.

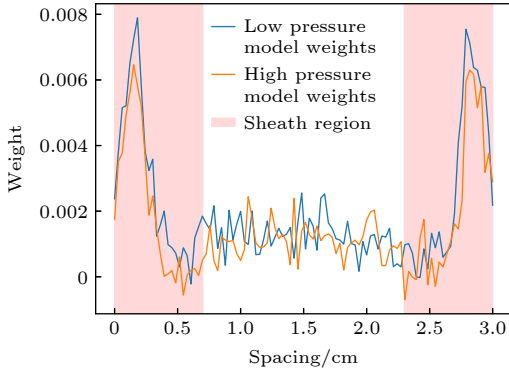


图 6 ALSTM 的输入层权重分布图, 其中蓝线和黄线分别为基于低气压和高气压数据训练的 ALSTM 模型的输入层权重分布, 红色区域为鞘层权重分布

Fig. 6. The weight distribution map of the input layer for the ALSTM model, where the blue and yellow lines represent the input layer weight distributions of the ALSTM models trained using low-pressure and high-pressure data, respectively, with the red region indicating the sheath layer weight distribution.

### 3.3 训练集长度对外推的影响

任何数据驱动模型的外推能力都不是无限的. 为量化模型的外推边界, 图 7 与图 8 系统展示了模型外推性能对训练集规模的依赖. 通过联合分析预测电子密度和电子温度的空间分布 (图 7(a) 与图 7(b)) 与对应归一化平均空间绝对误差 (NMAE) (图 8(a) 与图 8(b)), 本研究将 5% 的归一化平均空间绝对误差确立为预测可靠性的临界阈值. 归一化平均空间绝对误差的计算方法为在固定电压或气压设置下, 对电子密度轴向空间归一化绝对误差 (NAE) 值取平均.

如图 7(a) 所示, 当在电压数据集的前 10% 上进行训练时, FNN(前馈神经网络) 预测的电子密度分布曲线在外推至训练区域外 20% 的总电压范围时, 开始与真实值出现显著偏差. 此时, 它的归一化平均空间绝对误差也达到了 5% (图 8(a)), 而 ALSTM 和 CTransformer 预测的空间分布与流体模型计算出的结果依然保持一致. 当训练集扩大至总数据的 20% 时, ALSTM 即便在外推距离达到 50% 的总电压范围时, 预测的电子密度分布依然与真实值高度符合, 且归一化平均空间绝对误差稳定在 5% 以下. 相比之下, FNN 和 CTransformer 在外推到 30% 的总电压范围时, 预测的空间分布

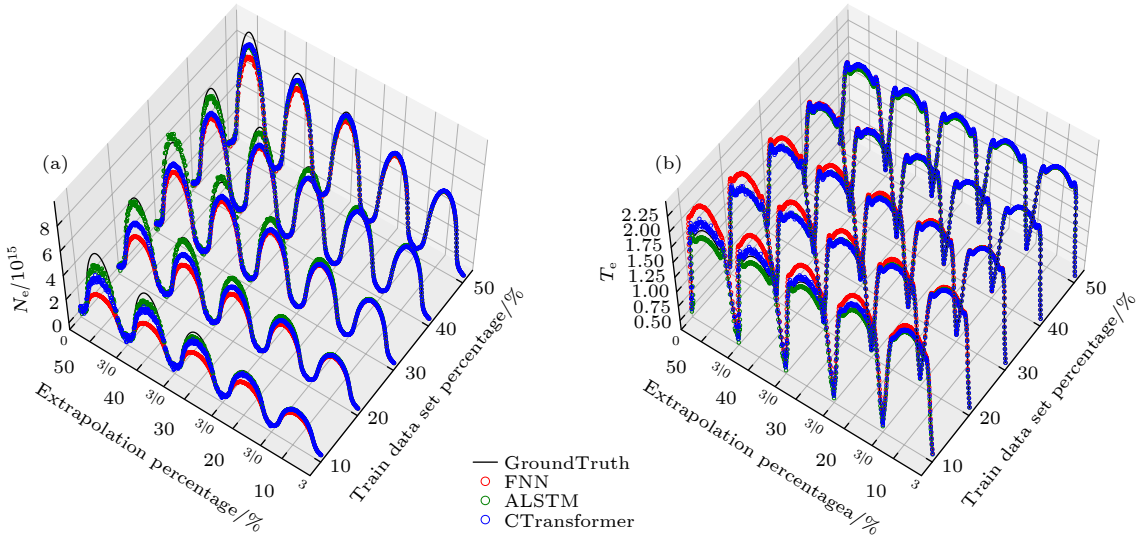


图 7 FNN、ALSTM 和 CTransformer 模型在不同电压数据集 (总电压范围 50—400 V 的 10%—50% 子集) 上训练时在不同外推距离下预测的电子密度 (a) 和电子温度 (b) 空间分布. 而外推距离是指从各自训练集边界开始计算的总电压参数范围的 10%, 20%, 30%, 40% 和 50%. GroundTruth 是指流体模拟的数据

Fig. 7. Spatial distributions of electron density (a) and electron temperature (b) predicted by FNN, ALSTM, and CTransformer models at different extrapolation distances when trained on distinct voltage datasets (10%–50% subsets of the total voltage range 50–400 V). These extrapolation distances correspond to 10%, 20%, 30%, 40%, and 50% of the total voltage parameter range calculated from the respective training set boundaries. GroundTruth refers to data from fluid simulations.

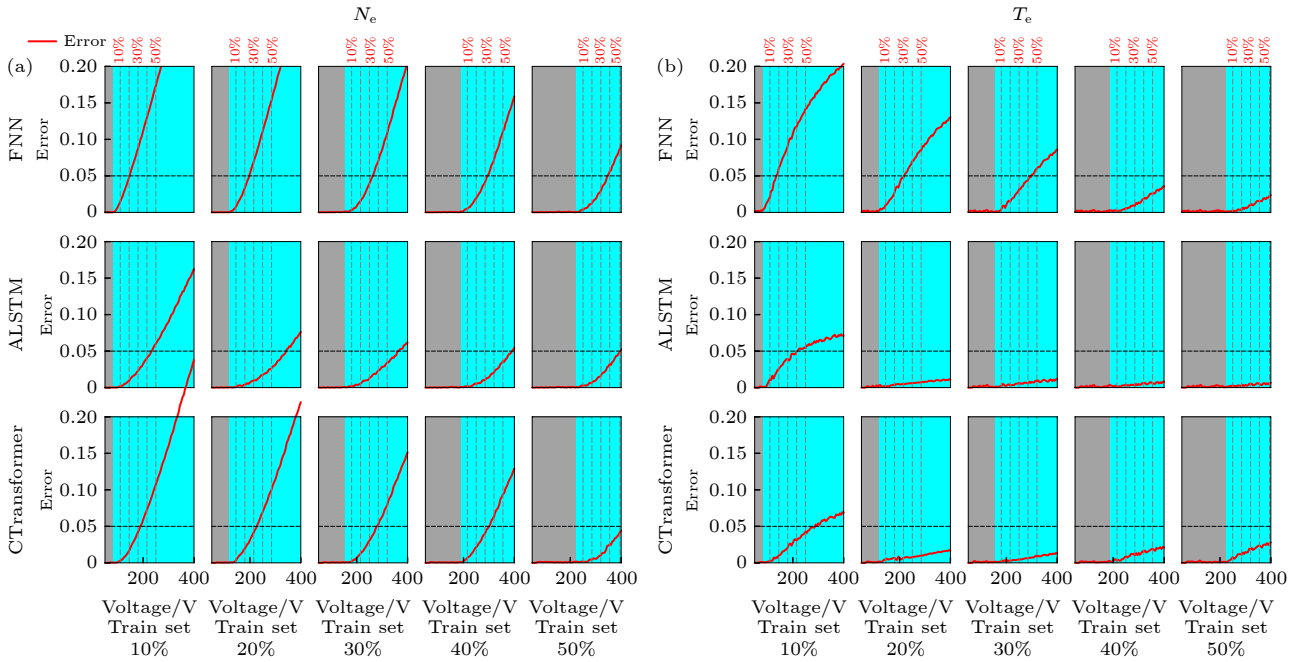


图 8 FNN、ALSTM 和 CTransformer 模型在不同电压数据集(总电压范围 50—400 V 的 10%—50% 子集)上训练时电子密度 (a) 和电子温度 (b) 的归一化平均空间绝对误差随电压的变化函数. 图中垂直虚线标记了图 7(a), (b) 中所示的具体外推距离

Fig. 8. The normalized mean spatial absolute error of electron density (a) and electron temperature (b) as a function of voltage for FNN, ALSTM, and CTransformer models trained on different voltage datasets (10%–50% subsets spanning the total voltage range of 50–400 V). Vertical dashed lines in the figure mark the specific extrapolation distances shown in Figure 7(a), (b).

已严重失真, 归一化平均空间绝对误差也已远超 5% 的阈值. 这一规律在更大的训练集以及对电子温度的预测中同样适用 (图 8(b)). 这揭示了任何模型的部署都必须伴随着对其训练数据覆盖范围的严格评估, 以防止在未知领域中产生具有误导性的伪预测.

进一步通过归一化平均空间绝对误差增长率评估了模型的外推性能. 如图 8(a) 所示, ALSTM 的电子密度的归一化平均绝对误差随外推电压的增长速率仅为 0.42%/V, 显著低于 CTransformer (0.69%/V) 和 FNN(1.24%/V). 这种更平缓的误差斜率意味着 ALSTM 模型在达到归一化平均空间绝对误差 5% 失效阈值前能探索更广阔参数空间. 然而, 上述关于模型外推性能的结论严格依赖于训练数据的来源. 本文所建立的外推可信边界基于流体模型, 若将该模型用于 PIC 模型生成的数据, 则需要额外考虑流体模型与 PIC 模型之间的固有数据差异所带来的误差.

## 4 结 论

本文系统地评估了三种深度学习架构在容性耦合 Ar 等离子体代理建模中的性能. 我们发现,

基于序列建模的 ALSTM 架构, 在精度 (电子密度、电场强度和电子温度整体误差为 1.73%) 和速度 (将预测时间从数小时缩短至毫秒级) 上取得了最佳平衡, 同时也具备更远的外推能力, 是 CCP 代理建模的优选方案. 本文还发现了模型的非对称推理特性. 神经网络模型通过学习以局域效应为主的高气压特性和描述非局域效应的低气压特征, 能够成功预测高气压条件下等离子体的空间分布, 反之失败. 此外, 本文系统地评估了模型外推性能与训练数据规模的依赖关系, 以 5% 的归一化平均空间绝对误差作为判断预测可靠性的临界阈值, 一旦误差超过此阈值, 预测的等离子体状态的空间分布将与真实物理分布产生显著偏离. 本研究为容性耦合等离子体代理模型划定了一个明确且量化的可信边界. 任何模型的部署都必须伴随着对其训练数据覆盖范围的严格评估, 以防止在未知领域中产生具有误导性的伪预测, 确保代理模型在科学探索和工程应用中的可靠性.

本文展示了一维 CCP 放电代理模型的潜力, 将其推广至二维/三维结构及多组分反应气体是未来研究的重点和难点. 这需要模型架构能够处理高维空间数据, 并能容纳气体组分、化学反应等多维

输入特征. 虽然模型升级在理论上可行, 但在实现过程中需要获取大规模、高保真的仿真数据. 因此, 开发高效的数据生成策略或探索物理信息神经网络等少数数据依赖的方法, 将是实现该技术工业化应用的关键突破口.

## 代码与数据可用性声明

本文所使用的 Python 代码及相关数据集均存放于以下 GitHub 仓库中, 可供访问与下载: <https://github.com/XiaoYu/dl4ccp>.

## 参考文献

- [1] Kim H C, Iza F, Yang S S, Radmilović-Radjenović M, Lee J K 2005 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **38** R283
- [2] Wang X C, Zhang Y T 2023 *J. Appl. Phys.* **133** 143301
- [3] Zhang Y T, Gao S H, Zhu Y Y 2023 *J. Appl. Phys.* **133** 053303
- [4] Sethi S P, Das D P, Behera S K 2023 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **51** 1434
- [5] Kim B, Im S, Yoo G 2021 *Electronics* **10** 49
- [6] Xiao T Q, Wu Z, Christofides P D, Armaou A, Ni D 2021 *Ind. Eng. Chem. Res.* **61** 638
- [7] Liao L C K, Huang C J, Chen C C, Huang C S, Chen T, Lin S C, Kuo L C 2002 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **71** 169
- [8] Pan J, Liu Y, Zhang S, Hu X C, Liu Y D, Shao T 2023 *Energy Convers. Manage.* **277** 116620
- [9] Wan C G, Yu Z, Wang F, Liu X J, Li J G 2021 *Nucl. Fusion* **61** 066015
- [10] Yang Y, Yang S, Li C, Yu Z H 2021 *IEEE Access* **9** 67232
- [11] Borghei M, Ghassemi M 2022 *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.* **29** 319
- [12] Seo J, Kim S, Jalalvand A, Conlin R, Rothstein A, Abbate J, Erickson K, Wai J, Shousha R, Kolemen E 2024 *Nature* **626** 746
- [13] Dave B, Patel S, Shivani R, Purohit S, Chaudhury B 2022 *Contrib. Plasma Phys.* **63** e202200051
- [14] Marvin M, Seymour P 1969 *MIT Press* **6** 318
- [15] Riedmiller M 1994 *Computer Standards & Interfaces* **16** 265
- [16] Krizhevsky A, Sutskever I, Hinton G E 2012 *Proceedings of the 26th International Conference on Neural Information Processing Systems* Lake Tahoe, USA, December 3-6, 2012 p1097
- [17] Elman J L 1990 *Cognitive Science* **14** 179
- [18] Hpchreiter S, Schmidhuber J 1997 *Neural Computation* **9** 1735
- [19] Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, Uszkoreit J, Jones L, Gomez A N, Kaiser Ł, Polosukhin 2017 *Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems* Long Beach, USA, December 4-9, 2017 p6000
- [20] Liu Z M, Wang Y X, Vaidya S, Ruehle F, Halverson J, Soljačić M, Hou Y T, Tegmark M 2024 2404.19756v5[cs.LG]
- [21] Von R L, Maryer S, Beckh K, Georgiev B, Giesselbach S, Heese R, Kirsch B, Pfrommer J, Pick A, Ramamurthy R, Walczak M, Garcke J, Bauckhage C, Schuecker J. 2021 *IEEE Trans. Knowl. Data Eng.* **35** 614
- [22] Willard J, Jia X, Xu S M, Steinbach M and Kumar V 2020 arXiv: 2003.04919v6[physics.comp-ph]
- [23] Basir S 2022 arXiv: 2209.09988v3[cs.LG]
- [24] Luo X, Yuan S Y, Tang H W, Xu D, Ran Q H, Cen Y H, Ling D F 2024 *Hydrol. Processes* **38** e15143
- [25] Li J, Wu X, Li Z 2025 *Appl. Ocean Res.* **161** 104661
- [26] Guo Y, Li L, Xiang Z, Gui J, Shi S, Lei Z, Xu X 2025 *Atomic Energy Science and Technology* **59** 1085
- [27] Li W K, Zhang Y T 2025 *J. Appl. Phys.* **137** 203304
- [28] Noh H, Lee J, Yoon E 2025 *J. Comput. Phys.* **523** 113665
- [29] Shi H Y, Wang S, Wang P Y 2024 *J. Environ. Chem. Eng.* **12** 112998
- [30] Marcus G 2018 arXiv: 1801.00631v1[cs.AI]
- [31] Battaglia P W, Hamrick J B, Bapst V, Sanchez-Gonzalez A, Zambaldi V, Malinowski M, Tacchetti A, Raposo D, Santoro A, Faulkner R, Gulcehre C, Song F, Ballard A, Gilmer J, Dahl G, Vaswani A, Allen K, Nash C, Langston V, Dyer C, Heess N, Wierstra D, Kohli P, Botvinick M, Vinyals O, Li Y, Pascanu R 2018 arXiv: 1806.01261v3[cs.LG]
- [32] Xu K, Zhang M, Li J, Du S S, Kawarabayashi K I, Jegelka S 2020 arXiv: 2009.11848v5[cs.LG]
- [33] Wu Y, Zhu Z, Liu F, Chrysos G, Cevher V 2022 *Advances in Neural Information Processing Systems* **35** 26980
- [34] Hestness J, Narang S, Ardalani N, Diamos G, Jun H, Kianinejad H, Patwary M M A, Yang Y, Zhou Y Q 2017 arXiv: 1712.00409v1[cs.LG]
- [35] Manzhos S, Ihara M 2023 *J. Phys. Chem. A* **127** 7823
- [36] Jain S, Wallace B C 2019 arXiv: 1902.10186v3[cs.CL]
- [37] Donko Z, Derzsi A, Vass M, Horvth B, Wilczek S, Horvath B, Hartmann P 2021 *Plasma Sources Sci. Technol.* **30** 095017
- [38] Jia W Z, Zhang Q Z, Wang X F, Song Y H, Wang Y N 2019 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **52** 015206

SPECIAL TOPIC—Non-equilibrium transport and active control strategy in low-temperature plasmas

## Capacitively coupled argon plasmas fluid simulations with deep learning surrogate model: Asymmetric inference and quantitative trust boundaries\*

LI Jingyu<sup>1)</sup> JIANG Xingzhao<sup>2)</sup> HE Qian<sup>1)</sup> ZHANG Yifan<sup>2)</sup> WU Tong<sup>1)</sup>  
JIANG Senzhong<sup>1)</sup> SONG Yuanhong<sup>2)</sup> JIA Wenzhu<sup>1)†</sup>

1) (*College of Artificial Intelligence, Southwest University, Chongqing 400715, China*)

2) (*Department of Physics, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China*)

( Received 19 September 2025; revised manuscript received 9 October 2025 )

### Abstract

Fluid simulations of capacitively coupled plasmas (CCPs) are crucial for understanding their discharge physics, yet the high computational cost results in a major bottleneck. To overcome this limitation, we develop a deep learning-based surrogate model to replicate the output of a one-dimensional CCP fluid model with near-instantaneous inference speed. Through a systematic evaluation of three architectures, i.e. feedforward neural network (FNN), attention-enhanced long short-term memory network (ALSTM), and convolutional-transformer hybrid network (CTransformer) it is found that the sequence-structured ALSTM model can achieve the optimal balance between speed and accuracy, with an overall prediction error of only 1.73% for electron density, electric field, and electron temperature in argon discharge. This study not only achieves significant simulation acceleration but also reveals that the model can accurately extrapolate from low-pressure conditions dominated by complex non-local effects to high-pressure conditions governed by simple local behavior, whereas the reverse extrapolation fails. This finding suggests that training under low-pressure conditions enables the model to capture more comprehensive physical features. From the perspective of model weights, both low-pressure and high-pressure models assign important weights to the sheath region. However, the low-pressure model exhibits higher weight peaks in the sheath, indicating stronger ability to capture the essential physics of sheath dynamics. In contrast, the high-pressure model, because of its lower weighting in the sheath region, may fail to adequately resolve complex sheath dynamics when predicting under new operating conditions, thereby limiting its extrapolation capability with high fidelity. To ensure the reliability of this data-driven model in practical applications, we establish a trust boundary with a normalized mean absolute spatial error of 5% for model performance through systematic extrapolation experiments. When the model's extrapolation error falls below this threshold, the spatial distribution curves of predicted parameters such as electron density and electron temperature closely match the true physical distributions. However, once the error exceeds this critical point, systematic deviations such as morphological distortion and amplitude discrepancies begin to appear in the predicted spatial distributions, significantly deviating from the true physical laws. In the future, we will develop neural network models capable of processing high-dimensional spatial data and combining multi-dimensional input features such as various discharge gases, ultimately realizing a dedicated AI model for the field of capacitively coupled plasmas.

**Keywords:** capacitively coupled plasma, fluid simulation, deep learning, inference capabilities

**PACS:** 52.65.-y

**DOI:** 10.7498/aps.74.20251290

**CSTR:** 32037.14.aps.74.20251290

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12020101005, 12475202).

† Corresponding author. E-mail: [jiawenzhu@swu.edu.cn](mailto:jiawenzhu@swu.edu.cn)



深度学习代理模型的容性耦合氩等离子体流体模拟：非对称推理与定量可信边界

李靖宇 蒋星照 何倩 张逸凡 吴桐 姜森钟 宋远红 贾文柱

**Capacitively coupled argon plasmas fluid simulations with deep learning surrogate model: Asymmetric inference and quantitative trust boundaries**

LI Jingyu JIANG Xingzhao HE Qian ZHANG Yifan WU Tong JIANG Senzhong SONG Yuanhong  
JIA Wenzhu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 235205 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20251290

CSTR: 32037.14.aps.74.20251290

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251290>

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

容性耦合等离子体中电子加热过程及放电参数控制

Electron heating dynamics and plasma parameters control in capacitively coupled plasma

物理学报. 2021, 70(9): 095214 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210473>

超低频/射频联合驱动容性耦合等离子体中二次电子效应的模拟

Numerical investigation of the secondary electron effect in capacitively coupled plasmas driven by ultra-low frequency/radio frequency sources

物理学报. 2025, 74(13): 135203 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250341>

磁等离子体发动机中磁喷管分离过程的流体模拟

Fluid simulation for detachment process in magnetic nozzle of magnetoplasma rocket engine

物理学报. 2024, 73(10): 105201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231862>

容性耦合硅烷等离子体尘埃颗粒空间分布的二维流体模拟

Two-dimensional fluid simulation of spatial distribution of dust particles in a capacitively coupled silane plasma

物理学报. 2023, 72(16): 165202 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230686>

基于深度学习的相位截断傅里叶变换非对称加密系统攻击方法

Attacking asymmetric cryptosystem based on phase truncated Fourier transform by deep learning

物理学报. 2021, 70(14): 144202 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202075>

基于深度学习的流场时程特征提取模型

Flow feature extraction models based on deep learning

物理学报. 2022, 71(7): 074701 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211373>