

# 反演光刻技术中的理论与算法

(申请清华大学理学博士学位论文)

培养单位：数学科学系

学 科：数学

研 究 生：刘 海 波

指导教师：陈 俊 清 副教授

二〇二五年五月



# **Theories and Algorithms in Inverse Lithography Technology**

Dissertation submitted to

**Tsinghua University**

in partial fulfillment of the requirement

for the degree of

**Doctor of Philosophy**

in

**Mathematics**

by

**Liu Haibo**

Dissertation Supervisor: Associate Professor Chen Junqing

**May, 2025**



## 学位论文公开评阅人和答辩委员会名单

### 公开评阅人名单

张立平	教授	清华大学数学科学系
杨家青	教授	西安交通大学数学与统计学院
崔涛	研究员	中国科学院数学与系统科学研究院
刘勇	副研究员	中国科学院数学与系统科学研究院

### 答辩委员会名单

主席	黄忠亿	教授	清华大学数学科学系
	刘晓东	研究员	中国科学院数学与系统 科学研究院
	刘勇	副研究员	中国科学院数学与系统 科学研究院
委员	张立平	教授	清华大学数学科学系
	邱凌云	副教授	清华大学丘成桐数学科 学中心
	陈俊清	副教授	清华大学数学科学系
	李宏杰	助理教授	清华大学丘成桐数学科 学中心
秘书			



## 摘要

反演光刻技术是计算光刻技术的一种，通过软件和高性能计算模拟光刻过程中的光学和化学过程，以增大最小可分辨特征尺寸，指导工艺参数优化。本文针对反演光刻技术中的关键挑战，发展了一系列创新性理论与算法。

针对薄掩模近似下的反演光刻算法计算效率不高以及没有收敛性保证的问题，本文提出了一种基于交替方向乘子法框架的反演光刻算法，反演光刻问题的目标函数被设计为包括三项：晶圆上的成像与目标图案之间的误差函数、确保掩模是二值函数的惩罚项以及全变差正则项。为了数值求解这一优化问题，通过变量分离，我们为原始目标函数引入了增广拉格朗日函数。在交替方向乘子法方法的框架下，反演光刻问题被分解为多个子问题，每个子问题都可以得到高效的解决。我们给出了对所提算法的收敛性分析。相比现有方法，我们提出的算法避免了对晶圆上图像全变差的繁琐计算，并具有良好的收敛性保证。

为了高效求解三维障碍物反散射问题，本文将曲面的隐式神经网络表示引入到对这一问题的解决中。曲面的隐式神经网络表示对于给定的形状类别具有出色的表达能力，这为反散射问题提供了有效的先验信息，从而可以有效降低优化变量的维数，极大简化了计算。本文结合形状优化方法的框架与曲面隐式神经网络表示，提出了一种解决障碍物反散射问题乃至更一般的偏微分方程约束的形状优化问题的新途径。数值实验表明，该方法在保证收敛性的同时，显著提高了计算效率。

在高效求解障碍物反散射算法的基础上，本文通过将反散射过程结合到反演光刻问题的模型中，提出了一种基于曲面隐式神经网络表示的三维掩模反演光刻算法，数值算例验证了所提算法的有效性。这一算法为推动反演光刻技术向更小尺寸发展提供了新思路。

**关键词：**反演光刻技术；交替方向乘子法；形状优化；曲面隐式神经网络表示

## Abstract

Inverse lithography technology is a computational lithography technique that simulates the optical and chemical processes during lithography through software and high-performance computing, aiming to increase the minimum resolvable feature size and guide process parameter optimization. This paper addresses key challenges in inverse lithography technology by developing a series of innovative theories and algorithms.

To address the issues of low computational efficiency and lack of convergence guarantees in inverse lithography algorithms under thin mask approximation, we propose an inverse lithography algorithm based on the Alternating Direction Method of Multipliers (ADMM) framework. The objective function of the inverse lithography problem is designed to include three terms: an error function between the wafer image and the target pattern, a penalty term ensuring the mask is a binary function, and a total variation regularization term. To numerically solve this optimization problem, we introduce an augmented Lagrangian function for the original objective function through variable splitting. Within the ADMM framework, the optimization problem is divided into multiple subproblems, each of which can be efficiently solved, and convergence analysis for the proposed algorithm is provided. Compared to existing methods, our ADMM algorithm avoids the cumbersome calculation of total variation on wafer images and offers good convergence guarantees.

To efficiently solve the three-dimensional obstacle inverse scattering problem, we introduce implicit neural network representation of surfaces into the solution of this problem. The implicit neural network representation of surfaces has excellent expressive power for given shape categories, providing effective prior information for inverse scattering problems, thereby effectively reducing the dimension of optimization variables and greatly simplifying computation. By combining the framework of shape optimization methods with implicit neural network representation of surfaces, we propose an approach to solve obstacle inverse scattering problems and more general shape optimization problems constrained by partial differential equations. Numerical experiments show that this method significantly improves computational efficiency while ensuring convergence.

Based on the efficient algorithm for solving obstacle inverse scattering problems, we propose a three-dimensional mask inverse lithography algorithm based on implicit neural

network representation by incorporating the inverse scattering process into the model of inverse lithography problems. Numerical examples verify the effectiveness of the proposed algorithm. This algorithm provides new ideas for advancing inverse lithography technology toward smaller dimensions.

**Keywords:** Inverse Lithography Technology; Alternating Direction Method of Multipliers; Shape Optimization; Neural Implicit Representation

## 目 录

摘 要.....	I
Abstract.....	II
目 录.....	IV
插图清单.....	VII
第 1 章 绪论 .....	1
1.1 光刻系统成像理论 .....	1
1.2 反演光刻技术简介 .....	7
1.3 已有工作介绍 .....	8
1.4 本文主要创新点 .....	10
1.5 行文结构.....	11
第 2 章 理论基础与相关工具 .....	12
2.1 反问题的正则化方法及 ADMM 算法 .....	12
2.2 边界元方法.....	14
2.3 基于曲面水平集表示的形状优化方法 .....	16
2.4 分数阶索伯列夫空间的预备知识与辅助引理 .....	18
第 3 章 基于 ADMM 的薄掩模反演光刻算法.....	20
3.1 适定性分析 .....	20
3.2 反演光刻问题的 ADMM 方法.....	23
3.2.1 U 子问题.....	24
3.2.2 V 子问题.....	25
3.3 收敛性分析 .....	27
3.4 数值实验.....	32
3.4.1 参数选取策略.....	32
3.4.2 数值算例.....	33
3.4.3 矩形排列结构的优化结果与对比实验.....	34
3.4.4 长条形与复杂混合结构的优化结果分析.....	39
3.5 可制造性约束下的反演光刻优化.....	41
3.5.1 可制造性正则化的数学建模.....	41
3.5.2 可制造性正则化效果验证.....	45
3.5.3 小结.....	49

---

3.6 本章小结.....	50
<b>第 4 章 基于曲面隐式神经网络表示的反散射算法 .....</b>	<b>51</b>
4.1 反散射问题.....	51
4.1.1 Burton-Miller 组合边界积分方程.....	53
4.1.2 障碍物反散射问题.....	54
4.2 基于曲面隐式神经网络表示的形状优化算法.....	55
4.2.1 曲面的隐式神经网络表示.....	56
4.2.2 反散射问题的形状导数.....	57
4.3 收敛性分析.....	60
4.4 数值实验与讨论.....	66
4.4.1 DeepSDF 神经网络的训练.....	67
4.4.2 参数选取.....	67
4.4.3 全孔径数据反演.....	68
4.4.4 利用反向散射远场数据进行反演.....	70
4.4.5 使用无相位数据进行进一步验证.....	71
4.4.6 复杂结构目标曲面反演.....	72
4.5 隐式神经网络形状优化算法在 EIT 问题中的应用.....	74
4.5.1 EIT 问题的数学描述.....	76
4.5.2 形状导数与算法实现.....	77
4.5.3 数值实验.....	77
4.6 本章小结.....	79
<b>第 5 章 结合反散射的三维掩模反演光刻算法 .....</b>	<b>80</b>
5.1 近场数据反散射问题的隐式神经网络形状优化算法.....	80
5.1.1 近场反散射数值试验.....	82
5.2 三维掩模反演光刻算法.....	84
5.3 数值实验.....	87
5.4 本章小结.....	92
<b>第 6 章 总结与展望 .....</b>	<b>93</b>
6.1 工作总结.....	93
6.2 未来展望.....	93
参考文献.....	95
附录 A 补充内容.....	101
致 谢.....	102

目 录

---

声 明.....	103
个人简历、在学期间完成的相关学术成果.....	104
指导教师评语.....	105
答辩委员会决议书.....	106

## 插图清单

图 1.1	光刻系统结构示意图 .....	1
图 1.2	点扩散函数 .....	4
图 1.3	柯勒照明 .....	5
图 1.4	sigmoid 函数及其导数 .....	6
图 1.5	薄掩模近似示意图 .....	6
图 1.6	光刻失真示例 .....	7
图 1.7	论文结构与各章节逻辑关系图 .....	11
图 2.1	水平集函数示意图 .....	17
图 2.2	离散隐式函数的水平集示例 .....	18
图 3.1	函数 $W_i^k$ .....	26
图 3.2	函数 $\nabla h_a(V)$ 与 $h_a(V)$ 的 Hessian .....	28
图 3.3	目标模式 .....	32
图 3.4	参数 $\rho$ 的影响 .....	33
图 3.5	$\gamma$ 的启发式选择 .....	33
图 3.6	$\beta_1$ 的启发式选取 .....	34
图 3.7	$\beta_2$ 的影响 .....	34
图 3.8	正方形掩模结构反演结果 .....	35
图 3.9	正方形掩模误差下降曲线 .....	36
图 3.10	正方形掩模结构无 TV 约束反演结果 .....	36
图 3.11	次梯度方法与 ADMM 算法优化结果比较 .....	37
图 3.12	次梯度方法与 ADMM 算法误差下降曲线对比 .....	38
图 3.13	次梯度方法在不同参数下的误差曲线 .....	38
图 3.14	次梯度方法在不同参数下的成像结果 .....	39
图 3.15	长条形掩模结构反演结果 .....	40
图 3.16	长条形掩模误差下降曲线 .....	40
图 3.17	复杂掩模结构反演结果 .....	42
图 3.18	复杂掩模误差下降曲线 .....	42
图 3.19	高斯滤波正则化的效果验证 .....	46
图 3.20	频域正则化的效果验证 .....	46
图 3.21	Laplacian 正则化的效果验证 .....	47

---

图 3.22	矩形排列结构的综合正则化效果验证	48
图 3.23	复杂电路结构的综合正则化效果验证	49
图 4.1	三维掩模散射效应	51
图 4.2	DeepSDF 结构示意图	57
图 4.3	全孔径反演结果	68
图 4.4	全孔径反演误差下降曲线	69
图 4.5	噪声数据反演结果	69
图 4.6	噪声数据误差下降曲线	69
图 4.7	反向数据反演结果	70
图 4.8	反向数据误差下降曲线	71
图 4.9	无相位数据反演结果	72
图 4.10	无相位数据误差下降曲线	72
图 4.11	T 型目标曲面反演结果	73
图 4.12	T 型目标曲面误差下降曲线	73
图 4.13	双 L 型目标曲面反演结果	74
图 4.14	双 L 型目标曲面误差下降曲线	74
图 4.15	H 型目标曲面反演结果	75
图 4.16	H 型目标曲面误差下降曲线	75
图 4.17	电阻抗成像	76
图 4.18	EIT 反演结果	78
图 4.19	EIT 误差下降曲线	79
图 5.1	L 型近场反演结果	83
图 5.2	L 型近场误差下降曲线	83
图 5.3	H 型近场反演结果	83
图 5.4	H 型近场误差下降曲线	84
图 5.5	三维反演光刻模型	85
图 5.6	三维 T 型掩模反演光刻优化结果	89
图 5.7	三维 H 型掩模反演光刻优化结果	90
图 5.8	三维掩模反演光刻优化结果	91

## 第1章 绪论

在过去的几十年里，半导体行业发生了一场革命，集成电路的发展基本遵循着戈登·摩尔在1965年发表的论文中的预测：未来10年，晶体管数量每年都会翻一番。十年后的1975年，摩尔将这一预测修改为每两年翻一番。近60年来，这种基于新兴趋势的推断一直是半导体行业的指导原则，起着至关重要的作用。但是今天，集成电路尺寸的缩小面临着光学系统分辨率的限制，另外，掩模散射使晶圆上的图案发生了很大的畸变。此时，继续通过硬件手段提高光刻精度的途径变得越来越难。为了进一步提高光刻精度，研究人员开始从算法层面深入探索解决方案。其中，反演光刻技术因其独特的优势和广阔的应用前景，成为了本文的核心关注对象。本章将首先对反演光刻技术进行简要介绍，回顾其发展历程，进而引出本文的主要工作，最后介绍全文的结构安排。下面，从对光刻系统基本原理的介绍开始。

### 1.1 光刻系统成像理论

由于集成电路制造所需的图案尺寸极小，难以直接加工制造，现代光刻工艺采用投影式光刻系统进行图案转移。在这一系统中，首先制作尺寸放大的掩模，其上的图案尺寸通常是晶圆上目标图案的4-5倍<sup>[1]</sup>，随后通过精密光学系统将掩模上的图案等比例缩小，并转移至涂覆光刻胶的晶圆表面。

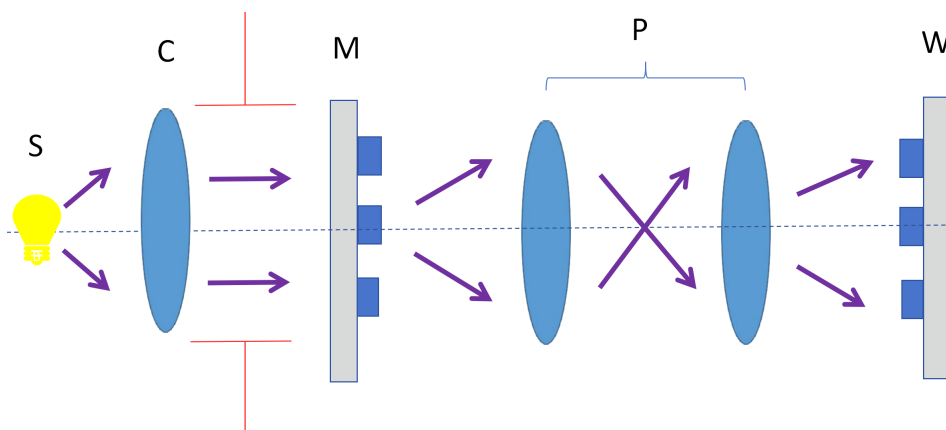


图 1.1 光刻系统结构示意图

图1.1描述了光刻系统的基本结构和关键光学元件。光源 {S}（通常是深紫外光源，如准分子激光器）发出的光经过聚光镜 {C} 被准直成平行光束，照射到掩模 {M} 上，掩模通常由石英基板和铬图案组成，其中铬图案的几何形状对应于经

过精心设计的晶圆图案。掩模图案经过投影透镜组  $\{P\}$ （一个复杂的多镜头系统）被缩小投影到涂有光刻胶的晶圆  $\{W\}$  上。现代投影透镜组通常具有 0.33 或更大的数值孔径 (NA)，能够提供 4 倍或更高的缩小率，以实现纳米级的分辨率。投影到光刻胶层的光强分布触发光刻胶内的光化学反应，导致光刻胶的溶解度发生变化。经过后续的显影步骤，掩模的图案就被转移到了晶圆表面。

在介绍了光刻系统的基本结构后，下面我们将介绍其成像原理。光刻系统的成像过程本质上是一个光学衍射成像问题。为了系统地理解这一过程，我们首先研究理想的单点光源照明情况，即一束相干平面波垂直入射到掩模平面上。在介绍完这一基础模型后，我们将简要讨论实际系统中更常见的部分相干照明情况。虽然本文后续主要基于单点光源模型进行分析，但理解部分相干照明对于完整把握光刻系统的物理本质具有重要意义。

我们从最简单的情况开始：单个点光源产生的相干平面波垂直于掩模平面入射。平面波是一种理想的波，其波前（等相位面）是无限延伸的平面<sup>[2]</sup>，可表示为：

$$E(\mathbf{r}, t) = A_0 e^{i(kz - \omega t)}, \quad (1.1)$$

其中  $A$  为常数振幅， $k = 2\pi/\lambda$  是波数， $z$  是传播方向， $\omega$  是角频率， $t$  是时间。这种理想的平面波具有完美的时间相干性和空间相干性。通常，我们可以假设入射场是时谐场（time-harmonic）<sup>[1]</sup>，因此可以将入射场简化为：

$$E_{\text{in}}(\mathbf{r}) = A e^{ikz}. \quad (1.2)$$

平行光经过掩模后被调制为  $E_{\text{mask}}$ 。接着，根据惠更斯-菲涅耳原理<sup>[3]</sup>，光场经过空间传播产生衍射：

$$E_{\text{diff}}(\mathbf{r}) = \iint E_{\text{mask}}(\mathbf{r}') G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (1.3)$$

最后，衍射场经过光学系统成像<sup>[4]</sup>：

$$E_{\text{image}}(\mathbf{r}) = \iint E_{\text{diff}}(\mathbf{r}') H(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (1.4)$$

其中  $H(\mathbf{r})$  是光学系统的点扩散函数，与光瞳函数  $P(\mathbf{f})$  通过傅里叶变换相关联：

$$H(\mathbf{r}) = \mathcal{F}^{-1}\{P(\mathbf{f})\}. \quad (1.5)$$

在理想情况下，系统的传递函数由光瞳函数决定：

$$P(\mathbf{f}) = \begin{cases} 1, & |\mathbf{f}| \leq \frac{\text{NA}}{\lambda}, \\ 0, & \text{其他情况}, \end{cases} \quad (1.6)$$

其中 NA 是数值孔径， $\lambda$  是波长。因此，投影透镜充当掩模的傅立叶变换的低通滤波器。低于投影透镜截止频率的频率可以通过透镜，高于截止频率的频率会丢失。

此时，对应的点扩散函数为：

$$H(x, y) = \frac{J_1(2\pi rNA/\lambda)}{2\pi rNA/\lambda}, \quad (1.7)$$

如图1.2所示，其中  $J_1(x)$  是 1 阶贝塞尔函数。最后，在成像平面上实际观察到的空间像光强（Aerial Image） $I_{\text{aerial}}$  是场  $E_{\text{image}}$  的模的平方：

$$I_{\text{aerial}}(\mathbf{r}) = |E_{\text{image}}(\mathbf{r})|^2. \quad (1.8)$$

将前述成像过程的各个步骤代入，可以得到空间像光强  $I_{\text{aerial}}$  与掩模调制场  $E_{\text{mask}}$  之间的依赖关系：

$$I_{\text{aerial}}(\mathbf{r}) = |H * E_{\text{mask}}|^2(\mathbf{r}), \quad (1.9)$$

其中  $*$  表示卷积运算。这个表达式清晰地展示了掩模图案如何通过光学系统的点扩散函数影响最终的空间像光强分布。这个光强分布将决定光刻胶的曝光情况，进而影响最终在晶圆上形成的图案。这个单点光源模型虽然简化了实际情况，但它捕捉了光刻系统的基本物理特性，是后续研究的重要基础。

在考虑离焦效应时，我们只需修改光瞳函数。具体而言，离焦效应描述了晶圆相对于最佳焦点平面的垂直偏移。虽然离焦本身并非真正的像差，但由于它与理想波前的偏差特性类似<sup>[3]</sup>，我们可以采用处理像差的方法来描述它。具体而言，若将像差函数表示为  $W(f, g)$ ，则相应的光瞳传递函数可表示为：

$$P(f, g) = \begin{cases} e^{-i\frac{2\pi}{\lambda}W(f, g)}, & |(f, g)| \leq \frac{NA}{\lambda}, \\ 0, & \text{其他情况.} \end{cases} \quad (1.10)$$

在这个框架下，离焦像差函数可以写作：

$$W(f, g) = \delta \sqrt{1 - (f^2 + g^2)\lambda^2}, \quad (1.11)$$

其中参数  $\delta$  表示离焦距离，即晶圆偏离最佳焦平面的距离。

我们简要介绍实际光刻系统中更常用的部分相干照明模型<sup>[5]</sup>，这一模型使用扩展光源来提高系统性能。在柯勒照明配置（如图1.3所示）下，扩展光源位于照明系统的前焦面上<sup>[3]</sup>。每个源点  $(s_x, s_y)$  产生一个相干平面波，其入射方向由源点位置决定：

$$E_{\text{in}}(\mathbf{r}; s_x, s_y) = A e^{jk(s_x x + s_y y + \sqrt{1 - s_x^2 - s_y^2} z)}. \quad (1.12)$$

根据 van Cittert-Zernike 定理<sup>[6]</sup>，虽然来自不同源点的光在掩模平面上的叠加是非相干的，但各个源点产生的场之间仍然存在确定的相位关系。这种相位关系可以通过互相干函数来描述：

$$\gamma(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \iint \mathcal{S}(s_x, s_y) e^{jk(s_x(x_1 - x_2) + s_y(y_1 - y_2))} ds_x ds_y, \quad (1.13)$$

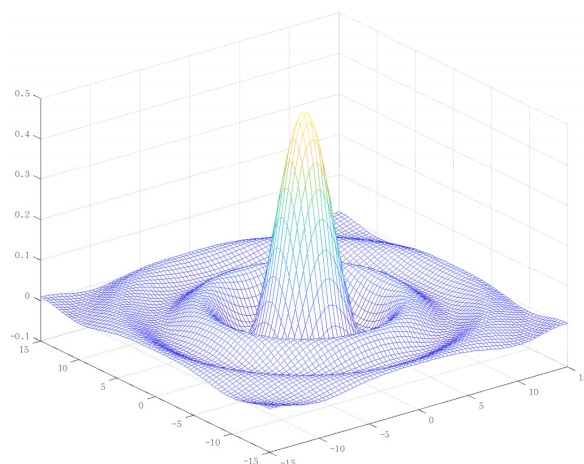


图 1.2 点扩散函数

其中  $S(s_x, s_y)$  是有效光源的强度分布。考虑到这种部分相干性，像面光强不能简单地由单个场分布的平方得到，而是需要考虑不同位置场的相关性<sup>[5]</sup>：

$$I_{\text{aerial}}(\mathbf{r}) = \iint_{-\infty}^{+\infty} E_{\text{mask}}(\mathbf{r}_1) E_{\text{mask}}^*(\mathbf{r}_2) \gamma(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) H(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) H^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (1.14)$$

公式 (1.14) 所表示的 Hopkins 公式<sup>[7]</sup> 计算复杂度较高，实际应用中通常采用源分解方法 (Source Decomposition) 将部分相干照明近似为多个相干光源的叠加<sup>[8]</sup>：

$$I_{\text{aerial}}(\mathbf{r}) \approx \sum_{i=1}^N w_i |H_i * E_{\text{mask}}|^2, \quad (1.15)$$

其中  $w_i$  是第  $i$  个源点的权重， $H_i$  是对应的点扩散函数， $N$  是分解后的源点数量。这种分解方法在数学上可通过奇异值分解 (SVD) 或特征分解等技术实现<sup>[9]</sup>。通常，前几个主要模式就能捕捉系统大部分能量，使得我们能够用少量相干光源的叠加来有效近似部分相干系统。

源分解方法的有效性表明，尽管实际光刻系统采用部分相干照明，但对单点光源 (即完全相干) 条件下反演光刻问题的研究仍具有重要理论意义。一方面，单点光源模型作为部分相干系统的基本组成单元，对其的深入理解是解决更复杂照明模式问题的基础；另一方面，针对单点光源开发的算法通常可以扩展应用到部分相干条件下，只需将目标函数修改为多个相干成像结果的加权和。事实上，许多文献<sup>[8,10]</sup> 表明，基于单点光源模型开发的算法，通过合适的修改后能够有效应用于部分相干照明系统。

本论文主要在单点光源假设下研究反演光刻问题，这不仅简化了理论分析和算法设计，也为理解和解决更复杂的部分相干照明问题提供了基础框架。

光刻胶的曝光过程是光刻工艺模拟的最后一个关键步骤。在实际工艺中，光刻胶对光的响应表现出明显的阈值特性。假设晶圆上的输出图案为二维，我们可

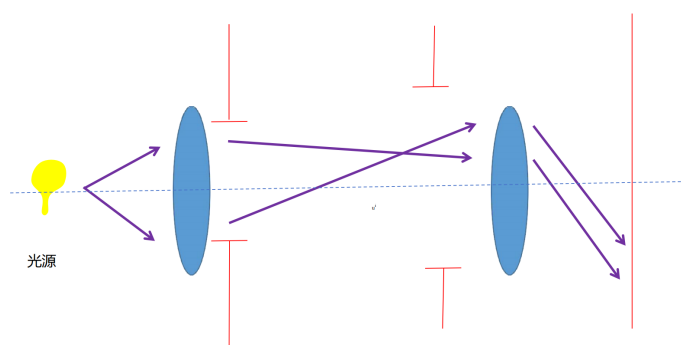


图 1.3 柯勒照明

以将这种涂层效应建模为一个硬阈值操作：

$$T(x) = \begin{cases} 1, & x \geq tr, \\ 0, & x < tr, \end{cases} \quad (1.16)$$

其中  $tr$  是阈值参数。基于这个阈值操作，晶圆上的曝光图案可以表示为：

$$I_l(U)(x, y) = T(I_{\text{aerial}}(E_{\text{mask}})(x, y)). \quad (1.17)$$

注意到  $T(x)$  是一个不可微函数，这使得该阈值模型不适合用基于梯度的优化方法求解。为了克服这个困难，通常采用 sigmoid 函数来近似阈值操作：

$$\text{Sig}_a(x) = \frac{1}{1 + \exp(-a(x - tr))}. \quad (1.18)$$

sigmoid 函数具有良好的数学性质：当  $x$  大于  $tr$  时，函数值平滑地趋向于 1，否则趋向于 0。参数  $a$  控制函数的陡度，较大的  $a$  值使得函数更接近于理想的阈值操作。图1.4展示了 sigmoid 函数及其导数在  $a = 20$ ,  $tr = 0.3$  时的行为。利用 sigmoid 函数的这种平滑近似，我们最终得到晶圆上的曝光图像：

$$I(U)(x, y) = \text{Sig}_a(|(H * E_{\text{mask}})(x, y)|^2). \quad (1.19)$$

这个表达式不仅保留了光刻胶的阈值特性，还提供了数学上的可处理性，为后续的优化计算奠定了基础。

在传统的光刻成像模型中，为了使问题便于处理，通常假设掩模的临界尺寸远大于波长  $\lambda$ ，从而忽略掩模的厚度，如图1.5所示。在这种近似下，掩模被简化为一个取值为  $\{0,1\}$  的二维图案：

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \text{透明区域,} \\ 0, & \text{不透明区域.} \end{cases} \quad (1.20)$$

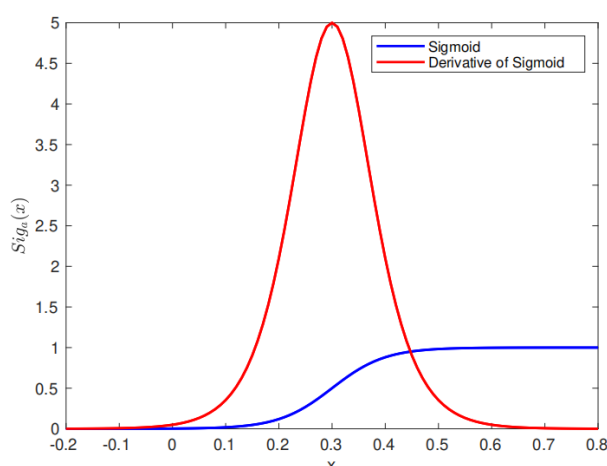


图 1.4 sigmoid 函数及其导数

此时，入射光经过掩模的调制关系简化为：

$$E_{\text{mask}}(\mathbf{r}) = E_{\text{in}} \cdot U(\mathbf{r}). \quad (1.21)$$

将这个掩模调制关系代入成像公式 (1.19)，得到薄掩模近似下的成像公式：

$$I(U)(x, y) = \text{Sig}_a(|(H * U)(x, y)|^2). \quad (1.22)$$

需要说明的是，这种薄掩模近似虽然在计算上带来了便利，但随着掩模特征尺寸的不断减小，掩模的三维效应变得越来越显著。当入射光与掩模结构相互作用产生散射效应时，会在掩模边缘产生复杂的电磁场分布，导致光的传播方向发生改变。这种现象被称为“厚掩模效应”，忽略这一效应将导致严重的模型误差，影响掩模优化的准确性。本文将在后续章节中着重研究如何克服这一局限性。

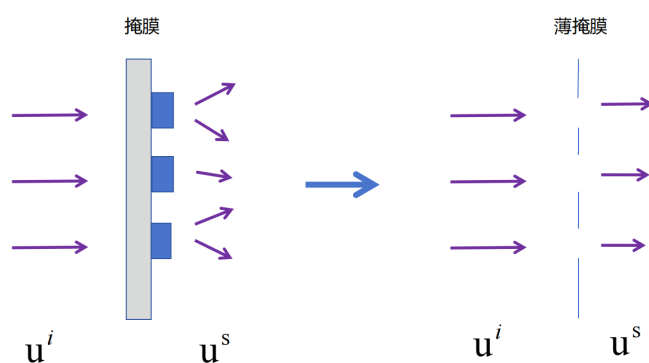


图 1.5 薄掩模近似示意图

以上讨论的光刻系统成像理论揭示了光的衍射特性在成像过程中的作用。当掩模上的图形尺寸接近光刻系统的分辨率极限时，由于光的波动性质导致的衍射效应，以及光与掩模材料相互作用产生的散射效应，使得光学系统无法准确重现

掩模上的精细结构。为了克服这些物理限制带来的挑战，反演光刻技术应运而生。下面我们将详细介绍这一技术。

## 1.2 反演光刻技术简介

在理想情况下，晶圆上成像的图案应当与掩模图案完全一致。然而，由于光的波动性质，实际成像会受到衍射效应的影响而产生模糊。根据瑞利判据，光刻系统的分辨率（即系统能够在晶圆上分辨的最小线条宽度）由下式给出：

$$\frac{\lambda}{\text{NA}}, \quad (1.23)$$

其中  $\lambda$  是光波的波长，NA 是投影透镜的数值孔径<sup>[11-12]</sup>。当掩模上的图形尺寸接近这一分辨率极限时，衍射效应的影响变得尤为显著。此时，高频信息（对应图形的精细结构）在成像过程中会大量丢失，导致各种图案失真现象，如线宽偏差、角部圆化、线端缩短等。图1.6直观地展示了这种失真现象，其中左侧为原始掩模图案，右侧为光刻系统实际成像结果。

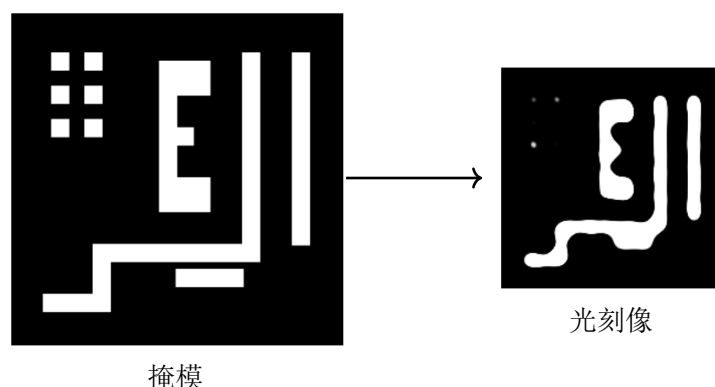


图 1.6 光刻失真示例

为了克服光刻失真并提高分辨率，反演光刻技术 (Inverse Lithography Technology, ILT) 提出了一种创新的思路：不再简单地将掩模设计为与目标图案相同，而是反向求解，寻找能产生期望成像的最优掩模图案。这一技术可以形式化地表示为如下优化问题：

$$\min_{U \in K_0} \|I(U) - I\|_X, \quad (1.24)$$

其中  $U$  是待求的掩模图案， $K_0 = \{U | U(x) \in \{0, 1\}\}$  是表示掩模二值特性的可行解空间， $I(U)$  表示掩模图案  $U$  经过光刻系统成像后的结果 (1.22)， $I$  是期望在晶圆上得到的目标图案， $X$  是适当选择的范数（可以是  $L^2$ 、 $L^1$  或其他合适的范数）。这个优化问题的目标是最小化实际成像与目标图案之间的差异。

反演光刻技术可以显著提高光刻系统的分辨率极限，实现更小特征尺寸的图案制造，为半导体工艺的持续微缩提供了重要支持。自提出以来，反演光刻技术取得了显著发展，下面将回顾该领域的关键研究进展以及仍然面临的挑战。

### 1.3 已有工作介绍

反演光刻技术的发展源于光学邻近效应校正技术 (Optical Proximity Correction, OPC)。光学邻近效应是指由于光的衍射和散射，导致相邻图形之间产生相互影响，使得晶圆上实际显影的图形偏离掩模原始图形的现象。为了补偿这种效应，OPC 技术通过有针对性地修改掩模图形（如添加衬线、调整角部形状等），成为了较早解决光刻失真问题的重要技术方案。OPC 技术主要分为两种实现方法：基于规则的 OPC 和基于模型的 OPC。基于规则的 OPC 采用预定义的修正规则库，根据图形的几何特征和周围环境进行修正，这种方法计算效率高，但难以处理复杂的光学效应<sup>[13]</sup>。基于模型的 OPC 则通过建立精确的光刻成像模型，采用迭代优化的方式调整掩模图形，直至获得满意的成像结果，这种方法虽然计算开销较大，但能提供更准确的修正效果<sup>[14]</sup>。

随着集成电路特征尺寸的持续缩小，传统 OPC 技术的局限性日益凸显。基于规则的 OPC 难以应对日益复杂的光学效应，而基于模型的 OPC 虽然能提供更好的修正效果，但其局部优化策略往往陷入局部最优，无法获得全局最优解<sup>[15]</sup>。为了突破这些限制，研究者开始探索基于全局优化的反演光刻技术。反演光刻技术可以视为基于模型 OPC 的理论延伸和方法创新，它将掩模设计问题严格地形式化为全局优化问题，通过严谨的数学物理方法来求解最优掩模图形。

反演光刻技术的理论演进可追溯至 20 世纪 90 年代初期，其发展历程深刻体现了数学物理方法与半导体制造的深度融合，其发展历程可以大致分为三个阶段：早期的基础理论建立、传统优化方法的发展、以及近年来新兴方法的探索。

反演光刻技术的理论基础经历了持续的发展和完善。Pati 和 Kailath<sup>[8]</sup>开创性地将光刻掩模设计形式化为非线性优化问题，为反演光刻奠定了理论基础。随着工艺节点不断推进，研究者们开始关注更复杂的物理效应：Cobb 和 Zakhor<sup>[16]</sup>发展了包含光刻胶效应的非线性成像模型，为后续研究提供了重要基础。Ma 和 Arce<sup>[17]</sup>提出了基于像素化表示的高效计算方法，显著提升了计算效率。Granik<sup>[18]</sup>则引入工艺窗口概念，建立了考虑工艺变化敏感度的优化框架，进一步提高了实用性。

在优化算法方面，反演光刻技术的发展经历了从简单到复杂的演进过程。早期研究主要关注基本优化方法，如 Liu 和 Zakhor<sup>[19]</sup>提出的基于模拟退火的二值掩模优化方法。由于反演光刻问题本质上是不适定的<sup>[20]</sup>，正则化方法在求解过程中

发挥着关键作用：最初主要采用 Tikhonov 正则化，如 Poonawala 等人<sup>[21]</sup>提出的用于控制掩模复杂度的正则化框架。随后，Ma 等人<sup>[22]</sup>系统研究了多种正则化方法，包括 L1 正则化、小波变换正则化和全变差正则化 (TV)。其中，TV 正则化因其优秀的边缘保持特性<sup>[23]</sup>受到特别关注，Choy 等人<sup>[24]</sup>进一步发展了基于多重 TV 项的目标函数。Li 等人<sup>[25]</sup>提出了基于交替拉格朗日乘子法的高效算法。

近年来，新的技术方法不断涌现，研究者们开始探索更复杂的正则化策略和优化算法。Jia 等人<sup>[26]</sup>发展了基于随机梯度的优化方法。为了提高算法的鲁棒性，Li 等人<sup>[27]</sup>提出了结合鲁棒优化的正则化框架，显著提升了算法的抗噪声能力。Ma 等人<sup>[28]</sup>则通过结合稀疏性和低秩正则化，发展了创新的分裂 Bregman 算法。针对大规模优化问题的计算挑战，Torunoglu 等人<sup>[29]</sup>开发了基于 GPU 的高效求解方法。随着人工智能技术的发展，深度学习开始方法开始在反演光刻领域发挥重要作用。Shin 等人<sup>[30]</sup>首次系统探讨了机器学习在计算光刻中的应用前景。Yang 和 Ren<sup>[31]</sup>通过引入物理先验信息，提出了可解释性更强的深度学习模型。Zheng 等人<sup>[32]</sup>开发的基于模型引导的深度学习框架，成功推进了部分相干照明情况下反演光刻问题的解决。为了规范评估这些新方法的性能，Zheng 等人<sup>[33]</sup>建立了 LithoBench 基准测试平台。然而，正如 Adam 等人<sup>[34]</sup>指出的，深度学习在物理建模中仍面临数据获取困难、模型可靠性等重要挑战。值得注意的是，上述大多数方法缺乏严格的理论分析，特别是在算法收敛性方面缺乏理论保证，这在实际应用中可能带来潜在风险。

此外，随着集成电路特征尺寸的持续减小，掩模的三维结构所带来的”厚掩模效应”逐渐成为影响光刻精度的关键因素<sup>[35]</sup>。”厚掩模效应”使得传统二维模型在预测成像结果时产生显著误差，严重制约了反演光刻技术的进一步发展。在使用三维掩模进行光刻成像时，为了准确模拟电磁场散射过程需要求解 Maxwell 方程，其计算复杂度远高于传统的二维傅里叶光学模型<sup>[36]</sup>。为了克服这一挑战，研究者们提出了多种近似方法：Adam 等人<sup>[37]</sup>发展了基于模型降阶的方法，但在复杂结构下精度受限；Shao 等人<sup>[38]</sup>提出了基于波导法的三维效应近似模型；Ding 等人<sup>[39]</sup>将严格耦合波分析 (RCWA) 方法应用于三维掩模电磁场计算。Fühner 等人<sup>[40]</sup>则尝试将三维 FDTD 模拟与遗传算法相结合用于电磁场计算。然而，随着特征尺寸持续缩小，掩模的三维效应日益显著，这些简化处理已难以满足高精度光刻的需求。

尽管厚掩模效应的物理机制已得到广泛认识，但将其纳入反演光刻优化框架仍面临巨大挑战。早期的工作主要关注对传统模型的改进：Ma 和 Arce<sup>[41]</sup>提出了基于矢量成像模型的掩模优化方法，通过考虑光的偏振效应，在一定程度上克服了标量模型的局限性；Ma 等人<sup>[12]Chapter 10</sup>基于 Boundary Layer 模型<sup>[42]</sup>，针对相干

照明条件下的厚掩模效应，系统构建了光学临近效应和相移掩模的梯度优化算法框架。随着研究的深入，Finders 等人<sup>[43]</sup>系统分析了三维掩模效应对成像质量的影响，揭示了这些效应导致的关键尺寸偏差和边缘放置误差。为了直接处理三维效应，Xiong 等人<sup>[44]</sup>提出了补偿三维掩模效应的光刻成像公式，并将反演光刻问题转化为组合优化问题进行求解。He 等人<sup>[45]</sup>则针对等离子体光刻系统，发展了一种三维掩模参数化优化方法，通过调整掩模的几何参数（如高度、倾斜角等）来提高成像分辨率。然而，这些方法仍存在两个根本性问题：一是正演模拟未能精确求解散射问题，二是三维掩模的表示方法过于简化。这些局限性使得现有方法难以从根本上解决三维掩模反演光刻问题，严重制约了反演光刻技术在更小特征尺寸下的应用，亟需开展深入研究。

## 1.4 本文主要创新点

通过系统梳理已有工作可以发现，对于反演光刻技术的研究仍存在两个主要不足：首先，对这一问题的理论分析尚不充分，特别是在最优解关于光学系统参数的稳定性分析方面，以及对算法的收敛性分析方面都有待深入；其次，将掩模三维散射效应直接纳入反演光刻技术的研究相对匮乏，现有工作大多采用各种近似处理（如薄掩模近似等），这些简化虽然降低了计算复杂度，但可能显著影响掩模设计的精确性。针对这些关键挑战，本文开展了如下创新性工作：

首先，针对薄掩模近似下的反演光刻问题，本文提出了一种基于交替方向乘子法 (ADMM) 框架的求解算法。该算法通过引入辅助变量和变量分离策略，将原始的非凸非光滑优化问题分解为一系列结构简单的子问题。相比现有方法，该算法具有三个显著优势：一是避免了对晶圆上图像全变差的繁琐计算；二是通过 ADMM 框架巧妙规避了 sigmoid 函数和卷积函数的复杂梯度计算；三是通过采用阈值函数的非光滑形式处理 sigmoid 子问题，显著提升了计算效率。在理论方面，本文严格证明了该算法在一定条件下的局部收敛性，为算法的可靠性提供了理论保证。

其次，为了高效求解障碍物反散射问题，本文提出了一种基于曲面隐式神经网络表示的形状优化算法框架。该框架通过利用隐式神经网络将曲面参数化为零水平集，实现了对复杂三维结构反散射问题的高效求解。在理论方面，本文通过建立形状导数的利普希茨连续性，严格证明了该算法的收敛性。这一方法不仅为障碍物反散射问题提供了新的求解思路，其框架还可推广到更一般的偏微分方程约束下的形状优化问题中，具有广泛的应用前景。

最后，在高效求解障碍物反散射问题的基础上，本文通过将散射过程纳入到反演光刻问题的模型中，提出了一种三维掩模反演光刻算法。该算法通过结合求

解反散射问题的隐式神经网络形状优化方法，实现了对三维掩模结构的整体优化，为推动反演光刻技术向更小尺寸发展提供了研究思路。

## 1.5 行文结构

本文共分六章，具体结构安排如下：

- 第二章介绍相关基础理论和数学工具，为后续研究奠定理论基础。
- 第三章针对薄掩模近似下的反演光刻问题，提出了一种基于交替方向乘子法的求解算法。通过严格的理论分析证明了该算法的收敛性，并通过数值算例验证了算法的有效性。
- 第四章提出一种结合曲面隐式神经网络表示的形状优化方法，用于求解三维障碍物反散射问题。理论分析证明了算法收敛到驻点的性质，数值实验展示了方法的有效性。
- 第五章通过将散射过程纳入反演光刻问题的建模中，提出了一种基于曲面隐式神经网络表示的三维掩模反演光刻算法，实现了对三维掩模结构的整体优化设计。
- 第六章总结全文工作，并对未来研究方向进行展望。

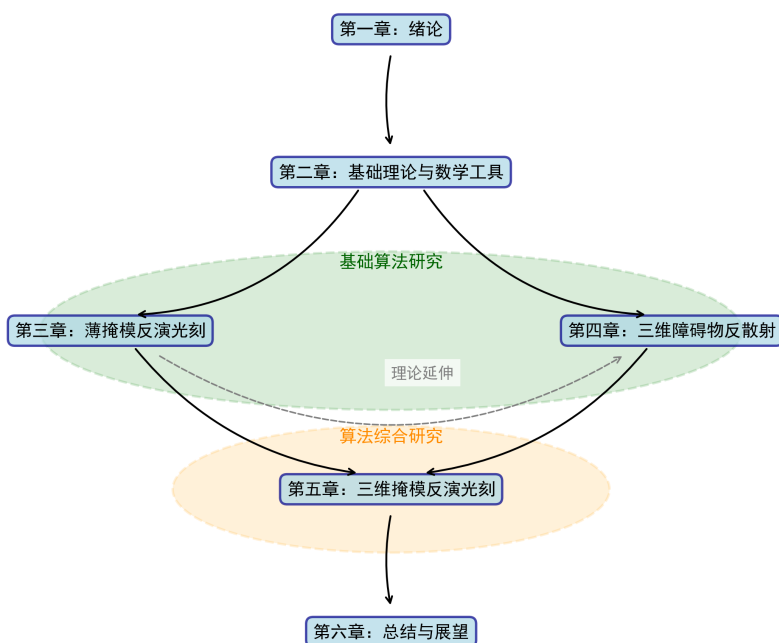


图 1.7 论文结构与各章节逻辑关系图

图1.7展示了本文各章节之间的内在联系。从研究性质上看，第三章和第四章在“基础算法研究”的框架下分别探索了不同问题背景中的算法设计。第五章通过融合前两章的方法优势，形成了新的研究方向。

## 第 2 章 理论基础与相关工具

本章系统阐述求解反演光刻问题所依赖的核心数学理论与计算方法，为后续研究提供必要的理论基础。这些数学工具不仅构成了本文算法设计的理论框架，也是建立算法收敛性和稳定性分析的关键。本章重点介绍以下四类基础数学工具：

- 正则化理论与优化方法：针对反问题的病态性，介绍克服不适定性的正则化框架，并重点阐述交替方向乘子法在求解非凸非光滑优化问题中的优势，为设计薄掩模近似下的反演光刻算法奠定基础。
- 边界积分方程与边界元方法：介绍求解无界区域上偏微分方程的高效数值方法，为求解反散射问题特别是无界区域上亥姆霍兹方程奠定基础。
- 形状优化与水平集演化：系统阐述水平集方法在几何表征中的优势，详细介绍形状导数的相关理论，为发展基于曲面隐式神经网络的形状优化方法提供数学基础。
- 分数阶函数空间理论：深入探讨分数阶索伯列夫空间的迹定理与紧嵌入性质，为后续算法的收敛性分析提供必要的泛函分析工具。

### 2.1 反问题的正则化方法及 ADMM 算法

数学物理反问题广泛存在于物理、医学、地质、集成电路等诸多科学领域，是当前数学研究的重要方向。从本质上讲，所有通过可观测现象来推断事物内在规律或外部影响的问题，都可归类为反问题。反演光刻技术就是一个典型的反问题：我们需要从晶圆上期望的目标图像出发，反向推导出能产生该图像的最优掩模设计。与反问题密切相关的是问题的适定性概念，根据 Hadamard 的定义，一个适定问题需要同时满足以下三个条件：

- 解的存在性：问题必须有解；
- 解的唯一性：解必须是唯一的；
- 解的稳定性：解必须连续依赖于输入数据。

遗憾的是，大多数反问题都是不适定的。不适定问题的求解具有本质困难，为此数学家们引入了正则化的概念来有效处理这类问题。正则化方法的核心思想是通过缩小问题的容许解集来构造近似解。通常，这个容许集可以选取为有限维集合，这不仅符合实际应用需求，而且能将不适定反问题转化为某种意义下的近似适定问题。这种转化不仅简化了问题，还能提高计算效率并保持解的物理意义，这对工程应用尤为重要。从理论分析的角度来看，需要严格证明这类近似解对原问

题的逼近程度，并阐明近似解本身的数学意义；从数值计算的角度来看，则需要研究如何设计既能简化计算又能保证精度的正则化方法，包括近似解的误差估计和逼近精度分析，从而发展出实用的数值求解方法。

具体到本文研究的问题，我们采用 BV（有界变差）正则化方法。为此，首先引入相关数学记号。令  $\Omega$  为二维有界 Lipschitz 区域，我们假设掩模属于 BV 空间：

$$\text{BV}(\Omega) = \left\{ U \in L^1(\Omega) : \sup \int_{\Omega} U(x) \text{div} \phi(x) dx < \infty, \phi \in C_c^1(\Omega, \mathbb{R}^n), |\phi| \leq 1 \right\}, \quad (2.1)$$

该空间配备范数

$$\|U\|_{\text{BV}} = \|U\|_{L^1(\Omega)} + \|U\|_{\text{TV}}, \quad (2.2)$$

其中

$$\|U\|_{\text{TV}} = \int_{\Omega} |DU| dx \equiv \sup_{\phi \in C_c^1(\Omega), |\phi| \leq 1} \int_{\Omega} U \text{div} \phi dx \quad (2.3)$$

是  $U$  的全变差范数。BV 空间具有重要的紧嵌入性质：它紧嵌入到  $L^1(\Omega)$  中，这一性质对于保证反问题解的存在性和稳定性起着关键作用。全变差范数度量了函数的总梯度变化，对函数的跳跃具有良好的保持性。在反演光刻问题中，BV 空间正则化既能保持掩模边缘的锐利性，又能有效抑制噪声影响，这对于生成高质量的二值掩模具有重要意义。

通过正则化处理，反问题可以转化为适定性更好的优化问题。然而，这类优化问题通常具有复杂的约束条件和非光滑项，需要特殊的数值方法来求解。交替方向乘法（ADMM）正是处理这类优化问题的有效工具，它特别适用于目标函数可分离且具有多个变量约束的情形。ADMM 的基本思想是将优化变量分离为  $x$  和  $z$  两部分，用于求解如下形式的优化问题：

$$\min_{x,z} f(x) + h(z) \quad \text{s.t.} \quad Ax + Bz = c. \quad (2.4)$$

该方法通过循环执行以下三步来逼近最优解：

- 固定变量  $z$  及拉格朗日乘子，关于变量  $x$  最小化拉格朗日函数；
- 固定变量  $x$  及拉格朗日乘子，关于变量  $z$  最小化拉格朗日函数；
- 更新拉格朗日乘子。

当变量  $x$  与  $z$  的分离方式选取得当时，每个子问题都可以高效求解，从而使得这种迭代算法能有效处理一般的约束优化问题。为了更清晰地描述这三步迭代，我们引入增广拉格朗日函数：

$$L(x, z, p) = f(x) + h(z) + p^T (Ax + Bz - c) + \frac{\rho}{2} \|Ax + Bz - c\|_2^2, \quad (2.5)$$

其中  $p$  为拉格朗日乘子向量,  $\rho > 0$  为惩罚参数。标准的 ADMM 迭代格式可表示为:

$$\begin{cases} x^{k+1} = \arg \min_x L(x, z^k, p^k), \\ z^{k+1} = \arg \min_z L(x^{k+1}, z, p^k), \\ p^{k+1} = p^k + \rho(Ax^{k+1} + Bz^{k+1} - c). \end{cases} \quad (2.6)$$

ADMM 算法的主要优势在于其变量分离策略: 它将复杂的优化问题分解为一系列结构简单的子问题, 这些子问题通常具有闭式解或可以通过高效算法求解。同时, 由于子问题之间的解耦特性, ADMM 算法的收敛性分析也相对容易展开。本文第三章将详细阐述如何基于 ADMM 框架构造求解薄掩模近似下反演光刻问题的算法, 并给出严格的收敛性分析。

## 2.2 边界元方法

在求解反演光刻中的三维掩模散射问题时, 需要高效处理定义在无界区域上的亥姆霍兹方程。边界元方法 (Boundary Element Method, BEM) 是解决此类问题的有力工具之一: 它通过将体积问题转化为边界上的积分方程, 巧妙地避免了对无限域的直接离散化。这种降维处理不仅显著减少了计算量, 而且自动满足了无穷远处的辐射条件。下面我们对边界元方法进行初步介绍, 更详细的理论可参见 Sauter 等人的专著<sup>[46]</sup>。

边界元方法的核心思想是将边界离散为一系列单元, 并在每个单元上通过简单的形函数来近似未知函数, 从而将连续的积分方程转化为离散的线性代数方程组。为了说明这一方法, 我们首先考虑边界积分方程的标准形式:

$$\alpha(x)u(x) + \int_{\Gamma} K(x, y)u(y)ds(y) = f(x), \quad x \in \Gamma, \quad (2.7)$$

其中  $\Gamma$  表示光滑边界,  $K(x, y)$  为积分核函数,  $u(x)$  为待求解的未知函数,  $f(x)$  为已知的右端项,  $\alpha(x)$  为与几何特征相关的系数函数。

边界  $\Gamma$  首先被离散为  $N$  个边界元:  $\Gamma \approx \Gamma_h = \bigcup_{j=1}^N \Gamma_j$ 。在每个边界元上, 采用形函数来分别近似几何形状和未知函数。几何形状的参数化表示为:

$$x(s) = \sum_{i=1}^n x_i \phi_i(s), \quad y(s) = \sum_{i=1}^n y_i \phi_i(s), \quad z(s) = \sum_{i=1}^n z_i \phi_i(s), \quad (2.8)$$

而未知函数的近似表示为:

$$u(x) \approx u_h(x) = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^n u_{ji} \phi_i(x), \quad x \in \Gamma_j, \quad (2.9)$$

其中  $s$  为局部参数坐标,  $(x_i, y_i, z_i)$  为节点坐标,  $u_{ji}$  为待定系数。常用的形函数

包括分片常数元  $\phi(s) = 1$ , 分片线性元  $\phi_1(s) = 1 - s, \phi_2(s) = s$ , 以及二次元  $\phi_1(s) = 2s^2 - 3s + 1, \phi_2(s) = -4s^2 + 4s, \phi_3(s) = 2s^2 - s$ 。将近似解代入原方程, 并选取配点  $\{x_i\}_{i=1}^M$ , 可得到离散方程组:

$$\alpha(x_i)u_h(x_i) + \sum_{j=1}^N \int_{\Gamma_j} K(x_i, y)u_h(y)ds(y) = f(x_i), \quad i = 1, \dots, M. \quad (2.10)$$

对于 Galerkin 方法, 还需要引入测试函数并在边界上积分:

$$\int_{\Gamma} \psi_k(x) \left[ \alpha(x)u_h(x) + \sum_{j=1}^N \int_{\Gamma_j} K(x, y)u_h(y)ds(y) \right] dx = \int_{\Gamma} \psi_k(x)f(x)dx. \quad (2.11)$$

这最终导出一个线性方程组  $Au = b$ , 其中矩阵元素由以下表达式给出:

$$A_{ij} = \alpha(x_i)\phi_j(x_i) + \int_{\Gamma} K(x_i, y)\phi_j(y)ds(y). \quad (2.12)$$

边界元方法中的一个核心问题是积分核的奇异性处理。根据奇异性的强度, 需要采用不同的数值策略: 对于非奇异积分, 可直接应用 Gauss 求积公式:

$$\int_{\Gamma_j} K(x, y)\phi(y)ds(y) \approx \sum_{k=1}^n w_k K(x, y_k)\phi(y_k)J_k, \quad (2.13)$$

其中  $w_k$  为求积权重,  $J_k$  为坐标变换的雅可比行列式。对于弱奇异积分, 可通过适当的坐标变换来消除奇异性。例如, 对于典型的平方根型奇异性:

$$\int_0^1 \frac{f(t)}{\sqrt{t}} dt = \int_0^1 2f(s^2)ds. \quad (2.14)$$

对于强奇异积分, 则需要采用解析方法或正则化技术, 通常表示为:

$$\int_{\Gamma} K(x, y)ds(y) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma \setminus B_{\epsilon}(x)} K(x, y)ds(y), \quad (2.15)$$

其中  $B_{\epsilon}(x)$  表示以  $x$  为中心、半径为  $\epsilon$  的球。

在边界元方法中, 离散化后得到的系数矩阵通常是稠密的, 需要采用适当的数值求解策略: 对于规模较小的问题, 可使用 LU 分解等直接法; 对于中等规模问题, 可采用 GMRES 等迭代方法; 而对于大规模问题, 则需要借助快速多极子方法 (FMM) 等加速技术。一旦获得边界上的解, 即可通过表示公式计算解在区域内任意点  $x \in \Omega$  处的解:

$$u(x) = \int_{\Gamma} [G(x, y)\frac{\partial u}{\partial n}(y) - \frac{\partial G}{\partial n}(x, y)u(y)]ds(y), \quad (2.16)$$

其中  $G(x, y)$  为基本解,  $\frac{\partial}{\partial n}$  表示法向导数。

边界元方法的一个显著优势是仅需对边界进行离散, 而无需对整个求解域进行网格剖分。这一特点使其在处理无限域问题时特别高效, 因为不需要人为截断

计算域。此外，由于边界积分方程中的基本解已经满足了控制方程和无穷远处的边界条件，该方法自然地保证了解的这些性质。然而，边界元方法也面临两个主要挑战：一方面，基本解的奇异性要求对数值积分进行特殊处理；另一方面，基本解的非局部性质导致离散后的线性方程组是稠密的，这显著增加了计算和存储开销。针对这些问题，可以通过快速多极子方法等现代数值技术来有效缓解。

在本文中，边界元方法主要用于求解散射问题中的边界积分方程。通过合理选择边界元类型和配点策略，不仅可以高效计算散射场，还能准确获得其远场模式，从而为后续的形状优化算法提供了可靠的数值计算工具。

### 2.3 基于曲面水平集表示的形状优化方法

形状优化问题在工程设计、材料科学、流体力学等诸多领域具有广泛应用。这类问题属于反问题的一个重要分支，其目的在于设计满足特定目标和物理约束的几何界面。形状优化问题通常可以形式化为如下约束优化问题：

$$\min_{\Gamma} J(\Gamma), \quad (2.17)$$

其中  $\Gamma$  表示待优化的几何界面， $J$  为目标泛函。

形状导数的概念为形状优化问题的数值求解奠定了理论基础。它描述了目标泛函相对于几何界面沿特定方向摄动的变化率。从直观上看，形状导数刻画了目标函数对形状微小变化的敏感性，这为设计基于梯度的形状优化算法提供了依据。下面基于速度场方法<sup>[47]</sup>给出形状导数的严格定义。设  $V : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3$  为给定的速度场，相应的特征线  $x(t, X)$  满足如下常微分方程组：

$$\frac{d}{dt}x(t, X) = V(t, x(t, X)), \quad (2.18)$$

其中  $X \in \Gamma$ ，初始条件为  $x(0, X) = X$ 。令  $T_t(X) = x(t, X)$ ，则  $T_t$  定义了从  $\Gamma$  到  $\Gamma_t = T_t(\Gamma)$  的变形映射。此时， $J(\Gamma)$  在速度场  $V$  方向上的形状导数  $dJ(\Gamma; V)$  定义为：

$$dJ(\Gamma; V) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{J(\Gamma_t(V)) - J(\Gamma)}{t}. \quad (2.19)$$

值得注意的是，当函数  $J(\Gamma)$  在 Hadamard 意义下<sup>[48]</sup>形状可微时，形状导数  $dJ(\Gamma; V)$  仅依赖于初始速度  $V(0, X)$ 。关于形状导数的更多理论细节，读者可参考文献<sup>[47-48]</sup>。

形状导数为解决形状优化问题提供了重要的理论指导：它给出了使目标函数下降的几何界面演化方向（如图2.1）。基于形状导数，可以构造梯度型算法来求解形状优化问题：通过迭代地沿着形状导数的负方向移动边界来逐步减小目标函数。然而，这种基于显式界面追踪的传统方法存在多个固有缺陷：需要频繁重新

划分网格，在处理复杂几何形状时容易出现网格畸变，且难以有效处理拓扑变化，这些问题在三维情况下尤为突出。为了克服这些局限性，现代形状优化方法转向采用水平集方法或相场方法等隐式界面表示技术。其中，水平集方法由 Osher 和 Sethian 于 1988 年首次提出，其核心思想是用高一维水平集函数的零等值面来隐式表示待优化几何界面。这种表示方法不仅能自然地处理复杂的几何变化，还为拓扑优化提供了有效途径。关于水平集方法的详细理论和应用，可参考 Sethian<sup>[49]</sup> 和 Osher<sup>[50]</sup> 的专著，以及他们的开创性工作<sup>[51]</sup>。

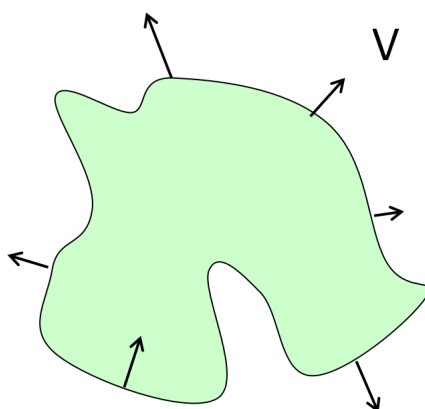


图 2.1 水平集函数示意图

水平集方法的核心思想是用高维函数  $\phi$  的零水平集  $\{x : \phi(x) = 0\}$  来隐式表示待优化的几何界面。具体地，水平集函数  $\phi$  通常定义为带符号距离函数：

$$\phi(x) = \begin{cases} -d(x, \Gamma), & x \in \Omega^-, \\ 0, & x \in \Gamma, \\ d(x, \Gamma), & x \in \Omega^+, \end{cases} \quad (2.20)$$

其中  $d(x, \Gamma)$  表示点  $x$  到界面  $\Gamma$  的最短距离， $\Omega^-$  和  $\Omega^+$  分别表示界面的内部和外部区域。这种表示方法的一个重要特点是  $\phi$  定义在整个计算域上，而不仅限于界面处。在实际计算中，需要对空间进行网格剖分来离散化  $\phi$ ，图 2.2 展示了一个典型的离散隐式函数示例。

基于水平集表示，形状优化问题可以转化为水平集函数  $\phi$  的演化问题。在优化过程中，为了实现目标函数的最速下降，我们构造演化方向与形状导数  $dJ(\Gamma; V)$  相反。具体地，界面的演化可以通过求解如下 Hamilton-Jacobi 方程来实现：

$$\phi_t + F|\nabla\phi| = 0, \quad (2.21)$$

其中  $\phi_t$  表示水平集函数关于时间的偏导数， $\nabla\phi$  为其空间梯度， $F = -dJ(\Gamma; V)$  为界面演化速度。这种基于偏微分方程的演化方案不仅能自然地处理复杂的拓扑变

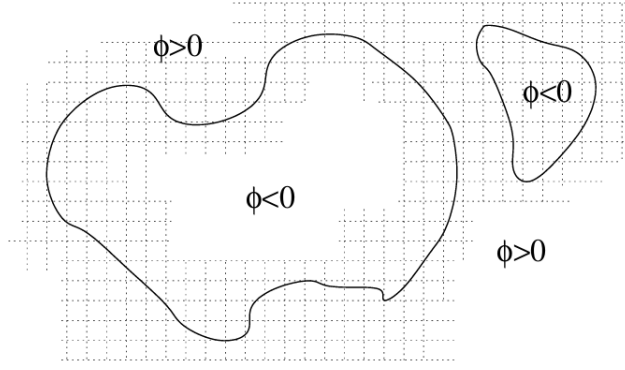


图 2.2 离散隐式函数的水平集示例

化，还为形状优化提供了系统的数值框架。

本节中介绍的基于曲面水平集表示的形状优化方法是在第四章中提出的求解障碍物反散射问题算法的基础。

## 2.4 分数阶索伯列夫空间的预备知识与辅助引理

为了后续分析第四章中提出的反散射算法的收敛性，在这一部分，我们给出几个关于分数阶索伯列夫空间的结果。对于索伯列夫空间更详细的介绍可参见专著[52]。

对于  $s \in \mathbb{R}_+$ ，当  $s = m + \sigma$ ，其中  $m \in \mathbb{N} \cup \{0\}$  且  $\sigma \in (0, 1)$  时， $H^s(\Gamma)$  空间的范数可通过 Sobolev-Slobodeckij 半范数定义为[52]：

$$\|u\|_{H^s(\Gamma)}^2 = \|u\|_{H^m(\Gamma)}^2 + \sum_{|\alpha|=m} \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \frac{|D^\alpha u(x) - D^\alpha u(y)|^2}{|x - y|^{2+2\sigma}} ds(x) ds(y). \quad (2.22)$$

引理 2.1： 设  $f, g \in H^s(\Gamma) \cap C^{[s]}(\Gamma)$ ，其中  $s > 0$  且  $s \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{N}$ ，则存在常数  $C > 0$  使得：

$$\|fg\|_{H^s(\Gamma)} \leq C(\|f\|_{C^{[s]}(\Gamma)} \|g\|_{H^s(\Gamma)} + \|g\|_{C^{[s]}(\Gamma)} \|f\|_{H^s(\Gamma)} + \|g\|_{C^{[s]}(\Gamma)} \|f\|_{C^{[s]}(\Gamma)}). \quad (2.23)$$

证明 如果  $0 < s < 1$ ，根据定义，

$$\|fg\|_{H^s(\Gamma)}^2 = \|fg\|_{L^2(\Gamma)}^2 + \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \frac{|f(x)g(x) - f(y)g(y)|^2}{|x - y|^{2+2s}} ds(x) ds(y). \quad (2.24)$$

记 I 为等式右边的第二项（ $H^s(\Gamma)$  半范数）。那么等式  $f(x)g(x) - f(y)g(y) =$

$f(x)(g(x) - g(y)) + (f(x) - f(y))g(y)$  和三角不等式给出:

$$\begin{aligned}
 I &\leq C \|f\|_{C(\Gamma)}^2 \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \frac{|g(x) - g(y)|^2}{|x - y|^{(2+2s)}} ds(x) ds(y) \\
 &\quad + C \|g\|_{C(\Gamma)}^2 \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \frac{|f(x) - f(y)|^2}{|x - y|^{(2+2s)}} ds(x) ds(y) \quad (2.25) \\
 &= C \|f\|_{C(\Gamma)}^2 (\|g\|_{H^s(\Gamma)}^2 - \|g\|_{L^2(\Gamma)}^2) \\
 &\quad + C \|g\|_{C(\Gamma)}^2 (\|f\|_{H^s(\Gamma)}^2 - \|f\|_{L^2(\Gamma)}^2).
 \end{aligned}$$

这就推出了当  $s \in (0, 1)$  时所需的断言。当  $1 < s < 2$  时, 令  $t = s - 1$ 。那么  $s \in (0, 1)$  的不等式可以推出:

$$\begin{aligned}
 \|fg\|_{H^s(\Gamma)} &\leq C \left( \|fg\|_{H^1(\Gamma)} + \sum_{|\alpha|=1} \|g D^\alpha f\|_{H^1(\Gamma)} + \sum_{|\alpha|=1} \|f D^\alpha g\|_{H^1(\Gamma)} \right) \\
 &\leq C \left( \|fg\|_{H^1(\Gamma)} + \|g\|_{C^1(\Gamma)} \sum_{|\alpha|=1} \|D^\alpha f\|_{H^1(\Gamma)} \right. \\
 &\quad + \|g\|_{H^1(\Gamma)} \sum_{|\alpha|=1} \|D^\alpha f\|_{C^1(\Gamma)} + \|g\|_{C^1(\Gamma)} \sum_{|\alpha|=1} \|D^\alpha f\|_{C^1(\Gamma)} \\
 &\quad + \|f\|_{H^1(\Gamma)} \sum_{|\alpha|=1} \|D^\alpha g\|_{C^1(\Gamma)} + \|f\|_{C^1(\Gamma)} \sum_{|\alpha|=1} \|D^\alpha g\|_{H^1(\Gamma)} \quad (2.26) \\
 &\quad \left. + \|D^\alpha g\|_{C^1(\Gamma)} \sum_{|\alpha|=1} \|f\|_{C^1(\Gamma)} \right) \\
 &\leq C (\|f\|_{C^1(\Gamma)} \|g\|_{C^1(\Gamma)} + \|f\|_{H^s(\Gamma)} \|g\|_{C^1(\Gamma)} + \|f\|_{C^1(\Gamma)} \|g\|_{H^s(\Gamma)}).
 \end{aligned}$$

对于  $s > 2$  的情况可以类似地证明。 ■

**引理 2.2:** 若  $s = m + \sigma$ , 其中  $s \in \mathbb{R}_+$ ,  $m \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ ,  $0 < \sigma < 1$ , 且  $u \in C^{m+1}(\Gamma)$ , 则存在常数  $C > 0$  使得:

$$\|u\|_{H^s(\Gamma)} \leq C \|u\|_{H^{m+1}(\Gamma)} \quad \text{以及} \quad \|u\|_{H^{m+1}(\Gamma)} \leq C \|u\|_{C^{m+1}(\Gamma)}. \quad (2.27)$$

**证明** 由分数阶索伯列夫空间的定义, 根据<sup>[53]</sup>Proposition 2.2, 有如下不等式:

$$\begin{aligned}
 \|u\|_{H^s(\Gamma)}^2 &= \|u\|_{H^m(\Gamma)}^2 + \sum_{|\alpha|=m} \|D^\alpha u\|_{H^\sigma(\Gamma)}^2 - \sum_{|\alpha|=m} \|D^\alpha u\|_{L^2(\Gamma)}^2 \\
 &\leq \|u\|_{H^m(\Gamma)}^2 + C \sum_{|\alpha|=m} \|D^\alpha u\|_{H^1(\Gamma)}^2 - \sum_{|\alpha|=m} \|D^\alpha u\|_{L^2(\Gamma)}^2 \quad (2.28) \\
 &\leq C \|u\|_{H^{m+1}(\Gamma)}^2.
 \end{aligned}$$

此外,

$$\|u\|_{H^{m+1}(\Gamma)}^2 = C \sum_{|\alpha| \leq m+1} \|D^\alpha u\|_{L^2(\Gamma)}^2 \leq C \|u\|_{C^{m+1}(\Gamma)}^2. \quad (2.29)$$

这就完成了引理的证明。 ■

## 第3章 基于 ADMM 的薄掩模反演光刻算法

随着集成电路特征尺寸的不断缩小，光刻失真问题日益严重，这对掩模优化技术提出了更高的要求。交替方向乘子法（ADMM）作为一种高效的优化算法框架，在处理大规模优化问题中表现出优异的性能。本章将详细介绍如何将 ADMM 方法应用于反演光刻问题的求解。

首先，我们将对问题的适定性进行分析，证明在合适的正则化条件下解的存在性和稳定性。其次，通过引入辅助变量和适当的变量分离技巧，我们将目标函数重写为适合使用 ADMM 求解的形式。在此基础上，我们详细讨论算法的实现步骤，特别关注子问题的高效求解策略。通过建立目标函数梯度的 Lipschitz 连续性，我们给出了算法收敛性的完整证明。最后，通过系统的数值实验，验证了所提出的 ADMM 方法在处理不同类型光刻图案时的有效性和鲁棒性。

### 3.1 适定性分析

由于掩模图案  $U(x)$  取值于  $\{0, 1\}$ ，其中  $x \in \Omega$ ， $\Omega$  表示掩模平面上的设计区域，问题 (1.24) 是一个非线性整数规划问题，该问题是 NP-困难的。此外， $K_0$  是一个非凸集，这也增加了求解难度。为了解决这一问题，通常用  $0 \leq U(x) \leq 1$  松弛二元约束  $U(x) = \{0, 1\}$ 。假设掩模是 BV 空间中的图案，令  $K = \{U \in BV(\Omega) | 0 \leq U(x) \leq 1\}$ ，我们选取  $L^2$  范数度量光刻像与目标掩模之间的误差，那么 ILT 转化为如下的优化问题：

$$\min_{U \in K} \|I(U) - I\|_{L^2(\Omega)}, \quad (3.1)$$

在过去的几年里，一些创新性地想法被引入到反演光刻技术中，并显著提高了重建掩模的质量。基本上所有方法都基于构建一个目标函数，该目标函数包含一个误差项和一些正则化项，其中正则化项用于处理反问题的不适定性。目标函数可以表示为：

$$E(U) = \|I(U) - I\|_{L^2(\Omega)}^2 + \alpha R(U), \quad (3.2)$$

其中  $\alpha$  是正则化参数， $R(U)$  表示正则化项。本章采取第二章中介绍的全变差正则化，并添加惩罚项  $\|U(1 - U)\|_1$  来促使优化结果二值化（即 0 或 1），那么 ILT 问

题转化为如下的约束优化问题：

$$\begin{aligned} \min_U & \| \text{Sig}_a(|H * U|^2) - I \|_{L^2(\Omega)}^2 + \beta_1 \|U\|_{TV} + \beta_2 \|U(1-U)\|_{L^1(\Omega)} \\ \text{s.t. } & U(x) \in K. \end{aligned} \quad (3.3)$$

为了分析优化问题 (3.3) 解的适定性，我们定义如下的目标函数：

$$E(U; H) = \| \text{Sig}_a(|H * U|^2) - I \|_{L^2(\Omega)}^2 + \beta_1 \|U\|_{TV} + \beta_2 \|U(1-U)\|_{L^1(\Omega)}. \quad (3.4)$$

下面给出优化问题 (3.3) 解的存在性：

**定理 3.1:** 假设  $I \in L^\infty(\Omega)$ ,  $H \in L^2(\Omega)$ 。那么对于固定参数  $\beta_1, \beta_2$ ,  $K$  中存在目标函数  $E$  的全局最小值。

**证明** 由于

$$E(0; H) = \|I\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|I\|_{L^\infty(\Omega)} * \|1\|_{L^2(\Omega)}^2 < +\infty, \quad (3.5)$$

最小值  $\inf_{U \in K} E(U; H)$  是有限的。假设  $E(U_n; H) \rightarrow \inf_{U \in K} E(U; H)$ ，我们可以得出结论： $\{U_n\}$  在  $BV(\Omega)$  中是一致有界的。由于  $BV(\Omega)$  紧嵌入到  $L^1(\Omega)$  中，因此存在一个子序列（也表示为  $\{U_n\}$ ）和函数  $U^* \in L^1(\Omega)$ ，使得：

$$U_n \rightarrow U^* \quad \text{在 } L^1(\Omega) \text{ 中强收敛。} \quad (3.6)$$

根据文献<sup>[52]</sup> 中的推论 2.17 可知，有一个子序列（也用  $\{U_n\}$  表示），使得

$$U_n \rightarrow U^* \quad \text{a.e. } x \in \Omega. \quad (3.7)$$

那么

$$\begin{aligned} \text{Sig}_a(|H * U_n|^2) - I & \rightarrow \text{Sig}_a(|H * U^*|^2) - I \quad \text{a.e. } x \in \Omega. \\ U_n(1 - U_n) & \rightarrow U^*(1 - U^*) \quad \text{a.e. } x \in \Omega. \end{aligned} \quad (3.8)$$

根据法图引理，我们有

$$\begin{aligned} & \| \text{Sig}_a(|H * U^*|^2) - I \|_{L^2(\Omega)}^2 + \beta_2 \|U^*(1 - U^*)\|_{L^1(\Omega)} \\ & \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \| \text{Sig}_a(|H * U_n|^2) - I \|_{L^2(\Omega)}^2 + \beta_2 \|U_n(1 - U_n)\|_{L^1(\Omega)}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

根据 (3.6)，可以推出<sup>[54]</sup>：

$$\int_{\Omega} |DU^*| dx \leq \liminf_n \int_{\Omega} |DU_n| dx. \quad (3.10)$$

通过 (3.9) 和 (3.10)，得到

$$E(U^*; H) \leq \liminf_n E(U_n, H). \quad (3.11)$$

因此  $U^*$  是  $E(U; H)$  的全局最小化点。 ■

根据定理 3.1，对于每个  $H$ ， $E(U; H)$  存在全局最小点  $U$ ，下面的结果显示了

$U$  关于  $H$  的稳定性:

**定理 3.2:** 假设  $I \in L^\infty(\Omega)$ 。当  $n \rightarrow \infty$  时在  $L^2(\Omega)$  中  $H_n \rightarrow H$ ,  $U_n$  是  $E(U; H_n)$  的全局最小点。那么  $\{U_n\}$  中存在一个子序列, 它在  $L^1(\Omega)$  中强收敛到  $E(U, H)$  的全局最小值点。

**证明** 直接计算可以得到:

$$\begin{aligned} & |H * U|^2(x) - |H_n * U|^2(x) \\ &= \int_{\Omega} (H(y) - H_n(y))U(x-y)dy \cdot \int_{\Omega} \bar{H}(y)U(x-y)dy \\ &+ \int_{\Omega} H_n(y)U(x-y)dy \cdot \int_{\Omega} (\bar{H}(y) - \bar{H}_n(y))U(x-y)dy. \end{aligned} \quad (3.12)$$

由于在  $L^2(\Omega)$  中  $H_n \rightarrow H$ , 因而存在常量  $C$ , 使得:  $\|H_n\|_{L^2(\Omega)} \leq C, \|H_n - H\|_{L^2(\Omega)} \leq C$ 。注意到  $0 \leq U \leq 1$ , 可以推出:

$$||H * U|^2(x) - |H_n * U|^2(x)| \leq C\|H - H_n\|_{L^2(\Omega)}, \forall x \in \Omega. \quad (3.13)$$

根据  $E(U, H)$  的定义, 得出:

$$\begin{aligned} |E(U; H) - E(U; H_n)| &= \int_{\Omega} |Sig_a(|H * U|^2) - Sig_a(|H_n * U|^2)| \\ &\leq C\|H - H_n\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

最后一个不等式由函数  $Sig_a$  的 Lipschitz 连续性和不等式 (3.13) 得出。因此对于任意  $U \in K$ :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E(U; H_n) = E(U; H). \quad (3.15)$$

因而  $E(U; H_n)$  是有界的。仍然根据  $E(U, H)$  的定义, 以及  $U_n$  是  $E(U; H_n)$  的全局最小化点, 可以导出:

$$\|U_n\|_{TV} \leq E(U_n, H_n) \leq E(U, H_n), \quad (3.16)$$

并且  $\|U_n\|_{TV}$  是有界的。由于  $0 \leq U \leq 1$ ,

$$\|U_n\|_{L^1(\Omega)} = \int_{\Omega} |U_n|dx \leq |\Omega|, \quad (3.17)$$

我们可以得出结论,  $\{U_n\}$  在  $BV(\Omega)$  中一致有界。由于  $BV(\Omega)$  紧嵌入到  $L^1(\Omega)$  中, 因此存在一个子序列 (也由  $\{U_n\}$  表示) 和一个函数  $U^* \in L^1(\Omega)$ , 使得:

$$U_n \rightarrow U^* \quad \text{在 } L^1(\Omega) \text{ 中强收敛.} \quad (3.18)$$

根据<sup>[52]</sup>的推论 2.17, 有一个子序列 (也用  $\{U_n\}$  表示), 满足:

$$U_n \rightarrow U^* \quad a.e. \quad x \in \Omega. \quad (3.19)$$

以及  $\{H_n\}$  的子序列 (也表示为  $\{H_n\}$ ), 使得:

$$H_n \rightarrow H \quad a.e. \quad x \in \Omega. \quad (3.20)$$

那么可以推出:

$$\begin{aligned} \text{Sig}_a(|H_n * U_n|^2) - I &\rightarrow \text{Sig}_a(|H * U^*|^2) - I \quad a.e. \quad x \in \Omega, \\ U_n(1 - U_n) &\rightarrow U^*(1 - U^*) \quad a.e. \quad x \in \Omega. \end{aligned} \quad (3.21)$$

根据法图引理可以得出:

$$\begin{aligned} &\|\text{Sig}_a(|H * U^*|^2) - I\|_{L^2(\Omega)}^2 + \beta_2 \|U^*(1 - U^*)\|_{L^1(\Omega)} \\ &\leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \|\text{Sig}_a(|H_n * U_n|^2) - I\|_{L^2(\Omega)}^2 + \beta_2 \|U_n(1 - U_n)\|_{L^1(\Omega)}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

由于 (3.18), 从而:<sup>[54]</sup>

$$\int_{\Omega} |DU^*| dx \leq \liminf_n \int_{\Omega} |DU_n| dx. \quad (3.23)$$

通过 (3.22) 和 (3.23), 可以得到:

$$E(U^*; H) \leq \liminf_n E(U_n, H_n). \quad (3.24)$$

根据  $U_n$  的定义, 得到:

$$E(U_n; H_n) \leq E(U; H_n), \quad \forall U \in K. \quad (3.25)$$

因此:

$$E(U^*; H) \leq \liminf_n E(U_n, H_n) \leq \liminf_n E(U, H_n) = E(U; H), \quad \forall U \in K. \quad (3.26)$$

因此  $U^*$  是  $E(U; H)$  的全局最小值点。 ■

我们注意到上述结果显示了解关于卷积核  $H$  的稳定性。实际上, 正如我们之前提到的,  $H$  代表光刻系统的点扩散函数, 它非常复杂, 很多因素都会为  $H$  带来扰动, 因此这一稳定性结果有重要的现实意义。

## 3.2 反演光刻问题的 ADMM 方法

本节基于 ADMM 框架提出了一种迭代算法来解决反演光刻问题, 然后提出一种针对带有阈值截断 ADMM 问题的高效数值求解算法。

首先, 类似<sup>[12]</sup>, 我们给出如下记号。假设掩模所在区域  $\Omega$  为一矩形, 我们将掩模离散为  $N \times N$  笛卡尔网格, 并让掩模在网格点上赋值。在这种情况下, 掩模是逐像素取值的, 并且可以由矩阵  $U \in \mathbb{R}^{N \times N}$  表示。为方便起见, 我们使用矩阵  $U$  的向量表示, 也表示为  $U \in \mathbb{R}^{N^2}$ 。同样, 我们使用  $I \in \mathbb{R}^{N^2}$  表示所需的输出模式。卷积矩阵  $H \in \mathbb{R}^{N^2 \times N^2}$  表示二维点扩散函数的离散形式。令  $G_x, G_y \in \mathbb{R}^{N^2} \times \mathbb{R}^{N^2}$

分别为水平和垂直方向的一阶有限差分矩阵。在这里和下文中，我们记

$$\mathcal{G}U = (G_x U, G_y U). \quad (3.27)$$

通过这些符号，我们定义

$$\|U\|_{TV} = \|\mathcal{G}U\|_1 = \|G_x U\|_1 + \|G_y U\|_1. \quad (3.28)$$

通过变量分离，问题 (3.3) 可以转换为

$$\begin{aligned} \min_{U, V} & \| \text{Sig}_a(|V|^2) - I \|_2^2 + \beta_1 \|\mathcal{G}U\|_1 + \beta_2 \|U \odot (1 - U)\|_1 \\ \text{s.t.} & \quad 0 \leq U \leq 1, V = HU. \end{aligned} \quad (3.29)$$

这里  $\odot$  表示矩阵的逐元素乘积。我们使用第二章中介绍的 ADMM 方法求解这一问题。问题 (3.29) 的增广拉格朗日函数可以表示为：

$$\begin{aligned} L_a(U, V, P) &= \| \text{Sig}_a(|V|^2) - I \|_2^2 + \beta_1 \|\mathcal{G}U\|_1 + \beta_2 \|U \odot (1 - U)\|_1 \\ &+ \langle P, V - HU \rangle + \frac{\rho}{2} \|V - HU\|_2^2, \end{aligned} \quad (3.30)$$

其中  $\rho$  是足够大的惩罚参数。通过给出拉格朗日函数，对于给定的初始  $U^0, V^0, P^0$ ，我们可以利用第二章中介绍的 ADMM 迭代格式进行求解：

$$\begin{cases} U^{k+1} = \arg \min_U L_a(U, V^k, P^k), \\ V^{k+1} = \arg \min_V L_a(U^{k+1}, V, P^k), \\ P^{k+1} = P^k + \rho(V^{k+1} - HU^{k+1}). \end{cases} \quad (3.31)$$

下面，我们分别给出每个子问题的求解方法。

### 3.2.1 U 子问题

对于给定的  $V^k, P^k$ ，(3.31) 中的  $U$  更新步骤可以简化为求解如下问题：

$$U^{k+1} = \arg \min_U \|HU - W\|_2^2 + \beta_1 \|\mathcal{G}U\|_1 + \beta_2 \|U \odot (1 - U)\|_1, \quad (3.32)$$

并带有约束  $0 \leq U \leq 1$ ，其中

$$W = V^k + \frac{1}{\rho} P^k. \quad (3.33)$$

令

$$\Phi(U) = (\beta_1 \mathcal{G}U, \beta_2 U \odot (1 - U)). \quad (3.34)$$

我们使用分裂 Bregman 迭代方法<sup>[55]</sup> 来解决问题 (3.32)。也就是说, 给定  $b^0, d^0$ , 对于  $s = 0, 1, \dots$ , 我们使用以下迭代过程求解 (3.32):

$$\begin{cases} \hat{U}^{s+1} = \arg \min_U \|HU - W\|_2^2 + \frac{\gamma}{2} \|d^s - \Phi(U) - b^s\|_2^2, \\ d^{s+1} = \arg \min_d \|d\|_1 + \frac{\gamma}{2} \|d - \Phi(\hat{U}^{s+1}) - b^s\|_2^2, \\ b^{s+1} = b^s + \Phi(\hat{U}^{s+1}) - d^{s+1}. \end{cases} \quad (3.35)$$

记

$$\begin{aligned} F(U) &= \|HU - W\|_2^2 + \frac{\gamma}{2} \|d^s - \Phi(U) - b^s\|_2^2 \\ &= \|HU - W\|_2^2 + \frac{\gamma}{2} (\|d_1^s - \beta_1 GU - b_1^s\|_2^2 + \|d_2^s - \beta_2 U \odot (1 - U) - b_2^s\|_2^2). \end{aligned} \quad (3.36)$$

通过直接计算可以得到,  $F(U)$  的梯度为

$$\begin{aligned} \nabla F(U) &= 2\text{Re}\{H^*(HU - W)\} - \gamma\beta_1 G^T(d_1^s - \beta_1 GU - b_1^s) \\ &\quad + \gamma\beta_2(d_2^s - \beta_2 U \odot (1 - U) - b_2^s) \odot (2U - 1). \end{aligned} \quad (3.37)$$

使用梯度下降法求解第一个子问题, 其中初值为  $\tilde{U}^0 = U^k$ , 迭代过程为

$$\tilde{U}^{m+1} = \tilde{U}^m - \eta_m \nabla F(\tilde{U}^m), m = 0, 1, \dots, \quad (3.38)$$

其中系数  $\eta_m$  是通过 Armijo 线搜索方法<sup>[56]</sup> 给出的, 关于 Armijo 线搜索方法的介绍参见附录 A。当这一迭代过程在  $m = M$  处达到收敛时, 令  $\hat{U}^{s+1} = \tilde{U}^M$ 。为了使掩模  $U$  满足  $0 \leq U \leq 1$ , 我们将  $\hat{U}^{s+1}$  投影到  $[0, 1]$  内:

$$\hat{U}^{s+1} = \min\{\max\{0, \hat{U}^{s+1}\}, 1\}. \quad (3.39)$$

最后, 我们使用软阈值操作 (shrinkage thresholding)<sup>[55]</sup> 更新  $d$ , 即对于  $d$  的每个元素, 计算

$$d_j^{s+1} = \text{shrink}(\Phi(\hat{U}^{s+1})_j + b_j^s, 1/\gamma), j = 1, 2, \dots, N^2, \quad (3.40)$$

其中收缩函数定义为

$$\text{shrink}(x, \lambda) = \frac{x}{|x|} \max(|x| - \lambda, 0). \quad (3.41)$$

当  $n$  等于给定数  $S$  时, 停止 Bregman 迭代 (3.35), 并令

$$U^{k+1} = \hat{U}^{S+1} \quad (3.42)$$

为问题 (3.32) 的解。

### 3.2.2 V 子问题

对于给定的  $U^{k+1}, P^k$ , 通过简单计算,  $V$  更新步骤等价于以下问题:

$$V^{k+1} = \arg \min_V \|Siga(|V|^2) - I\|_2^2 + \frac{\rho}{2} \|V - W^k\|_2^2, \quad (3.43)$$

其中

$$W^k = HU^{k+1} - \frac{1}{\rho}P^k. \quad (3.44)$$

这里， $V$  子问题可以分解为一系列单变量优化问题：

$$V_i^{k+1} = \arg \min_{V_i} (\text{Sig}_a(|V_i|^2) - I_i)^2 + \frac{\rho}{2}(V_i - W_i^k)^2. \quad (3.45)$$

正如我们之前提到的， $\text{Sig}_a$  是截断函数的光滑化。为了避免使用非线性迭代方法求解问题 (3.45)，我们直接求解以下问题：

$$V_i^{k+1} = \arg \min_{V_i} (T(|V_i|^2) - I_i)^2 + \frac{\rho}{2}(V_i - W_i^k)^2, \quad (3.46)$$

其中  $T$  是第一章中函数 (1.16) 中定义的运算。问题 (3.46) 有一个闭式解：

$$V_i^{k+1} = \begin{cases} W_i^k, & |W_i^k| < \sqrt{tr} \text{ 且 } I_i = 0, \\ W_i^k, & |W_i^k| < \sqrt{tr} \text{ 且 } I_i = 1 \text{ 且 } \frac{\rho}{2}||W_i^k| - \sqrt{tr}|^2 > 1, \\ W_i^k, & |W_i^k| > \sqrt{tr} \text{ 且 } I_i = 0 \text{ 且 } \frac{\rho}{2}||W_i^k| - \sqrt{tr}|^2 > 1, \\ W_i^k, & |W_i^k| > \sqrt{tr} \text{ 且 } I_i = 1, \\ \sqrt{tr} \cdot \text{sgn}(W_i^k), & \text{其他}, \end{cases} \quad (3.47)$$

其中  $tr$  的定义在第一章的公式 (1.18) 中。

图 3.1 显示了当  $W_i^k = 0.2, \rho = 1, tr = 0.3$  以及  $I_i$  取不同值时 (3.46) 给出目标函数的曲线，其中左图对应于  $I_i = 1$ ，右图对应于  $I_i = 0$ 。可以看到  $V_i^{k+1} = \sqrt{tr} \text{sgn}(W_i^k) = \sqrt{0.3}$  以及  $V_i^{k+1} = W_i^k$  分别取到对应于  $I_i = 1$  和  $I_i = 0$  时的最小值，这证实了公式 (3.47)。

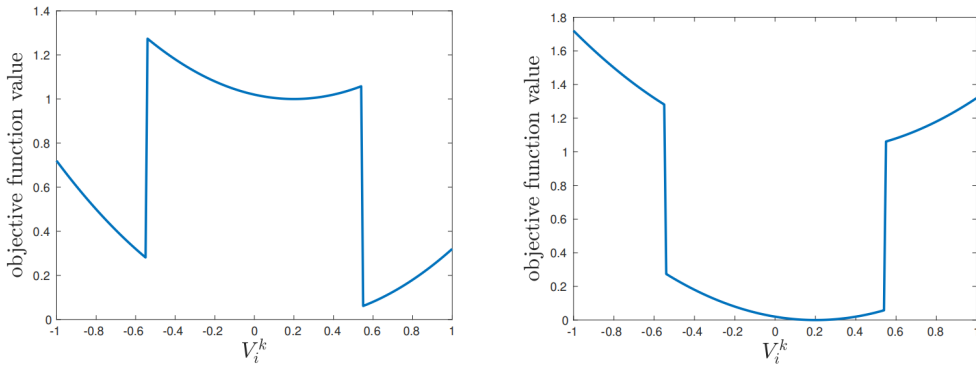


图 3.1 函数  $W_i^k$

现在，作为总结，我们给出求解约束优化问题 3.29 的完整算法 3.1。

**算法 3.1** 求解反演光刻问题的 ADMM 算法

**输入:** 目标图像  $I$ 。  
**初始化:**  $U = I, V = H * U, P = 1$ 。  
**while** 误差  $>$  tol **do**  
   计算  $W = V + P/\rho$ 。  
   初始化  $d = \Phi(U), b = 0$ 。  
   **while** 误差  $>$  tol **do**  
     通过公式 (3.38) 更新  $U$ 。  
     将  $U$  投影到  $[0, 1]$  上:  $U = \min\{\max\{0, U\}, 1\}$ 。  
     更新  $d = \text{shrink}(b + \Phi(U), \frac{1}{\gamma})$ 。  
     更新  $b = b + \Phi(U) - d$ 。  
   **end while**  
   通过 (3.47) 更新  $V$ 。  
   更新拉格朗日乘子  $P$ :  $P = P + \rho(V - HU)$ 。  
**end while**  
**返回:** 优化掩模  $U$ 。

### 3.3 收敛性分析

下面给出算法3.1的收敛性分析。我们的收敛性分析方法受到文献<sup>[57]</sup>中的全局收敛结果的启发。为了使证明更加简洁，首先给出一些记号。定义如下函数

$$h_a(V) = \|\text{Sig}_a(|V|^2) - I\|_2^2, \quad (3.48)$$

及其关于变量  $V$  的导数:

$$\nabla h_a(V) = 2aV \odot (\text{Sig}_a(|V|^2) - I) \odot (1 - \text{Sig}_a(|V|^2)) \odot \text{Sig}_a(|V|^2). \quad (3.49)$$

$\nabla h_a(V)$  与  $V$  是具有相同的大小向量。根据  $h_a(V)$  的定义， $\nabla h_a(V)$  的每个元素都是一个单值函数，那么  $h_a(V)$  的 Hessian 是一个对角矩阵。图3.2绘制了当  $a = 20, tr = 0.3$  时  $\nabla h_a(V)$  的第  $i$  个元素以及 Hessian 矩阵相应的对角元，其中左图对应于  $I_i = 0$ ，右图对应于  $I_i = 1$ 。容易知道  $\nabla h_a(V)$  对于任意给定的  $a$  都是 Lipschitz 连续的，假设 Lipschitz 常数为  $l_h$ 。定义函数:

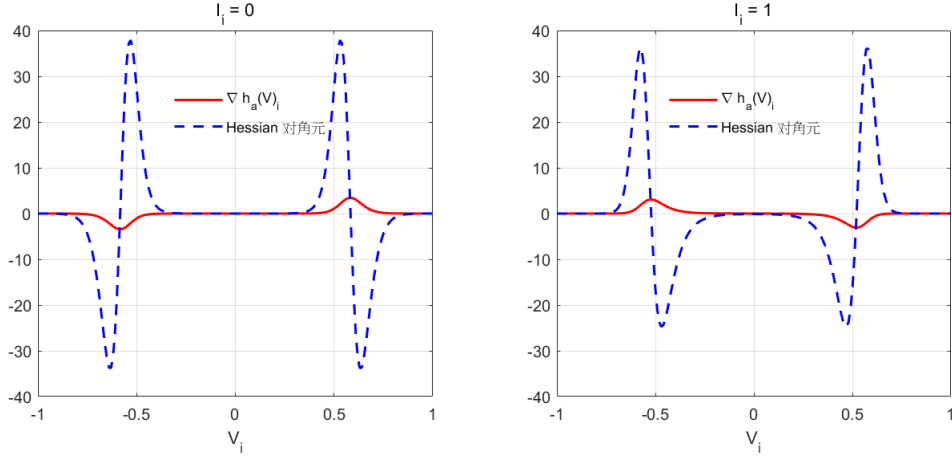
$$f(U) = \beta_1 \|GU\|_1 + \beta_2 \|U \odot (1 - U)\|_1. \quad (3.50)$$

此时，拉格朗日函数可以重写为

$$L_a(U, V, P) = f(U) + h_a(V) + \langle P, V - HU \rangle + \frac{\rho}{2} \|V - HU\|_2^2. \quad (3.51)$$

为方便起见，下文中省略下标  $a$ 。那么 ADMM 迭代格式可以重写为:

$$\begin{cases} U^{k+1} = \arg \min_U L(U, V^k, P^k), \\ V^{k+1} = \arg \min_V L(U^{k+1}, V, P^k), \\ P^{k+1} = P^k + \rho(V^{k+1} - HU^{k+1}). \end{cases} \quad (3.52)$$


 图 3.2 函数  $\nabla h_a(V)$  与  $h_a(V)$  的 Hessian

现在我们陈述并证明关于收敛性的主要定理：

**定理 3.3:** 假设参数满足  $\frac{\rho}{2} - \frac{l_h}{\rho} - l_h > 0$ ，序列  $(U^k, V^k, P^k)$  是由 (3.52) 生成的，那么存在一个子序列收敛到  $L(U, V, P)$  的驻点。

首先给出拉格朗日函数的递减性质：

**引理 3.1:** 如果  $\frac{\rho}{2} - \frac{l_h}{\rho} - l_h > 0$ ，其中  $l_h$  是  $\nabla h$  的 Lipschitz 常数，那么存在一个常数  $C = C(\rho, l_h) > 0$ ，使得对于足够大的  $k$ ，有

$$L(U^k, V^k, P^k) - L(U^{k+1}, V^{k+1}, P^{k+1}) \geq C \|V^{k+1} - V^k\|_2^2. \quad (3.53)$$

**证明** 由于  $V^k$  满足最优性条件，可以得到：

$$\nabla h(V^k) + P^{k-1} + \rho(V^k - HU^k) = 0, \quad (3.54)$$

并且：

$$P^k = P^{k-1} + \rho(V^k - HU^k). \quad (3.55)$$

从而有：

$$P^k = -\nabla h(V^k). \quad (3.56)$$

根据函数  $\nabla h$  的 Lipschitz 连续性：

$$\|P^{k+1} - P^k\|_2 = \|\nabla h(V^k) - \nabla h(V^{k+1})\|_2 \leq l_h \|V^k - V^{k+1}\|_2. \quad (3.57)$$

由  $U^{k+1}$  的定义，可以得到：

$$L(U^k, V^k, P^k) - L(U^{k+1}, V^k, P^k) \geq 0, \quad (3.58)$$

考虑函数值的差:

$$\begin{aligned}
 & L(U^{k+1}, V^k, P^k) - L(U^{k+1}, V^{k+1}, P^{k+1}) \\
 & = h(V^k) - h(V^{k+1}) - \langle P^{k+1}, V^{k+1} - HU^{k+1} \rangle + \langle P^k, V^k - HU^{k+1} \rangle \\
 & \quad + \frac{\rho}{2} \|V^k - HU^{k+1}\|_2^2 - \frac{\rho}{2} \|V^{k+1} - HU^{k+1}\|_2^2,
 \end{aligned} \tag{3.59}$$

应用向量范数恒等式  $\|a - c\|^2 - \|b - c\|^2 = \|a - b\|^2 + 2\langle a - b, b - c \rangle$ , 得到:

$$\begin{aligned}
 & L(U^{k+1}, V^k, P^k) - L(U^{k+1}, V^{k+1}, P^{k+1}) \\
 & = h(V^k) - h(V^{k+1}) + \langle P^{k+1}, V^k - V^{k+1} \rangle + \frac{\rho}{2} \|V^k - V^{k+1}\|_2^2 \\
 & \quad + \langle P^k - P^{k+1}, V^k - V^{k+1} \rangle + \langle P^k - P^{k+1}, V^{k+1} - HU^{k+1} \rangle \\
 & \quad + \rho \langle V^k - V^{k+1}, V^{k+1} - HU^{k+1} \rangle.
 \end{aligned} \tag{3.60}$$

结合 (3.55) 和 (3.56), 并根据  $\nabla h(V)$  的 Lipschitz 连续性, 可以得到:

$$\begin{aligned}
 & L(U^{k+1}, V^k, P^k) - L(U^{k+1}, V^{k+1}, P^{k+1}) \\
 & = h(V^k) - h(V^{k+1}) - \langle \nabla h(V^{k+1}), V^k - V^{k+1} \rangle \\
 & \quad + \frac{\rho}{2} \|V^{k+1} - V^k\|_2^2 - \frac{1}{\rho} \|P^{k+1} - P^k\|_2^2 \\
 & \geq -l_h (\|V^{k+1} - V^k\|_2^2) + \frac{\rho}{2} \|V^{k+1} - V^k\|_2^2 - \frac{l_h}{\rho} \|V^{k+1} - V^k\|_2^2 \\
 & \geq \left(\frac{\rho}{2} - \frac{l_h}{\rho} - l_h\right) \|V^{k+1} - V^k\|_2^2.
 \end{aligned} \tag{3.61}$$

最后, 借助 (3.58) 和上述不等式 (3.61), 得到 (3.53). ■

下面的引理表明拉格朗日函数有下界并且序列  $(U^k, V^k, P^k)$  有界:

**引理 3.2:** 在与引理 3.1 相同的条件下,  $L(U^k, V^k, P^k)$  是有下界的, 并且  $(U^k, V^k, P^k)$  是有界的。

**证明** 由于  $\rho > 2l_h$ , 根据  $L_a(U, V, P)$  的定义, 可以得到:

$$\begin{aligned}
 & L(U^k, V^k, P^k) = f(U^k) + h(V^k) + \langle P^k, V^k - HU^k \rangle + \frac{\rho}{2} \|V^k - HU^k\|_2^2 \\
 & = f(U^k) + h(V^k) - \langle \nabla h(V^k), V^k - HU^k \rangle + \frac{\rho}{2} \|V^k - HU^k\|_2^2 \\
 & \geq f(U^k) + h(HU^k) + \left(\frac{\rho}{2} - l_h\right) \|V^k - HU^k\|_2^2 \\
 & \geq \frac{l_h}{\rho} \|V^k - HU^k\|_2^2 \geq 0.
 \end{aligned} \tag{3.62}$$

引理 3.1 表明  $L(U^k, V^k, P^k)$  是有上界的, 那么  $\|V^k - HU^k\|$  是有界的。由于  $0 \leq U^k \leq 1$ , 那么  $HU^k$  是有界的, 从而  $V^k$  是有界的,  $P^k = -\nabla h(V^k)$  也是有界的。 ■

引理 3.3: 序列  $L(U^k, V^k, P^k)$  收敛并且

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|V^k - V^{k+1}\|_2 \rightarrow 0, \lim_{k \rightarrow \infty} \|P^k - P^{k+1}\|_2 \rightarrow 0. \quad (3.63)$$

证明 基于引理 3.1 和引理 3.2, 我们知道序列  $\{L(U^k, V^k, P^k)\}$  是收敛的, 根据引理 3.1, 我们有  $\|V^k - V^{k+1}\|_2 \rightarrow 0, k \rightarrow \infty$ 。根据  $P^k = -\nabla h(V^k)$ , 可以得到:

$$P^k - P^{k+1} = -\nabla h(V^k) + \nabla h(V^{k+1}). \quad (3.64)$$

因为  $\nabla h(V)$  是 Lipschitz 连续的, 从而:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|P^k - P^{k+1}\|_2 \rightarrow 0. \quad (3.65)$$

现在给出两个收敛性结果:

引理 3.4: 对于任何  $k$ , 都存在一个  $\bar{d}^k \in \partial_U L(U^{k+1}, V^{k+1}, P^{k+1})$  使得:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\bar{d}^k\|_2 \rightarrow 0. \quad (3.66)$$

证明 根据 (3.51), 可以得到:

$$\partial_U L(U^{k+1}, V^{k+1}, P^{k+1}) = \partial f(U^{k+1}) - H^T P^{k+1} - \rho H^T (V^{k+1} - HU^{k+1}). \quad (3.67)$$

令

$$\Psi(U) = h(V^k) + \langle P^k, V^k - HU \rangle + \frac{\rho}{2} \|V^k - HU\|_2^2. \quad (3.68)$$

根据  $U^{k+1}$  的最优性条件和文献<sup>[58]</sup>的 3.1.7 节, 可以得到:

$$d^k = -\nabla_U \Psi(U^{k+1}) = H^T P^k + \rho H^T (V^k - HU^{k+1}) \in \partial f(U^{k+1}). \quad (3.69)$$

那么

$$\begin{aligned} \bar{d}^k &= d^k - H^T P^{k+1} - \rho H^T (V^{k+1} - HU^{k+1}) \\ &= H^T (P^k - P^{k+1}) + \rho H^T (V^k - V^{k+1}) \in \partial_U L(U^{k+1}, V^{k+1}, P^{k+1}). \end{aligned} \quad (3.70)$$

根据引理 (3.1) 和 (3.2), 可以得到:

$$\|\bar{d}^k\|_2 \leq C' (\|P^k - P^{k+1}\|_2 + \|V^k - V^{k+1}\|_2) \leq C \|V^k - V^{k+1}\|_2 \rightarrow 0. \quad (3.71)$$

引理 3.5: 如果  $(U^*, V^*, P^*)$  是子序列  $(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s})$  的极限点, 那么  $L(U^*, V^*, P^*) = \lim_{s \rightarrow \infty} L(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s})$ 。

证明 首先注意到  $\{L(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s})\}$  是单调非增的, 这意味着序列  $\{L(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s})\}$  收敛, 由于  $L$  是下半连续的 (l.s.c.), 我们有:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} L(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s}) \geq L(U^*, V^*, P^*). \quad (3.72)$$

因为  $L$  中唯一可能不连续的项是  $f(U)$ , 所以有:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} L(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s}) - L(U^*, V^*, P^*) \leq \limsup_{s \rightarrow \infty} f(U^{k_s}) - f(U^*). \quad (3.73)$$

但因为  $U^{k_s}$  是子问题的最优解:

$$\min_U L(U, V^{k_s-1}, P^{k_s-1}), \quad (3.74)$$

因此  $L(U^{k_s}, V^{k_s-1}, P^{k_s-1}) \leq L(U^*, V^{k_s-1}, P^{k_s-1})$ 。由于  $L(U, V, P)$  中唯一不连续的部分是  $f(U)$ , 所以有:

$$\limsup_{s \rightarrow \infty} L(U^{k_s}, V^{k_s-1}, P^{k_s-1}) - L(U^*, V^{k_s-1}, P^{k_s-1}) = \limsup_{s \rightarrow \infty} f(U^{k_s}) - f(U^*). \quad (3.75)$$

因此  $\limsup_{s \rightarrow \infty} f(U^{k_s}) - f(U^*) \leq 0$ 。根据 (3.72) 和 (3.73), 可以得到:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} L(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s}) - L(U^*, V^*, P^*) = 0. \quad (3.76)$$

■

现在, 可以给出定理 3.3 的证明:

**定理 3.3 的证明** 由引理 3.2 可知, 序列  $(U^k, V^k, P^k)$  是有界的, 因此存在收敛子序列  $(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s})$  和极限点  $(U^*, V^*, P^*)$ , 使得  $(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s}) \rightarrow (U^*, V^*, P^*)$ ,  $s \rightarrow +\infty$ 。根据引理 3.1 和 3.2,  $L(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s})$  是单调非增且有下界的, 因此  $\|V^{k_s} - V^{k_{s+1}}\| \rightarrow 0$ ,  $s \rightarrow +\infty$ 。根据引理 3.4, 存在  $\bar{d}^s \in \partial_U L(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s})$  使得  $\|\bar{d}^s\| \rightarrow 0$ 。基于引理 3.5, 有  $L(U^*, V^*, P^*) = \lim_{s \rightarrow \infty} L(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s})$ 。根据次梯度的定义, 有如下不等式:

$$L(U, V^{k_s}, P^{k_s}) - L(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s}) - \langle \bar{d}^s, U - U^{k_s} \rangle \geq 0, \quad \forall U. \quad (3.77)$$

因为  $L(U, V, P)$  相对于  $V$  和  $P$  是连续的, 对  $s$  取极限可以得到:

$$L(U, V^*, P^*) - L(U^*, V^*, P^*) \geq 0, \quad \forall U. \quad (3.78)$$

因此,  $0 \in \partial_U L(U^*, V^*, P^*)$ 。根据  $V^{k_s}$  的最优性, 可以得到:

$$0 = \partial_V L(U^{k_s}, V^{k_s}, P^{k_s-1}) = \nabla h(V^{k_s}) + P^{k_s-1} + \rho(V^{k_s} - HU^{k_s}). \quad (3.79)$$

显然,  $\partial_V L(U, V, P)$  相对于  $U, V, P$  是连续的, 那么根据引理 3.3, 可以得出:

$$\begin{aligned} \partial_V L(U^*, V^*, P^*) &= \nabla h(V^*) + P^* + \rho(V^* - HU^*) \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \nabla h(V^{k_s}) + P^{k_s-1} + \rho(V^{k_s} - HU^{k_s}) = 0. \end{aligned} \quad (3.80)$$

仍由  $V^{k_s}$  的最优性:

$$\rho(V^{k_s} - HU^{k_s}) = -\nabla h(V^{k_s}) - P^{k_s-1} = \nabla h(V^{k_s-1}) - \nabla h(V^{k_s}), \quad (3.81)$$

那么可以得到:

$$\partial_p L(U^*, V^*, P^*) = V^* - HU^* = \lim_{s \rightarrow \infty} V^{k_s} - HU^{k_s} = 0. \quad (3.82)$$

这里我们使用了  $\nabla h$  的 Lipschitz 连续性和引理 3.3。因此  $0 \in \partial L(U^*, V^*, P^*)$ 。 ■

### 3.4 数值实验

本节提供了一系列数值实验,旨在测试所提算法的性能表现及收敛特性。所有数值实验的参数选择如下:波长  $\lambda = 193\text{nm}$ , 数值孔径  $NA = 0.85$ , 像素大小为  $5\text{nm}$ , 离散点扩散函数  $H$  的大小为  $100 \times 100$ 。截断函数 (1.16) 中选取  $tr = 0.3$ 。本文所有数值实验均在配置为 Intel(R) Core(TM) i7-10510U CPU @ 1.80GHz-2.30GHz, 16GB RAM 的笔记本电脑上采用 Matlab 软件完成。

为了衡量光刻像与目标像之间的误差,定义边缘放置误差:

$$EPE = |I(U) - I|. \quad (3.83)$$

EPE 衡量图像边缘的误差,是评价反演精确性的重要参数。定义误差:

$$error = \|EPE\|_2 \quad (3.84)$$

衡量输出图像与目标图像之间的距离,这里  $\|\cdot\|_2$  表示向量化图像的  $l^2$  范数。我们分别给出了在最佳离焦  $D = 0\text{nm}$  和离焦  $D = 50\text{nm}$  时的数值算例,其中离焦  $D$  由 (1.11) 定义。

#### 3.4.1 参数选取策略

本节讨论增广拉格朗日函数 (3.30) 中参数  $\rho, \beta_1, \beta_2$  以及迭代格式 (3.35) 中参数  $\gamma$  的选取策略。图3.3展示了本例中的目标图像,图像的大小为  $144 \times 144$ ,蓝色部分值为 0,黄色部分值为 1。

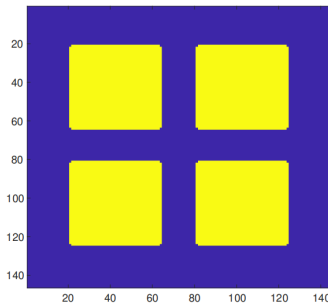


图 3.3 目标模式

图3.4显示了当选取不同  $\rho$  时优化过程中误差函数的下降情况,其中  $\gamma =$

50,  $\beta_1 = 0.005, \beta_2 = 0.01$ 。可以看到, 随着  $\rho$  的增加, 误差下降更加一致, 更加平缓,  $\rho = 10$  是一个合适的选择。图3.5给出了不同  $\gamma$  下的误差下降情况, 其中  $\rho = 10, \beta_1 = 0.005, \beta_2 = 0.01$ , 可以看到  $\gamma = 30$  是一个合适的选择。下面, 固定  $\rho = 10$  和  $\gamma = 30$ 。图3.6显示了选取不同  $\beta_1$  时的修正掩模, 从左到右分别对应  $\beta_1 = 0.005, 0.01, 0.015$ 。图3.7显示了选取不同  $\beta_2$  时的优化图像。这些数值示例启发我们选取  $\beta_1 = 0.01, \beta_2 = 0.015$ 。我们指出, 这些选择是相当启发式的, 因为很难找到最佳的参数。

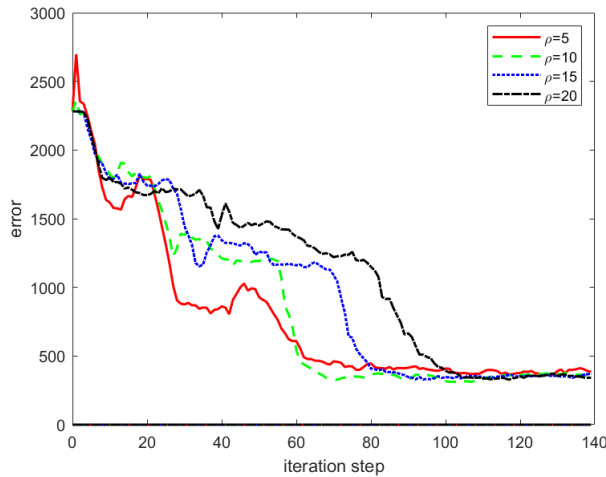


图 3.4 参数  $\rho$  的影响

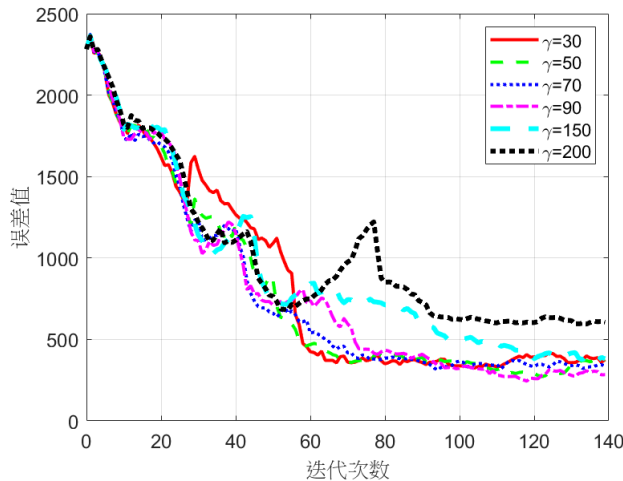
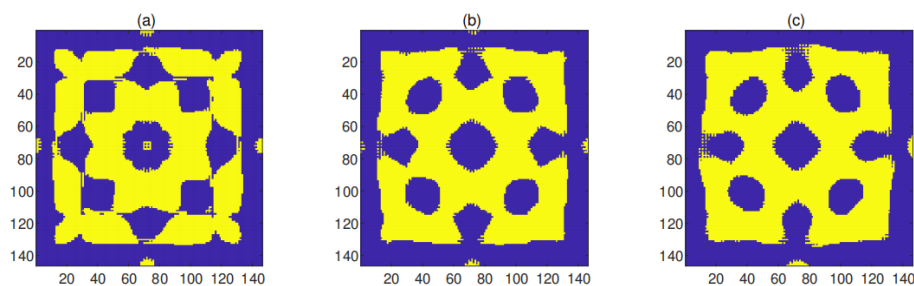
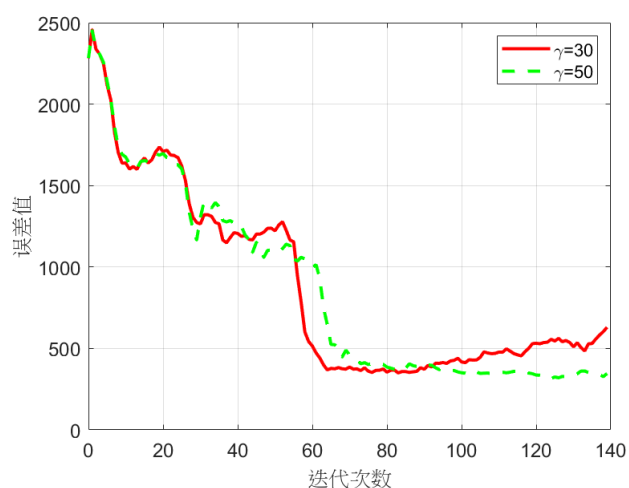


图 3.5  $\gamma$  的启发式选择

### 3.4.2 数值算例

本节通过三个具有代表性的数值算例来验证所提出算法的有效性。这些算例依照复杂度递增的顺序排列: 算例 1 为规则的矩形排列结构, 算例 2 为长条形结

图 3.6  $\beta_1$  的启发式选取图 3.7  $\beta_2$  的影响

构，算例 3 为接近实际芯片设计的复杂混合结构。对于每个算例，我们展示了对焦条件 ( $D = 0 \text{ nm}$ ) 和离焦条件 ( $D = 50 \text{ nm}$ ) 下的优化结果，以评估算法的性能和稳健性。特别地，针对算例 1，我们还进行了对比实验，分析了全变差正则项的作用以及与次梯度方法的性能比较，以全面验证所提 ADMM 算法的优势。

### 3.4.3 矩形排列结构的优化结果与对比实验

图3.8展示了由 10 个矩形组成的目标图案及其反演优化结果。图3.8(a) 显示了目标图案，图3.8(b) 展示了以目标模式直接作为光刻系统输入时的输出模式，图3.8(c) 是相应的边缘放置误差。可以明显看出，直接使用目标图案作为掩模会导致严重的成像失真，尤其是正方形的边缘和角点区域。图3.8(d) 显示了我们提出的算法在对焦情况 ( $D = 0 \text{ nm}$ ) 下生成的优化掩模，其特征是在正方形角点和边缘处生成了复杂的辅助结构。图3.8(e) 展示了使用该优化掩模得到的输出图案，图3.8(f) 是相应的边缘放置误差。可以看出，优化后的成像结果与目标图案高度吻合，边缘误差显著减小。图3.8(g)-(l) 展示了离焦条件 ( $D = 50 \text{ nm}$ ) 下的相应结果，尽管离焦引入了额外的相位变化，但算法仍能生成有效的优化掩模，并产生满意

的成像结果。特别值得注意的是，优化掩模中出现的辅助特征在形状和分布上表现出规律性，这些特征虽然不直接对应目标图案，但通过光学干涉效应，有效补偿了衍射效应和离焦导致的失真。图3.9给出了该算例的误差下降曲线，从中可以观察到对焦情况（蓝色实线）和离焦情况（红色虚线）下误差均呈现先快速下降后趋于平稳的特性。在迭代初期（约 50 次迭代内），对焦情况下的优化速度更快，而离焦情况下的误差曲线则表现出一定的波动性，这反映了离焦条件增加了优化问题的复杂度。然而，在约 200 次迭代后，两种情况下的误差均趋于稳定，最终达到相近的误差水平，证明了所提算法对于光学参数变化的适应性和鲁棒性。

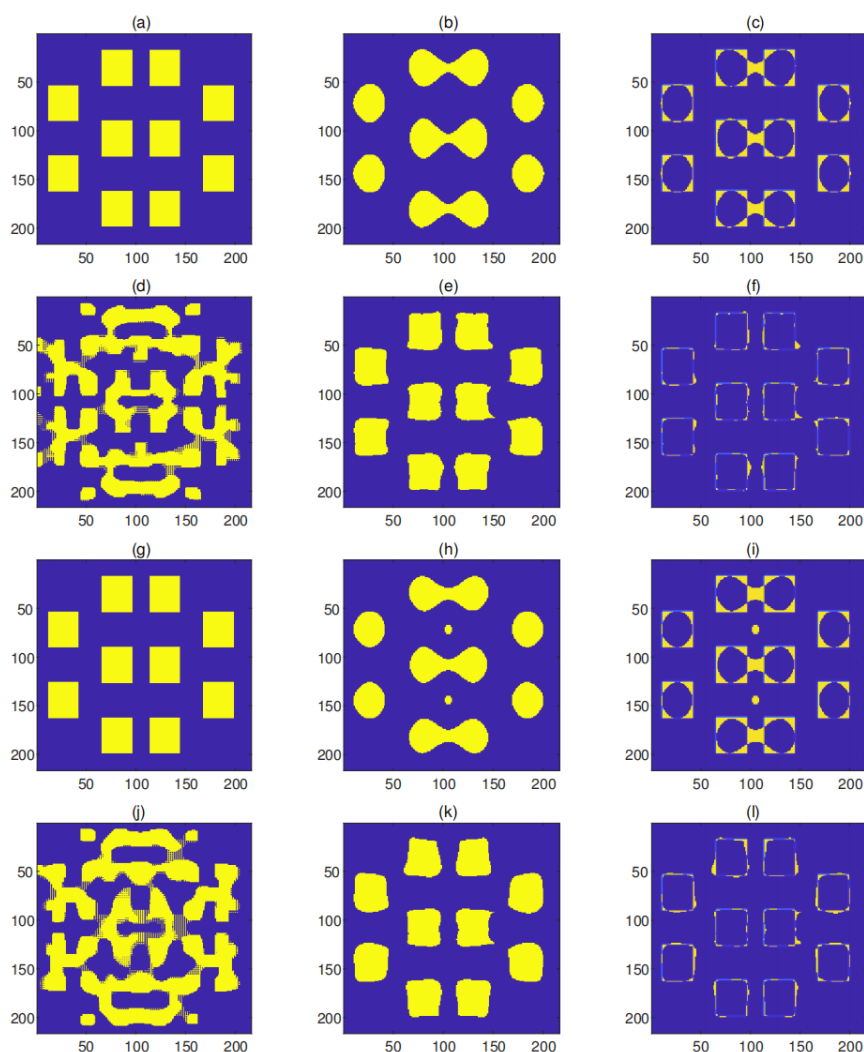


图 3.8 正方形掩模结构反演结果

为了验证全变差 (TV) 正则项的重要作用，图3.10展示了不添加 TV 正则项 ( $\beta_1 = 0$ ) 的优化结果。对比图3.8(d)和图3.10(d)可见显著差异：加入 TV 约束的优化掩模特征分布规律，边缘平滑，辅助特征主要集中在正方形四周和角点；而无 TV 约束的优化掩模则边缘锯齿状，出现大量细碎、孤立的结构和噪点，尤其在正

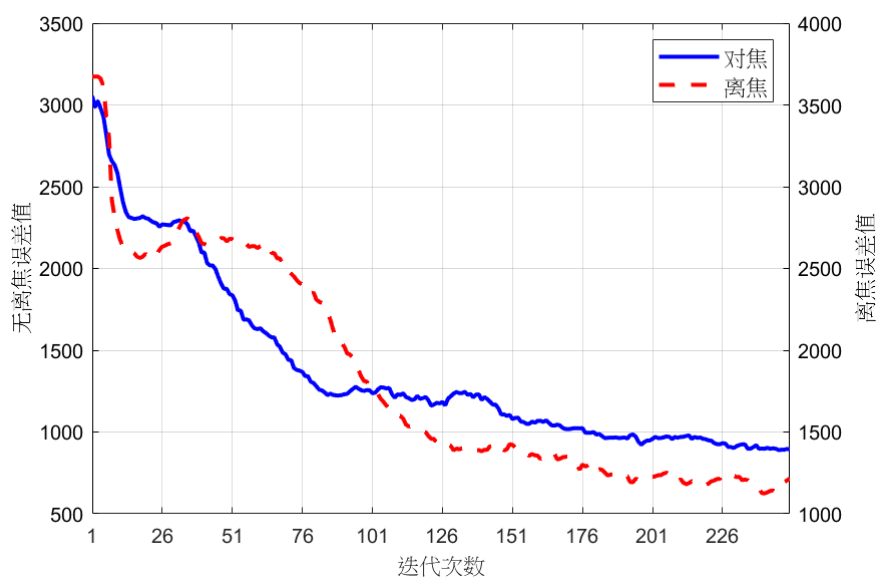


图 3.9 正方形掩模误差下降曲线

方形之间的区域，这些随机分布的小结构缺乏明显物理意义。虽然两种掩模在理想条件下都能产生近似目标的成像结果，但无 TV 约束掩模的复杂结构带来三个问题：制造难度增加，细小结构可能低于制造限制；对成像系统参数变化更敏感；以及边缘误差实际更高，特别是在角点区域。这一对比说明 TV 正则项通过惩罚掩模的总梯度，即使优化结果更平滑规整，提高可制造性，又消除了无物理意义的高频细节，增强了算法鲁棒性。

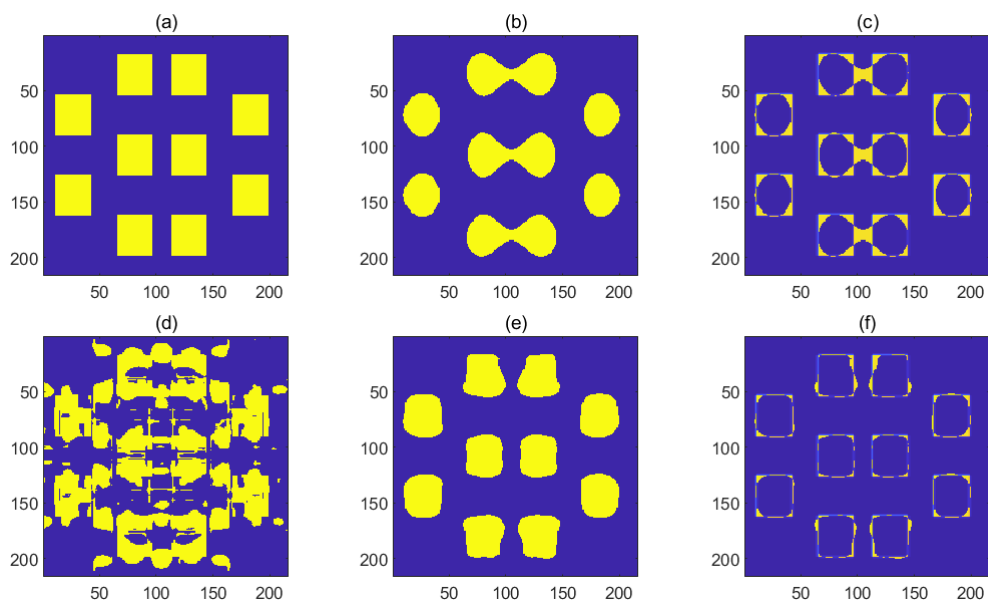


图 3.10 正方形掩模结构无 TV 约束反演结果

除了验证正则项的作用，我们还将所提出的 ADMM 算法与优化 TV 正则项的

次梯度方法<sup>[21]</sup>进行了对比。在相同的参数设置 ( $\beta_1 = 0.05$ ,  $\beta_3 = 0.015$ , 为次梯度方法表现较好的一组参数) 之下, 图3.11展示了两种算法的优化结果对比, 其中前两行为我们提出的 ADMM 算法的结果, 第三行为次梯度方法的结果。可以观察到 ADMM 算法生成的掩模边缘更为平滑, 特征分布更加规则, 而次梯度方法的结果存在明显的不规则边缘和杂乱的辅助特征; 图3.12显示了两种方法的误差下降曲线, 蓝色线代表 ADMM 算法, 红色线代表次梯度方法, 清晰展示了次梯度法的不稳定性——虽然初期迭代中误差快速下降, 但随后在持续震荡, 而 ADMM 算法则能够持续稳定降低误差。

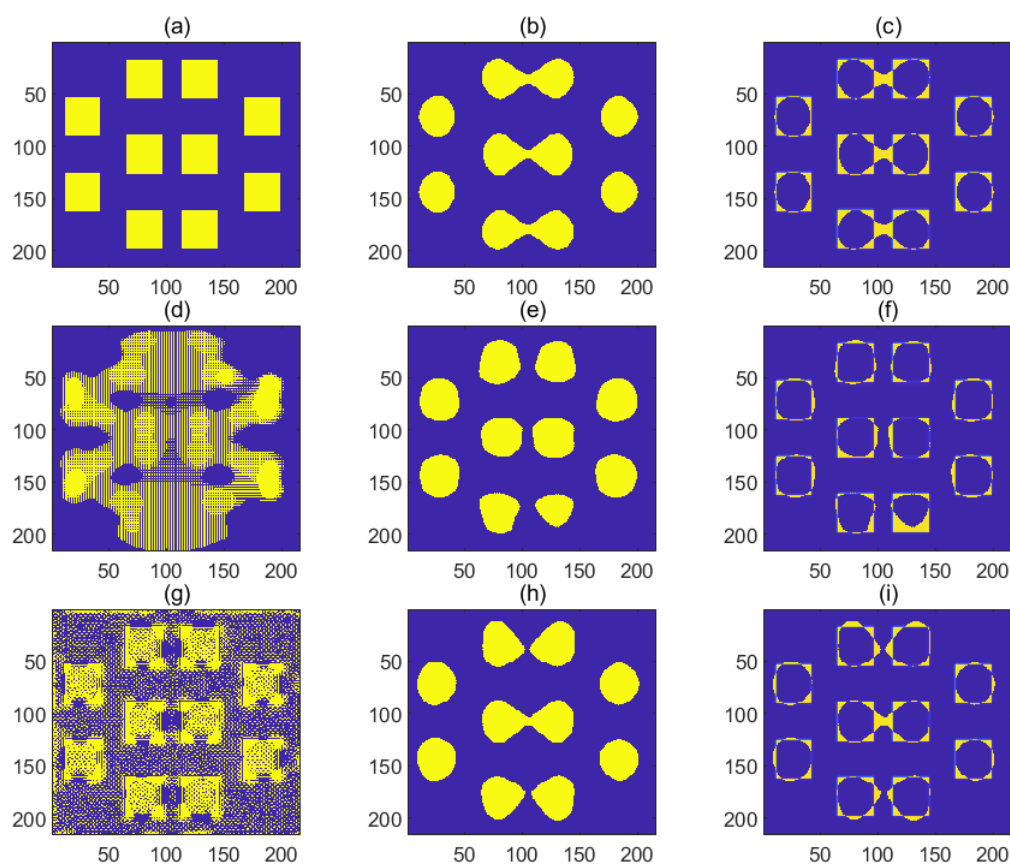


图 3.11 次梯度方法与 ADMM 算法优化结果比较

为了系统检验次梯度方法关于参数选取的敏感性, 我们设计了一系列实验, 通过改变步长、正则项系数等关键参数, 评估算法性能的稳定性和鲁棒性。通过图3.13中的误差曲线对比可以明确观察到次梯度方法对参数选择的高度敏感性。我们以  $\beta_1 = 0.05$ 、 $\beta_2 = 0.015$ 、步长  $\alpha = 7.0$  为基准参数组合 (深蓝色实线), 围绕这一组参数系统测试了次梯度算法的参数敏感性。当步长减小到 5.0 时 (红色虚线), 算法收敛趋于平稳但最终误差水平较高; 步长增大到 9.0 时 (绿色点划线), 算法收敛性明显恶化, 出现大幅度震荡且误差随迭代次数增加而增大。TV 正则项系数 ( $\beta_1$ ) 的变化对算法稳定性同样产生显著影响: 当  $\beta_1$  增大到 0.07 时 (粉红色点线), 收敛

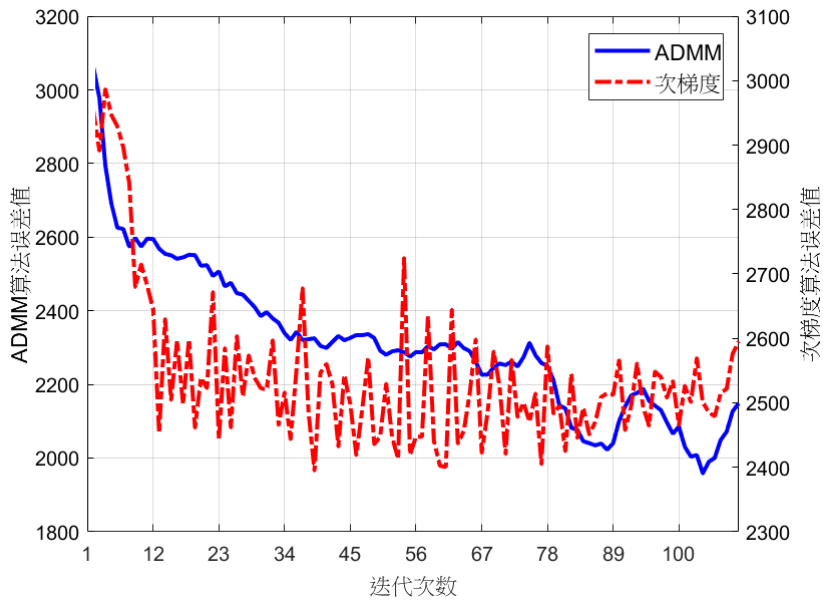


图 3.12 次梯度方法与 ADMM 算法误差下降曲线对比

速度较慢且最终误差较高； $\beta_1$  减小到 0.03 时 (青色实线)，则完全失去稳定性，误差呈现剧烈震荡并最终发散。二值约束系数 ( $\beta_2$ ) (黑色点划线、黄色点划线) 的影响相对较小，曲线表现与基准参数相近。这种对参数敏感的特性使得次梯度方法在实际应用中面临参数调整困难的挑战。

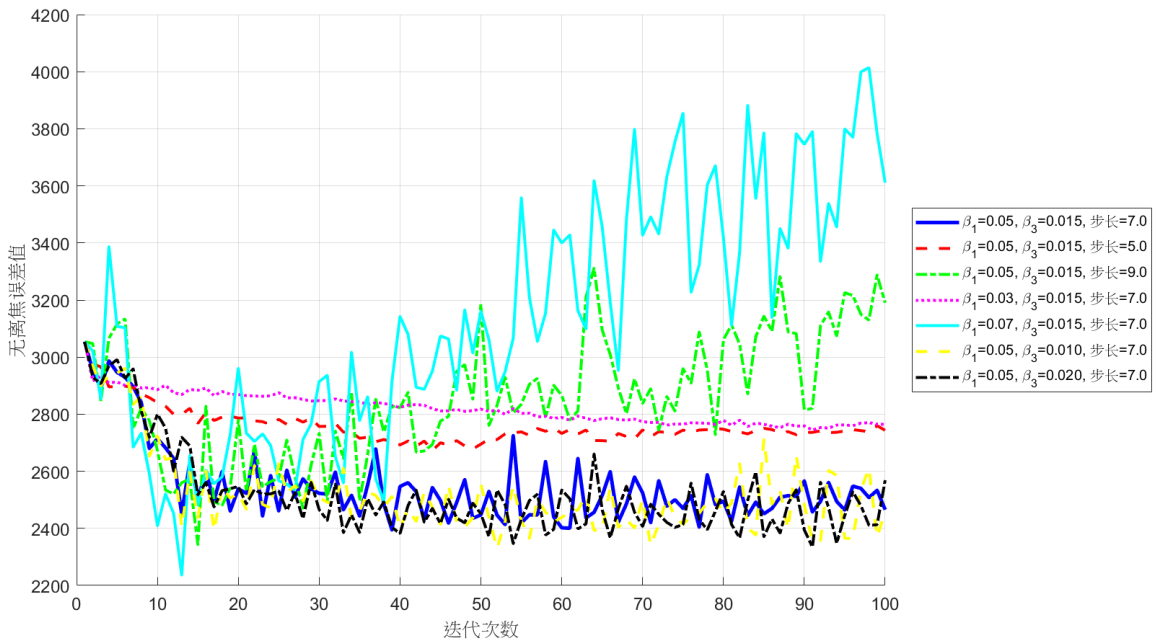


图 3.13 次梯度方法在不同参数下的误差曲线

图3.14进一步证实了参数选择对成像质量的决定性影响，展示的结果依次对应图3.13中不同的参数组合。第一行从左至右分别是目标图案、基准参数 ( $\beta_1 = 0.05$ ,

$\beta_2 = 0.015$ , 步长  $=\alpha = 7.0$ )、步长  $=\alpha = 5.0$  和步长  $=\alpha = 9.0$  的结果; 第二行从左至右分别展示了 TV 正则项系数  $\beta_1 = 0.03$ 、 $\beta_1 = 0.07$  以及二值约束系数  $\beta_2 = 0.01$  和  $\beta_2 = 0.02$  时的成像结果。从图中可以观察到, 步长变化的情况下 (第一行右侧两图), 成像结果的边缘保留和整体结构相对稳定; 然而, 当 TV 正则项系数变化时, 成像结果差异显著:  $\beta_1 = 0.07$  (第二行第二图) 导致中间区域结构严重断裂, 特征分布混乱, 而  $\beta_1 = 0.03$  (第二行第一图) 则保留了相对完整的结构。二值约束系数的变化 (第二行右侧两图) 对成像影响相对较小, 但  $\beta_2 = 0.02$  时边缘平滑度有所改善。这一系列对比实验清晰地展示了次梯度方法在处理反问题时的根本局限性: 算法性能高度依赖于参数选择, 且难以同时兼顾收敛稳定性和优化效果, 这正是本文提出 ADMM 算法的主要动机。

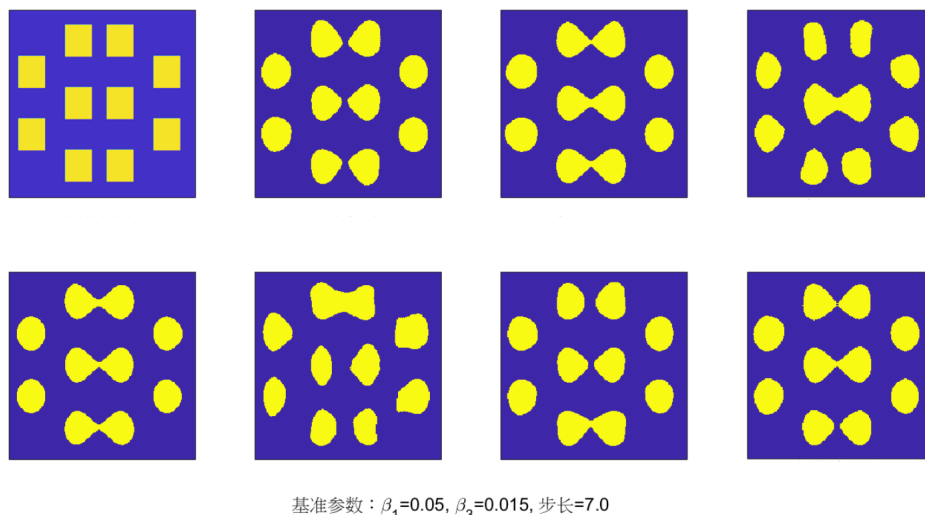


图 3.14 次梯度方法在不同参数下的成像结果

#### 3.4.4 长条形与复杂混合结构的优化结果分析

图3.15展示了目标图案包含长条的算例。从第一行和第三行可以发现, 对于以目标图案作为输入的直接成像来说, 图案的角是圆的。通过使用所提算法进行优化, 角点变得尖锐, 边缘放置误差显著减小, 这可以从第二行和第四行看出。图3.16给出了该算例的误差下降曲线, 显示优化过程在初期 (约 40 次迭代内) 误差迅速下降, 随后进入平缓收敛阶段。对焦情况下 (蓝色实线) 和离焦情况下 (红色虚线) 的收敛趋势相似, 但离焦情况下的最终误差值略高, 这与成像过程中引入的相位变化有关。值得注意的是, 即使在离焦条件下, 最终优化掩模仍能有效补偿光学系统引入的相位变化, 使输出图案与目标图案保持良好匹配。误差曲线的稳定下降也证实了所提 ADMM 算法在此类结构优化问题中的有效性和稳定性。

图3.17显示了目标图案包含小方块和长条的混合结构算例, 这种复杂图案更接

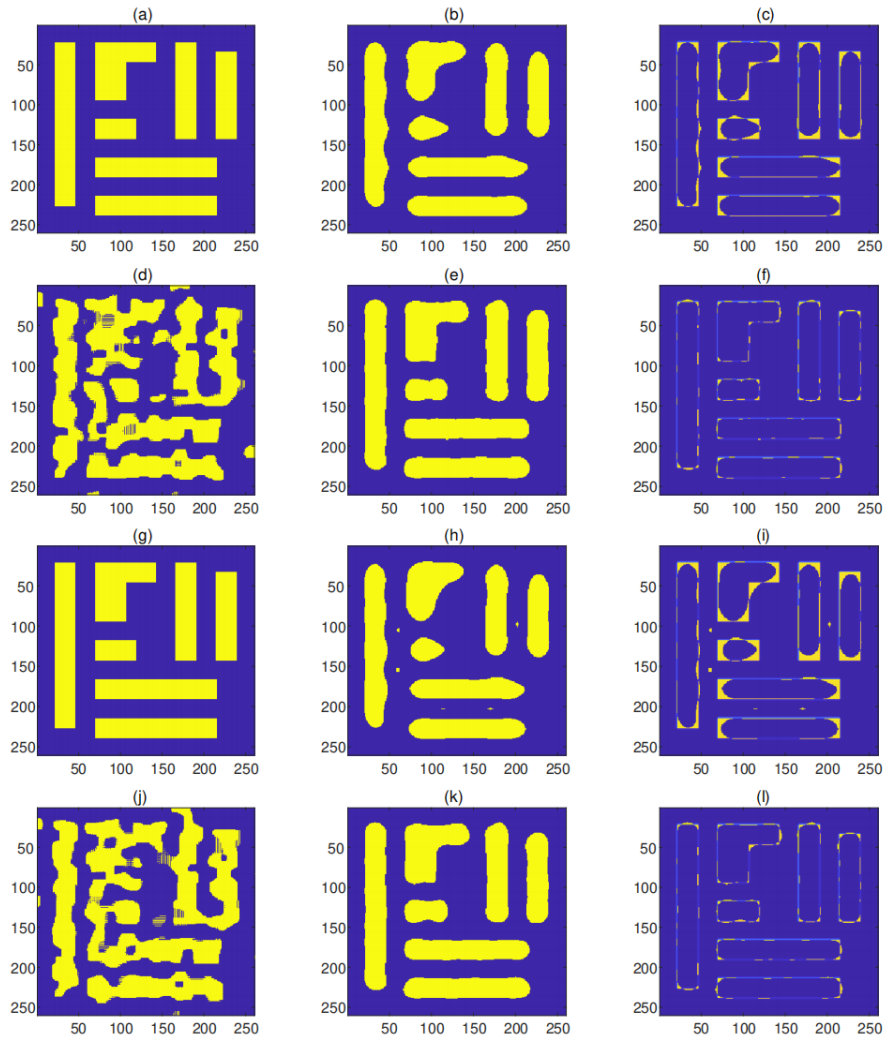


图 3.15 长条形掩模结构反演结果

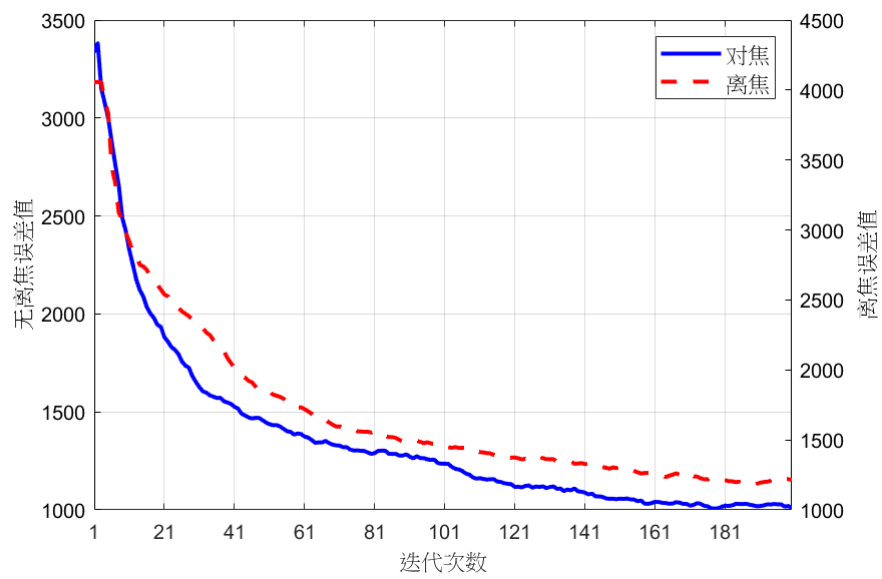


图 3.16 长条形掩模误差下降曲线

近实际芯片设计中的典型结构。从图中可以观察到，对于这种结构复杂的目标图案，直接使用目标图案作为掩模时（第一行和第三行），小方块区域几乎无法成像，而长条结构的边缘和拐角也存在严重失真。通过使用所提 ADMM 算法优化后（第二行和第四行），不仅长条结构的边缘变得更加清晰，小方块区域也能够被准确地成像出来。特别值得注意的是，即使在离焦条件下，优化后的掩模仍然能够有效补偿光学系统的相位变化，确保复杂细节的成像质量。图3.18展示了该复杂结构算例的误差下降曲线。从曲线可以看出，初始阶段（约 20 次迭代内）误差快速下降，随后进入相对平缓的收敛阶段。与前两个算例相比，该复杂结构的初始误差值更高（约 3500-4000），这反映了目标图案的复杂度增加。对焦情况（蓝色实线）和离焦情况（红色虚线）在收敛趋势上相似，但离焦情况的误差始终略高于标准情况，且两者之间的差距在优化后期仍然存在。这表明复杂结构在离焦条件下更具挑战性，但所提算法仍能将误差降低到可接受范围，证明了所提方法对于复杂光刻图案的有效性和鲁棒性。

根据图3.9、3.16、3.18中的误差下降曲线，可以看出在所有三个算例中，不论是简单的正方形结构、中等复杂度的长条结构，还是包含小方块和长条的复杂混合结构，误差下降过程都表现出相似的特征：初期快速下降后逐渐平稳收敛，没有出现明显的振荡或发散现象。这种平稳的收敛行为充分体现了本文所提 ADMM 算法的理论优势——由于采用了变量分离和松弛策略，算法能够有效避免直接梯度法可能遇到的震荡问题，即使在离焦条件下也能保持良好的收敛性能。特别是对于复杂结构的优化问题，传统方法往往在接近最优解时出现震荡或停滞，而 ADMM 算法则能持续稳定地减小误差，最终达到满意的优化效果。这一系列实验结果有力地验证了对算法收敛性的理论分析。

### 3.5 可制造性约束下的反演光刻优化

前面几节详细讨论了反演光刻问题的基本理论、ADMM 求解方法及其收敛性，并通过数值实验验证了算法的有效性。在实际应用中光刻掩模还需考虑制造工艺的限制，本节探讨如何将可制造性约束纳入优化框架，确保所得掩模图案不仅具有良好的成像性能，还能满足制造工艺的要求。我们将通过引入特定的正则项来实现这些可制造性约束，构建考虑制造可行性的优化模型。

#### 3.5.1 可制造性正则化的数学建模

基于我们在优化问题（3.3）中定义的目标函数：

$$J(U) = \|Sig_a(|H * U|^2) - I\|_{L^2(\Omega)}^2 + \beta_1 \|U\|_{TV} + \beta_2 \|U(1 - U)\|_{L^1(\Omega)}, \quad (3.85)$$

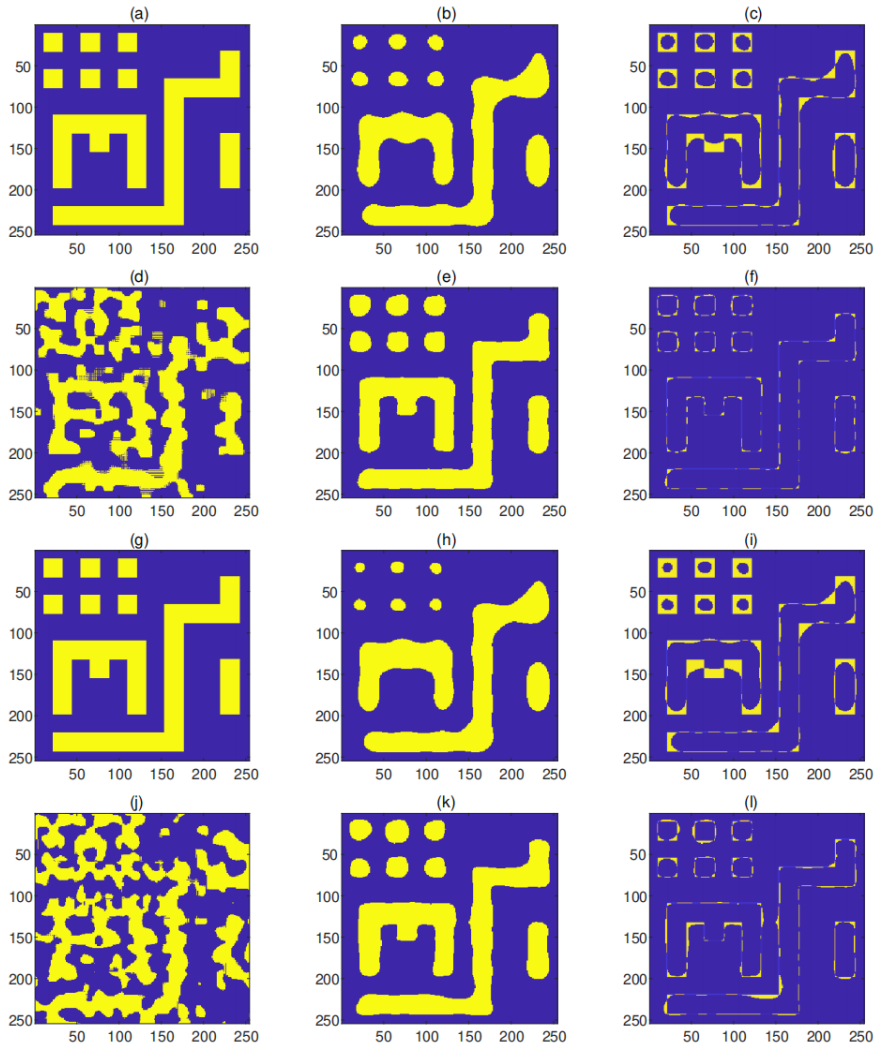


图 3.17 复杂掩模结构反演结果

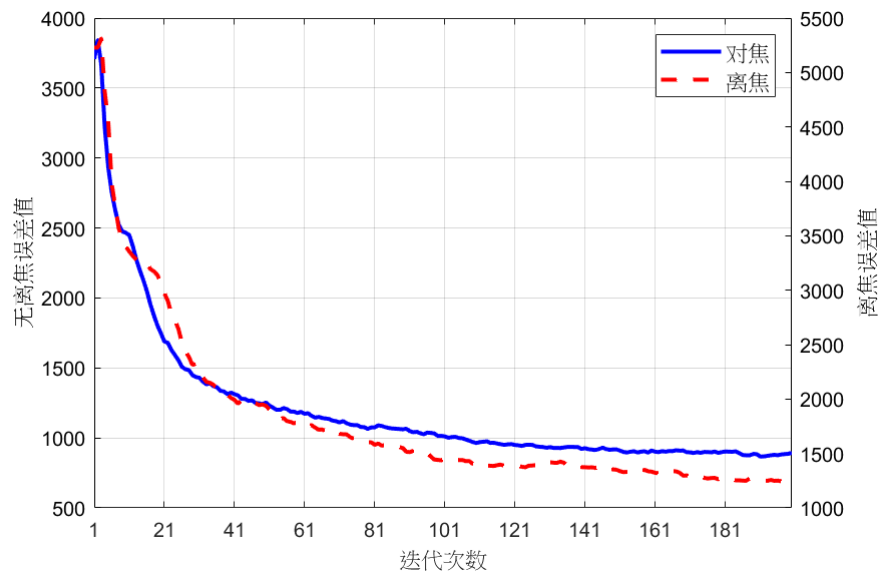


图 3.18 复杂掩模误差下降曲线

我们引入新的正则化项，形成增广的优化问题：

$$\min_U J(U) + R_{\text{Total}}(U), \quad (3.86)$$

其中  $R_{\text{Total}}(U)$  表示可制造性正则项。工业制造过程中，掩模必须避免出现难以制造的细小特征、孤立结构或过于尖锐的边缘。这种可制造性要求必须通过适当的数学约束模型来表达和控制。下面我们介绍三种有效的可制造性正则化方法，并分析其数学特性和实现方式。

### 3.5.1.1 高斯滤波正则化

高斯滤波正则化<sup>[59]</sup>通过对掩模图案进行平滑处理，有效抑制细小特征和尖锐边缘。这种平滑作用可以视为对最小特征尺寸的隐式控制，使优化结果自然符合制造工艺的能力范围。数学上，高斯滤波正则项可表示为：

$$R_{\text{GF}}(U) = \alpha_{\text{GF}} \|U - G_{\sigma} * U\|_2^2, \quad (3.87)$$

其中， $G_{\sigma}$  是标准差为  $\sigma$  的高斯核， $*$  表示卷积操作， $\alpha_{\text{GF}}$  是权重系数，控制约束强度。参数  $\sigma$  与工艺能力直接相关，较大的  $\sigma$  值对应更严格的最小特征尺寸要求。

这一正则项的梯度表达式为：

$$\nabla R_{\text{GF}}(U) = 2\alpha_{\text{GF}}(U - G_{\sigma} * U) - 2\alpha_{\text{GF}}G_{-\sigma} * (U - G_{\sigma} * U), \quad (3.88)$$

其中， $G_{-\sigma}$  表示高斯核的反转形式，用于实现反向卷积。在数值实现中，高斯滤波可通过快速傅里叶变换（FFT）高效计算，使得该约束在计算上非常高效。

高斯滤波正则化的优势在于其计算简便性和物理直观性，正则化参数  $\sigma$  可直接与工艺分辨率限制关联，便于在实际应用中进行参数调整。

### 3.5.1.2 频域正则化

频域正则化<sup>[60]</sup>通过限制掩模图案的高频分量，抑制难以制造的精细特征和尖锐边缘。不同于空间域的高斯滤波，频域约束直接在掩模的傅里叶变换域中施加限制，提供了更精确的频率选择性控制。数学上表示为：

$$R_{\text{FC}}(U) = \alpha_{\text{FC}} \sum_{(u,v) \in H} |\mathcal{F}(U)(u,v)|^2, \quad (3.89)$$

其中， $\mathcal{F}(U)$  表示掩模  $U$  的傅里叶变换， $H$  表示高频区域， $\alpha_{\text{FC}}$  是权重系数。高频区域  $H$  可以定义为：

$$H = \{(u,v) | \sqrt{u^2 + v^2} > \rho \cdot \max(\sqrt{u^2 + v^2})\}, \quad (3.90)$$

参数  $\rho \in (0, 1)$  控制高频区域的范围，通常取值为 0.5-0.8，对应于制造工艺的分辨率限制。

频域正则项的梯度可通过帕塞瓦尔定理 (Parseval's theorem) 计算：

$$\nabla R_{\text{FC}}(U) = 2\alpha_{\text{FC}} \mathcal{F}^{-1}(W \cdot \mathcal{F}(U)), \quad (3.91)$$

其中， $\mathcal{F}^{-1}$  表示逆傅里叶变换， $W$  是频域权重矩阵，在高频区域  $H$  中取值为 1，其他区域取值为 0。

频域约束的主要优势在于其对空间频率的精确控制能力，可以针对不同的制造工艺特性，设计特定的频率响应滤波器，实现更加个性化的可制造性控制。

### 3.5.1.3 Laplacian 正则化

Laplacian 正则化<sup>[61]</sup>通过惩罚掩模图案的高阶导数，促使优化结果具有平滑边缘，避免形成尖锐角度和毛刺等难以制造的特征。该正则项数学表示为：

$$R_{\text{Lap}}(U) = \alpha_{\text{Lap}} \|L * U\|_2^2, \quad (3.92)$$

其中， $L$  是 Laplacian 算子核，典型的形式为：

$$L = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.93)$$

Laplacian 正则项的梯度表达式为：

$$\nabla R_{\text{Lap}}(U) = 2\alpha_{\text{Lap}} L^T * (L * U), \quad (3.94)$$

其中， $L^T$  是 Laplacian 算子核的转置。实际上，由于 Laplacian 核是对称的， $L^T = L$ ，因此梯度可简化为：

$$\nabla R_{\text{Lap}}(U) = 2\alpha_{\text{Lap}} L * (L * U). \quad (3.95)$$

Laplacian 正则化的独特优势在于其对曲率变化的敏感性，可以有效识别和平滑掩模边缘的尖锐变化，使优化结果具有更好的边缘光滑度，提高制造可行性。

### 3.5.1.4 正则化组合与权重选择

在实际应用中，上述三种正则项可以单独使用，也可以组合使用以获得更好的可制造性控制。正则项的组合形式为：

$$R_{\text{Total}}(U) = R_{\text{GF}}(U) + R_{\text{FC}}(U) + R_{\text{Lap}}(U), \quad (3.96)$$

权重系数  $\alpha_{GF}$ 、 $\alpha_{FC}$  和  $\alpha_{Lap}$  的选择应根据具体的制造工艺要求和优化目标来确定。一般而言，对最小特征尺寸要求较高的制造工艺，应增大高斯滤波正则项的权重；对边缘光滑度要求较高的工艺，则应增大 Laplacian 正则项的权重；而频域正则项则提供了更精细的频率选择控制，适用于有特定频率响应要求的场景。

这样，在优化过程中，算法会自然地避开那些难以制造的掩模图案，使最终优化结果既满足光学成像要求，又具有良好的可制造性，真正实现反演光刻算法的工程应用价值。

值得指出的是，本节介绍的所有可制造性正则项：高斯滤波正则项、频域正则项和 Laplacian 正则项，都是连续可微的函数，这一特性使它们能够直接融入到第3.3节中所建立的 ADMM 算法收敛性分析框架中。因此，我们可以在不影响算法理论保证的前提下，有效地增强优化结果的实际制造可行性。

### 3.5.2 可制造性正则化效果验证

为了验证前述可制造性约束的有效性，本节设计了一系列数值实验，分别测试各种正则化在不同场景下的表现。首先，我们将分别测试三种正则化（高斯滤波正则化、频域正则化和 Laplacian 正则化）的单独效果；然后，针对两种代表性的复杂图案，验证综合正则化的整体效果。所有实验均使用与前述相同的光学参数设置，初始掩模结构设为与目标结构相似的简化图案。

#### 3.5.2.1 单一正则化效果分析

首先，我们测试高斯滤波正则化对优化结果的影响。从图3.19可以明显观察到，添加高斯滤波正则项后，掩模图案的细小特征得到了有效抑制，边缘变得更加平滑。具体而言，图 (a) 展示了目标图案，一个由规则方块组成的结构；图 (d) 显示了未添加正则项的优化结果，其中存在大量毛刺、细小连接结构和不规则边缘；而图 (e) 则是添加高斯滤波正则项后的优化掩模，可以看到锯齿状边缘被平滑化，细小结构被消除，整体形状更接近于可制造的方块状结构。值得注意的是，虽然图 (e) 中的方块边缘略有圆润，但这恰恰反映了高斯滤波的特性——通过抑制高频成分来平滑图像。这种平滑处理虽然使掩模与目标图案存在一定差异，但显著提高了其可制造性，避免了许多难以实现的尖锐特征和极小结构。从图 (b)、(c) 和 (f) 的辅助结果也可以观察到，高斯滤波正则化在不同类型的图案中均能有效工作，表明该约束具有良好的通用性。总体而言，高斯滤波正则化在保持掩模功能的同时，有效地提升了其制造可行性。

接下来，我们验证频域正则化的效果。从图3.20可以观察到，与图3.8(d) 中未添加正则项的优化结果相比，添加频域正则项后的优化掩模（图3.20(d)）表现出

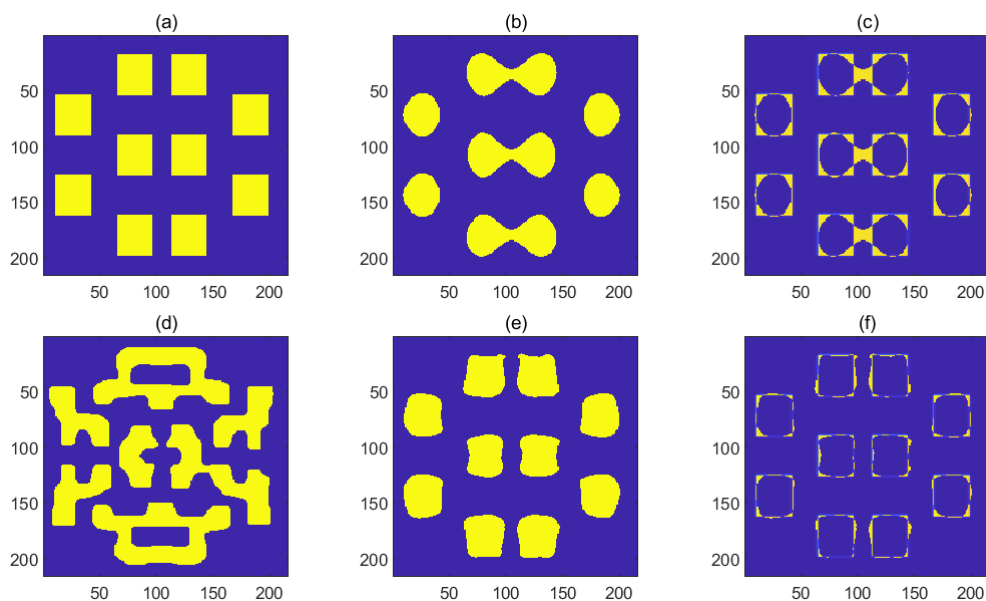


图 3.19 高斯滤波正则化的效果验证

明显不同的特性：高频细节得到有效抑制，掩模结构更加规整，特别是边缘区域的毛刺和锯齿状特征基本消除。频域正则化通过直接限制掩模图案的空间频率成分，使得图3.20(e)中的成像结果更加接近目标图案中的方块结构。值得注意的是，虽然频域正则化和高斯滤波正则化都能抑制高频成分，但频域正则化允许更加精确地控制频率截止阈值，因此图3.20(d)中的优化掩模边缘比图3.19(d)中稍显锐利，同时仍然避免了过于细小的难以制造的结构。

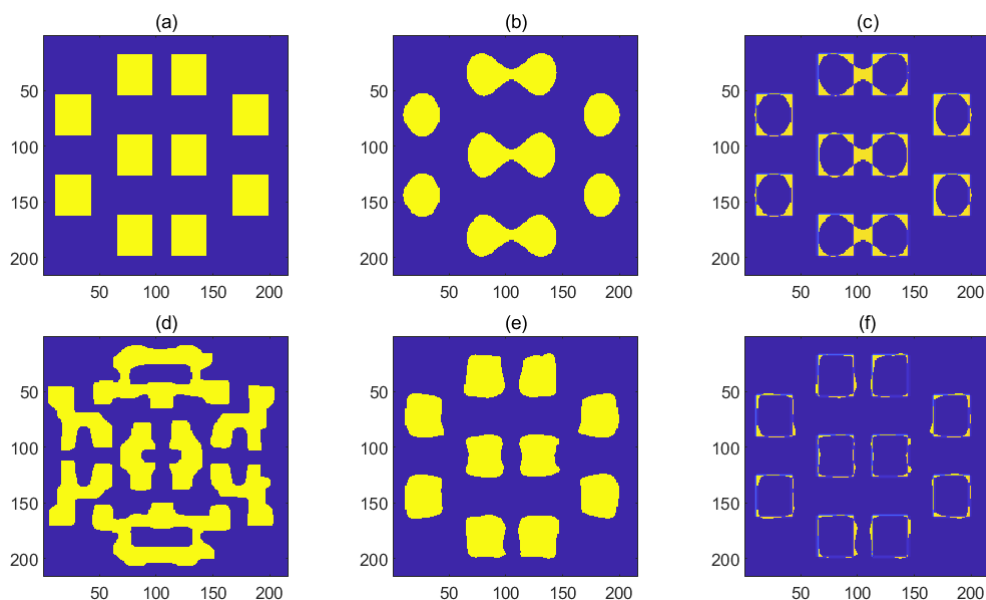


图 3.20 频域正则化的效果验证

最后，我们考察 Laplacian 正则化对掩模边缘平滑度的影响。从图3.21可以看

出，与图3.8(d)中未添加正则项的优化结果相比，添加 Laplacian 正则项后的优化掩模（图3.21(d)）在边缘特性上有显著改善：尖锐的角点和高曲率区域得到有效平滑，掩模轮廓更加规则，同时保留了主要结构特征。Laplacian 正则项通过惩罚掩模图像的二阶导数，特别针对边缘的曲率变化进行调控，使得图3.21(e)中的成像结果呈现出更加均匀的边缘过渡。与高斯滤波和频域约束相比，Laplacian 正则项对掩模特征的保留更为精细，主要影响边缘的几何形状而非整体结构，因此在维持主要图案特征的同时提高了边缘的可制造性。这种对边缘曲率的精确控制使得 Laplacian 正则项在处理复杂图案的转角和接触区域时尤为有效。

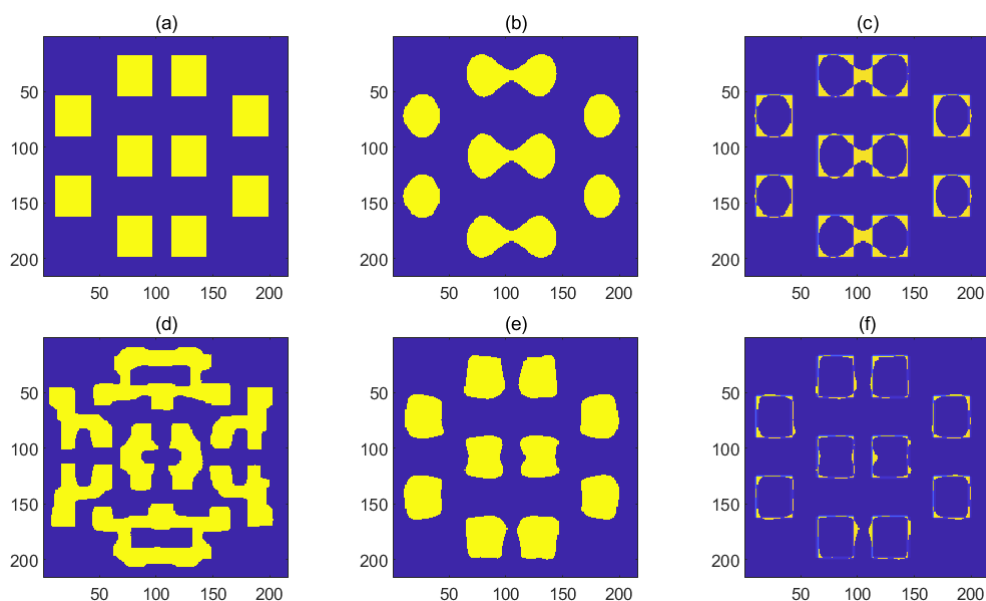


图 3.21 Laplacian 正则化的效果验证

### 3.5.2.2 综合正则化效果验证

在实际应用中，往往需要同时考虑多种可制造性要求，因此将不同正则化组合使用更具实用价值。下面，我们针对两种代表性的复杂图案，验证综合正则化的效果。

矩形排列结构是光刻中常见的基本单元，其内角区域易形成制造难点。图3.22展示了应用综合正则化后的优化结果。与图3.8(d)中未添加任何正则项的优化结果相比，图3.22(d)中应用了综合正则项（高斯滤波、频域正则项和 Laplacian 正则项的组合）后的掩模表现出显著改善：掩模结构更加规整，边缘平滑度大幅提高，细小结构和孤立点被有效消除。特别是在矩形内角和边缘交界处，原本容易出现的尖锐角点和高曲率区域得到了良好的平滑处理，同时保持了基本图案的几何特征。图3.22(e)展示的成像结果更加接近目标图案，边缘轮廓清晰，过渡

平滑。这表明综合正则化的应用不仅提高了掩模的可制造性，还在一定程度上改善了成像质量。与单一正则化相比，综合正则化能够更全面地处理掩模的各种制造限制，在保持图案整体结构的同时，平衡了细节保留和边缘平滑之间的关系，为实际光刻制造提供了更为可行的优化结果。

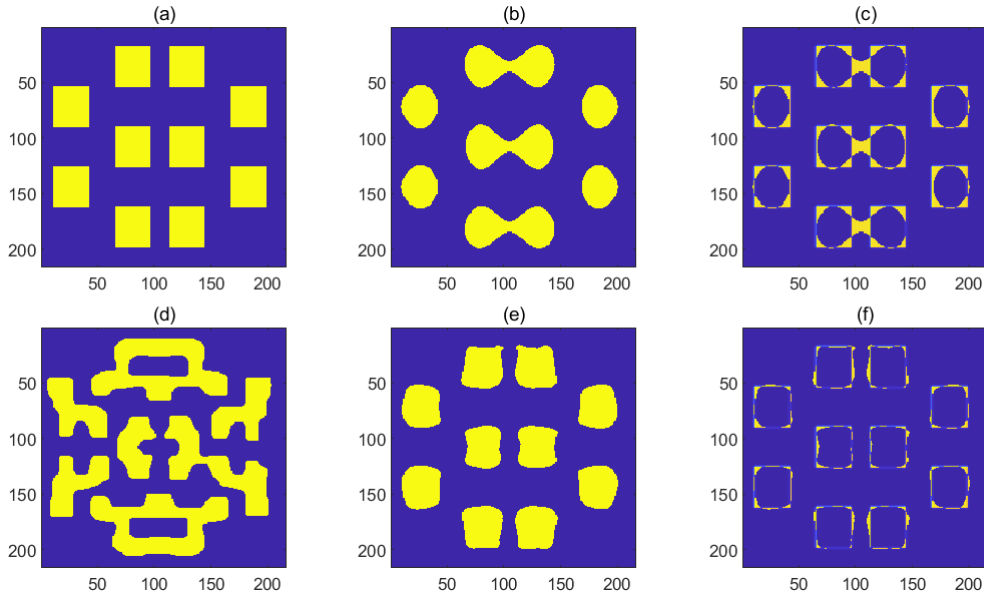


图 3.22 矩形排列结构的综合正则化效果验证

最后，我们考察一个更为复杂的电路结构，包含多个转角、细线和接触孔。图3.23展示了应用综合正则化后的优化结果。这类复杂电路图案代表了实际光刻应用中常见的挑战性结构，对掩模优化提出了更高要求。对比图3.17(d)中的未添加正则化的优化结果，图3.23(d)中应用综合正则化后的掩模虽然仍保留了一定的复杂度，但各项可制造性指标得到了显著改善：尖锐转角被平滑化，细小结构得到适当加强，孤立噪点被有效抑制。特别是在电路的弯曲部分和“M”形状区域，边缘轮廓更加流畅，同时保持了原有功能结构的完整性。从图3.23(e)的成像结果可以看出，虽然掩模形状与目标图案存在明显差异，但优化后的成像效果与目标图案高度吻合，这再次验证了反演优化的有效性。图3.23(f)的EPE分布更加集中，表明即使在复杂图案下，综合正则化仍能在确保成像质量的同时提高掩模可制造性。这一结果对实际半导体制造工艺具有重要意义，证明了本文提出的正则化方法可以有效应对多种复杂结构的反演光刻优化问题。

通过上述一系列实验，我们验证了各种可制造性正则化的效果。单一正则化实验表明，高斯滤波正则化主要控制最小特征尺寸，有效抑制细小结构和平滑锯齿状边缘；频域正则化通过精确调控空间频率分布，更有针对性地消除高频细节同时保留关键结构特征；而Laplacian正则项则专注于边缘曲率控制，特别对尖锐

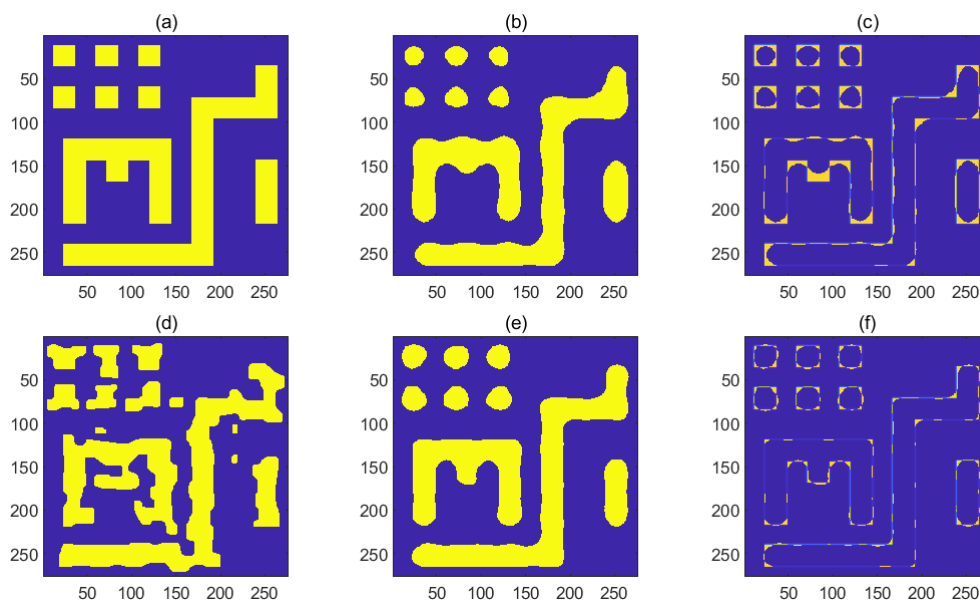


图 3.23 复杂电路结构的综合正则化效果验证

角点和高曲率区域进行平滑处理。矩形排列和复杂电路结构的综合正则化实验进一步证明，合理组合多种正则项可以在保持良好成像质量的前提下，显著提高掩模的可制造性，对解决实际光刻应用中的复杂结构尤为有效。这些结果表明，将可制造性正则化纳入反演光刻优化框架是实现理论与工程实践结合的关键环节，确保算法不仅能产生理论上优越的解，还能生成实际可制造的掩模设计。

### 3.5.3 小结

本节系统研究了反演光刻中的可制造性约束问题，提出了一套完整的数学模型将制造工艺限制纳入优化框架。我们分析了三类关键的可制造性正则化：高斯滤波正则化用于控制最小特征尺寸并平滑边缘锯齿，频域正则化通过精确调控空间频率分布抑制难以制造的高频细节，以及 Laplacian 正则化专注于平滑高曲率区域和尖锐角点。

通过一系列实验，我们验证了各种正则化的单独效果和组合应用效果。结果表明，高斯滤波正则化有效消除了细小结构和锯齿边缘；频域正则化更加精确地控制了空间频率特性；Laplacian 正则化则显著改善了边缘几何形状。在复杂图案的优化中，合理组合多种正则化能够在保持良好成像质量的前提下，显著提高掩模的可制造性，特别是对于矩形排列和复杂电路等实际应用中常见的结构。

### 3.6 本章小结

本章针对薄掩模近似下的反演光刻问题，提出了一种基于 ADMM 的快速求解算法。通过引入辅助变量和适当的正则化项，将原始的非凸非光滑优化问题转化为适合 ADMM 求解的形式。在理论方面，详细分析了算法的收敛性，证明了在合适的参数选择下，算法序列存在收敛子列，这为算法的实际应用提供了理论保证。

数值实验表明，该算法能有效处理不同类型的目标图案，包括方形、长条和混合图案，在无离焦和有离焦情况下都表现良好。反演算法通过在掩模中引入辅助特征，显著改善了成像质量，特别是在角点区域，边缘放置误差得到明显降低。此外，对算法参数选择进行了系统研究，给出了参数选择建议，为算法在实际应用中的参数调节提供了指导。

本章前面几节侧重于反演光刻算法的基本理论和成像质量优化，而可制造性约束分析一节使得算法框架更加完整，建立了理论优化与工程实践之间的关键桥梁。这种系统性的约束建模方法不仅拓展了反演光刻的理论深度，也为实际半导体制造工艺中的掩模设计提供了直接的应用价值，确保算法不仅能产生理论上优越的解，还能生成实际可制造的掩模设计。

## 第4章 基于曲面隐式神经网络表示的反散射算法

反散射问题是一类重要的反问题，其核心任务是通过观测散射场的观测来反推散射体的形状和物理特性。在半导体光刻制造中，这一问题具有特殊的重要性。随着半导体工艺的不断微缩，掩模的三维散射效应（如图4.1）已成为影响光刻精度的关键因素。传统反演光刻算法主要基于薄掩模近似，难以精确考虑散射效应，一个重要原因是缺乏求解三维反散射问题的高效算法。

本章首先介绍反散射问题的数学模型，然后详细阐述如何结合曲面隐式神经网络表示来发展第二章中介绍的基于水平集表示的形状优化算法，从而为求解三维掩模反演光刻问题奠定基础。需要指出的是，这里所提出的方法不仅适用于反演光刻问题，还具有解决其他领域反问题的通用性。

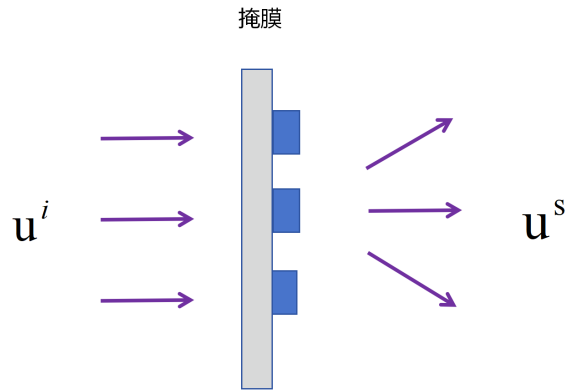


图 4.1 三维掩模散射效应

### 4.1 反散射问题

反散射问题在众多领域如医学成像、无损检测、地球物理勘探和光刻制造中有着广泛应用。在光刻制造中，当入射场与三维掩模结构相互作用时，会产生复杂的散射现象，这些散射效应会显著影响成像质量和光刻精度。准确求解反散射问题可以帮助设计更优的掩模结构，从而提高光刻分辨率和精度。

现在我们给出反散射问题的数学描述。令  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  为开的并且有界的区域，具有  $C^2$  边界  $\Gamma$ 。令  $u^i$  为入射平面波：

$$u^i(x) = e^{ikx \cdot d}, \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad (4.1)$$

其中  $k > 0$  是波数， $d \in \mathbb{S}^2$  是入射方向。考虑以下具有狄利克雷边界条件的亥姆

霍兹方程:

$$\Delta u + k^2 u = 0 \quad \text{在 } \mathbb{R}^3 \setminus \Omega \text{ 中,} \quad (4.2a)$$

$$u = 0 \quad \text{在 } \Gamma \text{ 上,} \quad (4.2b)$$

$$\frac{\partial u^s}{\partial r} - iku^s = o(r^{-1}) \quad \text{当 } r \rightarrow \infty \text{ 时,} \quad (4.2c)$$

其中  $r = \|x\|_2$  ( $\|\cdot\|_2$  表示向量的欧几里德范数),  $u^s$  是散射场,  $u = u^i + u^s$  是总场。(4.2a) 是亥姆霍兹方程, (4.2c) 是索末菲辐射条件, 辐射条件意味着散射场在无穷远处有如下的渐近行为:

$$u^s(x) = \frac{e^{ikr}}{r} \left\{ u^\infty(\hat{x}, d) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r}\right) \right\}, \quad \text{当 } r \rightarrow \infty \quad (4.3)$$

其中  $\hat{x} = x/\|x\|_2$  是  $x$  的方向,  $u^\infty(\hat{x}, d)$  被称为  $u$  的远场模式。方程 4.2 具有唯一解<sup>[62]</sup>。

下面给出散射问题 (4.2) 的积分方程。亥姆霍兹方程的基本解  $\Phi(x, y)$  由下式给出:

$$\Phi(x, y) = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik\|x-y\|_2}}{\|x-y\|_2}, \quad x \neq y \in \mathbb{R}^3. \quad (4.4)$$

定义相应的的单层和双层位势算子  $\mathcal{S}$  和  $\mathcal{K}$ :

$$(\mathcal{S}\varphi)(x) = \int_{\Gamma} \Phi(x, y)\varphi(y)ds(y) \quad \text{及} \quad (\mathcal{K}\varphi)(x) = \int_{\Gamma} \frac{\partial\Phi(x, y)}{\partial\nu(y)}\varphi(y)ds(y), \quad (4.5)$$

以及法向导数算子  $\mathcal{K}'$ :

$$(\mathcal{K}'\varphi)(x) = \int_{\Gamma} \frac{\partial\Phi(x, y)}{\partial\nu(x)}\varphi(y)ds(y). \quad (4.6)$$

由于 (4.1) 中的平面入射波  $u^i$  在整个  $\mathbb{R}^3$  中满足亥姆霍兹方程, 并且总场  $u$  和  $u^s$  在区域外部满足亥姆霍兹方程, 可以推出法向导数  $v := \partial u / \partial \nu$  满足所谓的 Burton-Miller 组合边界积分方程<sup>[63]p. 59</sup>:

$$v + \mathcal{K}'v - ik\mathcal{S}v = 2\frac{\partial u^i}{\partial\nu} - 2iku^i, \quad \text{在 } \Gamma \text{ 上.} \quad (4.7)$$

方程 (4.7) 为通过边界元方法数值求解问题 (4.2) 奠定了基础。通过  $v$ , 外部区域  $\mathbb{R}^3 \setminus \Omega$  上的散射场  $u^s$  由下式给出:

$$u^s(x) = -\frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} \Phi(x, y)v(y)ds(y), \quad x \in \mathbb{R}^3 \setminus \Omega. \quad (4.8)$$

远场模式  $u^\infty_{\Omega}(\hat{x}, d)$  有如下的积分表示<sup>[63]</sup>:

$$u^\infty_{\Omega}(\hat{x}, d) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} \frac{\partial e^{-ik\hat{x}\cdot y}}{\partial\nu}(y)u^s(y) - \frac{\partial u^s}{\partial\nu}(y)e^{-ik\hat{x}\cdot y}ds(y), \quad (4.9)$$

其中下标  $\Omega$  表示  $u^\infty$  关于区域  $\Omega$  的依赖性。

### 4.1.1 Burton-Miller 组合边界积分方程

Burton-Miller 组合边界积分方程方法是求解散射问题的有效方法之一，下面对其基本内容进行介绍，其详细介绍可以在<sup>[63]p. 59</sup>中找到。首先定义位势算子：

$$(Sf)(x) = 2 \int_{\partial\Omega} g(x, y) f(y) ds(y), \quad (4.10)$$

$$(K'f)(x) = 2 \int_{\partial\Omega} \frac{\partial g(x, y)}{\partial n(x)} f(y) ds(y), \quad (4.11)$$

$$(Tf)(x) = 2 \frac{\partial}{\partial n(x)} \int_{\partial\Omega} \frac{\partial g(x, y)}{\partial n(y)} f(y) ds(y), \quad (4.12)$$

以及

$$g(x, y) = \frac{e^{ik|x-y|}}{4\pi|x-y|}. \quad (4.13)$$

根据格林公式：

$$u^s(x) = \int_{\partial\Omega} u^s(y) \frac{\partial g(x, y)}{\partial n(y)} - \frac{\partial u^s}{\partial n}(y) g(x, y) ds(y), \quad x \in \mathbb{R}^3 \setminus \Omega. \quad (4.14)$$

令  $x$  趋于边界，可以得到：

$$u^s(x) = \frac{1}{2} u^s(x) + \int_{\partial\Omega} u^s(y) \frac{\partial g(x, y)}{\partial n(y)} - \frac{\partial u^s}{\partial n}(y) g(x, y) ds(y), \quad x \in \partial\Omega. \quad (4.15)$$

对上式取法向导数，根据位势算子在边界上的跳跃条件<sup>[64]</sup>：

$$\lim_{x \rightarrow x^+} \frac{\partial}{\partial n} \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u^s}{\partial n}(y) g(x, y) ds(y) = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u^s}{\partial n}(y) \frac{\partial g(x, y)}{\partial n(x)} ds(y) - \frac{1}{2} \frac{\partial u^s}{\partial n}(x), \quad x \in \partial\Omega, \quad (4.16)$$

以及

$$\lim_{x \rightarrow x^-} \frac{\partial}{\partial n} \int_{\partial\Omega} u^i(y) \frac{\partial g(x, y)}{\partial n(y)} ds(y) = \lim_{x \rightarrow x^+} \frac{\partial}{\partial n} \int_{\partial\Omega} u^i(y) \frac{\partial g(x, y)}{\partial n(y)} ds(y), \quad x \in \partial\Omega, \quad (4.17)$$

可以得到：

$$\begin{aligned} \frac{\partial u^s}{\partial n}(y) &= \frac{\partial}{\partial n} \int_{\partial\Omega} u^s(y) \frac{\partial g(x, y)}{\partial n(y)} ds(y) \\ &\quad - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u^s}{\partial n}(y) \frac{\partial g(x, y)}{\partial n(x)} ds(y) + \frac{1}{2} \frac{\partial u^s}{\partial n}, \quad y \in \partial\Omega. \end{aligned} \quad (4.18)$$

由于在  $\partial\Omega$  上  $u^s = -u^i$ ，可以得到：

$$S \frac{\partial u^s}{\partial n} = u^i - K u^i, \quad (4.19)$$

$$\frac{\partial u^s}{\partial n} + K' \frac{\partial u^s}{\partial n} = -T u^i. \quad (4.20)$$

根据  $u^i$  满足的格林公式:

$$u^i(x) = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u^i}{\partial n}(y)g(x, y) - u^i(y)\frac{\partial g(x, y)}{\partial n(y)}, \quad x \in \Omega, \quad (4.21)$$

令  $x$  趋于边界, 可以得到:

$$u^i(x) = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u^i}{\partial n}(y)g(x, y) - u^i(y)\frac{\partial g(x, y)}{\partial n(y)}ds(y) + \frac{1}{2}u^i(x), \quad x \in \partial\Omega. \quad (4.22)$$

对上式取法向导数, 根据边界上的跳跃条件:

$$\lim_{x \rightarrow x^-} \frac{\partial}{\partial n} \int_{\partial\Omega} u^i(y)\frac{\partial g(x, y)}{\partial n(y)}ds(y) = \lim_{x \rightarrow x^+} \frac{\partial}{\partial n} \int_{\partial\Omega} u^i(y)\frac{\partial g(x, y)}{\partial n(y)}ds(y), \quad x \in \partial\Omega, \quad (4.23)$$

以及

$$\lim_{x \rightarrow x^-} \frac{\partial}{\partial n} \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u^i}{\partial n}(y)g(x, y)ds(y) = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u^i}{\partial n}(y)\frac{\partial g(x, y)}{\partial n(x)}ds(y) + \frac{1}{2}\frac{\partial u^i}{\partial n}(x), \quad x \in \partial\Omega, \quad (4.24)$$

可以得到:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u^i}{\partial n}(x) &= \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u^i}{\partial n}(y)\frac{\partial g(x, y)}{\partial n(x)}ds(y) + \frac{1}{2}\frac{\partial u^i}{\partial n}(x) \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial n} \int_{\partial\Omega} u^i(y)\frac{\partial g(x, y)}{\partial n(y)}ds(y), \quad x \in \partial\Omega. \end{aligned} \quad (4.25)$$

从而

$$S\frac{\partial u^i}{\partial n} = u^i + Ku^i, \quad x \in \partial\Omega. \quad (4.26)$$

$$\frac{\partial u^i}{\partial n} + K'\frac{\partial u^i}{\partial n} = Tu^i + 2\frac{\partial u^i}{\partial n}, \quad x \in \partial\Omega. \quad (4.27)$$

将这两个方程组合起来, 得出:

$$\frac{\partial u}{\partial n} + K'\frac{\partial u}{\partial n} - ikS\frac{\partial u}{\partial n} = 2\frac{\partial u^i}{\partial n} - 2iku^i, \quad x \in \partial\Omega. \quad (4.28)$$

#### 4.1.2 障碍物反散射问题

本章研究的障碍物反散射问题旨在利用远场数据  $u^\infty$  来反演障碍物边界  $\Gamma$ 。假设我们可以在多个测量方向  $\hat{x}_m, m = 1, \dots, M$  上获取远场数据, 以及多个入射场方向  $d_l, l = 1, \dots, L$ , 遵循标准的最小二乘公式, 障碍物反散射问题可以描述为如下的形状优化问题<sup>[63]</sup>: 寻找障碍物边界  $\Gamma$  最小化目标函数:

$$J(\Gamma) := \frac{1}{2LM} \sum_{l=1}^L \sum_{m=1}^M |u_\Gamma^\infty(\hat{x}_m, d_l) - u_{\Gamma^*}^\infty(\hat{x}_m, d_l)|^2 \rightarrow \inf_{\Gamma \in \mathcal{A}}, \quad (4.29)$$

其中  $\Gamma^*$  是我们反演的目标障碍物边界,  $\mathcal{A}$  表示界面  $\Gamma$  的容许集。对于这一形状优化问题, 我们给出如下的存在性定理:

**定理 4.1:** 假设容许集  $\mathcal{A}$  满足以下条件:

1. 存在固定的  $C^2$  参考界面  $\Gamma_0$ , 使得  $\mathcal{A}$  中的每个界面  $\Gamma$  可以表示为:

$$\Gamma = \{x + h(x) : x \in \Gamma_0\} \quad (4.30)$$

其中  $h$  是定义在  $\Gamma_0$  上的  $C^2$  向量场。

2. **一致有界性:** 存在常数  $M > 0$ , 使得对于上述表示中的所有向量场  $h$ , 有

$$\|h\|_{C^2(\Gamma_0)} \leq M. \quad (4.31)$$

3. **闭包性:** 若  $\{\Gamma_n\} \subset \mathcal{A}$  且  $\Gamma_n$  的相应向量场  $h_n$  在  $C^2(\Gamma_0)$  范数下收敛到  $h$ , 则由  $h$  确定的界面  $\Gamma_h = \{x + h(x) : x \in \Gamma_0\}$  也属于  $\mathcal{A}$ 。

4. **有限值条件:** 存在界面  $\Gamma \in \mathcal{A}$  使得  $J(\Gamma) < \infty$ 。

那么在  $\mathcal{A}$  中存在界面  $\tilde{\Gamma}$  使泛函  $J$  取到最小值。

**证明** 由有限值条件,  $J$  在  $\mathcal{A}$  中是有下界的。根据下确界定义, 存在界面序列  $\{\Gamma_n\} \subset \mathcal{A}$  满足:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} J(\Gamma_n) = \inf_{\Gamma \in \mathcal{A}} J(\Gamma) =: m. \quad (4.32)$$

根据条件 1, 每个  $\Gamma_n$  可以表示为  $\Gamma_n = \{x + h_n(x) : x \in \Gamma_0\}$ , 其中  $h_n \in C^2(\Gamma_0)$  且  $\|h_n\|_{C^2(\Gamma_0)} \leq M$ 。由 Arzelà-Ascoli 定理,  $C^2(\Gamma_0)$  中有界集的闭包是紧的, 因此存在子列  $\{h_{n_k}\}$  和向量场  $h^* \in C^2(\Gamma_0)$ , 使得  $h_{n_k} \rightarrow h^*$  在  $C^2(\Gamma_0)$  范数下收敛。

根据条件 3 (闭包性), 界面  $\tilde{\Gamma} = \{x + h^*(x) : x \in \Gamma_0\}$  也属于  $\mathcal{A}$ 。

根据 Hettlich<sup>[65]</sup> 的定理 1.1, 远场算子  $F : C^2 \rightarrow L^2(S^2)$  在形状函数处是 Fréchet 可微的 (这自然蕴含了算子的连续性)。因此, 当向量场  $h_{n_k} \rightarrow h^*$  在  $C^2$  范数下收敛时, 相应的远场模式满足:

$$\forall (d_l, \hat{x}_m), \lim_{k \rightarrow \infty} |u_{\Gamma_{n_k}}^\infty(\hat{x}_m, d_l) - u_{\tilde{\Gamma}}^\infty(\hat{x}_m, d_l)| = 0. \quad (4.33)$$

对目标函数应用 Fatou 引理:

$$J(\tilde{\Gamma}) = \frac{1}{2LM} \sum_{l=1}^L \sum_{m=1}^M |u_{\tilde{\Gamma}}^\infty(\hat{x}_m, d_l) - u_{\Gamma_{n_k}}^\infty(\hat{x}_m, d_l)|^2 \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} J(\Gamma_{n_k}) = m. \quad (4.34)$$

由下确界定义,  $J(\tilde{\Gamma}) \geq m$ , 因此  $J(\tilde{\Gamma}) = m$ , 即  $\tilde{\Gamma}$  使泛函  $J$  取到最小值。 ■

## 4.2 基于曲面隐式神经网络表示的形状优化算法

我们在第二章中介绍的传统的基于曲面水平集表示的形状优化算法需要对计算区域进行网格剖分。并且由于该算法是在拉格朗日框架下执行的, 在迭代过程中, 整个区域或其边界的变形会导致边界上的网格节点发生位移。大变形的产生往往会扭曲和纠缠现有的网格, 这需要重新剖分网格, 而这导致了昂贵的计算。特

别是在三维情况下，曲面的变形更加复杂，网格剖分的计算量更大。

#### 4.2.1 曲面的隐式神经网络表示

对于三维障碍物反散射问题，曲面的表示是任何迭代求解算法成功的关键。本文将文献<sup>[66]</sup>中提出的 DeepSDF (Deep Signed Distance Function) 隐式神经网络曲面表示方法引入到障碍物反散射问题的解决中。三维空间中的曲面  $S$  可以由符号距离函数  $SDF_S(x) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  隐式表示，对于给定的空间点  $x \in \mathbb{R}^3$ ，输出这一点到曲面  $S$  的距离，其符号表示该点是在曲面内部（负）还是外部（正）：

$$SDF_S(x) = \begin{cases} d(x, S), & \text{如果 } x \text{ 在外部,} \\ -d(x, S), & \text{如果 } x \text{ 在内部,} \end{cases} \quad (4.35)$$

其中  $d$  是欧几里得距离。曲面  $S$  由  $SDF_S(\cdot) = 0$  的等值面隐式表示，并且可以通过移动立方体算法<sup>[67]</sup> 获得数值表示。DeepSDF 的使用深度神经网络  $f_\theta(z, x)$  拟合符号距离函数，其中  $x$  为空间点，潜在向量  $z$  的引入是为了使用单个神经网络拟合多个曲面的符号距离函数。经过训练的网络可以预测任一潜在向量  $z$  对应的曲面在任一空间点  $x$  处的符号距离函数的值，此后我们可以通过移动网格法提取零水平集曲面。具体来说，计算过程如下：对于给定曲面数据集  $\mathbb{D} = \{S_i\}$ ，对于每个曲面  $S \in \mathbb{D}$  对应一个潜在向量  $z_S \in \mathbb{R}^Z$ ，其中  $Z$  是潜在向量的维度。然后，为了在集合  $\mathbb{D}$  上拟合符号距离函数，最小化如下的损失函数来训练神经网络  $f_\theta(z, x) : \mathbb{R}^Z \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ <sup>[68]</sup>：

$$L_{\text{imp}}(\{z_S\}_{S \in \mathbb{D}}, \theta) = \sum_{S \in \mathbb{D}} \frac{1}{|X_S|} \sum_{x \in X_S} \|f_\theta(z_S, x) - SDF_S(x)\|_1 + \lambda \sum_{S \in \mathbb{D}} \|z_S\|_2^2, \quad (4.36)$$

其中  $\theta$  表示神经网络的参数， $X_S$  表示空间中的采样点集， $\lambda > 0$  为权重。这里  $\ell^1$  范数的选择使得神经网络更容易提取关键特征。不难看出 DeepSDF 是一种曲面表示的深度生成先验方法，每当潜在向量  $z$  发生变化时，DeepSDF 都给成一个新的曲面。图 4.2 为 DeepSDF 结构的示意图。

DeepSDF 曲面表示的一个显著优点是可以同时对多个曲面的符号距离函数进行求值，此外，与每次更新曲面都要重新打网格的水平集方法不同，DeepSDF 不需要提前打网格，因而不会导致离散化误差，同时大大减少了内存占用。这些优点使得 DeepSDF 为提出高效的反散射问题反演算法打开了大门。

现在我们描述如何使用隐式神经网络曲面表示来求解障碍物反散射问题。通过引入隐式神经网络曲面表示，容许集  $\mathcal{A}$  中的每个曲面  $\Gamma$  都一一对应着一个潜在

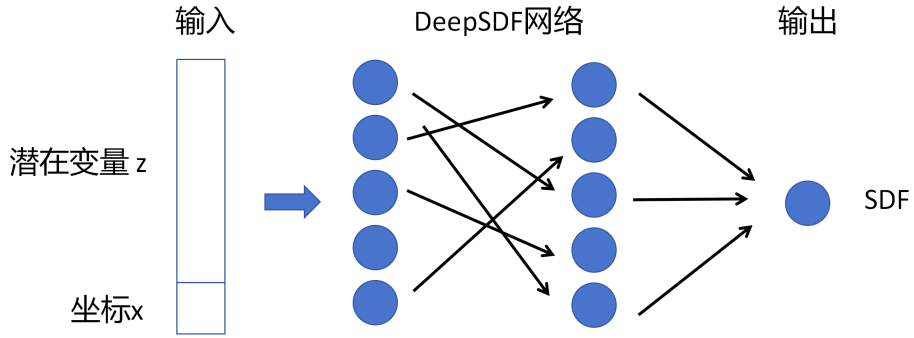


图 4.2 DeepSDF 结构示意图

向量  $z$ ，那么  $\mathcal{A}$  上的形状优化问题就转化为潜在向量  $\{z\}$  所在空间  $\mathbb{R}^Z$  上的优化问题，即最小化以下目标函数来寻找潜在向量  $z \in \mathbb{R}^Z$ ：

$$\mathcal{L}(z) = J(\Gamma_z) = \frac{1}{2LM} \sum_{l=1}^L \sum_{m=1}^M |u_{\Gamma_z}^\infty(\hat{x}_m, d_l) - u_{\Gamma^*}^\infty(\hat{x}_m, d_l)|^2, \quad (4.37)$$

其中曲面  $\Gamma_z$  由下式给出：

$$\Gamma_z = \{x \in \mathbb{R}^3 | f_\theta(z, x) = 0\}. \quad (4.38)$$

在下文中，我们假设隐式表示的曲面  $\Gamma_z$  是规则的<sup>[69]</sup>，即

$$f_\theta(z, x) = 0 \Rightarrow \nabla_x f_\theta(z, x) \neq 0. \quad (4.39)$$

关于问题 (4.37) 的求解，其基本思路如下：定义函数  $G(z) = f_\theta(z, \cdot)$ ，并假设  $G$  关于潜在向量  $z$  可微，这使得我们能够通过标准反向传播算法计算目标函数中与  $G$  相关部分对  $z$  的梯度。我们使用梯度下降方法求解问题 (4.37)，该方法在每次迭代中交替执行两个步骤：梯度下降更新和投影。首先，利用形状导数对损失函数 (4.29) 进行梯度下降更新，得到更新后的曲面  $\Gamma_t$ ，但这样得到的  $\Gamma_t$  可能不在 DeepSDF 所表示的曲面流形上，因而需要通过第二步投影操作将其映射回曲面流形。具体地，通过最小化投影损失函数：

$$P_G(\Gamma_t) = G(\arg \min_z \|\Gamma_t - G(z)\|), \quad (4.40)$$

来实现流形约束。下面将详细描述这两个步骤。

#### 4.2.2 反散射问题的形状导数

Kirsch<sup>[70]</sup> 和 Hettlich<sup>[65]</sup> 给出了具有 Dirichlet 和 Neumann 边界条件的障碍物反散射问题形状导数的推导。在此基础上，我们给出目标函数  $\mathcal{L}(z)$  关于  $z$  的梯度  $\nabla \mathcal{L}(z)$  的如下表示：

**定理 4.2：** 令  $\Omega_z$  为  $C^2$  的有界区域，损失函数  $\mathcal{L}(z)$  定义如 (4.37)。如果  $\Omega_z$  的边

界  $\Gamma$  是规则的, 那么成立:

$$\nabla \mathcal{L}(z) = -\frac{1}{L} \operatorname{Re} \left( \sum_{l=1}^L \int_{\Gamma_z} \frac{\partial u_l}{\partial v} \frac{\partial w_l}{\partial v} \frac{\nabla_z f_\theta}{\|\nabla_x f_\theta\|} ds \right), \quad (4.41)$$

其中  $\operatorname{Re}$  表示取复数的实部,  $v$  是  $\Gamma_z$  的单位外法向量,  $u_l$  是问题 (4.2) 的总场 (具有入射方向  $d = d_l$ ),  $w_l := w_l^i + w_l^s$  是以下伴随问题的解:

$$\begin{cases} \Delta w_l + k^2 w_l = 0, & \text{在 } \mathbb{R}^3 \setminus \Omega_z \text{ 中,} \\ w_l = 0, & \text{在 } \Gamma_z \text{ 上,} \\ \frac{\partial w_l^s}{\partial r} - ikw_l^s = o(r^{-1}), & \text{当 } r \rightarrow \infty \text{ 时,} \end{cases} \quad (4.42)$$

其中入射波为:

$$w_l^i(y) = \frac{1}{4\pi M} \sum_{m=1}^M \overline{(u_{\Omega_z}^\infty(\hat{x}_m, d_l) - u_{\Omega^*}^\infty(\hat{x}_m, d_l))} e^{-ik\hat{x}_m \cdot y}, \quad (4.43)$$

其中上横线表示复共轭。

**证明** 令  $e_i \in \mathbb{R}^Z$  为第  $i$  个坐标向量, 即第  $i$  个分量为 1, 其他分量为零。定义一个从曲面  $\Gamma_z$  到  $\Gamma_{z+te_i}$  的变换  $T(t)$ , 其中边界  $\Gamma_z$  由  $f_\theta(z, x) = 0$  隐式确定  $\Gamma_z = \{x \in \mathbb{R}^3 | f_\theta(z, x) = 0\}$ , 而  $\Gamma_{z+te_i}, t \geq 0$  同样由  $f_\theta(z + te_i, x) = 0$  隐式确定  $\Gamma_{z+te_i} = \{x \in \mathbb{R}^3 | f_\theta(z + te_i, x) = 0\}$ 。定义向量场  $V: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3$ :

$$V(t)(x) = V(t, x) = -\frac{\nabla_x f_\theta(z + te_i, x)}{\|\nabla_x f_\theta(z + te_i, x)\|^2} \frac{\partial f_\theta}{\partial z_i}(z + te_i, x). \quad (4.44)$$

根据第二章中等式 (2.18), 可以得到对于任何  $X \in \Gamma_z$ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_\theta(z + te_i, x(t, X)) &= \frac{\partial f_\theta}{\partial z_i} + \nabla_x f_\theta \cdot \frac{d}{dt} x(t, X) \\ &= \frac{\partial f_\theta}{\partial z_i} - \nabla_x f_\theta \cdot \frac{\nabla_x f_\theta(z + te_i, X)}{\|\nabla_x f_\theta(z + te_i, X)\|^2} \frac{\partial f_\theta}{\partial z_i} = 0, \end{aligned} \quad (4.45)$$

并且

$$f_\theta(z, x(0, X)) = 0, \quad \forall X \in \Gamma_z. \quad (4.46)$$

因此, 可以得到:

$$f_\theta(z + te_i, x(t, X)) = 0, \quad \forall t \geq 0, \forall X \in \Gamma_z. \quad (4.47)$$

令  $T_t(X) = x(t, X)$ , 那么对于  $X \in \Gamma_z$  有  $T_t(X) \in \Gamma_{z+te_i}$ 。假设映射  $T_t: \Gamma_z \rightarrow \Gamma_{z+te_i}$  在  $0 \leq t \leq \varepsilon$  上是满射, 其中  $\varepsilon$  是一个小常数, 那么  $T_t(\Gamma_z) = \Gamma_{z+te_i} = \{x \in \mathbb{R}^3 | f_\theta(z + te_i, x) = 0\}$ 。同时, 如果函数  $J(\Gamma)$  在  $\Gamma_z$  和  $V \in C([0, \varepsilon]; C^1(\overline{\Omega_z}, \mathbb{R}^3))$  处

形状可微，则根据<sup>[47]</sup>Proposition 2.21，以下关系成立

$$dJ(\Gamma_z; V) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{J(\Gamma_{z+te_i}) - J(\Gamma_z)}{t} = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{J(T_t(\Gamma_z)) - J(\Gamma_z)}{t}. \quad (4.48)$$

根据  $\mathcal{L}(z)$  的定义：

$$\frac{\partial \mathcal{L}(z)}{\partial z_i} = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{J(\Gamma_{z+te_i}) - J(\Gamma_z)}{t}. \quad (4.49)$$

由第二章中形状导数的定义 (2.19)，根据 (4.48) 得出：

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{J(\Gamma_{z+te_i}) - J(\Gamma_z)}{t} = dJ(\Gamma_z; V), \quad (4.50)$$

其中  $V$  由等式 (4.44) 定义。由于  $\Omega_z$  是  $C^2$  的有界区域，根据<sup>[71]</sup>定理 3.2 可以得出  $J(\Gamma)$  在  $\Gamma_z$  处的形状导数由下式给出

$$dJ(\Gamma_z; V) = \frac{1}{L} \operatorname{Re} \left( \sum_{l=1}^L \int_{\Gamma_z} \frac{\partial u_l}{\partial v} \frac{\partial w_l}{\partial v} (v \cdot V(0)) ds \right), \quad (4.51)$$

将

$$V(0) \cdot v = -\frac{\nabla_x f_\theta}{\|\nabla_x f_\theta\|^2} \frac{\partial f_\theta}{\partial z_i} \cdot \frac{\nabla_x f_\theta}{\|\nabla_x f_\theta\|} = -\frac{1}{\|\nabla_x f_\theta\|} \frac{\partial f_\theta}{\partial z_i}, \quad (4.52)$$

代入表达式 (4.51) 即可得到所需的结果。 ■

注意到潜在向量  $z$  是神经网络  $f_\theta$  的输入，在数值计算时，梯度  $\nabla_x f_\theta$  和  $\nabla_z f_\theta$  都可以通过反向传播算法<sup>[72]</sup> 利用自动微分计算，例如使用 PyTorch 包中的 `torch.autograd` 函数。

一旦我们有了梯度  $\nabla \mathcal{L}(z)$  的表达式，就可以使用梯度下降类的算法更新潜在变量，得到求解障碍物反散射问题的迭代算法。这里，我们采用自适应矩估计 (Adam)<sup>[73]</sup> 来更新潜在向量  $z$ 。具体来说，在每次迭代中，计算随机梯度  $g_n$  满足  $\mathbb{E}[g_n] = \nabla \mathcal{L}(z_n)$ 。这可以通过 PyTorch 中的 `torch.optim.Adam` 等函数来实现。按照通常的标准，采用  $0 < \beta_2 \leq 1, 0 \leq \beta_1 < \beta_2$ ，以及非负序列  $(\alpha_n)_{n \in \mathbb{N}}$  并迭代定义三个向量  $m_n, v_n, z_n \in \mathbb{R}^Z$ 。更准确地说，给定初始值  $z_0 \in \mathbb{R}^Z$ 、 $m_0 = 0$  和  $v_0 = 0$ ，对所有下标  $n \in \mathbb{N}$  定义

$$\begin{cases} m_{n,i} = \beta_1 m_{n-1,i} + (1 - \beta_1) g_{n-1,i}, \\ v_{n,i} = \beta_2 v_{n-1,i} + (1 - \beta_2) (g_{n-1,i})^2, \\ z_{n,i} = z_{n-1,i} - \alpha_n \frac{m_{n,i}}{\sqrt{v_{n,i}}}, \end{cases} \quad (4.53)$$

其中  $x_j$  表示向量  $x$  的第  $j$  个坐标， $\alpha_n$  是第  $n$  步的学习率， $\beta_1 > 0$  是动量参数， $\beta_2$  控制平方梯度的每坐标指数移动平均值的衰减率。我们在 4.1 中给出了完整的求解算法。

**算法 4.1** 基于曲面隐式神经网络表示的反散射算法

**输入:** 用于训练 DeepSDF 的曲面数据。远场模式数据, 波数  $k$ , 方向  $\{d_l\}_{l=1}^L, \{\hat{x}_m\}_{m=1}^M$ 。

**初始化:** 初始潜在向量  $z_0$ , 步长序列:  $\{\alpha_n\}_{n=0}^N, m_0 = 0$  以及  $v_0 = 0$ 。

根据 (4.36) 训练 DeepSDF 神经网络  $f_\theta(z, x)$ 。

**for**  $n = 0, 1, 2, \dots, N$  **do**

通过移动立方体算法产生相应于  $z_n$  的曲面  $\Gamma_n = \{x | f_\theta(z_n, x) = 0\}$ 。

通过求解 (4.2) 计算  $u_l^n$ 。

通过求解 (4.42) 计算  $w_l^n$ 。

通过 (4.41) 计算梯度  $\nabla \mathcal{L}(z_n)$ 。

通过 (4.53) 中所给出的 Adam 方法更新潜在变量  $z_n$ 。

**end for**

**返回:** 对应于  $z_{N+1}$  的曲面。

### 4.3 收敛性分析

现在我们讨论格式 (4.1) 的收敛性, 这为反演算法提供了基本的理论保证。首先, 我们给出二阶形状导数的定义。令  $V_1, V_2 : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3$  为两个可微的速度场。假设目标函数  $J(\Gamma)$  在 Hadamard<sup>[48]</sup> 意义上是形状可微的, 定义二阶形状导数:

$$d^2 J(\Gamma; V_1; V_2) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{dJ(\Gamma_t(V_1); V_2(t)) - dJ(\Gamma; V_2(0))}{t}. \quad (4.54)$$

根据<sup>[48]</sup> 定理 6.2, Chapter 9 可以得到:

$$d^2 J(\Gamma; V_1; V_2) = d^2 J(\Gamma; V_1(0); V_2(0)) + dJ(\Gamma; V_1'(0)), \quad (4.55)$$

其中

$$\begin{aligned} d^2 J(\Gamma; V_1(0); V_2(0)) &:= \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{dJ(T_t(\Gamma, V_1); V_2(0)) - dJ(\Gamma; V_2(0))}{t}, \\ dJ(\Gamma; V(0)) &:= \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{J(T_t(\Gamma, V)) - J(\Gamma)}{t}, \end{aligned} \quad (4.56)$$

$$T_t(\Gamma, V) = \{x + tV(0, x) | x \in \Gamma\},$$

以及

$$V'(0) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{V(t, x) - V(0, x)}{t}. \quad (4.57)$$

关于二阶形状导数的详细讨论可以在专著<sup>[48,74]</sup> 和<sup>[75]</sup>appendix 中找到。

我们给出关于形状泛函 (4.29) 形状导数的如下估计:

**定理 4.3:** 假设边界  $\Gamma$  是  $C^5$  的, 那么存在独立于  $V$  的常数  $C$ , 使得:

$$|dJ(\Gamma; V(0))| \leq C \|V(0)\|_{C(\Gamma; \mathbb{R}^3)}, \quad \forall V \in C([0, \varepsilon]; C(\overline{\Omega}, \mathbb{R}^3)), \quad (4.58)$$

$$\begin{aligned} |d^2 J(\Gamma; V_1(0); V_2(0))| &\leq C \|V_1(0)\|_{C^3(\Gamma, \mathbb{R}^3)} \|V_2(0)\|_{C^3(\Gamma, \mathbb{R}^3)}, \\ &\forall V_1, V_2 \in C([0, \varepsilon]; C^3(\overline{\Omega}, \mathbb{R}^3)), \end{aligned} \quad (4.59)$$

其中  $\varepsilon > 0$  是一个小常量,  $\|f\|_{C^m(\Gamma)} \triangleq \sum_{i=0}^m \|f^{(i)}\|_{C(\Gamma)}$ , 以及对于任意  $f(x) \in$

$C^m(\overline{\Omega}, \mathbb{R}^3)$ ,  $\|f\|_{C(\Gamma)} \triangleq \max_{x \in \Gamma} |f(x)|$ 。

该定理的证明需要椭圆偏微分方程理论中的经典结果<sup>[62]</sup>定理 2.6.7:

**引理 4.1:** 如果边界  $\Gamma$  是  $C^m$  的,  $u^i \in H^{m-1/2}(\Gamma)$ ,  $m \in \mathbb{N}$ , 那么问题 (4.2) 的解  $u$  满足  $u \in H^m(\Omega^+)$ , 并且存在  $C = C(k, \Omega)$  使得:

$$\|u\|_{H^m(\Omega^+)} \leq C \|u^i\|_{H^{m-1/2}(\Gamma)}, \quad (4.60)$$

其中  $\Omega^+ := \mathbb{R}^3 \setminus \Omega$ ,

$$H(\Omega^+) = \left\{ u, \|u\|_{H(\Omega^+)} := \int_{\Omega^+} \frac{u^2}{r^2+1} + \frac{|\nabla u|^2}{r^2+1} dV + \int_{\Omega^+} \left| \frac{\partial u}{\partial r} - iku \right|^2 dV < \infty \right\}, \quad (4.61)$$

$$H^m(\Omega^+) = \left\{ u, \|u\|_{H^m(\Omega^+)} := \sum_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha u\|_{H(\Omega^+)} < \infty \right\}, \quad (4.62)$$

其中  $r = \|x\|_2$ 。

我们给出如下的引理:

**引理 4.2:** 令  $u$  为问题 (4.2) 的解, 边界  $\Gamma$  为  $C^m$  的,  $m \in \mathbb{N}$  并且  $m \geq 1$ 。那么  $\gamma u \in H^{m-1/2}(\Gamma)$ ,  $\partial_\nu u \in H^{m-3/2}(\Gamma)$ , 并且:

$$\|\partial_\nu u\|_{H^{m-3/2}(\Gamma)} \leq C \|\gamma u\|_{H^{m-1/2}(\Gamma)}. \quad (4.63)$$

**证明** 根据引理 4.1, 如果  $u^i \in H^{m-1/2}(\Gamma)$ , 则解  $u \in H^m(\Omega^+)$  并且成立:

$$\|u\|_{H^m(\Omega^+)} \leq C \|u^i\|_{H^{m-1/2}(\Gamma)} = C \|\gamma u\|_{H^{m-1/2}(\Gamma)}. \quad (4.64)$$

根据迹定理<sup>[52]</sup>pp. 163–164, 可以推出  $\|\partial_\nu u\|_{H^{m-3/2}(\Gamma)} \leq C \|u\|_{H^m(\Omega^+)}$ 。将这两个估计结合起来就可以得出所需的结果。 ■

为了证明定理 4.3, 我们定义远场模式算子  $F: \mathcal{T} \rightarrow L^2(\mathbb{S}^2)$ , 它把集合  $\mathcal{T}$  中的边界  $\Gamma$  从映射到方程 (4.2) 的远场模式 (4.9):  $F(\Gamma) = u_\infty$ 。根据<sup>[75]</sup>定理 6.1, 算子  $F$  关于边界  $\Gamma$  的变化量  $V_1, V_2 \in C([0, \varepsilon]; C^1(\overline{\Omega}, \mathbb{R}^3))$  是二次连续可导的, 并且

$$d^2 F(\Gamma; V_1(0); V_2(0)) = u_\infty'', \quad (4.65)$$

其中函数  $u_\infty''$  是如下的散射问题的远场模式:

$$\begin{cases} \Delta u'' + k^2 u'' = 0, & \text{在 } \mathbb{R}^3 \setminus \Omega \text{ 中,} \\ u'' = \psi, & \text{在 } \Gamma \text{ 上,} \\ \frac{\partial u''}{\partial r} - iku'' = o(r^{-1}), & \text{当 } r \rightarrow \infty \text{ 时,} \end{cases} \quad (4.66)$$

其中边界数据  $\psi$  定义为:

$$\begin{aligned} \psi = & -V_{1,v} \frac{\partial u'_2}{\partial v} - V_{2,v} \frac{\partial u'_1}{\partial v} \\ & + (V_{1,v}V_{2,v} - V_{1,\tau}V_{2,\tau})\kappa \frac{\partial u}{\partial v} \\ & + (V_{1,\tau}(\tau \cdot \nabla V_{2,\tau}) + V_{2,\tau}(\tau \cdot \nabla V_{1,\tau})) \frac{\partial u}{\partial v}, \end{aligned} \quad (4.67)$$

其中  $u$  是散射问题 (4.2) 的解,  $v$  表示边界  $\Gamma$  的单位外法向,  $V_{j,v} = V_j(0) \cdot v$  是  $V_j(0)$  的法向分量,  $V_{j,\tau} = V_j(0) \cdot \tau$  是向量  $V_j(0)$  的切向分量,  $\tau \cdot \nabla$  是切向梯度,  $\kappa$  表示  $\Gamma$  的曲率。此外,  $u'_j, j = 1, 2$  是如下边值问题的解:

$$\begin{cases} \Delta u' + k^2 u' = 0, & \text{在 } \mathbb{R}^3 \setminus \Omega \text{ 中,} \\ u' = -V_{j,v} \frac{\partial u}{\partial v}, & \text{在 } \Gamma \text{ 上,} \\ \frac{\partial u'}{\partial r} - iku' = o(r^{-1}), & \text{当 } r \rightarrow \infty \text{ 时.} \end{cases} \quad (4.68)$$

同样根据 [75]p. 25:

$$dF(\Gamma; V(0)) = u'_\infty, \quad (4.69)$$

其中  $u'_\infty$  是问题 (4.68) 的解  $u'$  的远场模式。对于算子  $F$ , 我们有如下的估计:

**引理 4.3:** 在定理 4.3 的假设下, 以下估计成立:

$$|dF(\Gamma; V(0))| \leq C \|V(0)\|_{C^1(\Gamma; \mathbb{R}^3)}, \quad \forall V \in C([0, \varepsilon); C^1(\overline{\Omega}, \mathbb{R}^3)). \quad (4.70)$$

$$\begin{aligned} |d^2 F(\Gamma; V_1(0); V_2(0))| & \leq C \|V_1(0)\|_{C^3(\Gamma, \mathbb{R}^3)} \|V_2(0)\|_{C^3(\Gamma, \mathbb{R}^3)}, \\ & \forall V_1, V_2 \in C([0, \varepsilon); C^3(\overline{\Omega}, \mathbb{R}^3)). \end{aligned} \quad (4.71)$$

**证明** 首先, 根据边界  $\Gamma$  的  $C^5$  正则性以及引理 4.2 可以推出对于任何有界子区域  $\Omega^+ = \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega}$ , 成立:

$$u \in H^5(\Omega^+), \quad \gamma u \in H^{9/2}(\Gamma) \quad \text{以及} \quad \partial_\nu u \in H^{7/2}(\Gamma). \quad (4.72)$$

根据远场模式的定义 (4.9) 和估计  $\|\partial_\nu e^{-ik\hat{x}\cdot y}\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} \leq C$  以及  $\|e^{-ik\hat{x}\cdot y}\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \leq C$ , 可以得出:

$$\begin{aligned} |dF(\Gamma; V(0))| & = \left| \frac{1}{4\pi} \int_\Gamma \frac{\partial e^{-ik\hat{x}\cdot y}}{\partial v} u'(y) - \frac{\partial u'(y)}{\partial v} e^{-ik\hat{x}\cdot y} ds(y) \right| \\ & \leq \frac{1}{4\pi} \left( \left| \int_\Gamma \frac{\partial e^{-ik\hat{x}\cdot y}}{\partial v} u'(y) ds(y) \right| + \left| \int_\Gamma \frac{\partial u'(y)}{\partial v} e^{-ik\hat{x}\cdot y} ds(y) \right| \right) \\ & \leq C (\|\partial_\nu e^{-ik\hat{x}\cdot y}\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} \|u'\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|\partial_\nu u'\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} \|e^{-ik\hat{x}\cdot y}\|_{H^{1/2}(\Gamma)}) \\ & \leq C (\|u'\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|\partial_\nu u'\|_{H^{-1/2}(\Gamma)}). \end{aligned} \quad (4.73)$$

根据亥姆霍兹方程的 DtN 算子的有界性（参见引理 4.2）可以推出：

$$|dF(\Gamma; V(0))| \leq C \|\gamma u'\|_{H^{1/2}(\Gamma)} = C \left\| -V_\nu \partial_\nu u \right\|_{H^{1/2}(\Gamma)}. \quad (4.74)$$

然后根据引理 2.1，可以得出：

$$\begin{aligned} |dF(\Gamma; V(0))| &\leq C (\|V_\nu\|_{C(\Gamma)} \|\partial_\nu u\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \\ &\quad + \|V_\nu\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \|\partial_\nu u\|_{C(\Gamma)} + \|V_\nu\|_{C(\Gamma)} \|\partial_\nu u\|_{C(\Gamma)}). \end{aligned} \quad (4.75)$$

当  $s > 1$ ,  $s - 1 = r + \alpha$ ,  $\alpha \in (0, 1)$  时，有连续索伯列夫嵌入  $H^s(\Gamma) \hookrightarrow C^{r, \alpha - \epsilon}(\Gamma)$ ，根据引理 2.2 可以推出：

$$\begin{aligned} |dF(\Gamma; V(0))| &\leq C \|V_\nu\|_{C(\Gamma)} \|\partial_\nu u\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + C \|\partial_\nu u\|_{H^{3/2}(\Gamma)} (\|V_\nu\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|V_\nu\|_{C(\Gamma)}) \\ &\leq C \|\partial_\nu u\|_{H^{3/2}(\Gamma)} (\|V_\nu\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|V_\nu\|_{C(\Gamma)}). \end{aligned} \quad (4.76)$$

然后根据估计  $\|\partial_\nu u\|_{H^{7/2}(\Gamma)} \leq C$  和 (4.72) 以及引理 2.2 可以得到：

$$|dF(\Gamma; V(0))| \leq C (\|V_\nu\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|V_\nu\|_{C(\Gamma)}) \leq C \|V_\nu\|_{C^1(\Gamma)} \leq C \|V(0)\|_{C^1(\Gamma)}. \quad (4.77)$$

这证明了第一个断言。接下来，根据引理 4.2，我们有：

$$\begin{aligned} |d^2 F(\Gamma; V_1(0); V_2(0))| &= \left| \frac{1}{4\pi} \int_\Gamma \frac{\partial e^{-ik\hat{x}\cdot y}}{\partial \nu} u''(y) - \frac{\partial u''(y)}{\partial \nu} e^{-ik\hat{x}\cdot y} ds(y) \right| \\ &\leq C (\|\partial_\nu e^{-ik\hat{x}\cdot y}\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} \|\gamma u''\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|\partial_\nu u''\|_{H^{-1/2}(\Gamma)} \|e^{-ik\hat{x}\cdot y}\|_{H^{1/2}(\Gamma)}) \\ &\leq C (\|\gamma u''\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|\partial_\nu u''\|_{H^{-1/2}(\Gamma)}) \leq C \|\gamma u''\|_{H^{1/2}(\Gamma)}. \end{aligned} \quad (4.78)$$

根据 (4.67) 中边界数据  $\psi$  的表达式以及三角不等式，可以推出：

$$\begin{aligned} |d^2 F(\Gamma; V_1(0); V_2(0))| &\leq C \|\gamma u''\|_{H^{1/2}(\Gamma)} = C \|\psi\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \\ &\leq C \left( \|V_{1,\nu} \partial_\nu u'_2\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|V_{2,\nu} \partial_\nu u'_1\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|(V_{1,\nu} V_{2,\nu} - V_{1,\tau} V_{2,\tau}) \kappa \partial_\nu u\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \right. \\ &\quad \left. + \|V_{1,\tau} (\tau \cdot \nabla V_{2,\tau}) \partial_\nu u\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|V_{2,\tau} (\tau \cdot \nabla V_{1,\tau}) \partial_\nu u\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \right) := \sum_{i=1}^5 I_i. \end{aligned} \quad (4.79)$$

下面分别给出这五项的有界性。对于第一项  $I_1$ ，根据引理 2.1，可以推出：

$$I_1 \leq C (\|V_{1,\nu}\|_{C(\Gamma)} \|\partial_\nu u'_2\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|\partial_\nu u'_2\|_{C(\Gamma)} \|V_{1,\nu}\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|\partial_\nu u'_2\|_{C(\Gamma)} \|V_{1,\nu}\|_{C(\Gamma)}). \quad (4.80)$$

通过索伯列夫嵌入  $H^{3/2}(\Gamma) \hookrightarrow C(\Gamma)$  和引理 2.2，可以得到：

$$I_1 \leq C \|\partial_\nu u'_2\|_{H^{3/2}(\Gamma)} (\|V_{1,\nu}\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|V_{1,\nu}\|_{C(\Gamma)}). \quad (4.81)$$

同时, 根据 DtN 算子的有界性 (参见引理 4.2), 我们有:

$$\begin{aligned} \|\partial_\nu u'_2\|_{H^{3/2}(\Gamma)} &\leq C\|\gamma u'_2\|_{H^{5/2}(\Gamma)} = C\|V_{2,\nu}\partial_\nu u\|_{H^{5/2}(\Gamma)} \\ &\leq C(\|V_{2,\nu}\|_{C^2(\Gamma)}\|\partial_\nu u\|_{H^{5/2}(\Gamma)} + \|\partial_\nu u\|_{C^2(\Gamma)}\|V_{2,\nu}\|_{H^{5/2}(\Gamma)} + \|\partial_\nu u\|_{C^2(\Gamma)}\|V_{2,\nu}\|_{C^2(\Gamma)}). \end{aligned} \quad (4.82)$$

然后根据正则性估计 (4.72), 索伯列夫嵌入  $H^{7/2}(\Gamma) \hookrightarrow C^2(\Gamma)$  和引理 2.2 可以推出:

$$\begin{aligned} I_1 &\leq C(\|V_{2,\nu}\|_{H^{5/2}(\Gamma)} + \|V_{2,\nu}\|_{C^2(\Gamma)})(\|V_{1,\nu}\|_{H^{1/2}(\Gamma)} + \|V_{1,\nu}\|_{C(\Gamma)}) \\ &\leq C\|V_{2,\nu}\|_{C^3(\Gamma)}\|V_{1,\nu}\|_{C^1(\Gamma)}. \end{aligned} \quad (4.83)$$

类似的可以得到估计  $I_2 \leq C\|V_{1,\nu}\|_{C^3(\Gamma)}\|V_{2,\nu}\|_{C^1(\Gamma)}$ 。接下来根据引理 2.1 和 2.2 以及正则性估计 (4.72), 可以得到:

$$I_3 \leq C\|V_1(0)\|_{C^1(\Gamma)}\|V_2(0)\|_{C^1(\Gamma)}. \quad (4.84)$$

最后, 再次使用引理 2.1, 引理 2.2 和 (4.72) 可以得到:

$$I_4 \leq C\|V_1(0)\|_{C^1(\Gamma)}\|V_2(0)\|_{C^2(\Gamma)} \quad \text{以及} \quad I_5 \leq C\|V_1(0)\|_{C^2(\Gamma)}\|V_2(0)\|_{C^1(\Gamma)}. \quad (4.85)$$

结合这些估计证明了第二个断言, 这就完成了证明。 ■

现在我们可以给出定理 4.3 的证明:

**定理 4.3 的证明** 根据形状导数表达式 (4.51) 以及引理 4.1 和 4.2 可以得出, 对于任何  $V \in C([0, \epsilon]; C^1(\overline{\Omega}, \mathbb{R}^3))$ , 成立:

$$\begin{aligned} |dJ(\Gamma; V(0))| &\leq \left( \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \left\| \frac{\partial u_l}{\partial \nu} \right\|_{L^2(\Gamma)} \left\| \frac{\partial w_l}{\partial \nu} \right\|_{L^2(\Gamma)} \right) \|V(0) \cdot \nu\|_{C(\Gamma)} \\ &\leq \left( \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \|u_l\|_{H^1(\Gamma)} \|w_l\|_{H^1(\Gamma)} \right) \|V(0) \cdot \nu\|_{C(\Gamma)} \leq C\|V(0)\|_{C(\Gamma; \mathbb{R}^3)}. \end{aligned} \quad (4.86)$$

类似地, 根据等式

$$\begin{aligned} d^2J(\Gamma; V_1(0); V_2(0)) &= \sum_{l,m} dF_{l,m}(\Gamma; V_1(0))dF_{l,m}(\Gamma; V_2(0)) \\ &\quad + (F_{l,m}(\Gamma) - u_{l,m}^*)d^2F_{l,m}(\Gamma; V_1(0); V_2(0)), \end{aligned} \quad (4.87)$$

和引理 4.3 (对于任何  $d_l \in S^1$  和  $\hat{x}_m \in S^1$ ) 有:

$$\begin{aligned}
 & |d^2 J(\Gamma; V_1(0); V_2(0))| \\
 & \leq \sum_{l,m} |dF_{l,m}(\Gamma; V_1(0))dF_{l,m}(\Gamma; V_2(0)) + (F_{l,m}(\Gamma) - u_{l,m}^*)d^2 F_{l,m}(\Gamma; V_1(0); V_2(0))| \\
 & \leq C \|V_1(0)\|_{C^1(\Gamma)} \|V_2(0)\|_{C^1(\Gamma)} + C \|V_1(0)\|_{C^3(\Gamma)} \|V_2(0)\|_{C^3(\Gamma)} \\
 & \leq C \|V_1(0)\|_{C^3(\Gamma)} \|V_2(0)\|_{C^3(\Gamma)}.
 \end{aligned} \tag{4.88}$$

这就完成了定理的证明。  $\blacksquare$

最后, 我们给出算法 4.1 的收敛性。使用符号  $[N]$  表示集合  $\{1, 2, \dots, N\}$ , 并使用  $\mathcal{O}(\cdot)$  作为标准的渐近符号。

**定理 4.4:** 假设算法 4.1 生成的序列  $\{z_n\}_{n=0}^\infty \subset \mathbb{R}^Z$  是一致有界的, 并且以下两个假设成立: (一) 采样梯度  $g_n$  以及梯度  $\nabla \mathcal{L}(z_n)$  是有界的, 即  $\|\nabla \mathcal{L}(z_n)\| \leq H$ 、 $\|g_n\| \leq H, \forall n > 1$ ; (二) 采样梯度  $g_n$  是无偏并且独立的, 即, 如果  $i \neq j$ , 则  $g_n = \nabla \mathcal{L}(z_n) + \zeta_n, E[\zeta_n] = 0$  和  $\zeta_i$  独立于  $\zeta_j$ 。同样假设定理 4.3 中的假设是满足的, 超参数  $\beta_1 \in [0, 1)$  是非递增的, 并且对于某些常量  $G > 0$ , 对于任意  $n$  成立  $\|\alpha_n m_n / \sqrt{\hat{v}_n}\| \leq G$ 。那么下面的估计成立:

$$\begin{aligned}
 & \mathbb{E} \left[ \sum_{n=1}^N \alpha_n \left\langle \nabla \mathcal{L}(z_n), \frac{\nabla \mathcal{L}(z_n)}{\sqrt{\hat{v}_n}} \right\rangle \right] \\
 & \leq \mathbb{E} \left[ C_1 \sum_{n=1}^N \left\| \frac{\alpha_n g_n}{\sqrt{\hat{v}_n}} \right\|^2 + C_2 \sum_{n=2}^N \left\| \frac{\alpha_n}{\sqrt{\hat{v}_n}} - \frac{\alpha_{n-1}}{\sqrt{\hat{v}_{n-1}}} \right\|_1 + C_3 \sum_{n=2}^{N-1} \left\| \frac{\alpha_n}{\sqrt{\hat{v}_n}} - \frac{\alpha_{n-1}}{\sqrt{\hat{v}_{n-1}}} \right\|^2 \right] + C_4,
 \end{aligned} \tag{4.89}$$

其中  $C_1, C_2, C_3$  和  $C_4$  是独立于  $N$  的常量, 期望  $\mathbb{E}$  是对于  $\{g_n\}$  取的。此外, 令  $\gamma_n := \min_{j \in [Z]} \min_{\{g_i\}_{i=1}^n} \alpha_n m_n / (\sqrt{\hat{v}_n})_j$  表示在所有可能的坐标和梯度  $\{g_i\}_{i=1}^n$  上的有效步长的最小可能值。那么算法 4.1 的收敛速度由下式给出

$$\min_{i \in [N]} \mathbb{E}[\|\nabla \mathcal{L}(z_n)\|^2] = \mathcal{O}\left(\frac{s_1(N)}{s_2(N)}\right), \tag{4.90}$$

其中  $s_1(N)$  是 (4.89) 中的上界,  $s_2(N) = \sum_{n=1}^N \gamma_n$ 。

**证明** 由于损失函数  $\mathcal{L}(z)$  是非负的, 因此  $\mathcal{L}(z)$  存在下确界。如果  $\mathcal{L}$  可微并且具有  $L$ -Lipschitz 梯度, 即:

$$\|\nabla \mathcal{L}(z) - \nabla \mathcal{L}(\tilde{z})\| \leq L \|z - \tilde{z}\|, \quad \forall z, \tilde{z}, \tag{4.91}$$

所需的断言 (4.89) 和 (4.90) 可以直接根据<sup>[76]</sup>定理 3.1 得出。因此, 我们只需给出

$\mathcal{L}(z)$  的  $L$ -Lipschitz 连续性。首先, 我们定义如下三个向量场  $V_1, V_2$  和  $W$ :

$$V_1[z](t, x) = -\frac{\nabla_x f_\theta(z + te_i, x)}{\|\nabla_x f_\theta(z + te_i, x)\|^2} \frac{\partial f_\theta}{\partial z_i}(z + te_i, x), \quad (4.92)$$

$$V_2[z](t, x) = -\frac{\nabla_x f_\theta(z + te_j, x)}{\|\nabla_x f_\theta(z + te_j, x)\|^2} \frac{\partial f_\theta}{\partial z_j}(z + te_j, x), \quad (4.93)$$

$$W(t, x) = -\frac{\nabla_x f_\theta(z + te_j, x)}{\|\nabla_x f_\theta(z + te_j, x)\|^2} \frac{\partial f_\theta}{\partial z_i}(z + te_j, x). \quad (4.94)$$

那么有  $W(t, x) = V_1[z + te_j](0, x)$  和  $W(0, x) = V_1(0, x)$ 。从 (3.37) 可以得出:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z_i}(z) = dJ(\Gamma_z; V_1[z]), \quad (4.95)$$

以及

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathcal{L}(z)}{\partial z_i \partial z_j} &= \frac{\partial}{\partial z_j} dJ(\Gamma_z; V_1[z]) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{dJ(\Gamma_{z+te_j}; V_1[z + te_j](0)) - dJ(\Gamma_z; V_1)}{t} \\ &= \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{dJ(\Gamma_t(V_2); W(t)) - dJ(\Gamma_z; V_1)}{t} = d^2 J(\Gamma_z; W; V_2). \end{aligned} \quad (4.96)$$

根据等式 (4.55), 可以推出:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathcal{L}(z)}{\partial z_i \partial z_j} &= d^2 J(\Gamma_z; W(0); V_2(0)) + d^2 J(\Gamma; W'(0)) \\ &= d^2 J(\Gamma_z; V_1(0); V_2(0)) + dJ(\Gamma; W'(0)), \end{aligned} \quad (4.97)$$

其中  $W'(0)(x)$  由下式给出:

$$W'(0)(x) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{W(t, x) - W(0, x)}{t} = -\frac{\partial}{\partial z_j} \left[ \frac{\nabla_x f_\theta}{\|\nabla_x f_\theta\|^2} \frac{\partial f_\theta}{\partial z_i} \right](z, x). \quad (4.98)$$

现在根据定理 4.3 可以得到:

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial z_i \partial z_j} \right| &\leq |d^2 J(\Gamma_z; V_1(0); V_2(0)) + dJ(\Gamma_z; W'(0))| \\ &\leq C \|V_1(0)\|_{C^3(\Gamma; \mathbb{R}^3)} \|V_2(0)\|_{C^3(\Gamma; \mathbb{R}^3)} + C \|W'(0)\|_{C^1(\Gamma)} \\ &\leq C \left\| \frac{\nabla_z f_\theta}{\|\nabla_x f_\theta\|} \right\|_{C^3(\Gamma; \mathbb{R}^3)}^2 + C \left\| \frac{\partial}{\partial z_j} \left[ \frac{\nabla_x f_\theta}{\|\nabla_x f_\theta\|^2} \frac{\partial f_\theta}{\partial z_i} \right] \right\|_{C^1(\Gamma)}. \end{aligned} \quad (4.99)$$

由于向量  $z$  是有界的, 根据  $f_\theta(z, x)$  的光滑性, 存在一个常量  $L$ , 使得  $\|\nabla^2 \mathcal{L}(z)\| \leq L$  对于所有  $z$  成立。因此, 根据<sup>[76]</sup>定理 3.1 即可推出所需的断言 (4.89) 和 (4.90)。■

## 4.4 数值实验与讨论

在本节中, 我们给出数值实验来验证所提算法的有效性。首先对数值实验中涉及的参数选取进行说明。

#### 4.4.1 DeepSDF 神经网络的训练

在全孔径数据反演、反向散射远场数据反演以及无相位数据反演的数值实验中，我们使用了 500 个不同长度的 L 型曲面作为训练 DeepSDF 神经网络的数据数据。这些 L 型曲面具有固定的厚度但壁长不同，每个曲面随机采样 5000 个坐标点并给出其符号距离函数值。在更多算例一节中，训练数据使用了 100 个不同长度的 H 型曲面，同样保持厚度固定但臂长可变，每个曲面随机采样 1000 个坐标点并计算对应的符号距离函数值。DeepSDF 神经网络被设计为包含 5 个隐藏层，使用 ReLU 激活函数。潜在向量  $z$  的维度  $Z$  设置为 256。训练过程中使用均方误差 (MSE) 作为损失函数，采用 Adam 优化器进行参数更新，学习率设置为 0.01。

#### 4.4.2 参数选取

在整个数值实验中，我们采用如下实验设置。假设散射体包含在立方体  $(-1, 1)^3$  中。在使用移动立方体算法<sup>[67]</sup>来生成曲面剖分时，笛卡尔网格间距设置为 0.06。使用 BEMPP-CL 包<sup>[77]</sup>求解问题 (4.2) 和 (4.42) 的边界积分方程。采用 PyTorch.optimizer 包中实现的 Adam 算法来更新潜在向量  $z$ ，学习率  $\alpha = 0.01$  恒定。

除非另有说明，我们固定入射波的波数  $k = 5\pi$ 。对于远场数据，我们在全孔径上等距入射  $L$  个平面波，并在全孔径上收集每个入射波的  $M$  等距角度的测量结果。单位球体  $S^2$  上的入射波和测量的等距方向是使用斐波那契晶格方法<sup>[78]</sup>生成的。具体来说，要生成单位球体  $S^2$  上的  $N$  等距点  $\{x_n = (x_n^1, x_n^2, x_n^3)\}_{n=1}^N \in \mathbb{R}^3$ ， $x_n$  的极坐标由下式给出：

$$\begin{cases} x_n^3 = (2n - 1)/N - 1, \\ x_n^1 = \sqrt{1 - (x_n^3)^2} \cdot \cos 2\pi n\phi, \\ x_n^2 = \sqrt{1 - (x_n^3)^2} \cdot \sin 2\pi n\phi, \end{cases} \quad (4.100)$$

其中  $\phi = (\sqrt{5} + 1)/2$  是黄金比。我们通过以下方式为测量数据添加噪声：

$$u_{ml}^\delta = (1 + \delta\xi_{ml})u_{\Gamma^*}^\infty(\hat{x}_m, d_l), \quad (4.101)$$

其中  $\xi_{ml}$  服从均值为零、方差为 1 的高斯随机变量， $\delta > 0$  控制相对噪声水平。为了测量反演曲面  $\hat{S}$  相对于精确曲面  $S^\dagger$  的精度，我们使用如下的指示子误差：

$$e(\hat{S}) = \sum_{x_i} \|\hat{S}(x_i) - S^\dagger(x_i)\|_2, \quad (4.102)$$

其中  $x_i$  是均匀网格上的网格点，

$$S(x) = \begin{cases} 1, & \text{如果 } x \text{ 在 } S \text{ 外部,} \\ 0, & \text{如果 } x \text{ 在 } S \text{ 内部.} \end{cases} \quad (4.103)$$

除非另有说明，我们在实验过程中设置一个入射场方向，100 个等距离接受方向。

现在我们更详细地介绍和讨论反演结果。

#### 4.4.3 全孔径数据反演

首先使用全孔径远场数据进行反演，目标曲面选取为光刻掩模中的基本结构，L 型曲面，反演结果如图 4.3 以及图 4.4，其中左图为目标函数下降曲线，右图为指导子误差  $e$  的下降曲线，实验结果验证了所提算法在 L 型结构反演中的有效性。从迭代过程可以观察到，我们的算法能够从初值出发，逐步恢复目标结构的几何特征。目标泛函的收敛曲线表明算法在约 100 次迭代后达到稳定状态，同时指示子误差的近似单调下降验证了反演结果的收敛性。值得注意的是，即使对于具有非光滑特征的 L 型结构，算法仍能准确反演其几何特征。

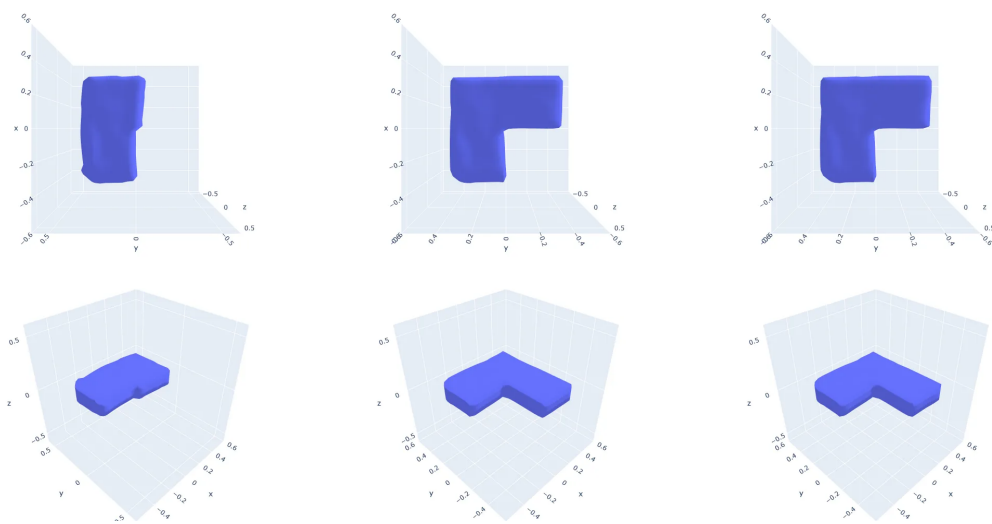


图 4.3 全孔径反演结果

在接受到的远场数据中增加 40% 噪声，实验结果如图 4.5 以及图 4.6。可以观察到反演误差相对于噪声（高达 40% 噪声水平）高度稳定，并且恢复的形状具有相对复杂的结构。由于反散射问题严重不适定，我们观察到的稳定性对于反散射问题的迭代方法来说是很重要的。

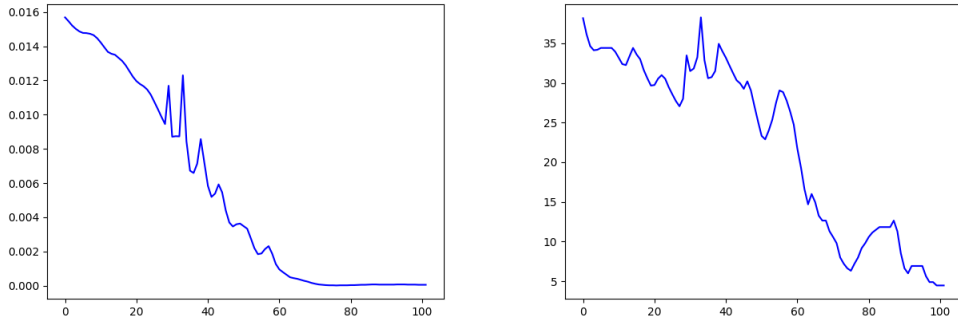


图 4.4 全孔径反演误差下降曲线

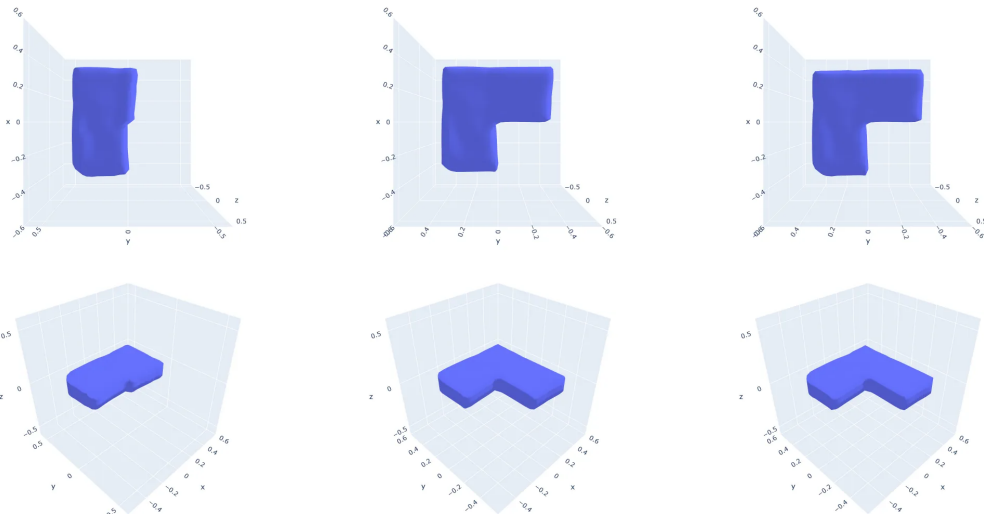


图 4.5 噪声数据反演结果

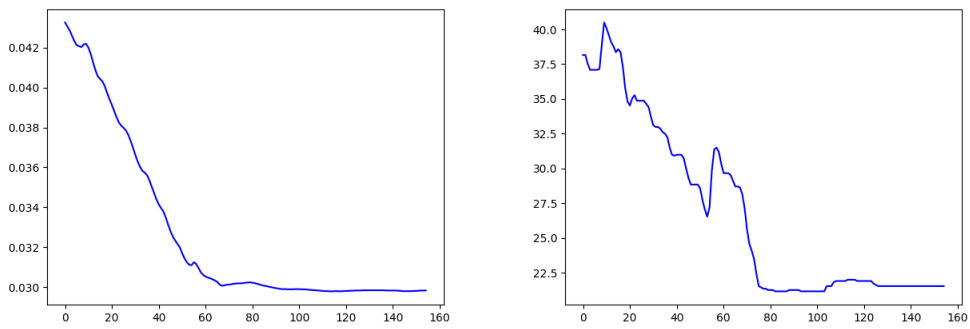


图 4.6 噪声数据误差下降曲线

#### 4.4.4 利用反向散射远场数据进行反演

现在使用反向散射数据测试所提出的算法。反向散射数据意味着对于每个入射方向  $d$ ，我们仅测量  $-d$  方向的远场数据  $u_\infty$ ，因此可用数据严重缺失。有关使用反向散射数据的现有反演方法，请参阅<sup>[79]</sup>。对于反向散射远场数据，伴随场  $w_l$  满足：

$$w_l = \frac{1}{4\pi} \overline{\left( u_{\Omega_z}^\infty(-d_l, d_l) - u_{\Omega^*}^\infty(-d_l, d_l) \right)} u_l. \quad (4.104)$$

与 (4.41) 类似，目标函数  $\mathcal{L}(z)$  的梯度  $\nabla \mathcal{L}(z)$  可以直接计算为：

$$\begin{aligned} \nabla \mathcal{L}(z) = & -\frac{1}{4\pi L} \operatorname{Re} \left( \sum_{l=1}^L \overline{\left( u_{\Omega_z}^\infty(-d_l, d_l) - u_{\Omega^*}^\infty(-d_l, d_l) \right)} \right. \\ & \left. \times \int_{\Gamma_z} \left( \frac{\partial u_l}{\partial v} \right)^2 \frac{\nabla_z f_\theta}{\|\nabla_x f_\theta\|} ds \right). \end{aligned} \quad (4.105)$$

这里，我们设置 5 个等距入射场方向，实验结果如图 4.7 以及图 4.8。数值实验验证了所提算法在仅使用反向散射数据情况下的反演性能。尽管可用数据严重缺失，算法仍然成功反演了目标结构。从目标泛函的收敛曲线可以观察到，算法在约 80 次迭代后趋于稳定，且指示子误差呈现总体下降趋势，虽然在后期出现小幅波动，但保持在可接受范围内。这一结果表明，我们的反演算法具有处理不完整数据的能力，这为实际应用中经常遇到的有限角度测量问题提供了解决思路。

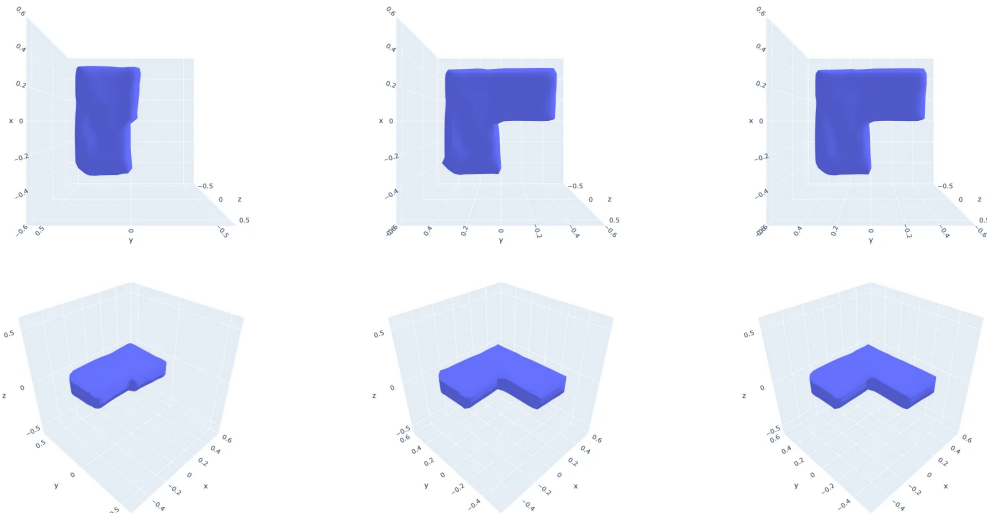


图 4.7 反向数据反演结果

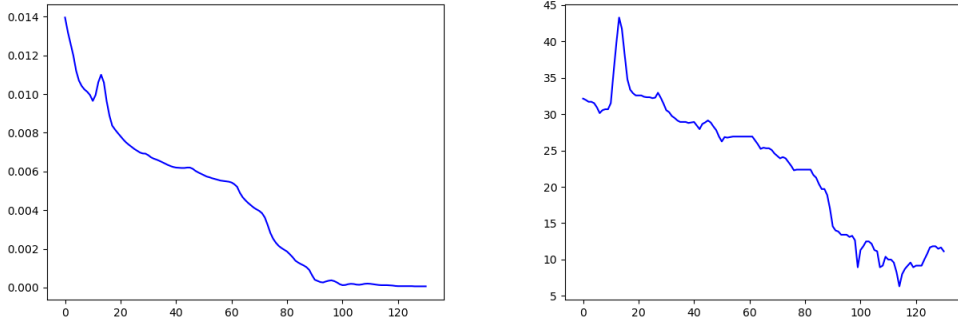


图 4.8 反向数据误差下降曲线

#### 4.4.5 使用无相位数据进行进一步验证

最后，我们用无相位数据进一步测试所提算法。在许多实际应用中，远场数据的相位与其大小或强度相比无法准确测量。因此，通常需要从无相位数据反演散射障碍物；请参阅论文<sup>[80]</sup>详细了解无相位数据的独特性和反演技术。与文献<sup>[71]</sup>类似，我们将无相位数据的目标函数  $\mathcal{L}(z)$  设置为：

$$\mathcal{L}(z) = J(\Gamma_z) = \frac{1}{2LM} \sum_{l=1}^L \sum_{m=1}^M \left| \frac{|u_{\Omega_z}^\infty(\hat{x}_m, d_l)|^2}{\sqrt{|u_{\Omega_z}^\infty(\hat{x}_m, d_l)|^2 + \epsilon}} - \frac{|u_{\Omega_z^*}^\infty(\hat{x}_m, d_l)|^2}{\sqrt{|u_{\Omega_z^*}^\infty(\hat{x}_m, d_l)|^2 + \epsilon}} \right|^2, \quad (4.106)$$

其中  $\epsilon > 0$  是一个小数字，以确保可微性。这一函数的梯度同样可以通过求解 (4.41) 得到，伴随问题 (4.42) 的入射波  $w_i$  为：

$$w_i^j(y) = \frac{1}{4\pi M} \sum_{m=1}^M \left( \frac{|u_{\Omega_z}^\infty(\hat{x}_m, d_l)|^2}{\sqrt{|u_{\Omega_z}^\infty(\hat{x}_m, d_l)|^2 + \epsilon}} - \frac{|u_{\Omega_z^*}^\infty(\hat{x}_m, d_l)|^2}{\sqrt{|u_{\Omega_z^*}^\infty(\hat{x}_m, d_l)|^2 + \epsilon}} \right) \times \frac{|u_{\Omega_z}^\infty(\hat{x}_m, d_l)|^2 + 2\epsilon}{(|u_{\Omega_z}^\infty(\hat{x}_m, d_l)|^2 + \epsilon)^{3/2}} u_{\Omega_z}^\infty(\hat{x}_m, d_l) e^{-ik\hat{x}_m \cdot y}. \quad (4.107)$$

这里，我们使用 10 个均匀分布的入射场方向，并在全孔径上为每个入射方向收集 300 个等距的无相位测量结果。由于无相位数据的平移不变性，算法只能重构形状而不包含位置信息（这对于所有连通部分都是相同的）。实验结果如图 4.9 以及图 4.10，数值实验结果验证了算法在处理无相位数据时的反演性能。从反演过程可以观察到，尽管缺失相位信息会导致反演问题的不适定性增加，算法仍能准确恢复目标结构的几何特征。目标泛函的收敛曲线在初期呈现较大波动，这反映了无相位数据带来的优化难度，但在约 150 次迭代后逐渐趋于稳定；同时，指示子误差

也呈现出总体下降趋势并最终收敛。这一结果表明，我们所提出的算法能够有效处理实际应用中常见的无相位测量数据，这具有重要的实用价值。

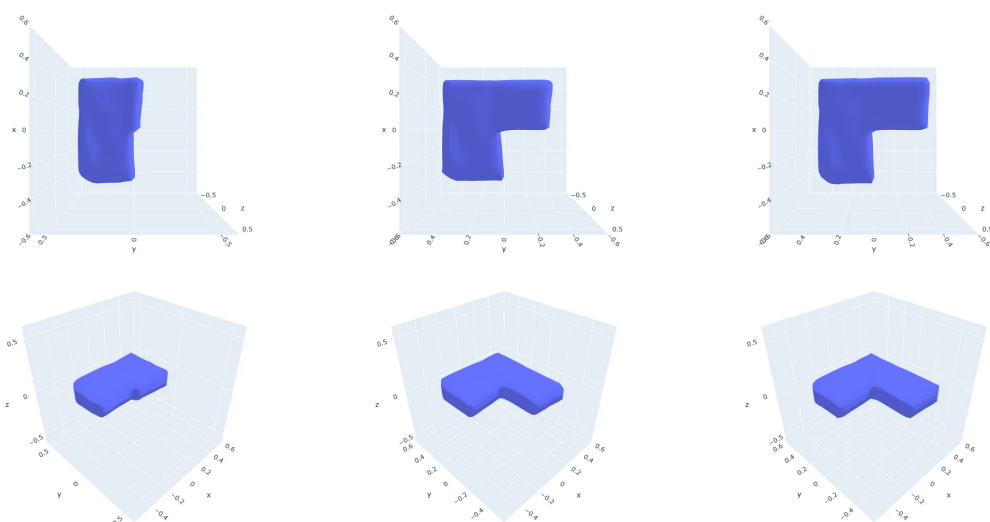


图 4.9 无相位数据反演结果

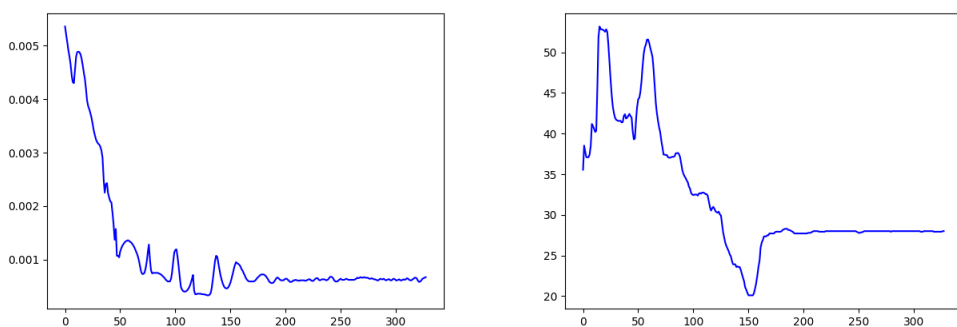


图 4.10 无相位数据误差下降曲线

#### 4.4.6 复杂结构目标曲面反演

这一节对于更复杂的目标曲面测试我们的算法。这里，我们采用一些反演光刻中常见的掩模结构进行实验，对于更复杂目标曲面的反演，参见<sup>[81]</sup>。对于 T 型目标曲面的实验结果如图 4.11 和图 4.12 所示。从反演结果可以观察到，算法能够准确捕捉 T 型结构的几何特征，目标泛函呈现出稳定的收敛趋势，在约 100 次迭代后达到稳定状态。指示子误差的单调下降进一步验证了反演结果的可靠性。

图 4.13 和图 4.14 展示了对双 L 型结构的反演结果。该结构具有更复杂的几何特征，包含多个直角转折。实验结果表明，即使面对这种复杂结构，算法仍能保持良好的反演性能。目标泛函和指示子误差的收敛曲线显示，算法在约 80 次迭代后达

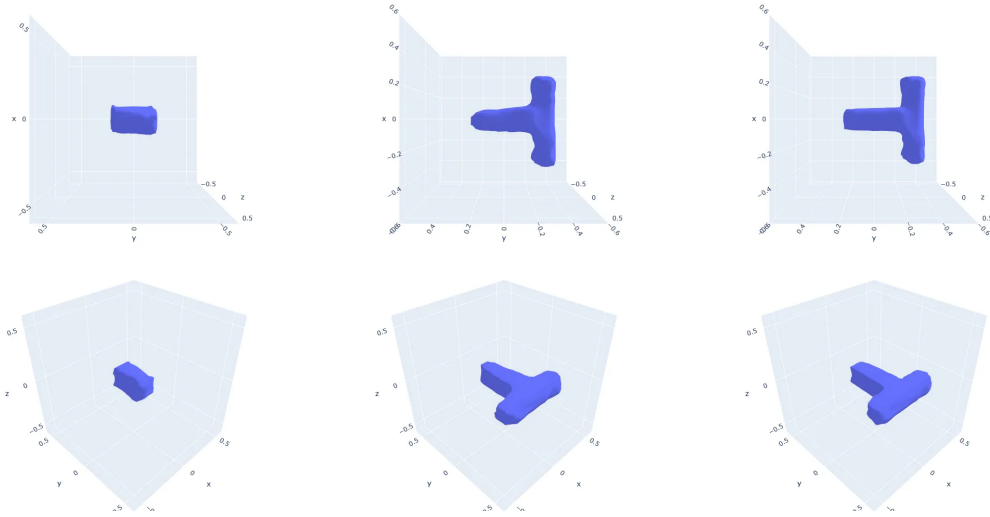


图 4.11 T 型目标曲面反演结果

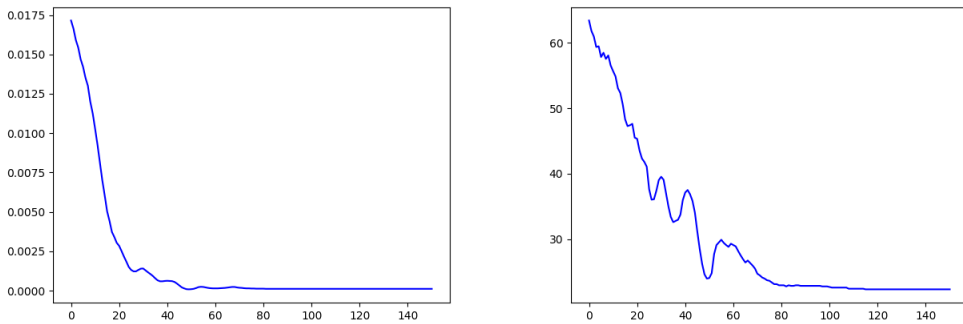


图 4.12 T 型目标曲面误差下降曲线

到收敛状态，反演结果与目标曲面高度吻合。

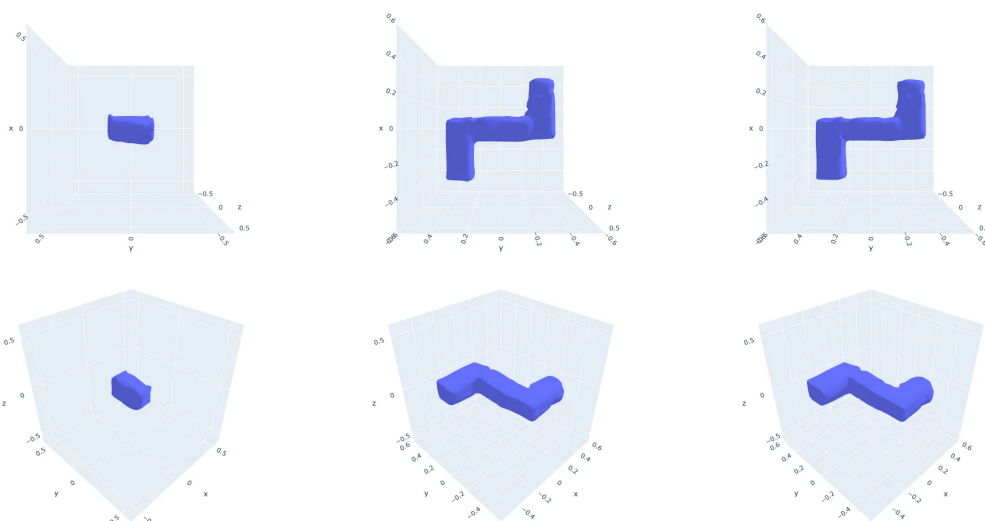


图 4.13 双 L 型目标曲面反演结果

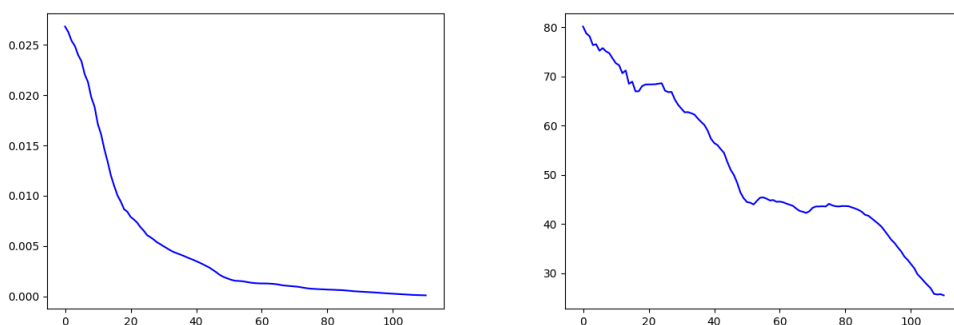


图 4.14 双 L 型目标曲面误差下降曲线

图4.15和图4.16给出了一个更具挑战性的 H 型结构反演实验。该结构不仅具有复杂的几何特征，还包含多个连接部分。从反演过程可以看出，算法能够逐步恢复目标结构的各个几何特征，目标泛函在约 60 次迭代后趋于稳定，指示子误差也呈现出良好的收敛性。这组实验进一步证实了所提算法在处理复杂几何结构时的优越性能。

#### 4.5 隐式神经网络形状优化算法在 EIT 问题中的应用

本章提出的基于隐式神经网络表示的形状优化算法，虽然是针对三维障碍物反散射问题提出的，但其本质是一个求解偏微分方程约束的形状优化问题的通用性算法框架。为了验证这一框架的广泛适用性，本节探讨其在电阻抗成像 (Electrical Impedance Tomography, EIT) 问题中的应用，展示算法在不同物理背景下的表现。

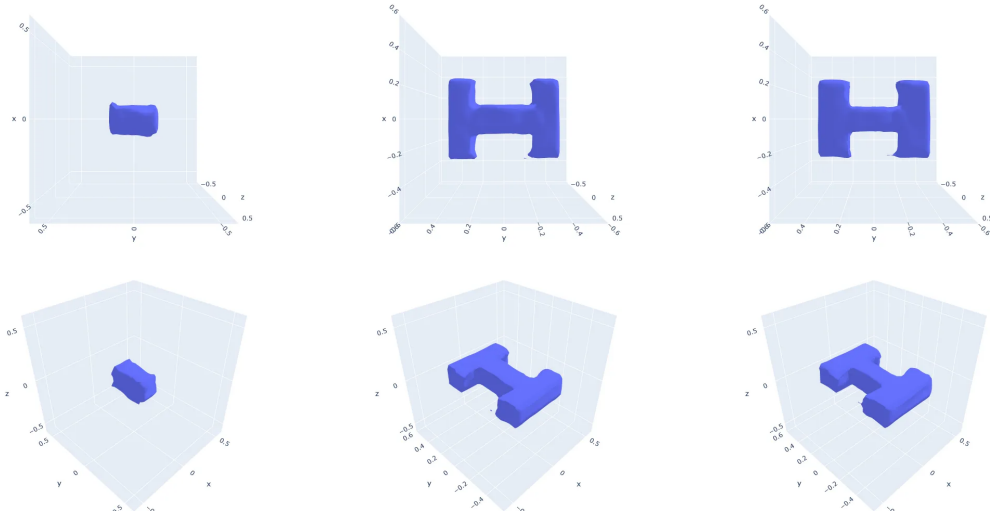


图 4.15 H 型目标曲面反演结果

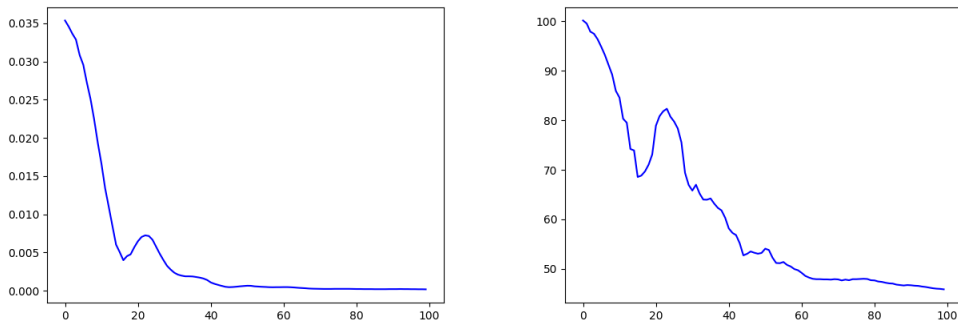


图 4.16 H 型目标曲面误差下降曲线

### 4.5.1 EIT 问题的数学描述

假设  $D \subset \mathbb{R}^3$  为包含未知夹杂物  $S$  的单连通有界区域，其中  $S$  具有  $C^2$  正则边界，并满足几何分离条件  $\text{dist}(\partial S, \partial D) > \delta > 0$ （见图 4.17）。

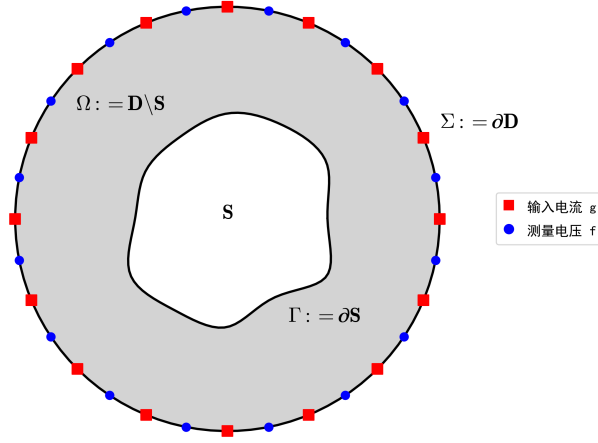


图 4.17 电阻抗成像

电阻抗成像（EIT）的正问题涉及在导电域  $\Omega$  上求解一系列椭圆型边值问题。给定满足以下条件的诺伊曼-狄利克雷数据对  $\{(g_l, f_l)\}_{l=1}^L$ ：

$$g_l \in H^{-1/2}(\Sigma), \quad \int_{\Sigma} g_l ds = 0 \quad (\text{电流守恒条件}), \quad (4.108)$$

$$f_l \in H^{1/2}(\Sigma) \quad (\text{电压测量数据}). \quad (4.109)$$

电势  $u_l$  满足的控制方程为：

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\sigma(x) \nabla u_l) = 0 & \text{在 } \Omega \text{ 内} \\ u_l = 0 & \text{在 } \Gamma \text{ 上} \\ u_l = f_l & \text{在 } \Sigma \text{ 上} \\ \partial_n u_l = g_l & \text{在 } \Sigma \text{ 上} \end{cases}, \quad l = 1, \dots, L. \quad (4.110)$$

其中  $l = 1, \dots, L$ 。根据标准椭圆理论<sup>[82]</sup>，正问题的适定性得到保证，其解满足：

$$\|u_l\|_{H^1(\Omega)} \leq C(\|f_l\|_{H^{1/2}(\Sigma)} + \|g_l\|_{H^{-1/2}(\Sigma)}). \quad (4.111)$$

EIT 问题旨在通过边界测量数据反演界面  $\Gamma := \partial S$ ，可以表示为最小化电势与测量电势之间的  $L^2$  误差：

$$J(\Gamma) := \frac{1}{2} \sum_{l=1}^L \|u_l - f_l\|_{L^2(\Sigma)}^2 \rightarrow \inf_{\Gamma \in \mathcal{A}}, \quad (4.112)$$

其中可容许界面集  $\mathcal{A}$  定义为:

$$\mathcal{A} := \{\Gamma \in C^2 : \text{dist}(\Gamma, \Sigma) > \delta, \text{Vol}(S) \leq V_{\max}\}. \quad (4.113)$$

这一数学表述与光刻中的反散射问题十分相似, 但控制方程从亥姆霍兹方程变为椭圆型方程, 测量数据从散射场变为电势, 这种相似性使我们可以将为光刻开发的算法框架直接应用于 EIT 问题。

#### 4.5.2 形状导数与算法实现

与第四章中所提算法类似的, 可以通过引入曲面的隐式神经网络表示, 将可容许集  $\mathcal{A}$  上的形状优化问题转化为潜在变量  $\{z\}$  所在空间上的有限维优化问题: 寻求潜在变量  $z$  最小化以下目标函数:

$$\mathcal{L}(z) = J(\Gamma_z) := \frac{1}{2} \sum_{l=1}^L \|u_l - f_l\|_{L^2(\Sigma)}^2. \quad (4.114)$$

与第四章中类似的, 我们同样假设容许集中的曲面是规则的4.39, 从而保证曲面的良好定义。我们给出目标函数 (4.114) 如下的梯度表达式:

**定理 4.5:** 设  $\Omega_z$  为  $C^2$  类有界域,  $\mathcal{L}(z)$  由 (4.114) 定义。那么:

$$\nabla \mathcal{L}(z) = \sum_{l=1}^L \int_{\Gamma_z} \frac{\partial u_l}{\partial n} \frac{\partial w_l}{\partial n} \frac{\nabla_x f_\theta}{\|\nabla_x f_\theta\|} ds, \quad (4.115)$$

其中伴随场  $w_l$  满足:

$$\begin{cases} \Delta w_l = 0 & \text{在 } \Omega \text{ 内,} \\ w_l = 0 & \text{在 } \Gamma_z \text{ 上,} \\ \partial_n w_l = u_l - f_l & \text{在 } \Sigma \text{ 上.} \end{cases} \quad (4.116)$$

这一定理的证明可以与定理4.2的证明类似地得到。值得注意的是, 尽管控制方程不同, EIT 问题的形状导数表达式与反散射问题的形式十分相似, 都表现为边界上伴随场与原场导数的积分形式, 这进一步证明了两类问题在数学结构上的相似性。

基于上述梯度表达式, 我们提出基于曲面隐式神经网络表示的求解 EIT 问题的算法4.2。

#### 4.5.3 数值实验

图4.18和图4.19所示的数值实验结果, 验证了所提算法在 EIT 问题中的有效性。实验针对具有弯曲边界的非凸介质进行反演, 这类结构在传统方法中往往难以准确反演。从反演结果可以观察到, 基于隐式神经网络表示的形状优化算法能够有

**算法 4.2** 基于曲面隐式神经网络表示的 EIT 算法

**输入:** 训练 DeepSDF 所需要的曲面数据。电压测量数据  $\{f_l\}, l = 1, 2, \dots, L$ 。

**初始化:** 潜在变量  $z_0$ 。

根据 (4.36) 训练 DeepSDF 神经网络  $f_\theta(z, x)$ 。

**for**  $k = 0, 1, 2, \dots, N$  **do**

通过移动立方体算法产生相应于  $z_k$  的曲面  $\Gamma_k = \{x | f_\theta(z_k, x) = 0\}$ 。

在  $\Omega_k$  上求解正问题 (4.110) 得  $u_k$ 。

求解伴随问题 (4.116) 得  $w_k$ 。

使用 (4.115) 计算梯度  $\nabla \mathcal{L}(z_k)$ 。

使用 Adam 方法更新潜在变量  $z_k$ 。

**end for**

**返回:** 反演界面  $\Gamma_N$ 。

效捕捉目标结构的几何特征，包括其非凸性和曲率变化。目标泛函的收敛曲线显示了良好的收敛性能，在约 20 次迭代后快速达到稳定状态，且收敛过程平稳；同时，指示子误差也呈现出显著的单调下降趋势。这一结果表明，我们提出的算法框架具有良好的通用性，不仅适用于反散射问题，在求解其他类型的形状优化问题时也表现出优异的性能。



图 4.18 EIT 反演结果

这一实验结果具有双重意义：一方面，它验证了本章提出的算法框架具有良好的通用性，能够有效处理不同物理背景下的反问题；另一方面，这种通用性也为第五章将反散射算法应用于三维掩模反演光刻问题提供了理论支持。事实上，EIT 问题的成功应用表明，我们的算法能够适应不同的控制方程和测量数据类型，这正是将反散射方法扩展到光刻领域的关键基础。

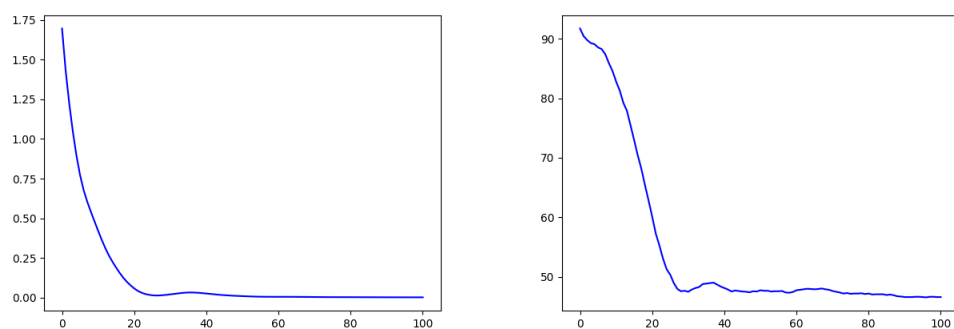


图 4.19 EIT 误差下降曲线

## 4.6 本章小结

本章针对三维障碍物反散射问题，提出了一种基于隐式神经网络表示的形状优化算法。该方法将曲面隐式神经网络表示引入到传统的形状优化框架中，通过将曲面优化问题转化为在潜在向量空间中的有限维优化问题，有效降低了问题的维度并提高了算法的稳定性。

在数值实验方面，通过多组算例验证了算法的有效性和鲁棒性。实验结果表明，该算法不仅能够有效处理标准数据的反演问题，在面对带噪声数据、反向散射数据以及无相位数据等复杂情况时也表现出良好的性能。特别是在处理高达 40% 噪声水平的数据时，算法仍能保持稳定的反演效果。

此外，本章还探索了该算法框架在其他形状优化问题中的应用潜力，以电阻抗成像问题为例，说明了算法的通用性。

## 第 5 章 结合反散射的三维掩模反演光刻算法

传统的反演光刻技术主要是在薄掩模近似的假设下进行的，本章将这一技术推广到了对三维掩模的优化。三维掩模光刻成像基于散射问题的近场数据，本章首先介绍求解带有近场数据的反散射算法，然后将散射过程纳入到反演光刻技术的模型中，提出了基于曲面神经网络表示的三维掩模反演光刻算法。

### 5.1 近场数据反散射问题的隐式神经网络形状优化算法

本节沿用4.1中的设置， $\Omega$  为散射区域， $u$  为亥姆霍兹方程（4.2）的解。假设测量点集  $\{x_i\}_{i=1}^M$  满足  $\overline{\Omega} \subset B_R$  且  $x_i \in \mathbb{R}^3 \setminus \overline{B_R}$ ,  $i = 1, 2, \dots$ ，近场数据反散射问题的目标函数被设置为：

$$J(\Gamma) := \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M |E(x_i) - d_i|^2, \quad (5.1)$$

其中近场算子  $E$  定义为：

$$E(\Gamma)(x) = \int_{\partial B_R} \Phi(x, y) \frac{\partial u}{\partial \nu}(y) - u(y) \frac{\partial \Phi(x, y)}{\partial \nu(y)} ds(y), \quad x \in \mathbb{R}^3 \setminus \overline{B_R}, \quad (5.2)$$

$\Phi$  为亥姆霍兹方程的基本解。

对于这一形状优化问题，我们给出如下的形状导数表达式：

**定理 5.1：** 目标函数（5.1）的形状导数为：

$$dJ(\Gamma; V) = \int_{\partial D} \frac{\partial u}{\partial \nu} \frac{\partial w}{\partial \nu} V \cdot n ds, \quad (5.3)$$

其中伴随场  $w = w^i + w^s$  满足：

$$\begin{cases} \Delta w^s + k^2 w^s = 0, & \text{在 } \mathbb{R}^3 \setminus \overline{D} \text{ 内,} \\ w^s = -w^i, & \text{在 } \partial D \text{ 上,} \\ w^s \text{ 满足辐射条件.} \end{cases} \quad (5.4)$$

入射场定义为：

$$w^i(y) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \overline{(E(x_i) - d_i)} \Phi(x_i, y). \quad (5.5)$$

**证明** 直接计算可以得到：

$$dJ(\Gamma; V) = \operatorname{Re} \left\{ \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \overline{(E(x_i) - d_i)} E'(x_i) \right\}, \quad (5.6)$$

其中

$$E'(\Gamma)(x) = \int_{\partial B_R} \Phi(x, y) \frac{\partial u'}{\partial \nu}(y) - u'(y) \frac{\partial \Phi(x, y)}{\partial \nu(y)} ds(y), \quad x \in \mathbb{R}^3 \setminus \overline{B_R}. \quad (5.7)$$

$u' \in H_{\text{loc}}^1(\mathbb{R}^3 \setminus \overline{D})$  满足外部边值问题:

$$\begin{cases} \Delta u' + k^2 u' = 0, & \text{在 } \mathbb{R}^3 \setminus \overline{D} \text{ 内,} \\ u' = -\frac{\partial u}{\partial \nu} V \cdot n, & \text{在 } \partial D \text{ 上,} \\ u' \text{ 满足辐射条件.} \end{cases} \quad (5.8)$$

将 (5.2) 代入 (5.6) 得到:

$$\begin{aligned} dJ(\Gamma; V) := \operatorname{Re} \left\{ \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \overline{(E(x_i) - d_i)} \right. \\ \left. \times \int_{\partial B_R} \left[ \Phi(x_i, y) \frac{\partial u'}{\partial \nu}(y) - u'(y) \frac{\partial \Phi(x_i, y)}{\partial \nu(y)} \right] ds(y) \right\}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

应用  $u'$  和  $\Phi(x_i, \cdot)$  在  $B_R \setminus \overline{D}$  上的格林定理可得:

$$\begin{aligned} \int_{\partial B_R} \left[ \Phi(x_i, y) \frac{\partial u'}{\partial \nu}(y) - u'(y) \frac{\partial \Phi(x_i, y)}{\partial \nu(y)} \right] ds(y) \\ = \int_{\partial D} \left[ \Phi(x_i, y) \frac{\partial u'}{\partial \nu}(y) - u'(y) \frac{\partial \Phi(x_i, y)}{\partial \nu(y)} \right] ds(y), \end{aligned} \quad (5.10)$$

代入  $w^i$  的定义推出:

$$dJ(\Gamma; V) = \operatorname{Re} \left\{ \int_{\partial D} w^i(y) \frac{\partial u'}{\partial \nu}(y) - u'(y) \frac{\partial w^i}{\partial \nu}(y) ds(y) \right\}. \quad (5.11)$$

应用  $u'$  和  $w^s$  在  $K_R \setminus \overline{D}$  上的格林定理得到:

$$\int_{\partial K_R} \left\{ u' \frac{\partial w^s}{\partial \nu} - \frac{\partial u'}{\partial \nu} w^s \right\} ds = \int_{\partial D} \left\{ u' \frac{\partial w^s}{\partial \nu} - \frac{\partial u'}{\partial \nu} w^s \right\} ds. \quad (5.12)$$

令  $R \rightarrow \infty$  可得:

$$\int_{\partial D} \left\{ u' \frac{\partial w^s}{\partial \nu} - w^s \frac{\partial u'}{\partial \nu} \right\} ds = 0. \quad (5.13)$$

结合 (5.13) 以及在  $\partial D$  上  $w^i + w^s = 0$ , 可以得到:

$$\begin{aligned} dJ(\Gamma; V) &= \operatorname{Re} \left\{ \int_{\partial D} -w^s(y) \frac{\partial u'}{\partial \nu}(y) - u'(y) \frac{\partial w^i}{\partial \nu}(y) ds(y) \right\} \\ &= \operatorname{Re} \left\{ \int_{\partial D} -u'(y) \frac{\partial w^s}{\partial \nu}(y) - u'(y) \frac{\partial w^i}{\partial \nu}(y) ds(y) \right\} \\ &= \operatorname{Re} \left\{ \int_{\partial D} -u'(y) \frac{\partial w}{\partial \nu}(y) ds(y) \right\} \\ &= \operatorname{Re} \left\{ \int_{\partial D} \frac{\partial u}{\partial \nu} \frac{\partial w}{\partial \nu} V \cdot n ds \right\}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

在得到形状导数的表达式之后，与第四章中求解带有远场数据的反散射算法类似的，我们可以将形状优化问题 (5.1) 转化为潜在向量空间上的优化问题：

$$\min_z \mathcal{L}(z) = J(\Gamma_z) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M |E(x_i) - d_i|^2, \quad (5.15)$$

并且可以给出目标函数  $\mathcal{L}(z)$  的梯度表达式：

$$\nabla \mathcal{L}(z) = -\text{Re} \int_{\Gamma_z} \frac{\partial u}{\partial v} \frac{\partial w}{\partial v} \frac{\nabla_z f_\theta}{\|\nabla_x f_\theta\|} ds, \quad (5.16)$$

其中  $w$  满足伴随方程 (5.4)。据此可以给出求解带有近场数据反散射问题的算法 5.1。

---

### 算法 5.1 基于曲面隐式神经网络表示的近场反散射算法

---

**输入：** 用于训练 DeepSDF 的曲面数据。近场数据，波数  $k$ ，方向  $\{d_i\}_{i=1}^L$ 。

**初始化：** 初始潜在向量  $z_0$ 。

根据 (4.36) 训练 DeepSDF 神经网络  $f_\theta(z, x)$ 。

**for**  $n = 0, 1, 2, \dots, N$  **do**

    通过移动立方体算法产生相应于  $z_n$  的曲面  $\Gamma_n = \{x | f_\theta(z_n, x) = 0\}$ 。

    通过求解 (4.2) 计算  $u_i^n$ 。

    通过求解 (5.4) 计算  $w_i^n$ 。

    通过 (5.16) 计算梯度  $\nabla \mathcal{L}(z_n)$ 。

    使用 Adam 方法更新潜在变量  $z_n$ 。

**end for**

**返回：** 对应于  $z_{N+1}$  的曲面。

---

#### 5.1.1 近场反散射数值试验

在数值试验中，我们采用与第四章相同的神经网络参数设置和散射参数设置。入射场设置为一个入射方向 (0,0,1)。近场数据的接收位置设置为在半径为 1 的球面上均匀分布的 100 个观测点。

图 5.1 和图 5.2 展示了使用近场数据进行反演的实验结果，验证了算法对于 L 型曲面结构的重建能力。从重建结果可以观察到，算法能够准确捕捉 L 型结构的几何特征，目标泛函呈现出稳定的收敛趋势，在约 60 次迭代后达到稳定状态；同时，指示子误差的单调下降也验证了重建结果的可靠性。

图 5.3 和图 5.4 展示了对 H 型结构的反演结果。尽管该结构具有更复杂的几何特征，算法仍表现出良好的重建性能，目标泛函在约 80 次迭代后趋于稳定，指示子误差也呈现出稳定的收敛趋势。这两组反演实验表明，所提出的基于隐式神经网络表示的形状优化方法不仅适用于远场数据重建，在处理近场测量数据时也具有良好的性能。

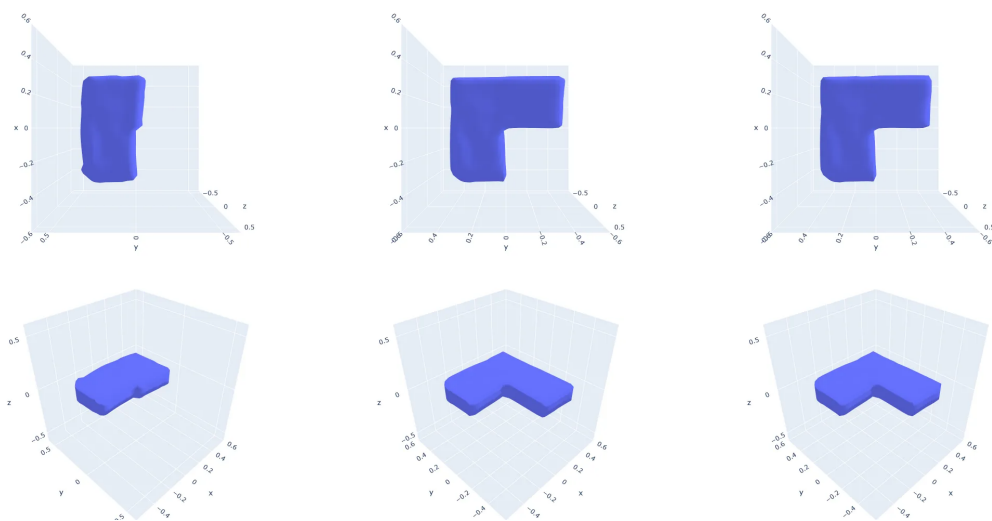


图 5.1 L 型近场反演结果

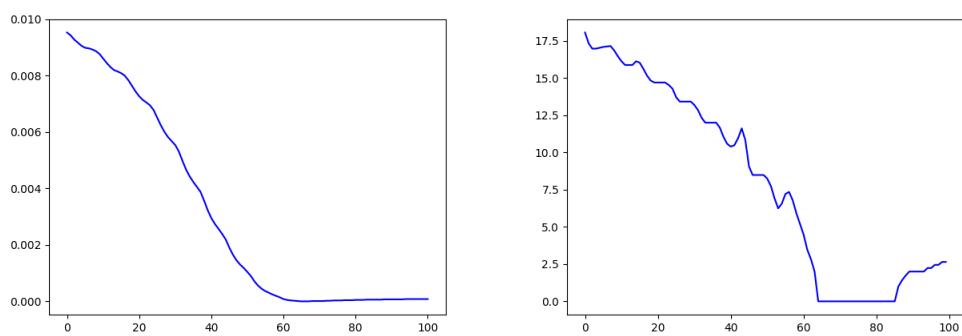


图 5.2 L 型近场误差下降曲线

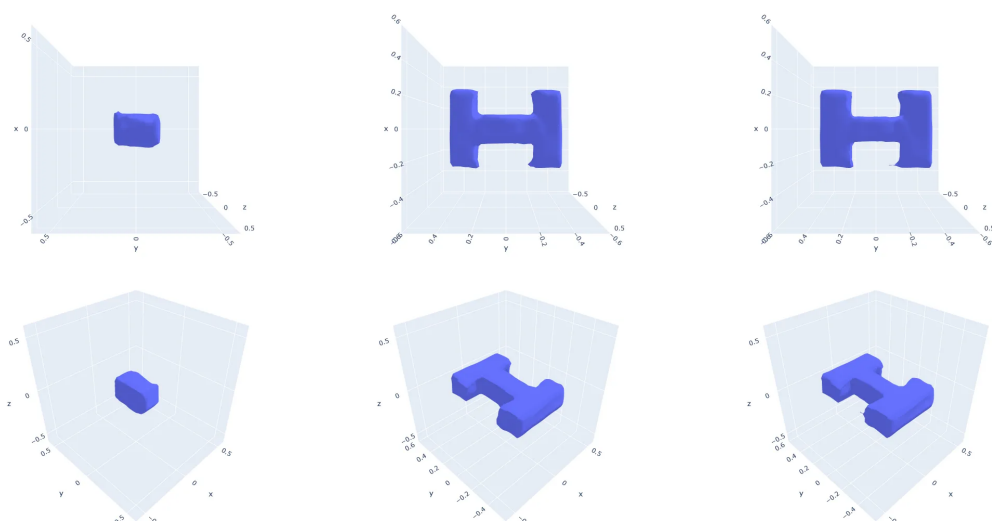


图 5.3 H 型近场反演结果

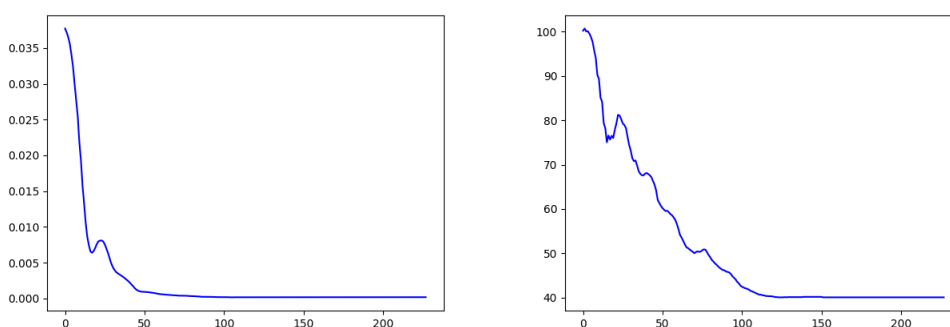


图 5.4 H 型近场误差下降曲线

对比使用远场数据和近场数据的反演结果图4.3和图5.1，我们在实验中观察到近场数据重建结果在几何细节上精确度更高，尤其是在 L 形物体的边缘和转角处，重建边界也更为锐利，内角更接近理想直角。值得注意的是，在无界散射体（如半空间问题或表面散射）情况下，已有研究工作表明近场数据相比远场数据包含更丰富的倏逝波信息，能够提供超出衍射极限的分辨率。基于我们的实验观察，我们推测近场测量可能同样捕获了更丰富的散射信息，为空间分辨率和边界特征重建提供了优势。然而，对于本文研究的有界散射体情况，近场成像优势的具体理论机制及其是否与特定波场成分相关，仍需在未来研究中进行更深入的探究。

## 5.2 三维掩模反演光刻算法

在将反散射过程纳入反演光刻算法时，一种可行的方案是采用两步法：首先利用第三章的薄掩模近似方法反演得到掩模后的近场分布作为目标数据，然后基于本章第一节的近场反散射算法，从这个目标近场数据反演最优的掩模形状。然而，这种方法可能会由于分步优化导致次优解。因此，本节采用另一种方式，将反散射过程与反演光刻直接组合为一个统一的模型。如图5.5所示，入射光经过掩模时发生散射形成近场分布  $E(\Gamma)$ ，随后，近场继续传播并经过光刻系统成像到晶圆平面上。将这两个物理过程统一建模，可以更准确地描述从掩模到晶圆的完整光学过程，有助于获得更优的掩模设计。

为了计算方便，区别于第一章中的成像公式 (1.19)，本章采用负显影成像模型<sup>[83]</sup>，这一成像模型可以表示为：

$$I = 1 - \text{sig}(|H * E|^2). \quad (5.17)$$

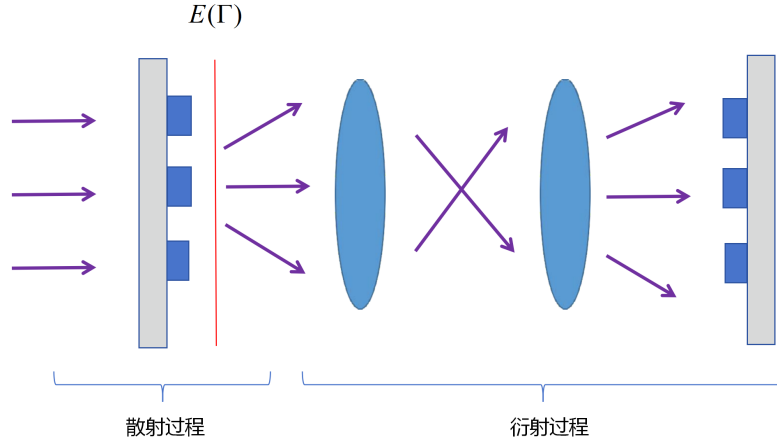


图 5.5 三维反演光刻模型

假设目标掩模为  $I^t$ ，三维掩模反演光刻问题可以表示为如下的形状优化问题：

$$\begin{aligned} \min_{\Gamma \in \mathcal{A}} \quad & J(\Gamma) := \frac{1}{2} \int |\text{sig}(|H * E(\Gamma)|^2) - 1 + I^t|^2 dx \\ \text{s.t.} \quad & \begin{cases} \Delta u + k^2 u = 0 & \text{在 } \mathbb{R}^3 \setminus \Omega \text{ 中,} \\ u = 0 & \text{在 } \Gamma \text{ 上,} \\ \frac{\partial u^s}{\partial r} - iku^s = o(r^{-1}) & \text{当 } r \rightarrow \infty \text{ 时} \end{cases} \end{aligned} \quad (5.18)$$

其中积分是在晶圆面上进行的， $E$  为 (5.2) 中定义的近场算子。

**定理 5.2:** 假设容许集  $\mathcal{A}$  满足以下条件：

1. 存在固定的  $C^2$  参考界面  $\Gamma_0$ ，使得  $\mathcal{A}$  中的每个界面  $\Gamma$  可以表示为：

$$\Gamma = \{x + h(x) : x \in \Gamma_0\} \quad (5.19)$$

其中  $h$  是定义在  $\Gamma_0$  上的  $C^2$  向量场。

2. **一致有界性:** 存在常数  $M > 0$ ，使得对于上述表示中的所有向量场  $h$ ，有

$$\|h\|_{C^2(\Gamma_0)} \leq M. \quad (5.20)$$

3. **闭包性:** 若  $\{\Gamma_n\} \subset \mathcal{A}$  且  $\Gamma_n$  的相应向量场  $h_n$  在  $C^2(\Gamma_0)$  范数下收敛到  $h$ ，则由  $h$  确定的界面  $\Gamma_h = \{x + h(x) : x \in \Gamma_0\}$  也属于  $\mathcal{A}$ 。

4. **有限值条件:** 存在界面  $\Gamma \in \mathcal{A}$  使得  $J(\Gamma) < \infty$ 。

那么在  $\mathcal{A}$  中存在界面  $\tilde{\Gamma}$  使泛函  $J$  取到最小值。

**证明** 由有限值条件， $J$  在  $\mathcal{A}$  中是有下界的（注意  $J$  非负）。根据下确界定义，存在界面序列  $\{\Gamma_n\} \subset \mathcal{A}$  满足：

$$\lim_{n \rightarrow \infty} J(\Gamma_n) = \inf_{\Gamma \in \mathcal{A}} J(\Gamma) =: m \geq 0. \quad (5.21)$$

根据条件 1，每个  $\Gamma_n$  可以表示为  $\Gamma_n = \{x + h_n(x) : x \in \Gamma_0\}$ ，其中  $h_n \in C^2(\Gamma_0)$

且  $\|h_n\|_{C^2(\Gamma_0)} \leq M$ 。由 Arzelà-Ascoli 定理,  $C^2(\Gamma_0)$  中有界集的闭包是紧的, 因此存在子列  $\{h_{n_k}\}$  和向量场  $h^* \in C^2(\Gamma_0)$ , 使得  $h_{n_k} \rightarrow h^*$  在  $C^2(\Gamma_0)$  范数下收敛。

根据条件 3 (闭包性), 界面  $\tilde{\Gamma} = \{x + h^*(x) : x \in \Gamma_0\}$  也属于  $\mathcal{A}$ 。

Hettlich<sup>[65]</sup> 在分析远场算子的 Fréchet 可微性时指出, 散射场连续依赖于边界, 对于我们的情况, 这意味着当向量场序列  $h_{n_k} \rightarrow h^*$  在  $C^2$  范数下收敛时, 相应的散射场解满足:

$$\|u_{n_k} - u_{\tilde{\Gamma}}\|_{H^1(B_R \setminus \bar{\Omega})} \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty. \quad (5.22)$$

根据迹定理, 解在  $\partial B_R$  上的限制满足:

$$\|u_{n_k}|_{\partial B_R} - u_{\tilde{\Gamma}}|_{\partial B_R}\|_{H^{1/2}(\partial B_R)} \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty, \quad (5.23)$$

以及

$$\left\| \frac{\partial u_{n_k}}{\partial \nu} |_{\partial B_R} - \frac{\partial u_{\tilde{\Gamma}}}{\partial \nu} |_{\partial B_R} \right\|_{H^{-1/2}(\partial B_R)} \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty. \quad (5.24)$$

根据近场积分表示公式 (5.2), 近场算子  $E$  可表示为  $\partial B_R$  上解及其法向导数的连续映射。因此, 我们有:

$$|E(\Gamma_{n_k})(x) - E(\tilde{\Gamma})(x)| \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty, \quad (5.25)$$

其中  $x$  表示近场数据测量点。

由于成像模型中的卷积算子  $H$  是有界线性算子, 且  $sig$  函数是连续的, 根据复合函数的连续性可得:

$$\int |sig(|H * E(\Gamma_{n_k})|^2) - sig(|H * E(\tilde{\Gamma})|^2)|^2 dx \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty. \quad (5.26)$$

应用 Fatou 引理到目标函数:

$$\begin{aligned} J(\tilde{\Gamma}) &= \frac{1}{2} \int |sig(|H * E(\tilde{\Gamma})|^2) - 1 + I^t|^2 dx \\ &\leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \int |sig(|H * E(\Gamma_{n_k})|^2) - 1 + I^t|^2 dx \\ &= \liminf_{k \rightarrow \infty} J(\Gamma_{n_k}) = m. \end{aligned} \quad (5.27)$$

由下确界定义,  $J(\tilde{\Gamma}) \geq m$ , 因此  $J(\tilde{\Gamma}) = m$ , 即  $\tilde{\Gamma}$  使泛函  $J$  取到最小值。 ■

我们给出形状优化问题 (5.18) 如下的形状导数表达式:

**定理 5.3:** 假设目标泛函  $J$  由 (5.18) 定义, 那么:

$$dJ(\Gamma; V) = \operatorname{Re} \int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial \nu} \frac{\partial w}{\partial \nu} V \cdot n ds, \quad (5.28)$$

其中伴随场  $w = w^i + w^s$  满足:

$$\begin{cases} \Delta w^s + k^2 w^s = 0 & \text{在 } \mathbb{R}^3 \setminus \overline{D} \text{ 内,} \\ w^s = -w^i & \text{在 } \Gamma \text{ 上,} \\ w^s \text{ 满足辐射条件,} \end{cases} \quad (5.29)$$

入射场定义为:

$$\begin{aligned} w^i(y) = & \int \left[ \text{sig}(|H * E|^2) + I^t - 1 \right] \cdot \text{sig}(|H * E|^2) \cdot \left[ 1 - \text{sig}(|H * E|^2) \right] \\ & \times 2 \text{Re} \left[ \overline{H * E} (H^\dagger * \Phi(x, y)) \right] dx, \quad y \in \Gamma. \end{aligned} \quad (5.30)$$

其中  $\dagger$  表示矩阵的共轭翻转操作。

**证明** 直接计算可以得到:

$$\begin{aligned} dJ(\Gamma; V) := & \int \left( \text{sig}(|H * E|^2) + I^t - 1 \right) \cdot \text{sig}(|H * E|^2) \\ & \cdot \left( 1 - \text{sig}(|H * E|^2) \right) \cdot 2 \text{Re} \left[ \overline{H * E} \right. \\ & \left. \cdot (H^\dagger * U') \right] dx, \end{aligned} \quad (5.31)$$

其中

$$U'(x) = \int_{\partial B_R} \Phi(x, y) \frac{\partial u'}{\partial \nu}(y) - u'(y) \frac{\partial \Phi(x, y)}{\partial \nu(y)} ds(y), \quad x \in \mathbb{R}^3 \setminus \overline{B_R}. \quad (5.32)$$

将 (5.32) 代入 (5.31), 接下来与定理5.1的证明类似的, 可得 (5.28)。 ■

在得到形状导数的表达式之后, 与前面类似的, 我们可以将形状优化问题 (5.18) 转化为潜在向量空间上的优化问题:

$$\min_z \mathcal{L}(z) = J(\Gamma(z)) = \frac{1}{2} \int |\text{sig}(|H * E(\Gamma)|^2) - 1 + I^t|^2 dx, \quad (5.33)$$

并且可以给出目标函数  $\mathcal{L}(z)$  的梯度表达式:

$$\nabla \mathcal{L}(z) = -\text{Re} \int_{\Gamma_z} \frac{\partial u}{\partial \nu} \frac{\partial w}{\partial \nu} \frac{\nabla_z f_\theta}{\|\nabla_x f_\theta\|} ds, \quad (5.34)$$

其中  $w$  满足伴随方程 (5.29)。据此可以给出如下基于曲面隐式神经网络表示的三维掩模反演光刻算法5.2。

### 5.3 数值实验

这部分数值实验的散射参数和神经网络参数沿用第一节 的设置, 光刻系统的参数设置则与第三章中数值算例部分保持一致。三维掩模的厚度设置为 0.2, 近场数据采集位置位于掩模板后 0.05 处, 在  $x$  和  $y$  方向 -1 到 1 的范围内均匀分布  $60 \times 60$

**算法 5.2** 基于曲面隐式神经网络表示的三维掩模反演光刻算法

**输入:** 训练 DeepSDF 所需要的曲面数据。晶圆上的目标像  $I'$ 。

**初始化参数:** 初始潜在向量  $z_0$ 。

根据 (4.36) 训练 DeepSDF 神经网络  $f_\theta(z, x)$ 。

**for**  $n = 0, 1, 2, \dots, N$  **do**

通过移动立方体算法产生相应于  $z_n$  的曲面  $\Gamma_n = \{x | f_\theta(z_n, x) = 0\}$ 。

求解状态方程 (4.2), 得到近场数据  $E^n$ 。

计算  $E^n$  在晶圆上所成的像  $I_n$ 。

求解伴随方程 (5.29)。

根据表达式 (5.34) 得到梯度  $\nabla \mathcal{L}(z_n)$ 。

使用 Adam 方法更新潜在变量:  $z_{n+1} \leftarrow z_n$ 。

**end for**

**返回:** 对应于  $z_{N+1}$  的曲面。

个观测点。

在传统的反演光刻算法中, 初始掩模通常设计为与目标图案形状相近, 以加快优化收敛。然而, 为了充分验证算法的性能和鲁棒性, 本实验特意选择了一个与目标图案 (T 型结构) 差异较大的简单矩形作为初始掩模。实验结果如图 5.6 所示。从图 (a)-(d) 可以看出, 初始状态下的三维掩模为一个简单的矩形结构, 其近场分布呈现出典型的衍射图样, 光刻成像结果与目标图案有较大偏差, 这反映在较大的边缘误差上。经过优化后, 如图 (e)-(h) 所示, 掩模逐渐演化出 T 型结构的特征, 近场分布也随之改变, 呈现出更复杂的干涉图样。最终的光刻成像与目标图案 (i) 有很好的匹配度, 边缘误差显著减小。从误差收敛曲线 (j) 可以观察到, 尽管初始掩模与目标差异较大, 算法仍表现出良好的收敛性, 在约 100 次迭代后趋于稳定。这一结果表明, 所提出的算法具有较强的优化能力, 即使从一个简单的初始构型出发, 也能够准确重建出复杂的目标结构, 这为实际应用中的掩模设计提供了更大的灵活性。

第二个数值算例的实验结果如图 5.7 所示。从图 (a)-(d) 可以看出, 初始三维掩模为一个简单的矩形结构, 其近场分布呈现出规则的衍射环状图样, 初始光刻成像为一个椭圆形, 与目标 H 型图案有显著差异。经过优化后, 如图 (e)-(h) 所示, 掩模形状逐渐演化出 H 型结构的特征, 近场分布也发生了显著变化, 形成了具有双中心的复杂干涉模式, 这种分布有利于形成目标图案所需的光强分布。最终的光刻成像与目标图案 (i) 达到了良好的匹配, 虽然在一些细节处仍存在小幅偏差, 但整体结构特征已被很好地重现。从误差收敛曲线 (j) 可以观察到, 优化过程经历了多个阶段: 前 50 次迭代快速下降, 随后在 150-200 次迭代间出现小幅波动, 最终在 300 次迭代后趋于稳定。这种收敛行为表明, 即使从一个简单的初始构型出发, 算法也能够通过逐步调整掩模形状, 最终实现对复杂目标结构的重建。这一结果

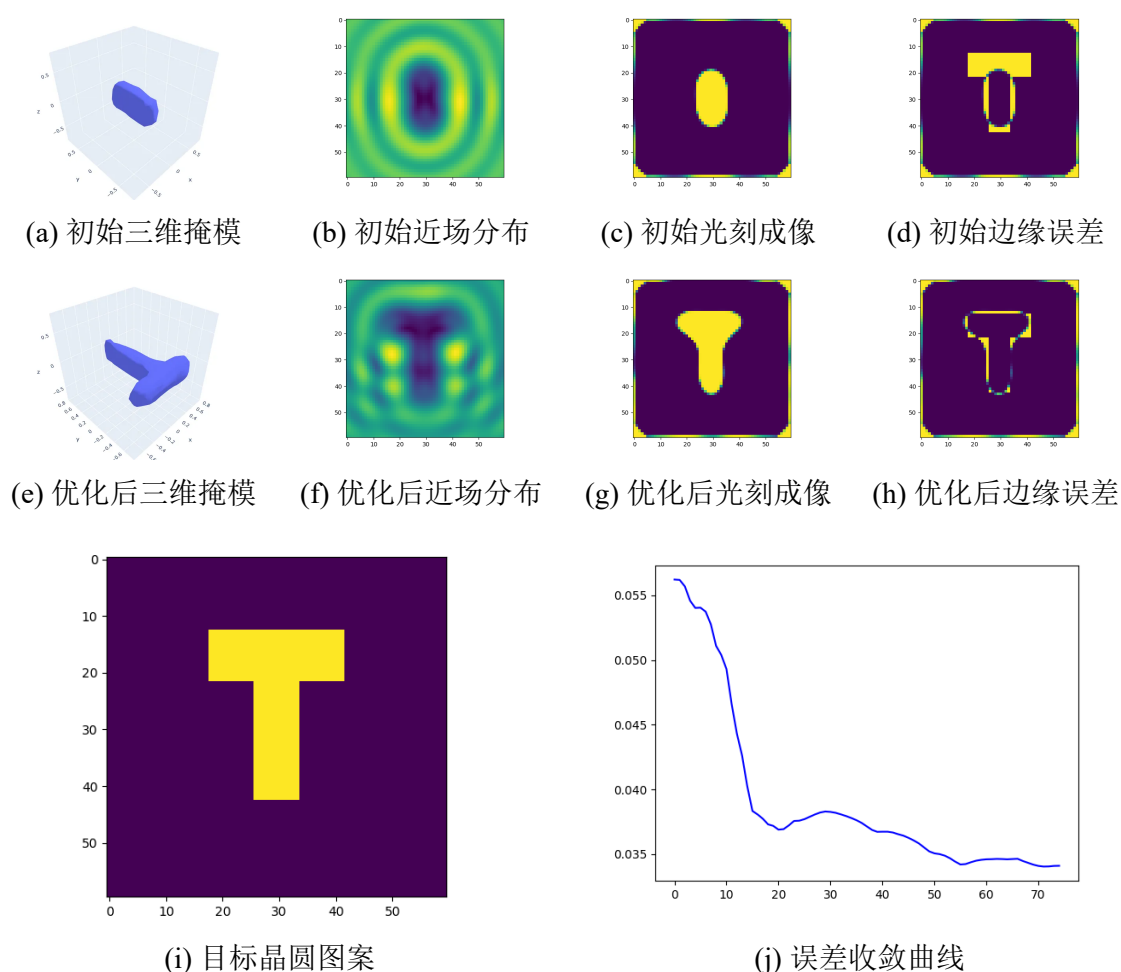


图 5.6 三维 T 型掩模反演光刻优化结果

不仅验证了算法的有效性，也说明该方法在实际应用中具有较强的适应性，不会过分依赖初始掩模的选择。

图5.8展示了采用与目标形状相似的初始掩模进行优化的结果，这是反演光刻技术中常用的策略。从图 (a)-(d) 可以观察到，尽管初始掩模与目标图案形状相似，但由于三维结构的影响，其光刻成像结果仍与目标图案存在明显差异。特别是在图 (c) 中可以看到，初始光刻成像出现了严重的畸变，这反映了三维效应对成像质量的显著影响。经过优化后，如图 (e)-(h) 所示，算法通过精细调整掩模的三维结构，使得最终的光刻成像更好地匹配了目标图案。从误差收敛曲线 (j) 可以看出，由于选择了较好的初始值，优化过程在前 5 次迭代就实现了快速收敛，随后逐步微调至最优解，整体收敛速度明显快于前两个算例。这一结果表明，当初始掩模选择合适时，算法能够更快地收敛到理想解。然而，结合前两个算例的结果，我们也证实了该算法在初始值选择上具有较大的灵活性，这为实际应用中的掩模设计提供了更多可能性。

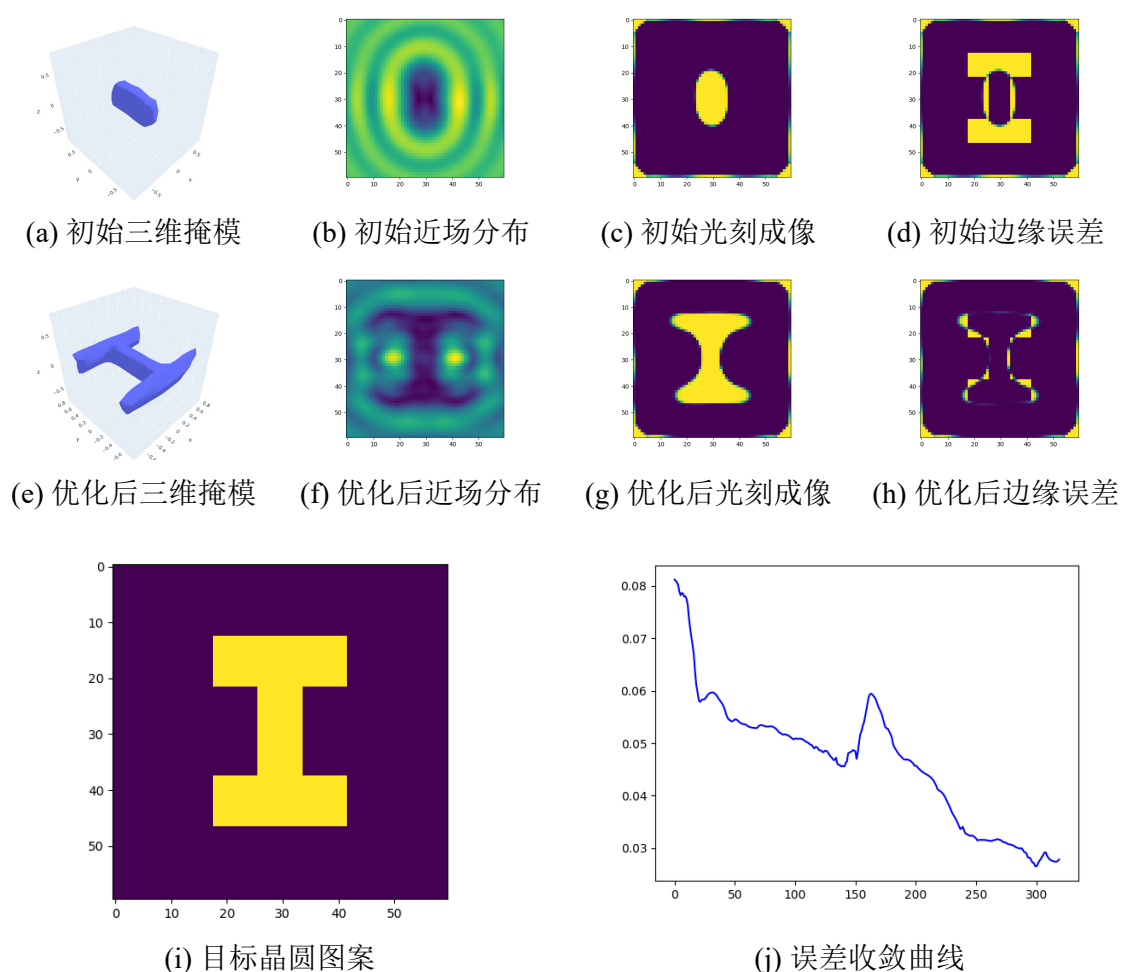


图 5.7 三维 H 型掩模反演光刻优化结果

值得指出的是，在本文的三维掩模表示中，数据集集中的掩模厚度是固定的，这在一定程度上简化了制造工艺的复杂性。虽然传统掩模制造技术在处理如图5.7(e)所示的复杂三维结构时存在一定挑战，但微纳制造领域的技术正在快速革新。双光子聚合技术已能实现 100nm 量级的打印精度<sup>[84]</sup>，原子层沉积技术提供了原子级的厚度控制<sup>[85]</sup>，而聚焦离子束加工则在精细三维微结构塑造方面展现出巨大潜力<sup>[86]</sup>。先进的多层光刻技术<sup>[87]</sup>和灰度光刻工艺<sup>[1]</sup>也为三维掩模制造提供了可行路径。

计算光刻领域的发展正在改变“先设计后制造”的传统范式，通过在算法设计阶段考虑制造约束，可以实现设计与制造的协同优化。本章提出的优化方法已在理论上展示了三维掩模的优越性，为光刻技术的下一代发展提供了清晰指引。从长远来看，随着新型制造技术与计算方法的结合，这些理论模型将逐步从实验室概念转变为实际工艺。半导体技术的历史表明，理论突破往往领先于工艺实现，这种理论引领实践的模式正是推动半导体技术持续六十余年指数级发展的核心动力，

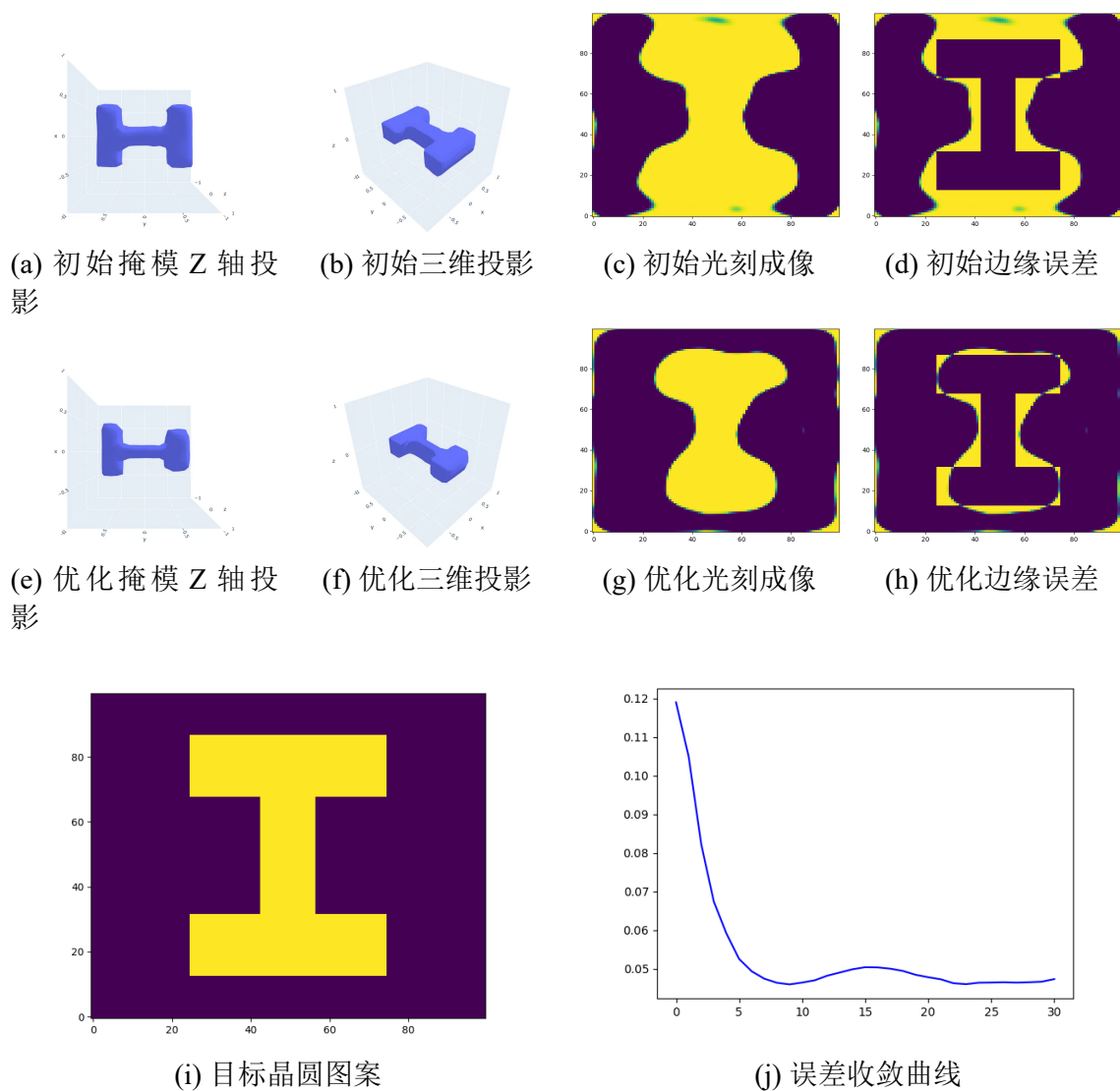


图 5.8 三维掩模反演光刻优化结果

也是本研究工作潜在价值的重要体现。

## 5.4 本章小结

本章首先研究了基于近场数据的反散射问题，提出了一种基于曲面隐式神经网络表示的近场反散射算法。通过对 L 型和 H 型结构的重建实验，验证了该算法在处理近场数据时具有良好的性能。实验结果表明，相比于远场数据的重建结果，近场数据能够捕捉到更多的细节信息，这与理论预期相符，因为近场数据包含了倏逝波信息。算法在两种不同复杂度的目标结构上都展现出良好的收敛性，L 型结构在约 60 次迭代后达到稳定，而更复杂的 H 型结构在约 80 次迭代后趋于稳定。

在此基础上，通过将散射问题纳入到反演光刻问题的模型中，提出了一种基于曲面隐式神经网络表示的三维掩模反演光刻算法。该算法将散射过程与光刻成像过程统一建模，更准确地描述了从掩模到晶圆的完整光学过程。数值实验通过三组不同的算例，系统地验证了算法的性能：首先采用简单矩形作为初始值，成功重建出 T 型结构；然后同样从简单初始构型出发，实现了对更复杂 H 型结构的优化；最后采用与目标相似的初始掩模，展示了算法在传统策略下的快速收敛特性。实验结果表明，该算法不仅能有效优化掩模的三维形貌，减轻光刻失真，而且在初始值选择上具有较大的灵活性。这些特性使得该方法在实际应用中具有更强的适应性，为反演光刻技术向更小尺寸发展提供了新的研究思路。

## 第6章 总结与展望

### 6.1 工作总结

本文比较系统地发展了反演光刻算法。主要工作可以概括为以下三个方面：

首先，针对薄掩模近似下的反演光刻问题，本文引入 TV 正则项来处理反演光刻问题的不稳定性并锐化掩模图案。为了求解带有 TV 正则项的优化问题，本文提出了一种基于 ADMM 框架的求解算法。该算法的主要创新点在于在 ADMM 子问题中直接使用截断函数来代替 sigmoid 函数，避免了梯度下降中对 sigmoid 函数梯度的复杂计算。通过这种替换，我们发现子问题具有闭式解，这大大提高了算法效率。此外，本文严格证明了所提算法的收敛性，并通过启发式方法对算法参数进行了优化选择。数值实验结果证实了所提算法的有效性。

其次，为了高效求解障碍物反散射问题，本文提出了一种基于曲面隐式神经网络表示的形状优化算法。该方法的核心创新在于将曲面隐式神经网络表示引入到反散射问题的求解中，从而将无穷维的形状优化问题转化为有限维空间上的优化问题，从而显著降低了问题的复杂度。在算法实现上，我们推导了目标函数关于潜在变量的导数表达式。通过建立目标函数梯度的 Lipschitz 性质，我们对算法的收敛性进行了理论分析。数值实验表明该方法具有优异的重建性能。

最后，本文通过将散射过程纳入到反演光刻问题的模型中，提出了一种基于曲面隐式神经网络表示的三维掩模反演光刻算法。该算法首先利用隐式神经网络对三维掩模进行参数化表示，将优化问题转化为对潜在变量的优化，大大降低了优化变量的维度。通过统一建模散射过程和光刻成像过程，算法能够更准确地描述从掩模到晶圆的完整光学过程。数值实验表明，该算法不仅能有效优化掩模的三维形貌，而且在初始值选择上具有较大的灵活性。这些特性使得该方法在实际工程中的三维掩模设计问题上具有良好的应用前景，为反演光刻技术向更小尺寸发展提供了新的解决思路。

### 6.2 未来展望

基于本文的研究工作，我们认为以下几个方向值得进一步探索：

- **算法的自适应与并行化：**自适应方法是近年来的热门研究方向。本文提出的带有截断函数的 ADMM 算法以及基于曲面隐式神经网络表示的形状优化算法的特点使得其非常适合实现自适应和并行化。如何在保证算法收敛性的前

提下实现高效的自适应策略，以及如何充分利用现代计算架构实现大规模并行计算，是很有价值的研究方向。

- **数据集构建与工业应用：**构建一个更贴合实际的三维掩模数据集，对于推动本文提出的算法在工业界的实际应用具有重要意义。这包括收集和整理真实的掩模设计数据，建立标准的测试基准，以及开发面向工业应用的软件工具等。
- **理论研究的深化：**虽然本文对算法的收敛性进行了分析，但在一些关键问题上还需要深入研究，例如收敛速率的精确估计、参数选择的理论指导、以及在更一般条件下的收敛性证明等。这些理论研究将为算法的进一步改进提供重要指导。
- **与深度学习方法的结合：**随着深度学习技术的快速发展，如何将本文提出的算法与最新的深度学习方法（如图神经网络、注意力机制等）结合，以进一步提升算法性能，是一个很有前景的研究方向。

总的来说，本文工作为反演光刻技术向更小尺度和更大规模发展提供了值得借鉴的研究思路，但仍有许多值得深入探索的方向。我们期待这些数学理论和算法创新能够推动光刻技术的进步，为半导体制造工艺的发展以及计算数学领域做出贡献。

## 参考文献

- [1] Mack C. Fundamental principles of optical lithography: the science of microfabrication[M]. Chichester: John Wiley & Sons, 2008.
- [2] Born M, Wolf E. Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light[M]. Seventh expanded ed. Amsterdam: Elsevier, 2013.
- [3] Goodman J W. Introduction to Fourier optics[M]. Third ed. Englewood, CO: Roberts & Co. Publishers, 2005.
- [4] Duffieux P M. The Fourier transform and its applications to optics[M]. New York: John Wiley & Sons, 1983.
- [5] Hopkins H H. The concept of partial coherence in optics[J]. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 1951, 208(1093): 263-277.
- [6] Mandel L, Wolf E. Optical Coherence and Quantum Optics[M]. New York: Cambridge University Press, 1995.
- [7] Hopkins H H. On the Diffraction Theory of Optical Images[J]. Proceedings of the Royal Society of London Series A, 1953, 217(1130): 408-432.
- [8] Pati Y, Kailath T. Phase-shifting masks for microlithography: automated design and mask requirements[J]. Journal of the Optical Society of America A, 1994, 11(9): 2438-2452.
- [9] Flagello D G, van der Laan H P, van Schoot J, et al. Understanding systematic and random CD variations using predictive modeling techniques[C/OL]//Advanced Lithography. 1999. <https://www.spiedigitallibrary.org/conference-proceedings-of-spie/3679/0000/Understanding-systematic-and-random-CD-variations-using-predictive-modeling-techniques/10.1117/12.354328.short>.
- [10] Erdmann A, Henke W, Robertson S A, et al. Comparison of simulation approaches for chemically amplified resists[C/OL]//Mack C A, Stevenson T. Lithography for Semiconductor Manufacturing II: Vol. 4404. SPIE, 2001: 99 - 110. <https://www.spiedigitallibrary.org/conference-proceedings-of-spie/4404/0000/Comparison-of-simulation-approaches-for-chemically-amplified-resists/10.1117/12.425196.short>.
- [11] Wong A K K. Optical imaging in projection microlithography: Vol. 66[M]. Bellingham, WA: Society of Photo-optical Instrumentation Engineers Press, 2005.
- [12] Ma X, Arce G R. Computational lithography[M]. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2011.
- [13] Liebmann L W. Layout impact of resolution enhancement techniques: impediment or opportunity?[C/OL]//Proceedings of the 2003 International Symposium on Physical Design. New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 2003: 110-117. [https://www.cecs.uci.edu/~papers/compendium94-03/papers/2003/ispd03/pdffiles/07\\_1.pdf](https://www.cecs.uci.edu/~papers/compendium94-03/papers/2003/ispd03/pdffiles/07_1.pdf).
- [14] Cobb N B, Zakhor A. Fast, low-complexity mask design[C/OL]//Brunner T A. Optical/Laser Microlithography VIII: Vol. 2440. 1995: 313-327. <https://www.spiedigitallibrary.org/conference-proceedings-of-spie/2440/0000/Fast-low-complexity-mask-design/10.1117/12.209263.short>.

- 
- [15] Schellenberg F M. Resolution enhancement technology: the past, the present, and extensions for the future[C/OL]//Smith B W. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series: Vol. 5377 Optical Microlithography XVII. 2004: 1-20[2024-01-10]. <https://www.spiedigitallibrary.org/conference-proceedings-of-spie/5377/0000/Resolution-enhancement-technology--the-past-the-present-and-extensions/10.1117/12.548923.short>.
- [16] Cobb N B, Zakhor A. Large-area phase-shift mask design[C/OL]//Optical/Laser Microlithography VII: Vol. 2197. San Jose, CA, USA: Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, 1994: 348-360[2023-02-15]. <https://www.spiedigitallibrary.org/conference-proceedings-of-spie/2197/0000/Large-area-phase-shift-mask-design/10.1117/12.175429.short>.
- [17] Ma X, Arce G R. Pixel-based simultaneous source and mask optimization for resolution enhancement in optical lithography[J]. Optics Express, 2009, 17(7): 5783-5793.
- [18] Granik Y, Cobb N B. New process models for OPC at sub-90-nm nodes[C/OL]//Optical Microlithography XVI: Vol. 5040. Santa Clara, CA, USA: Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, 2003: 1166-1175. <https://www.spiedigitallibrary.org/conference-proceedings-of-spie/5040/1/New-process-models-for-OPC-at-sub-90-nm-nodes/10.1117/12.485321.short>.
- [19] Liu Y, Zakhor A. Binary and phase-shifting image design for optical lithography[C/OL]//Optical/Laser Microlithography IV: Vol. 1463. San Jose, CA, USA: Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, 1991: 382-399. <https://www.spiedigitallibrary.org/conference-proceedings-of-spie/1463/0000/Binary-and-phase-shifting-image-design-for-optical-lithography/10.1117/12.44797.short>.
- [20] Engl H W, Hanke M, Neubauer A. Regularization of inverse problems[M]. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2000.
- [21] Poonawala A, Milanfar P. Mask design for optical microlithography—an inverse imaging problem[J]. IEEE Transactions on Image Processing, 2007, 16(3): 774-788.
- [22] Ma X, Arce G R. Generalized inverse lithography methods for phase-shifting mask design[J]. Optics Express, 2007, 15(23): 15066-15079.
- [23] Strong D, Chan T. Edge-preserving and scale-dependent properties of total variation regularization[J]. Inverse Problems, 2003, 19(6): S165.
- [24] Choy S K, Jia N, Tong C S, et al. A robust computational algorithm for inverse photomask synthesis in optical projection lithography[J]. SIAM Journal on Imaging Sciences, 2012, 5(2): 625-651.
- [25] Li J, Liu S, Lam E Y. Efficient source and mask optimization with augmented Lagrangian methods in optical lithography[J]. Optics Express, 2013, 21(7): 8076-8090.
- [26] Jia N, Lam E Y. Stochastic gradient descent for robust inverse photomask synthesis in optical lithography[J]. 2010 IEEE International Conference on Image Processing, 2010: 4173-4176.
- [27] Li J, Lam E Y. Robust source and mask optimization compensating for mask topography effects in computational lithography[J]. Optics Express, 2014, 22(8): 9471-9485.
- [28] Ma X, Wang Z, Zhu J, et al. Nonlinear compressive inverse lithography aided by low-rank regularization[J]. Optics Express, 2019, 27(21): 29992-30008.

- 
- [29] Torunoglu I, Karakas A S, Elsen E, et al. A GPU-based full-chip inverse lithography solution for random patterns[C/OL]//Advanced Lithography. 2010[2024-05-15]. <https://www.spiedigitallibrary.org/conference-proceedings-of-spie/7641/1/A-GPU-based-full-chip-inverse-lithography-solution-for-random/10.1117/12.846638.short>.
- [30] Shin Y. Computational lithography using machine learning models[J]. *IP SJ Transactions on System and LSI Design Methodology*, 2021, 14: 2-10.
- [31] Yang H, Ren H. Enabling scalable AI computational lithography with physics-inspired models [J]. 2023 28th Asia and South Pacific Design Automation Conference (ASP-DAC), 2023: 715-720.
- [32] Zheng X, Ma X, Zhao Q, et al. Model-informed deep learning for computational lithography with partially coherent illumination.[J]. *Optics Express*, 2020, 28 26: 39475-39491.
- [33] Zheng S, Yang H, Zhu B, et al. LithoBench: Benchmarking AI computational lithography for semiconductor manufacturing[C/OL]//Oh A, Naumann T, Globerson A, et al. *Advances in Neural Information Processing Systems: Vol. 36*. Curran Associates, Inc., 2023: 30243-30254. [https://proceedings.neurips.cc/paper\\_files/paper/2023/file/604b9fa9e1c16284e6517d923cf9ff20-Paper-Datasets\\_and\\_Benchmarks.pdf](https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2023/file/604b9fa9e1c16284e6517d923cf9ff20-Paper-Datasets_and_Benchmarks.pdf).
- [34] Adam K, Ganjugunte S K, Moyroud C, et al. Using machine learning in the physical modeling of lithographic processes[C/OL]//Advanced Lithography. 2019. <https://www.spiedigitallibrary.org/conference-proceedings-of-spie/10962/109620F/Using-machine-learning-in-the-physical-modeling-of-lithographic-processes/10.1117/12.2519848.short>.
- [35] Flagello D G, van der Laan H P, van Schoot J, et al. Understanding systematic and random CD variations using predictive modeling techniques[C/OL]//Advanced Lithography. 1999[2024-05-15]. <https://www.spiedigitallibrary.org/conference-proceedings-of-spie/3679/0000/Understanding-systematic-and-random-CD-variations-using-predictive-modeling-techniques/10.1117/12.354328.short>.
- [36] K-K W A. *Resolution enhancement techniques in optical lithography: Vol. 47[M]*. Bellingham, WA: Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers Press, 2001.
- [37] Adam K, Neureuther A R. Simplified models for edge transitions in rigorous mask modeling[C/OL]//Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers Advanced Lithography. 2001 [2024-05-15]. <https://www.spiedigitallibrary.org/conference-proceedings-of-spie/4346/0000/Simplified-models-for-edge-transitions-in-rigorous-mask-modeling/10.1117/12.435733.short>.
- [38] Shao F, Evanschitzky P, Reibold D, et al. Fast rigorous simulation of mask diffraction using the waveguide method with parallelized decomposition technique[C/OL]//European Mask and Lithography Conference. 2008[2024-06-15]. <https://ieeexplore.ieee.org/document/5755001>.
- [39] Ding H, Fan T, Zhang L, et al. Three-dimensional plasmonic lithography imaging modeling based on the RCWA algorithm for computational lithography[J]. *Optics Express*, 2023, 31(22): 36061-36077.
- [40] Fühner T, Erdmann A, Seifert S. Direct optimization approach for lithographic process conditions[J]. *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS and MOEMS*, 2007, 6(3): 031006-031006.

- 
- [41] Ma X, Li Y, Dong L. Mask optimization approaches in optical lithography based on a vector imaging model[J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2012, 29(7): 1300-1312.
- [42] Tirapu-Azpiroz J, Burchard P, Yablonovitch E. Boundary layer model to account for thick mask effects in photolithography[C/OL]//*Optical Microlithography XVI: Vol. 5040*. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, 2003: 1611-1619. <https://www.spiedigitallibrary.org/conference-proceedings-of-spie/5040/1/Boundary-layer-model-to-account-for-thick-mask-effects-in/10.1117/12.488803.short>.
- [43] Finders J, Hollink T. Mask 3D effects: impact on imaging and placement[C/OL]//*European Mask and Lithography Conference*. 2011[2024-06-15]. <https://www.spiedigitallibrary.org/conference-proceedings-of-spie/7985/79850I/Mask-3D-effects-impact-on-imaging-and-placement/10.1117/12.896909.short>.
- [44] Xiong W, Zhang J, Tsai M C, et al. ILT approach for compensating 3-D mask effects[J]. *Tsinghua Science and Technology*, 2009, 14(1): 68-74.
- [45] He J, Ding H, Wei Y, et al. Mask 3D parameter optimization for improving imaging contrast of plasmonic lithography[J]. *Applied Optics*, 2024, 63(18): 4809-4818.
- [46] Sauter S A, Schwab C. *Boundary element methods*[M]. Berlin: Springer, 2010.
- [47] Sokołowski J, Zolésio J P. *Introduction to shape optimization: Shape sensitivity analysis*[M]. Berlin: Springer-Verlag, 1992.
- [48] Delfour M C, Zolésio J P. *Shapes and geometries*[M]. Second ed. Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2011.
- [49] Sethian J A. *Level set methods and fast marching methods*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [50] Osher S, Fedkiw R. *Applied mathematical sciences: Level set methods and dynamic implicit surfaces*[M]. Springer New York, 2002.
- [51] Osher S, Sethian J A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2004, 79(1): 12-49.
- [52] Adams R A, Fournier J J F. *Sobolev spaces*[M]. Second ed. Amsterdam: Elsevier/Academic Press, 2003.
- [53] Di Nezza E, Palatucci G, Valdinoci E. Hitchhiker's guide to the fractional Sobolev spaces[J]. *Bulletin des Sciences Mathématiques*, 2012, 136(5): 521-573.
- [54] Chen Z, Zou J. An augmented Lagrangian method for identifying discontinuous parameters in elliptic systems[J]. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 1999, 37(3): 892-910.
- [55] Goldstein T, Osher S. The split Bregman method for L1-regularized problems[J]. *SIAM Journal on Imaging Sciences*, 2009, 2(2): 323-343.
- [56] Armijo L. Minimization of functions having Lipschitz continuous first partial derivatives[J]. *Pacific Journal of Mathematics*, 1966, 16(1): 1-3.
- [57] Wang Y, Yin W, Zeng J. Global convergence of ADMM in nonconvex nonsmooth optimization [J]. *Journal of Scientific Computing*, 2019, 78(1): 29-63.
- [58] Nesterov Y. *Lectures on convex optimization: Vol. 137*[M]. Cham, Switzerland: Springer, 2018.

- 
- [59] Buades A, Coll B, Morel J M. A non-local algorithm for image denoising[C/OL]//2005 IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR'05): Vol. 2. Ieee, 2005: 60-65. <https://ieeexplore.ieee.org/document/1467423>.
- [60] Neelamani R, Choi H, Baraniuk R. Forward: Fourier-wavelet regularized deconvolution for ill-conditioned systems[J]. IEEE Transactions on Signal Processing, 2004, 52(2): 418-433.
- [61] Rudin L I, Osher S, Fatemi E. Nonlinear total variation based noise removal algorithms[J]. Physica D: nonlinear phenomena, 1992, 60(1-4): 259-268.
- [62] Nédélec J C. Acoustic and electromagnetic equations[M]. New York: Springer-Verlag, 2001.
- [63] Colton D, Kress R. Inverse acoustic and electromagnetic scattering theory[M]. Second ed. Berlin: Springer-Verlag, 1998.
- [64] Colton D, Kress R. Integral equation methods in scattering theory[M]. Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2013.
- [65] Hettlich F. Fréchet derivatives in inverse obstacle scattering[J]. Inverse Problems, 1995, 11(2): 371-382.
- [66] Guillard B, Remelli E, Lukoianov A, et al. DeepMesh: Differentiable iso-surface extraction[J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2024, 46(11): 7072-7087.
- [67] Lorensen W E, Cline H E. Marching Cubes: A high resolution 3D surface construction algorithm[J]. ACM SIGGRAPH Computer Graphics, 1987, 21(4): 163-169.
- [68] Park J J, Florence P R, Straub J, et al. DeepSDF: Learning continuous signed distance functions for shape representation[C/OL]//2019 Institute of Electrical and Electronics Engineers/Computer Vision Foundation Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Institute of Electrical and Electronics Engineers, 2019: 165-174[2024-05-16]. [https://openaccess.thecvf.com/content\\_CVPR\\_2019/html/Park\\_DeepSDF\\_Learning\\_Continuous\\_Signed\\_Distance\\_Functions\\_for\\_Shape\\_Representation\\_CVPR\\_2019\\_paper.html](https://openaccess.thecvf.com/content_CVPR_2019/html/Park_DeepSDF_Learning_Continuous_Signed_Distance_Functions_for_Shape_Representation_CVPR_2019_paper.html).
- [69] Krantz S G, Parks H R. The implicit function theorem: history, theory, and applications[M]. New York: Springer Science & Business Media, 2002.
- [70] Kirsch A. The domain derivative and two applications in inverse scattering theory[J]. Inverse Problems, 1993, 9(1): 81-96.
- [71] Audibert L, Haddar H, Liu X. An accelerated level-set method for inverse scattering problems [J]. SIAM Journal on Imaging Sciences, 2022, 15(3): 1576-1600.
- [72] Goodfellow I, Bengio Y, Courville A. Deep learning[M]. Cambridge, MA: MIT Press, 2016.
- [73] Kingma D P, Ba J. Adam: A method for stochastic optimization[C/OL]//3rd International Conference for Learning Representations. San Diego, 2015[2024-07-15]. <https://arxiv.org/abs/1412.6980>.
- [74] Simon J. Second variations for domain optimization problems[J]. Control Theory of Distributed Parameter Systems and Applications, 1989, 91: 361-378.
- [75] Hettlich F, Rundell W. A second degree method for nonlinear inverse problems[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 2000, 37(2): 587-620.

- 
- [76] Chen X, Liu S, Sun R, et al. On the convergence of a class of Adam-type algorithms for non-convex optimization[C/OL]//International Conference on Learning Representations. New Orleans, LA, 2019[2024-05-16]. <https://openreview.net/forum?id=H1x-x309tm>.
- [77] Betcke T, Scroggs M. Bempp-cl: A fast python based just-in-time compiling boundary element library[J]. *Journal of Open Source Software*, 2021, 6(59): 2879-2879.
- [78] González Á. Measurement of areas on a sphere using Fibonacci and latitude–longitude lattices [J]. *Mathematical Geosciences*, 2010, 42: 49-64.
- [79] Arens T, Ji X, Liu X. Inverse electromagnetic obstacle scattering problems with multi-frequency sparse backscattering far field data[J/OL]. *Inverse Problems*, 2020, 36(10): 105007. <https://dx.doi.org/10.1088/1361-6420/abb5e2>.
- [80] Ivanyshyn O. Shape reconstruction of acoustic obstacles from the modulus of the far field pattern[J]. *Inverse Problems and Imaging*, 2007, 1(4): 609-622.
- [81] Chen J, Jin B, Liu H. Solving inverse obstacle scattering problem with latent surface representations[J]. *Inverse Problems*, 2024, 40(6): 065013.
- [82] Gilbarg D, Trudinger N S. Elliptic partial differential equations of second order[M]. Berlin: Springer-Verlag, 2001.
- [83] 韦亚一. 超大规模集成电路先进光刻理论与应用[M]. 北京: 科学出版社, 2016.
- [84] Gissibl T, Thiele S, Herkommer A, et al. Two-photon direct laser writing of ultracompact multi-lens objectives[J]. *Nature Photonics*, 2016, 10(8): 554-560.
- [85] George S M. Atomic layer deposition: an overview[J]. *Chemical Reviews*, 2010, 110(1): 111-131.
- [86] Wagner A, Levin J. Focused ion beam repair of lithographic masks[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 1989, 37: 224-230.
- [87] Pirati A, van Schoot J, Troost K, et al. The future of EUV lithography: enabling Moore's law in the next decade[C]//Extreme Ultraviolet (EUV) Lithography VIII: Vol. 10143. SPIE, 2017: 57-72.

## 附录 A 补充内容

### A.1 Armijo 线搜索方法

Armijo 线搜索方法是一种近似线搜索技术，它不追求精确的最小值，而是确保每次迭代都能使目标函数获得充分下降。与依赖梯度 Lipschitz 常数等全局量的其他方法不同，Armijo 方法仅利用目标函数的局部特性来确定步长。

假设  $F$  为我们要最小化的目标函数，步长选择过程如下：首先固定参数  $0 < \alpha < 0.5$  和  $0 < \beta < 1$ ，然后从初始步长  $t = t_0$  开始。当满足以下条件时：

$$F(\tilde{U}^m - t\nabla F(\tilde{U}^m)) > F(\tilde{U}^m) - \alpha t \|\nabla F(\tilde{U}^m)\|^2 \quad (\text{A.1})$$

我们将步长缩减为  $t = \beta t$ 。重复此过程直到条件 (A.1) 不再满足，此时选择当前的  $t$  值作为最终步长  $\eta_m$ 。关于 Armijo 方法的更多详细内容，读者可参考<sup>[A.1]</sup>的第三章。

### 参考文献

[A.1] Nocedal J W S J. Numerical optimization[M]. New York: Springer, 2006.

## 致 谢

衷心感谢导师陈俊清副教授对本人的精心指导与悉心栽培。在我攻读博士学位期间，陈老师不仅在学术研究上给予了我专业的指导和建议，还在科研思维、学术规范和职业发展等方面给我提供了宝贵的经验和启示。尤其是陈老师严谨的治学态度对我影响至深，他对科学研究一丝不苟的精神、对学术问题的深入思考以及对研究质量的高标准要求，不仅塑造了我的学术品格，也将指引我未来的道路。他开阔的学术视野以及对科研的执着精神同样使我终生受益。

感谢数学系的各位老师对我研究工作的支持和帮助。特别感谢香港中文大学金邦梯教授在研究方法上给予的指导和建议，他渊博的学识和独到的见解为本文的研究工作提供了重要的思路。

感谢课题组的所有同门在学术讨论和日常工作中给予的帮助和支持。他们的智慧和友谊是我博士生涯中宝贵的财富。与各位同学的讨论和合作不仅促进了研究的顺利进行，也让我的博士生活充满了温暖和力量。同样感谢在清华大学认识的每一位同学，他们的陪伴与鼓励是我前进的动力。在清华园的点点滴滴，都将成为我人生中最珍贵的回忆。

感谢家人一直以来的理解、支持和鼓励。感谢父母多年来的养育之恩，是他们的无私奉献和坚定信任让我能够专心致志地投入学术研究，他们的支持是我克服困难、不断前进的最大动力。

本课题承蒙国家重点研发计划《集成电路设计中的新型计算方法及数学理论》（2019YFA0709600,2019YFA0709602）资助，特此致谢。同时也感谢学校提供的良好科研环境和各项便利条件。