制約2次計画法および2次錐計画法を用いた 半導体露光装置用レンズの最適調整*

品 野 勇 治^{*1}, 吉 原 俊 幸^{*2}
宮 代 隆 平^{*1}, 深 川 容 三^{*3}

Optimization of Lens Adjustment in Semiconductor Lithography Equipment Using Quadratically Constrained and Second Order Cone Programming

Yuji SHINANO, Toshiyuki YOSHIHARA,
Ryuhei MIYASHIRO and Youzou FUKAGAWA^{*4}

^{**} Semiconductor Production Equipment Development Department, CANON INC.,
20-2 Kiyohara-Kogyodanchi, Utsunomiya-shi, Tochigi, 321-3292 Japan

In this paper, we consider an optimization problem of lens adjustment in semiconductor lithography equipment. The problem to obtain optimal adjustment of lens can be naturally formulated as a convex minimization problem. However, in such a formulation the objective function is convex but contains many nondifferentiable points, and thus methods based on derivatives cannot be applied. Other approaches using derivative-free optimization or meta-heuristic methods cannot guarantee that obtained solutions are truly optimal. From such a background, we formulate the problem as quadratically constrained and second-order cone programming problems, which can be handled by solvers using an interior point method. With the proposed formulations, computational simulations show that optimal adjustment of lens is obtained in a practical computational time.

Key Words: Semiconductor Lithography, Abberation, Optimum Design, System Engineering, Optical Instrument, Precision Instrument, Second Order Cone Programming, Quadratically Constrained Programming, Interior Point Method, Engineering Optimization

1. は じ め に

本論文は、半導体露光装置におけるレンズ自動調整の最適化について述べる。最近の半導体露光装置は、線幅 45 nm の解像力が求められ、波面収差 RMS を数 $m\lambda$ に抑えなくてはならない⁽¹⁾。また、露光装置の生産性向上にともなって、単位時間あたりのレーザー照射エネルギーが増加し、収差に与える露光熱の影響が無視できなくなっている。これらのことから、露光中の収差変化を予測または計測し、100 ms 程度の短い時間でレンズの位置と姿勢を最適な状態に制御する必要がある⁽²⁾。

さて、レンズ調整の最適化においては、像面湾曲やディストーション(歪曲収差)のように、光学要素の位置や姿勢の制御量に対して線形に変化する収差、すなわち1次光学特性値と、制御量の2次関数で表される2次光学特性値が存在する。1次光学特性値だけを

考慮すればよい場合、線形計画法を用いることにより高速に最適なレンズ調整量を求めることができる⁽³⁾⁽⁴⁾。しかし、2次光学特性値も考慮するならば、線形計画法は使えない。後に述べるように、2次光学特性値まで考慮した場合には、最適なレンズ調整量を求める問題は凸関数の最小化問題としてとらえられる。しかしながら、この凸関数は微分不可能な点を多数含むため、通常の凸関数最小化に有効である各種の勾配法が適用できない。

そこで本論文では、レンズの最適調整量を算出する問題を2次制約計画問題および2次錐計画問題として定式化した。また、定式化した問題を一般的に入手可能なソルバーで解いた結果、最適なレンズ調整量が高速に計算できることを数値実験で確認した。以降、本論文の第2章ではレンズの収差とレンズ性能の評価について記し、第3章では最適なレンズ調整量を求める問題を定義する。第4章では、微分不可能な関数の最小化によく用いられるNelder-Mead法を用いた数値実験を行い、十分な解の精度が得られないことをみる。第5章において、最適なレンズ調整量を求める問題を2次制約計画問題および2次錐計画問題に定式化し、

* 原稿受付 2008年6月25日。

^{*1} 東京農工大学大学院共生科学技術研究部(☎184-8588 小金井市中町2-24-16)。

^{*2} キヤノン(株)(☎321-3292 宇都宮市清原工業団地20-2)。

^{*3} 正員、キヤノン(株)。

E-mail: fukagawa.yozo@canon.co.jp

第6章で実工程における8本のレンズについて最適な調整量を求めた数値実験の結果を示す。最後に、第7章でまとめを述べる。

2. レンズの収差とレンズ性能の評価

本章では、レンズの収差とレンズ性能の評価について記述する。レンズ性能評価の方法の1つに、露光装置上で収差を実際に測定する方法がある。具体的には、投影光学系の波面収差を干渉計等で計測し、その波面収差をゼルニケ関数で展開してゼルニケ係数を求める方法や、光強度センサ等を用いてディストーションを計測する方法がとられる。なお、ゼルニケ関数とは極座標系の直交関数で、光学系の波面収差を表現するのに適している。一方、装置上で収差を計測する代わりに、投影光学系に露光熱を与えた時に発生する収差をシミュレーションにより予め求めておくこともある。次に、これらの評価値から1次光学特性値および2次光学特性値、ディストーション値を計算し、それらに重み付けした値がレンズ性能の評価値となる。以下、詳しく記述する。

露光領域内の計測点 h ($h = 1, 2, \dots, H$) について、そこでの波面収差を計測し、それを J 個のゼルニケ直交関数で展開したときの j 番目のゼルニケ係数を $\hat{Z}_{jh}$ ($j = 1, 2, \dots, J$) とする。

次に求められた波面収差ゼルニケ係数 $\hat{Z}_{jh}$ から、線幅非対称性、像面湾曲、非点収差など、波面収差量に対して1次の特性をもつ I 種の1次光学特性値を求める。計測点 h における i 番目 ($i = 1, 2, \dots, I$) の1次光学特性値 $\hat{L}_{ih}$ は、以下の式で記述される。

$$\hat{L}_{ih} = \sum_{j=1}^J c_{ij} \hat{Z}_{jh} \quad (1)$$

ここで c_{ij} は、 i 番目の1次光学特性値に対する j 番目のゼルニケ係数の影響度を示す定数である。

同様に波面収差の平方値など、波面収差量に対して2次の特性をもつ M 種の2次光学特性値をゼルニケ係数 $\hat{Z}_{jh}$ から求める。計測点 h における m 番目 ($m = 1, 2, \dots, M$) の2次光学特性値 $\hat{Q}_{mh}$ は、以下の式で記述される。

$$\hat{Q}_{mh} = \sum_{j=1}^J b_{mj} \hat{Z}_{jh}^2 \quad (2)$$

ここで b_{mj} は、 m 番目の2次光学特性値に対する j 番目のゼルニケ係数の影響度を示す非負の定数である。 $(\hat{Z}_{jh}^2$ は常に非負であり、光学特性値は0に近いほどレンズ性能が良くなることを意味するので、 b_{mj} は非負の定数である。 c_{ij} は1次光学特性値にかかる係数なので、非負とは限らない。)

最後に、光強度センサを用いて計測したディストーションから求まる、計測点 h におけるディストーション値を $\hat{D}_h$ とする。

以上で定義した1次光学特性値 $\hat{L}_{ih}$ 、2次光学特性値 $\hat{Q}_{mh}$ 、ディストーション値 $\hat{D}_h$ を用いると、レンズの性能値 f は、以下の式で定義される。ただし P_i^L は i 番目の1次光学特性値の限界許容量、 P_m^Q は m 番目の2次光学特性値の限界許容量、 P^D はディストーション値の限界許容量とする。

$$f = +W_Q \sum_{m=1}^M \frac{1}{P_m^Q} \max_{1 \leq h \leq H} \{\hat{Q}_{mh}\} \\ + W_L \sum_{i=1}^I \frac{1}{P_i^L} \max_{1 \leq h \leq H} \{|\hat{L}_{ih}|\} \\ + W_D \frac{1}{P^D} \max_{1 \leq h \leq H} \{|\hat{D}_h|\} \quad (3)$$

各光学特性値 $\hat{L}_{ih}$ 、 $\hat{Q}_{mh}$ 、 $\hat{D}_h$ は絶対値が小さい方がレンズ性能が良いことを示し、またレンズの光学特性は H 箇所の計測点のうち光学特性値が最悪のものによって決定されるので、それぞれを $\max_{1 \leq h \leq H} \{\hat{Q}_{mh}\}$ 、 $\max_{1 \leq h \leq H} \{|\hat{L}_{ih}|\}$ 、 $\max_{1 \leq h \leq H} \{|\hat{D}_h|\}$ という形で評価する。また、ここでは1次光学特性値は I 種類、2次光学特性値は M 種類考えているが、それぞれの光学特性値は限界許容量が異なる。したがって、各光学特性値を限界許容量で除して正規化している。さらに、1次光学特性値、2次光学特性値、ディストーション値に重みをつけて評価する際のために、それぞれに対する重みを W_L, W_Q, W_D としている。

以上、(3)式で表現されるレンズ性能値 f でレンズの性能は評価され、 f の値が小さければ小さいほどレンズの性能が良いことを意味する。

最後に、本章で使用した記号の意味を以下に列記しておく。

- H : 計測点の個数
- J : ゼルニケ関数で波面収差を直交展開した項数
- I : 1次光学特性値の種類数
- M : 2次光学特性値の種類数
- $\hat{Z}_{jh}$: 計測点 h における j 番目のゼルニケ係数
- $\hat{L}_{ih}$: 計測点 h における i 番目の1次光学特性値
- $\hat{Q}_{mh}$: 計測点 h における m 番目の2次光学特性値
- $\hat{D}_h$: 計測点 h におけるディストーション値
- c_{ij} : i 番目の1次光学特性値に対する j 番目のゼルニケ係数の影響度
- b_{mj} : m 番目の2次光学特性値に対する j 番目のゼルニケ係数の影響度 (非負)
- f : 計測したゼルニケ係数から算出されるレンズ性能値

- P_i^L : i 番目の 1 次光学特性値の限界許容量
- P_m^Q : m 番目の 2 次光学特性値の限界許容量
- P^D : ディストーション値の限界許容量
- W_L : レンズ性能値における 1 次光学特性値の重み
- W_Q : レンズ性能値における 2 次光学特性値の重み
- W_D : レンズ性能値におけるディストーション値の重み

3. 最適なレンズ調整量を求める問題

本章では、最適なレンズ調整量を求める問題を定式化する。

ここでは、調整可能箇所が K 箇所ある投影光学系におけるレンズの最適調整を考える。各調整箇所の調整量をベクトル $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_K)^T$ で表現する。各部の調整箇所を $\mathbf{x}$ だけ調整した後の、計測点 h ($h = 1, 2, \dots, H$) の j 番目 ($j = 1, 2, \dots, J$) のゼルニケ係数 $Z_{jh}(\mathbf{x})$ は、式 (4) で示すように調整量 x_k ($k = 1, 2, \dots, K$) の線形結合で表すことができる。

$$Z_{jh}(\mathbf{x}) = \hat{Z}_{jh} + \sum_{k=1}^K a_{hjk} x_k \quad (4)$$

ただしここで a_{hjk} は計測点 h における、調整量 x_k が j 番目のゼルニケ係数に与える影響度を表す定数である。

したがって、調整量 $\mathbf{x}$ の調整をした後の 2 次光学特性値 $Q_{mh}(\mathbf{x})$ ($m = 1, 2, \dots, M, h = 1, 2, \dots, H$) は、式 (2) のゼルニケ係数 $\hat{Z}_{jh}$ を式 (4) の $Z_{jh}(\mathbf{x})$ で置き換えることで得られ、

$$Q_{mh}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^J b_{mj} \left(\hat{Z}_{jh} + \sum_{k=1}^K a_{hjk} x_k \right)^2 \quad (5)$$

となる。

同様に、調整後の 1 次光学特性値 $L_{ih}(\mathbf{x})$ ($i = 1, 2, \dots, I, h = 1, 2, \dots, H$) は、式 (1) より

$$L_{ih}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^J c_{ij} \left(\hat{Z}_{jh} + \sum_{k=1}^K a_{hjk} x_k \right) \quad (6)$$

となる。

また、計測点 h ($h = 1, 2, \dots, H$) におけるディストーションも、調整量 x_k に対して線形であり、調整後のディストーション値 D_h は式 (7) で算出される。

$$D_h(\mathbf{x}) = \hat{D}_h + \sum_{k=1}^K d_{hk} x_k \quad (7)$$

ただしここで d_{hk} は計測点 h における、調整量 x_k のディストーション値に対する影響度を表す定数である。

以上のことから、 K 個の調整箇所を $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_K)^T$ だけ調整した後のレンズ性能値

$f(\mathbf{x})$ は以下で表される。

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) = & +W_Q \sum_{m=1}^M \frac{1}{P_m^Q} \max_{1 \leq h \leq H} \{Q_{mh}(\mathbf{x})\} \\ & +W_L \sum_{i=1}^I \frac{1}{P_i^L} \max_{1 \leq h \leq H} \{|L_{ih}(\mathbf{x})|\} \\ & +W_D \frac{1}{P^D} \max_{1 \leq h \leq H} \{|D_h(\mathbf{x})|\} \end{aligned} \quad (8)$$

ここで、 $b_{mj} \geq 0$ より $Q_{mh}(\mathbf{x})$ は $\mathbf{x}$ に関する 2 次の凸関数であり、また $L_{ih}(\mathbf{x})$ および $D_h(\mathbf{x})$ は $\mathbf{x}$ の線形関数である。したがって、 $f(\mathbf{x})$ 全体は凸関数であることがわかる。

以上をまとめると、最適なレンズ調整量を求める問題は以下の最小化問題 (P1) として定式化される。

問題 (P1)

$$\text{minimize} \quad f(\mathbf{x})$$

$$\text{subject to} \quad L_k \leq x_k \leq U_k \quad (k = 1, 2, \dots, K) \quad (9)$$

ただし L_k, U_k は各部調整量 x_k の下限値および上限値である。物理的な調整を考えているので、各部調整量 x_k には、可動範囲による上下限の制約がある。それを示したのが式 (9) である。

最適なレンズ調整を行うには、上記の問題 (P1) を解いて、制約式 (9) を満たす範囲で目的関数 $f(\mathbf{x})$ を最小にするような調整量 $\mathbf{x}$ を求め、その分だけ各部調整量を駆動すればよいことになる。繰り返しになるが、本論文では露光中のリアルタイム調整を考えているため、調整量の計算に許される時間はたかだか 100 ms 程度である。

なお、本章で新たに使用した記号の意味を以下に列記しておく。

- K : 調整箇所の個数
- x_k : k 番目の調整箇所の調整量
- $Z_{jh}(\mathbf{x})$: 計測点 h における調整後の j 番目のゼルニケ係数
- $L_{ih}(\mathbf{x})$: 計測点 h における調整後の i 番目の 1 次光学特性値
- $Q_{mh}(\mathbf{x})$: 計測点 h における調整後の m 番目の 2 次光学特性値
- $D_h(\mathbf{x})$: 計測点 h における調整後のディストーション値
- a_{hjk} : 調整量 x_k の $Z_{jh}(\mathbf{x})$ に対する影響度
- d_{hk} : 調整量 x_k のディストーション値に対する影響度
- $f(\mathbf{x})$: 調整後のレンズ性能値
- L_k : 調整量 x_k の物理的な調整下限値
- U_k : 調整量 x_k の物理的な調整上限値

4. Nelder-Mead 法を用いた数値実験

本章では、前章で定式化したレンズ調整の最適化問題を降下法を用いて解いた場合、どのような問題点があるかを記す。

前章で定式化されたレンズ調整の最適化問題 (P1) は凸関数最小化問題であり、制約条件は各変数 x_k の上下限制約のみである。通常、上下限制約のみの凸関数最小化問題は、各種の勾配法により高速に解くことができる。しかしながら、問題 (P1) においては、目的関数 $f(\mathbf{x})$ が max 演算子および絶対値演算子を含むため、微分不可能な点が多数存在し、勾配情報を利用するようなアルゴリズムはうまく適用できない。

勾配情報を用いない方法としては、古典的であるが、Nelder-Mead 法⁽⁵⁾が有効であることが知られている⁽⁶⁾。そこで、本論文の主題である 2 次制約計画法および 2 次錐計画法を利用した解法の比較対象として、まず Nelder-Mead 法によって問題 (P1) を解いた結果を提示する。

数値実験には、実際の現場における 8 つのレンズデータを用いた ($H = 3, M = 1, I = 1, J = 18, K = 10$)。それぞれのレンズデータに対して、異なる乱数の系列を用いて 10 回ずつ Nelder-Mead 法を実行した。本章の計算実験の実行環境は、CPU: Intel Core 2 6600 (2.4 GHz), RAM: 2 GB, OS: Windows XP である。また、Nelder-Mead 法の実装として、Mathematica 6⁽⁷⁾における NMinimize 関数の NelderMead を利用した。各種パラメータの設定は Mathematica 6 のデフォルト値を用いたが、解の精度を高めるために、反復の最大試行回数を示す MaxIterations パラメータのみ 10000 に設定した (デフォルト値は 100 であり、また実験では全ての試行について 2000 回以内の反復で収束条件を満たして終了したことを確認した)。表 1 に、8 つのレンズデータに対して 10 回ずつ試行した結果における、目的関数値 $f(\mathbf{x})$ と計算時間 [s] の平均、標準偏差、最小値、最大値を示す。

実験の結果、表 1 からわかるように、算出されたレンズ性能値 $f(\mathbf{x})$ は試行ごとのバラつきが非常に大きくなった。これは主に、Nelder-Mead 法における初期点の取り方に依存していることが解の解析からわかった。本来、Nelder-Mead 法は真の意味での最適解に収束する保証はないが、関数 $f(\mathbf{x})$ は単峰性であるから、局所的な最適解に達することができればそれが大域的最適解でもある。しかしながら、今回の実験においては、関数 $f(\mathbf{x})$ が max 関数に起因する微分不可能な点

Table 1 Results with the Nelder-Mead algorithm

	mean	s. d.	min.	max.
no. 1: $f(\mathbf{x})$	8 804.2 *	4 429.8	3 275.8	18 461.0
time [s]	12.2	0.4	11.6	13.1
no. 2: $f(\mathbf{x})$	11 399.0	5 377.0	4 789.2	25 522.7
time [s]	12.0	0.4	11.3	12.6
no. 3: $f(\mathbf{x})$	10 265.6	6 723.2	4 577.5	24 198.2
time [s]	11.9	0.4	11.5	12.7
no. 4: $f(\mathbf{x})$	10 350.1	14 974.8	3 873.5	54 990.9
time [s]	12.0	0.4	11.5	12.6
no. 5: $f(\mathbf{x})$	4 446.4	4 723.6	1 174.0	18 006.9
time [s]	12.3	0.6	11.5	13.6
no. 6: $f(\mathbf{x})$	4 936.2	8 292.4	411.9	29 185.7
time [s]	12.2	0.3	11.8	13.0
no. 7: $f(\mathbf{x})$	5 153.3	7 386.0	474.2	25 533.8
time [s]	12.1	0.3	11.5	12.5
no. 8: $f(\mathbf{x})$	3 995.6	2 635.2	1 708.4	9 662.1
time [s]	12.2	0.4	11.6	13.0

を多く含むため、Nelder-Mead 法が局所最適解以外の点に収束してしまう現象⁽⁸⁾が発生したと考えられる。

また、問題 (P1) は上下限制約のみの最小化問題であるから、遺伝的アルゴリズムや焼きなまし法に代表される各種のメタ・ヒューリスティクスも容易に適用できる。そこで、遺伝的アルゴリズムについては Mathematica 6 の NMinimize 関数に含まれる DifferentialEvolution を、焼きなまし法については同じく SimulatedAnnealing を用いて予備的な実験を行った。しかしいずれの方法も、ある程度のレンズ性能値を得るためには Nelder-Mead 法より計算時間を要し、得られるレンズ性能値も試行によってバラつきがあり、Nelder-Mead 法と比較しても一長一短であることがわかった。

なお本章の実験において、いずれのアルゴリズムについても専用のプログラムを開発せず Mathematica を用いたのは、研究者にとって容易に追試が行えるようにするためである。もちろん、レンズ調整の問題専用からプログラムを実装し、パラメータチューニングを行って高精度化・高速化をすることは可能であると思われる。しかし、次章以降で提案する 2 次制約計画法および 2 次錐計画法を利用した解法を用いれば、真の意味での最適解を高速に求めることができる。

5. 2 次制約計画法・2 次錐計画法を利用した定式化

本章では、最適なレンズ調整量を求める問題を 2 次制約計画問題および 2 次錐計画問題として定式化する。まず、問題 (P1) の目的関数 $f(\mathbf{x})$ に含まれる max 演算

子および絶対演算子を以下のように取り除く。

2 次光学特性値 $Q_{m1}(\mathbf{x}), Q_{m2}(\mathbf{x}), \dots, Q_{mH}(\mathbf{x})$ に対して、これらの最大値を表すために新たな変数 t_m^Q を準備する。制約式 $Q_{mh}(\mathbf{x}) \leq t_m^Q$ ($h=1, 2, \dots, H$) を導入すると、 $\max_{1 \leq h \leq H} \{Q_{mh}(\mathbf{x})\} \leq t_m^Q$ が成り立つので、問題 (P1) の $f(\mathbf{x})$ に含まれる $\max_{1 \leq h \leq H} \{Q_{mh}(\mathbf{x})\}$ の項を t_m^Q へと置きかえることができる。

同様に $\max_{1 \leq h \leq H} \{|L_{ih}(\mathbf{x})|\}$ の項を変数 t_i^L , $\max_{1 \leq h \leq H} \{|D_h(\mathbf{x})|\}$ の項を変数 t^D を用いて書きかえると、問題 (P1) と等価な問題 (P2) が以下のように定義できる。ただし、 $\mathbf{t}^L = (t_1^L, t_2^L, \dots, t_I^L)^\top$ および $\mathbf{t}^Q = (t_1^Q, t_2^Q, \dots, t_M^Q)^\top$ と定義する。

問題 (P2)

$$\begin{aligned} & \text{minimize} \quad f(\mathbf{x}, \mathbf{t}^Q, \mathbf{t}^L, t^D) \\ & = W_Q \sum_{m=1}^M \frac{1}{P_m^Q} t_m^Q + W_L \sum_{i=1}^I \frac{1}{P_i^L} t_i^L + W_D \frac{1}{P^D} t^D \\ & \text{subject to} \\ & Q_{mh}(\mathbf{x}) \leq t_m^Q \\ & \quad (m=1, 2, \dots, M, h=1, 2, \dots, H), \quad (10) \\ & -t_i^L \leq L_{ih}(\mathbf{x}) \leq t_i^L \\ & \quad (i=1, 2, \dots, I, h=1, 2, \dots, H), \quad (11) \\ & -t^D \leq D_h(\mathbf{x}) \leq t^D \quad (h=1, 2, \dots, H), \quad (12) \\ & L_k \leq x_k \leq U_k \quad (k=1, 2, \dots, K). \quad (13) \end{aligned}$$

この問題の目的関数は線形であり、制約式 (11), (12), (13) も同じく線形である。制約式 (10) は凸 2 次不等式であるため、問題 (P2) 全体としては 2 次制約計画問題となる。2 次制約計画問題は、内点法を用いて真の意味での最適解を求めることができる⁽⁹⁾。

次に本章では、問題 (P2) をさらに変形し、2 次錐計画問題としても定式化する。2 次錐計画問題とは、線形計画問題に 2 次錐制約が追加された問題である（本論文では厳密な定義は省く。詳細は文献⁽¹⁰⁾を参照のこと）。ここで 2 次錐制約とは、決定変数を $\mathbf{y}$ 、ノルムをユークリッドノルム $\|\mathbf{y}\| = (\mathbf{y}^\top \mathbf{y})^{1/2}$ としたときに、 $\|\mathbf{A}\mathbf{y} + \mathbf{b}\| \leq \mathbf{c}^\top \mathbf{y} + d$ という形で表される制約式である。2 次錐計画問題は、 $\mathbf{A}$ をゼロ行列、 $\mathbf{b}$ をゼロベクトルとおけば線形計画問題を特殊ケースとして含むことがわかる。また、2 次制約計画問題を含む問題のクラスでもあるが、その説明は省略する。

既に本章では、問題 (P1) を (P2) へと変形し 2 次制約計画問題として定式化した。これをわざわざ 2 次錐計画問題として定式化し直すのには、フリーのソルバーである SOCP⁽¹¹⁾を使いたいという意図がある。

2 次制約計画問題は商用ソフト CPLEX⁽¹²⁾で高速に最適解を求めることができるが、CPLEX は商用であり、必ずしも全ての環境に普及しているわけではない。フリーのソルバーである SOCP でも扱える 2 次錐計画問題という形に定式化することにより、レンズ調整の最適化が実用上さらに容易になると考えたからである。（なお、CPLEX は 2 次錐計画問題も解ける。）

以下、問題 (P2) を 2 次錐計画問題に変形する。問題 (P2) における制約式 (11)~(13) は、線形の制約式なので、そのまま 2 次錐計画問題の制約式として記述できる。一方、式 (10) は凸 2 次制約式なので、式 (14) の 2 次錐制約式として書き直すことができる。

$$\mathbf{x}^\top B_{mh}^\top B_{mh} \mathbf{x} + \boldsymbol{\alpha}_{mh}^\top \mathbf{x} + \beta_{mh} \leq t_m^Q \quad (14)$$

$$\text{ただし } B_{mh} = \begin{pmatrix} \sqrt{b_{m1}a_{h11}} & \dots & \sqrt{b_{m1}a_{h1K}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sqrt{b_{mJ}a_{hJ1}} & \dots & \sqrt{b_{mJ}a_{hJK}} \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$\boldsymbol{\alpha}_{mh} = \begin{pmatrix} 2 \sum_{j=1}^J b_{mj} \hat{Z}_{jh} a_{hj1} \\ \vdots \\ 2 \sum_{j=1}^J b_{mj} \hat{Z}_{jh} a_{hJK} \end{pmatrix}, \quad (16)$$

$$\beta_{mh} = \sum_{j=1}^J b_{mj} \hat{Z}_{jh}^2. \quad (17)$$

式 (14) は、次の変形により、等価な 2 次錐制約式 (18) へ書き直せる。

$$\begin{aligned} & \mathbf{x}^\top B_{mh}^\top B_{mh} \mathbf{x} + \boldsymbol{\alpha}_{mh}^\top \mathbf{x} + \beta_{mh} \leq t_m^Q \\ \Leftrightarrow & \mathbf{x}^\top B_{mh}^\top B_{mh} \mathbf{x} + \frac{(t_m^Q - \boldsymbol{\alpha}_{mh}^\top \mathbf{x} - \beta_{mh} - 1)^2}{4} \leq \frac{(t_m^Q - \boldsymbol{\alpha}_{mh}^\top \mathbf{x} - \beta_{mh} + 1)^2}{4} \\ \Leftrightarrow & \left\| \begin{pmatrix} B_{mh} \mathbf{x} \\ \frac{t_m^Q - \boldsymbol{\alpha}_{mh}^\top \mathbf{x} - \beta_{mh} - 1}{2} \end{pmatrix} \right\| \leq \frac{t_m^Q - \boldsymbol{\alpha}_{mh}^\top \mathbf{x} - \beta_{mh} + 1}{2} \\ \Leftrightarrow & \left\| \begin{pmatrix} B_{mh} & \mathbf{0} \\ -\frac{\boldsymbol{\alpha}_{mh}^\top}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ t_m^Q \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ -\frac{\beta_{mh} + 1}{2} \end{pmatrix} \right\| \\ & \leq \left(-\frac{\boldsymbol{\alpha}_{mh}^\top}{2} \frac{1}{2} \right) \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ t_m^Q \end{pmatrix} + \frac{-\beta_{mh} + 1}{2} \quad (18) \end{aligned}$$

まとめると、問題 (P2) を 2 次錐計画問題に変形した問題 (P3) は、次のようになる。

問題 (P3)

$$\begin{aligned} \text{minimize} \quad & f(\mathbf{x}, t^Q, t^L, t^D) \\ & = W_Q \sum_{m=1}^M \frac{1}{P_m^Q} t_m^Q + W_L \sum_{i=1}^I \frac{1}{P_i^L} t_i^L + W_D \frac{1}{P^D} t^D \\ \text{subject to} \quad & \left\| \begin{pmatrix} B_{mh} & \mathbf{0} \\ -\frac{\alpha_{mh}^T}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ t_m^Q \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ -\frac{\beta_{mh}+1}{2} \end{pmatrix} \right\| \\ & \leq \begin{pmatrix} -\frac{\alpha_{mh}^T}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ t_m^Q \end{pmatrix} + \frac{-\beta_{mh}+1}{2} \\ & (m=1, 2, \dots, M, h=1, 2, \dots, H), \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} -t_i^L & \leq L_{ih}(\mathbf{x}) \leq t_i^L \\ & (i=1, 2, \dots, I, h=1, 2, \dots, H), \end{aligned} \quad (20)$$

$$-t^D \leq D_h(\mathbf{x}) \leq t^D \quad (h=1, 2, \dots, H), \quad (21)$$

$$L_k \leq x_k \leq U_k \quad (k=1, 2, \dots, K), \quad (22)$$

ただし $B_{mh}, \alpha_{mh}, \beta_{mh}$ は式 (15), (16), (17) で表される。

問題 (P3) は 2 次錐計画問題であり、内点法を用いて真の意味での最適解を求めることができる⁽⁹⁾。

6. 数 値 実 験

本章では、ここまでに提案したレンズ調整量の最適化問題に対する (P1), (P2), (P3) の 3 種の定式化に対して、各種のソルバーを用いて数値実験を行い、それぞれの解法を評価し考察を行う。

数値実験には、第 4 章で記述したものと同一、現場における 8 つの実レンズデータ ($H=3, M=1, I=1, J=18, K=10$) を用いた。以下、問題 (P1), (P2), (P3) ごとに実験結果を記す。計算機環境は、ソルバーの利用環境により異なるので、それぞれの数値実験毎に示す。また、内点法を利用して解く問題 (P2), (P3) は、真の意味での最適解が求まるので、問題 (P1) と異なり試行は 1 回のみである。

問題 (P1) に関しては、既に第 4 章で実験結果を記述してあるので、ここには結果のみを示す。表 2 の (P1) の欄に、それぞれのレンズデータに対して 10 回ずつ試行したうちの最も良い値および最も速い計算時間を記載した。(それぞれの平均値・標準偏差・最小値・最大値は第 4 章の表 1 を参照のこと。)

次に、問題 (P2) は、商用の数値計画ソルバーである CPLEX 10.1⁽¹²⁾ を用いて解いた。問題 (P2) は 2 次制約計画問題であるから、内点法に基づく解法で高速に最適解が得られる。CPLEX の計算機環境は、CPU: Xeon 3.6 GHz, メモリ: 3 GB, OS: Windows XP である。表 2 の (P2) の欄に、それぞれのレンズデータに対

して得られたレンズ性能値および計算時間を記載した。

最後に、問題 (P3) は、フリーのソルバーである SOCP⁽¹¹⁾ を用いて解いた。問題 (P3) は 2 次錐計画問題であるから、やはり内点法に基づく解法で高速に最適解が得られる。SOCP の計算機環境は、CPU: Xeon 2.0 GHz, メモリ: 2 GB, OS: Windows 2000 である。表 2 の (P3) の欄に、それぞれのレンズデータに対して得られたレンズ性能値および計算時間を記載した。

Table 2 Computational results

Formulation	(P1)*	(P2)	(P3)
Solver	Mathematica	CPLEX	SOCP
Method	Nelder-Mead	Interior Point Method	
CPU	2.4 GHz	3.6 GHz	2.0 GHz
no. 1: $f(\cdot)$	3 725.8	2 818.2	2 811.4
time [s]	11.6	0.03	0.020
no. 2: $f(\cdot)$	4 789.2	3 383.5	3 383.6
time [s]	11.3	0.08	0.017
no. 3: $f(\cdot)$	4 577.5	2 913.2	2 904.9
time [s]	11.5	0.05	0.014
no. 4: $f(\cdot)$	3 873.5	2 015.0	2 011.6
time [s]	11.5	0.03	0.016
no. 5: $f(\cdot)$	1 174.0	205.5	202.6
time [s]	11.5	0.05	0.023
no. 6: $f(\cdot)$	411.9	113.4	111.9
time [s]	11.8	0.05	0.014
no. 7: $f(\cdot)$	474.2	118.1	114.1
time [s]	11.5	0.06	0.018
no. 8: $f(\cdot)$	1 708.4	1 192.3	1 186.9
time [s]	11.6	0.05	0.019

*The best of 10 trials for each instance

表 2 の実験結果について考察する。計算時間は SOCP によるものが最も高速で、実現場における 100 ms 以内という目標を優に達成した。(計算機環境が (P1), (P2), (P3) でそれぞれ異なるが、(P3) が最も非力であることに注意されたい。) CPLEX と SOCP では、ともに内点法による解法が実装されているにも関わらず、商用の CPLEX の方が計算に時間を要している。これは、CPLEX が整数計画問題なども解ける汎用ソルバーであり、SOCP と比較するとその分余計な処理を行うためであると考えられる。

解の精度についてであるが、Nelder-Mead 法で求めた解は、バラつきが多いことからある程度想像できていたが、真の最適解と比較するとかなり性能が悪いこ

とがわかった。CPLEXとSOCPは、いずれも最適解を求めているのだが、値に若干のずれがある。これは、数値誤差の扱いの違いであると考えられる。CPLEXはデフォルトの設定で動作させているが、実行時にゼロと見なす許容値等のパラメータを適切にチューニングすれば、精度が上がると思われる。

数値実験からも確かめられたように、2次制約計画法および2次錐計画法を用いた解法は、真の意味での最適解が高速に求まる。これには他の手法と比較して決定的な利点がある。最適性の保証がある解が求まるということは、不可能な要求がある時にも役に立つ。例えば、レンズ性能値 $f(\mathbf{x})$ をある一定値以下に抑えろ、という現場の要求があり、今扱っているレンズではその要求を満たすことが不可能であるとする。Nelder-Mead法やメタ・ヒューリスティクスでは、その要求を満たす調整方法が求まらない原因が、パラメータの設定ミスなのか、あるいは光学性能上の本質的な問題なのかがわかりにくい。それに対して、2次制約計画法あるいは2次錐計画法を用いて真の意味での最適解を求めれば、無駄な試行を繰り返すことなく目標性能達成可否の判断ができる。

さらに、2次制約計画問題および2次錐計画問題の形にすることにより、ある特定の光学特性値を一定以下の値に抑えなければならない、というような追加の条件が加わった場合にも、制約式を加えることにより容易に対応できるのも特徴の一つである。

7. お わ り に

本論文では、半導体露光装置におけるレンズの最適調整量を求める問題を扱った。最適なレンズ調整量を求める問題は、レンズの2次光学特性値まで考慮した場合には凸関数の最小化問題になる。しかしながら、この凸関数は微分不可能な点を多数含むため、通常の凸関数最小化に有効である各種の勾配法が適用できない。また、Nelder-Mead法やメタ・ヒューリスティクスでは得られる解に最適性の保証が無い。そこで本論文では、レンズの最適調整量を算出する問題を2次制約計画問題および2次錐計画問題として定式化した。これらにより、内点法を利用したソルバーで真の意味での最適解を求めることが可能になった。また、実レ

ンズデータを使って数値実験を行い、最適なレンズ調整量が実用上の観点からも十分高速に計算できることを確認した。

文 献

- (1) Okazaki, S., Suzuki, A. and Ueno, T., *Semiconductor Lithography Technology for Beginners* (in Japanese), Beginner's Book Series 29, Kougyou-chousakai, (2003), pp. 43-69.
- (2) Yoshihara, T., Takeshita, B., Shigenobu, A., Hasegawa, Y., Ohsaki, Y., Mishima, K. and Miura, S., New Projection Optics and Aberration Control System for the 45-nm Node, SPIE Vol. 6520, 652022, (2007), Optical Microlithography XX; Donis G. Flagello; Ed.
- (3) Fukagawa, Y., Shinano, Y. and Nakamori, M., Optimum Adjustment for Distortion in Semiconductor Lithography Equipment, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series C*, Vol. 72, No.722 (2006), pp. 3378-3382.
- (4) Shinano, Y., Fukagawa, Y., Takano, Y. and Yoshihara, T., Lens System Adjustment in Semiconductor Lithography Equipment, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series C*, Vol. 73, No.735 (2007), pp. 2982-2987.
- (5) Nelder, J.A. and Mead, R., A Simplex Method for Function Minimization, *Computer Journal*, Vol. 7, (1965), pp. 308-313.
- (6) Lagarias, J.C., Reeds, J.A., Wright, M.H. and Wright, P.E., Convergence Properties of the Nelder-Mead Simplex Method in Low Dimensions, *SIAM Journal on Optimization*, Vol. 9, (1998), pp. 112-147.
- (7) Wolfram Research Inc., *Mathematica 6*, (2007), Wolfram Research Inc.
- (8) Dennis, J.E., Jr. and Woods, D.J., Optimization on Microcomputers: the Nelder-Mead Simplex Algorithm, Wouk, A. ed., *New Computing Environments: Microcomputers in Large-Scale Computing*, (1987), pp. 116-122, Society for Industrial and Applied Mathematics.
- (9) Kojima, M., Tsuchiya, T., Mizuno, S. and Yabe, H., *Interior Point Method* (in Japanese), (2001), Asakura Publishing Co., Ltd.
- (10) Lobo, M., Vandenberghe, L., Boyd, S. and Lebret, H., Applications of Second-Order Cone Programming, *Linear Algebra and its Applications*, Vol. 284, (1998), pp. 193-228.
- (11) Lobo, M., Vandenberghe, L. and Boyd, S., "SOCP: Software for Second-Order Cone Programming". Stanford University. (online), available from http://www.stanford.edu/~boyd/old_software/SOCP.html, (accessed 2008-05-10).
- (12) ILOG Inc., *ILOG CPLEX 10.1*, (2006), ILOG Inc.