

AOCLS 虛擬光刻模擬引擎：物理約束神經算子、格點收斂與拓撲驗證框架

v2.0 / 2026-03-01 / Neo.K（許筌歲） / 公開概念技術論文／可驗證架構提案

證據狀態：本文提出模型、數學表述、驗證協議與工程路線；尚未宣稱完成端到端軟體基準、真實材料校準或實體製造驗證。文中數值門檻均為建議驗收標準，而非既成實驗結果。

<https://thisoneisneok.com/html/papers/ccp-10.html>

Physics-Constrained Neural Operators for AOCLS Virtual Lithography: A Lattice-Convergent and Topology-Aware Framework

作者：Neo.K（許筌歲）

機構：一言諾科技有限公司（EveMissLab Technology Co., Ltd.）

文件編號：EML-AOCLS-VL-2026-v2.0

原始版本：AOCLS-AI v1.0，2026 年 3 月

修訂日期：2026 年 7 月 29 日

文件類型：公開概念技術論文／可驗證架構提案

論文授權：CC BY-SA 4.0

程式碼與資料狀態：尚未公開釋出；其授權應於實際發布時另行聲明

證據狀態：本文提出模型、數學表述、驗證協議與工程路線；尚未宣稱完成端到端軟體基準、真實材料校準或實體製造驗證。文中數值門檻均為建議驗收標準，而非既成實驗結果。

SECTION

摘要

本文提出 AOCLS 虛擬光刻模擬引擎的第二版架構。其目標不是以神經網路取代所有高保真數值求解器，而是在 AOCLS 「觀察—理解—模擬—製造—驗證」 閉環中，建立一個具備物理約束、跨格點檢驗、拓撲保真與不確定性輸出的快速代理模擬層。

本文將光刻製程表述為參數化多物理場解算子。輸入包括光源、光學元件、材料場、幾何、邊界條件與製程參數；輸出則可依任務需要包含電磁場、溫度、反應物濃度、聚合程度、位移與應力。高保真離散求解器記為 cal-F_h ，其中 h 代表空間離散尺度；待學習的代理模型記為 cal-G_ϕ 。本文提出格點—拓撲物理約束神經算子框架，使 cal-G_ϕ 同時接受場函數、材料函數與離散尺度，並以資料誤差、偏微分方程殘差、邊界條件、能量平衡、幾何誤差、持久同調拓撲誤差、跨格點一致性與不確定性校準共同訓練。

相較原始版本，本文做出五項關鍵修正。第一，不再把尚未執行的模擬寫成實驗結果。第二，不把 FDTD、FEM 或神經代理模型的複雜度簡化為不準確的單一公式。第三，將「拓撲不變量恆定」修正為「拓撲事件與參考解一致」；聚合體在形成、連接與封閉空腔時，本來就可能發生合法拓撲轉換。第四，以 Betti 數、Euler 示性數與持久同調取代一般材料情境下不必要的 Chern 數。第五，增加跨材料、跨幾何、跨解析度、域外輸入與真實製程校準的分層驗證協議。

本文的核心主張是：AOCLS 所需的不是個宣稱永遠正確的「AI 物理模擬器」，而是一個能清楚區分已知域與未知域、能指出物理違反、能量化拓撲偏差、能回退至高保真求解器，並能為每次預測生成驗證證書的混合式計算系統。

關鍵詞：AOCLS、虛擬光刻、神經算子、科學機器學習、多物理場、格點收斂、持久同調、拓撲保真、不確定性量化、代理模型

SECTION

第一章 問題定位與研究邊界

1.1 AOCLS 中的模擬瓶頸

AOCLS 的整體流程可表示為：

多模態觀察
→
幾何與材料推斷
→
虛擬光刻
→
製程參數選擇
→

其中，虛擬光刻並非單純產生一張光強圖，而是要回答以下問題：

- 指定光源與光學配置會形成何種三維場分布？
- 材料中的吸收、反應、擴散與熱累積如何隨時間演化？
- 最終可顯影或可固化區域的幾何是否符合目標？
- 結構是否出現斷裂、錯誤連接、封閉空腔或局部過曝？
- 模型對這次預測有多大把握？是否應交由高保真求解器複核？

高保真電磁與多物理場求解通常需要細密網格、長時間積分或大型稀疏系統求解。以 Yee 格點的 FDTD 為例，若空間格點總數為 N 、時間步數為 T ，每一時間步的局部更新通常約為 $O(N)$ ，總計算成本約為 $O(NT)$ ，並受到 CFL 穩定條件約束。FEM 的成本則取決於網格、元素階數、矩陣條件數、線性或非線性求解器與預條件器，不能一概寫成 $O(N^3)$ 。

因此，AOCLS 的合理策略不是捨棄數值求解器，而是建立兩層結構：

- 高保真層：提供可信基準、域外複核與最終簽核；
- 快速代理層：提供參數掃描、互動預覽、初步逆向設計與主動學習。

1.2 本文不主張的事項

本文不主張：

- 神經模型已經在所有材料與幾何上達成固定精度；
- 代理模型可以在沒有適用域檢查時取代 FDTD、FEM 或實驗；
- 物理殘差足夠小就等於實體製程必然正確；
- 拓撲約束會使所有形狀細節自動正確；
- 格點收斂可以僅靠單一解析度訓練自動獲得；
- AOCLS 已完成真實設備、材料資料庫與閉環製造驗證。

本文提出的是一套可被實作、檢驗、證偽與逐級擴充的架構。

1.3 從「綜合微積分」到工程操作化

原始版本使用「綜合微積分」描述多種局部微分量、整體積分量與多場耦合量的共同表述。本文保留此思想，但在工程上將其操作化為多場狀態與描述符系統，不把它直接宣稱為已獲外部驗證的獨立數學體系。

對任一物理狀態 s ，定義綜合描述符：

```
cal-D[s]
=
(
s,
 $\nabla s$ ,
 $\partial \boxtimes s$ ,
cal-I[s],
cal-T[s]
),
```

其中：

- s 是原始物理場；
- ∇s 與 $\partial \boxtimes s$ 是局部空間與時間變化；
- cal-I 是能量、體積、質量或反應總量等積分泛函；
- cal-T 是連通性、孔洞與空腔等拓撲描述符。

如此可保留原始命題的跨尺度精神，同時使其能被標準數值分析與科學機器學習方法檢驗。

SECTION

第二章 多物理場解算子

2.1 輸入、狀態與輸出

令 AOCLS 單次虛擬製程的輸入為：

$$\Theta = (G, M, S, B, P),$$

其中：

- G：目標幾何、遮罩、錐形光學或其他光場生成幾何；
- M：折射率、介電常數、吸收係數、熱參數、擴散係數、反應速率與力學參數等材料場；
- S：波長、偏振、脈衝、功率、入射角與相位等光源條件；
- B：週期、吸收、對稱、固定、絕熱或對流等邊界條件；
- P：曝光時間、顯影閾值、掃描策略與其他製程控制參數。

完整狀態可寫為：

$$s(x,t) = (E, H, T, c_m, c_r, \rho_p, u, \sigma),$$

其中 c_m 與 c_r 分別表示單體與活性反應物濃度， ρ_p 表示聚合或固化程度。實際 MVP 不必一次求解全部分量，而應使用可切換的模型階層：

- L0 光場模式：只估計 E, H 或光強；
- L1 光化學模式：加入 c_m, c_r, ρ_p ；
- L2 熱耦合模式：加入 T ；
- L3 熱—化學—力學模式：加入 u, σ ；
- L4 實驗校準模式：加入設備與材料偏差模型。

2.2 高保真離散解算子

在格點尺度 h 與時間步長 Δt 下，高保真求解器表示為：

$$\text{cal-F}_-(h, \Delta t): \Theta| \rightarrow s_-(h, \Delta t).$$

本文擬學習的是參數到場函數的解算子：

$$\begin{aligned} &\text{cal-G}_\phi: \\ &(\Theta, h, \Delta t) \\ &| \rightarrow \\ &\widehat{s}_-(h, \Delta t), \end{aligned}$$

其中 ϕ 為模型參數。將 h 與 Δt 納入輸入，是為了避免模型把某一固定解析度誤認為物理定律本身。

2.3 電磁場方程

在線性、各向同性且可含導電損耗的簡化情況下：

$$\begin{aligned} &\nabla \times E \\ &= \\ &-\mu(\partial H)/(\partial t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\nabla \times H \\ &= \\ &\epsilon(\partial E)/(\partial t) \end{aligned}$$

若存在非線性極化，則應加入：

$$\begin{aligned} D &= \\ &\varepsilon \boxtimes E \\ &+ P^{(1)} \\ &+ P^{(2)} \\ &+ P^{(3)} + \dots \end{aligned}$$

AOCLS 不應預設所有材料都能由單一吸收係數描述；材料模型必須明確聲明適用波長、溫度、劑量與非線性範圍。

2.4 熱與光化學演化

熱場可採用：

$$\begin{aligned} \rho_m C_p (\partial T) / (\partial t) &= \\ &\nabla \cdot (\kappa \nabla T) \\ &+ Q_{\text{abs}} \\ &+ Q_{\text{rxn}} \\ &- Q_{\text{loss}}. \end{aligned}$$

聚合或固化反應可用一般反應—擴散形式表示：

$$\begin{aligned} (\partial c_m) / (\partial t) &= \\ &\nabla \cdot (D_m \nabla c_m) \\ &- R(I, T, c_m, c_r), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\partial \rho_p) / (\partial t) &= \\ &R(I, T, c_m, c_r) - R_{\text{term}}. \end{aligned}$$

反應函數 R 應由材料資料、文獻模型或校準實驗決定，而非直接假設為普適的 $I(1-\rho_p)$ 。

2.5 力學響應

若要預測收縮、翹曲或殘餘應力，可使用準靜態平衡：

$$\nabla \cdot \sigma + f = 0,$$

$$\sigma = \mathbb{C} : (\varepsilon(u) - \varepsilon^{\text{ast}}(\rho, p, T)).$$

其中 ε^{ast} 表示聚合收縮與熱膨脹造成的本徵應變。

2.6 能量平衡的正確形式

原始版本將輸入能量與吸收能量直接相等，忽略反射、透射、場能儲存與數值耗散。更完整的離散能量平衡應寫為：

$$E_{\text{(in)}} = E_{\text{(ref)}} + E_{\text{(trans)}} + E_{\text{(abs)}} + \Delta E_{\text{(field)}} + \varepsilon_{\text{(num)}}.$$

因此能量殘差可定義為：

$$\text{cal-R}_{\text{(E)}} = (E_{\text{(in)}} - E_{\text{(ref)}})$$

此殘差能揭示明顯物理違反，但不能單獨證明所有局部場都正確。

SECTION

第三章 格點化、穩定性與連續極限

3.1 離散化不是中性容器

不同離散方法會引入不同的數值色散、邊界誤差與人工耗散。AOCLS 代理模型若只學習單一求解器輸出，可能學到的是求解器特有偏差，而非目標物理。

因此資料集需保留：

- 求解器名稱與版本；
- 網格生成方法；
- h 與 Δt ；
- 邊界條件；
- 收斂容許值；
- 硬體與數值精度；
- 已知近似與失效條件。

3.2 Yee 格點與其他離散方式

電磁 FDTD 可採交錯 Yee 格點；光化學與熱場可採有限差分、有限體積或 FEM；力學則可由 FEM 處理。不同場之間需要保守插值或共同網格映射。

對顯式 FDTD，時間步長需滿足類 CFL 條件。三維均勻格點的典型形式為：

$$\Delta t \leq \frac{1}{c} \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right)^{-1/2}$$

神經代理模型即使能一次跨越多個時間步，也必須檢查其長期滾動誤差與因果性，不能只比較單步誤差。

3.3 格點收斂

對可觀測量 Q ，若數值方法具有階數 p ，理想誤差展開為：

$$\begin{aligned} Q(h) &= \\ Q^{\ast} &+ C h^p \\ &+ o(h^p). \end{aligned}$$

代理模型應至少在三個解析度上接受檢驗：

$$h_1 \gg h_2 \gg h_3.$$

可使用 Richardson 外推估計 $Q^{\ast}$ ，但前提是三個解析度已進入漸近收斂區。若尚未進入該區，外推出來的「連續極限」不具可信度。

3.4 跨格點一致性損失

令 $\text{cal-R}_\ell(h_1 \rightarrow h_2)$ 為網格轉換算子，則可定義：

$$\begin{aligned} \text{cal-L}_\ell(\text{grid}) &= \\ \sum_{i \neq j} &| \\ \text{cal-R}_\ell(h_1 \rightarrow h_2) & \\ \widehat{\text{widehats}}_\ell(h_1) & \\ - & \\ \widehat{\text{widehats}}_\ell(h_2) & \\ |^2_\ell(W). \end{aligned}$$

這只能鼓勵解析度一致性，不能取代與高保真解及實驗的比較。

第四章 格點—拓撲物理約束神經算子

4.1 為何從固定 U-Net 升級為神經算子

固定尺寸 3D U-Net 可以作為早期基線，但它通常將輸入與輸出視為固定維度張量，對解析度、幾何與邊界條件變化的泛化有限。AOCLS 更適合學習函數空間之間的映射，因此本文採用神經算子作為主幹，並允許 Fourier Neural Operator、DeepONet、圖神經算子或混合架構作為候選。

這不代表神經算子天然跨解析度正確。模型仍需透過跨網格資料、域外測試與收斂協議驗證。

4.2 架構總覽

本文將模型暫稱為 LTPNO (Lattice-Topological Physics-constrained Neural Operator)。其模組包括：

- 幾何與材料編碼器：輸入空間材料場、目標幾何與邊界遮罩；
- 光源與製程參數編碼器：輸入波長、相位、偏振、功率與曝光程序；
- 神經算子主幹：學習參數化 PDE 的解算子；
- 時間傳播器：直接預測時空塊，或以自回歸方式推進；
- 物理校正層：降低 PDE、邊界與守恆殘差；
- 拓撲頭：計算連通分量、孔洞、空腔與持久同調描述；
- 幾何頭：輸出可製造區域、臨界尺寸與表面誤差；
- 不確定性頭：輸出置信區間、域外分數與回退建議。

抽象地寫：

```
widehats_(t+Δ t)
=
Π_(phys)
[
cal-G_φ
(
```


其中 $\Pi_{\text{(phys)}}$ 是校正或投影算子。對非線性耦合系統，該投影通常只是近似校正，不應宣稱能保證精確落在完整物理解流形上。

4.3 因果性與時間建模

光場、反應與熱場具有不同時間尺度。模型可採：

- 分段時間捆綁；
- 多速率積分；
- 光場準穩態加慢變化學場；
- 因果卷積或狀態空間模型；
- 自回歸與直接時空塊混合。

若模型預測 K 個時間步，需同時報告單步誤差與滾動誤差：

$$\begin{aligned} & \text{cal-E}_{\text{(roll)}}(K) \\ &= \\ & (1)/(K) \\ & \sum_{k=1}^K \\ & | \\ & \widehat{s}_{\text{(t+k}\Delta t)} \\ & - \\ & s_{\text{(t+k}\Delta t)} \\ & |_{\text{W}}. \end{aligned}$$

4.4 多保真修正

資料來源可包含粗格點模擬、細格點模擬與真實量測。可將代理模型寫成：

$$\begin{aligned} & \widehat{s}_{\text{(HF)}} \\ &= \\ & \text{cal-G}^{\text{(LF)}}_{\text{(}\phi\text{)}}(\Theta) \\ & + \\ & \Delta \text{cal-G}_{\text{(}\psi\text{)}} \\ & (\end{aligned}$$

其中第一項學習低保真結構，第二項學習低保真到高保真的修正。真實設備校準也可採相同形式建立 sim-to-real 修正層。

SECTION

第五章 物理、幾何與拓撲損失

5.1 總損失

總訓練目標定義為：

$$\begin{aligned} \text{cal-L} &= \\ &\lambda_{\text{dcal-L}}(\text{data}) \\ &+ \\ &\lambda_{\text{pcal-L}}(\text{PDE}) \\ &+ \\ &\lambda_{\text{bcal-L}}(\text{BC}) \\ &+ \\ &\lambda_{\text{ecal-L}}(\text{energy}) \\ &+ \\ &\lambda_{\text{gcal-L}}(\text{geom}) \\ &+ \\ &\lambda_{\text{tcal-L}}(\text{topo}) \\ &+ \\ &\lambda_{\text{rcal-L}}(\text{grid}) \\ &+ \\ &\lambda_{\text{ucal-L}}(\text{uncert}). \end{aligned}$$

權重不應由固定的「物理重要性數字」武斷指定。可採用無量綱化、梯度平衡、同方差不確定性加權、增廣拉格朗日法或分階段課程學習。

5.2 資料損失

對多場輸出：

$$\begin{aligned} \text{cal-L}(\text{data}) \\ = \\ \sum_{\mathbf{q} \in \text{cal-Q}} \omega_{\mathbf{q}} \\ (| \\ \widehat{\mathbf{q}} - \mathbf{q} \\ |^2) / (|\mathbf{q}|^2 + \epsilon), \end{aligned}$$

其中 cal-Q 可包含場、溫度、聚合程度與應力。應避免單一高幅值場支配全部梯度。

5.3 PDE 與邊界殘差

以 Maxwell 方程為例：

$$\begin{aligned} \text{cal-R}(\mathbf{F}) \\ = \\ \nabla \times \widehat{\mathbf{E}} \\ + \\ \mu \partial_t \widehat{\mathbf{H}}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{cal-R}(\mathbf{A}) \\ = \\ \nabla \times \widehat{\mathbf{H}} \\ - \\ \epsilon \partial_t \widehat{\mathbf{E}} \\ - \\ \sigma_e \widehat{\mathbf{E}} \\ - \\ \mathbf{J}(\text{src}). \end{aligned}$$

則：

```
cal-L_(PDE)
=
|cal-R_(F)| $\Delta$ 2
+
|cal-R_(A)| $\Delta$ 2
+cal-L_(thermal)
+cal-L_(reaction)
+cal-L_(mechanical).
```

邊界條件必須另行評估，否則低內部殘差仍可能對應錯誤解。

5.4 幾何損失

令固化區域為：

```
 $\Omega_-(\tau)$ 
=
{
x:
ho_p(x,t_f)  $\geq$   $\tau$ 
}.
```

可使用 Dice、IoU、Chamfer 距離與 Hausdorff 距離。對臨界尺寸敏感的製程，還需計算局部線寬、孔徑、側壁角與表面粗糙度。

5.5 拓撲描述符

對三維固化區域，最直接的拓撲量為：

- β_0 ：連通分量數；
- β_1 ：獨立環或通道數；
- β_2 ：封閉空腔數。

Euler 示性數為：

$$X = \beta_0 - \beta_1 + \beta_2.$$

若使用體素立方複形，也可由各維胞腔數計算：

$$X = N_0 - N_1 + N_2 - N_3.$$

原始版本主張拓撲在時間中應保持不變，這並不普遍成立。聚合過程可能合法地出現成核、合併、打通與封閉事件。正確要求應是：

- 預測拓撲事件與高保真解或量測一致；
- 不應出現短暫數值雜訊造成的假連接或假孔洞；
- 最終拓撲需符合設計規格。

5.6 持久同調損失

單一閾值 τ 容易受數值雜訊影響。持久同調可觀察一系列閾值下拓撲特徵的出生與消失。令 $D_k(\rho_p)$ 為第 k 維持久圖，則可定義：

$$\begin{aligned} \text{cal-L}(\text{topo}) &= \sum_{k=0}^2 \eta_k W_p \\ &\left(D_k(\widehat{\rho}_p), D_k(\rho_p) \right), \end{aligned}$$

其中 W_p 為持久圖距離。實作時可使用可微拓撲層，或將完整拓撲計算作為週期性驗證與模型選擇指標。

拓撲損失不能取代幾何損失。兩個物體可具有相同 Betti 數，卻在尺寸、位置與曲率上完全不同。

SECTION

第六章 資料生成、主動學習與資料治理

6.1 資料來源分層

AOCLS 資料可分為：

- 解析或半解析基準：平面波、Gaussian beam、均勻介質與簡單界面；
- 低保真模擬：粗格點或簡化多物理模型；
- 高保真模擬：細格點 FDTD、FEM 或經驗證的商用／開源求解器；
- 實驗量測：顯微影像、輪廓儀、SEM、AFM、光譜與製程紀錄；
- 失敗案例：不收斂、材料參數缺失、設備飄移與製造破壞。

失敗資料不得刪除，因為域外偵測與回退策略正需要這些負例。

6.2 參數空間採樣

若輸入維度高，純均勻隨機採樣效率低。可混合使用：

- Latin hypercube；
- Sobol 序列；
- 基於靈敏度的局部加密；
- 貝葉斯最佳化；
- 不確定性主動學習；
- 拓撲事件附近的邊界採樣。

尤其應加密以下區域：

- 聚合閾值附近；

- 連通與斷裂相變附近；
- 高折射率或吸收梯度；
- 高熱累積區；
- 訓練模型不確定性高的輸入。

6.3 防止資料洩漏

資料切分不能只隨機切割樣本，否則相似幾何的細微變體可能同時出現在訓練與測試集中。至少需建立：

- 幾何家族留出；
- 材料家族留出；
- 波長區間留出；
- 解析度留出；
- 設備批次留出；
- 時間批次留出。

6.4 資料卡與可追溯性

每筆樣本應附帶：

Sample ID
+
Solver Hash
+
Material Version
+
Mesh
+
BC
+
Hardware
+

如此才能判斷模型進步來自架構、資料或求解器版本變化。

SECTION

第七章 分層驗證與驗收標準

7.1 五級驗證

V0：單元與守恆測試

檢查離散算子、邊界條件、能量計算與拓撲計算是否正確。

V1：解析基準

在有解析解或可信半解析解的場景中比較場幅值、相位與收斂階。

V2：求解器對求解器

與 FDTD、FEM 或其他高保真求解器比較，並跨幾何與材料留出。

V3：域外與失效測試

測試模型是否能對未知材料、未知幾何、極端參數與解析度外推發出警告。

V4：實驗閉環

以真實曝光、顯影與量測結果校準，區分數值誤差、材料模型誤差與設備誤差。

只有通過 V4，才可把模型稱為經實體製程驗證。

7.2 指標矩陣

類別	指標	用途
----	----	----

場精度	NRMSE、相位誤差、散射參數誤差	比較電磁場
-----	-------------------	-------

物理一致性	PDE 殘差、邊界殘差、能量殘差	排除明顯非物理解
-------	------------------	----------

幾何	Dice、IoU、Hausdorff、臨界尺寸誤差	比較最終結構
----	---------------------------	--------

拓撲	$\beta_0, \beta_1, \beta_2$ 、Euler、持久圖距離	檢查斷裂、錯接與空腔
----	--	------------

時間	單次延遲、吞吐量、記憶體、訓練成本	衡量工程效益
----	-------------------	--------

泛化 幾何／材料／解析度留出誤差 衡量域外能力

可信度 覆蓋率、校準誤差、域外偵測 AUROC 決定是否回退

7.3 建議驗收門檻

以下僅是 MVP 的初始工程目標，必須在指定資料集、硬體、解析度與基準求解器下重新確認：

項目 建議初始門檻 狀態

場 NRMSE $\leq 5\%$ 待實測

最終幾何 IoU ≥ 0.95 待實測

能量平衡殘差 $\leq 1\%$ 待實測

最終 Betti 數完全一致率 $\geq 95\%$ 待實測

域內推理加速 相對同硬體基準求解器 $\geq 100\times$ 待實測

高風險域外樣本回退率 $\geq 99\%$ 待實測

置信區間經驗覆蓋 接近聲明覆蓋率 待實測

速度比較必須聲明：

- 相同問題定義；
- 相同精度門檻；
- 相同硬體或清楚列出硬體差異；
- 是否包含前處理、資料搬移與模型載入；
- 是否把離線資料生成與訓練成本計入總成本。

7.4 消融實驗

至少比較：

- 純資料模型；
- 加入 PDE 殘差；

- 加入能量與邊界條件；
- 加入拓撲損失；
- 加入跨格點訓練；
- 加入不確定性與回退；
- 神經算子與固定 U-Net 基線。

若物理或拓撲模組沒有改善域外誤差、失效偵測或樣本效率，就不能僅因概念漂亮而保留。

SECTION

第八章 不確定性、回退與預測證書

8.1 不確定性的兩個來源

- 資料不確定性：量測噪聲、材料批次差異與設備飄移；
- 模型不確定性：訓練域不足、模型容量或錯誤歸納偏置。

可使用深度集成、貝葉斯近似、概率輸出頭、共形預測或其組合。輸出不應只有單一幾何，而應包括：

```
(  
widehats,  
cal-U,  
cal-R_(phys),  
cal-R_(topo),  
OOD Score,  
Decision  
).
```

8.2 回退決策

定義風險分數：

```
cal-Z
=
a⊗cal-U
+a⊗cal-R_(phys)
+a⊗cal-R_(topo)
+a⊗cal-R_(grid)
+a⊗cal-O_(OOD).
```

當 cal-Z 超過門檻，系統不得直接進入製造，而應：

- 呼叫高保真求解器；
- 要求更完整材料參數；
- 降低製程範圍或調整解析度；
- 將新結果加入主動學習佇列。

8.3 預測證書

每次預測應生成機器可讀證書，至少包含：

- 模型版本與權重指紋；
- 訓練資料版本；
- 輸入參數與材料版本；
- 網格與邊界條件；
- 預測模式；
- 物理殘差；
- 幾何與拓撲指標；
- 不確定性；
- 適用域判定；

- 是否允許進入製造；
- 是否已由高保真求解器或實驗複核。

此證書比單純顯示「98% 準確」更有工程價值。

SECTION

第九章 工程實作路線

9.1 建議軟體結構

```
aocls-vl/  
├── configs/      # 光源、材料、幾何與邊界設定  
├── solvers/      # FDTD、FEM、反應擴散與耦合求解器介面  
├── datasets/     # 資料卡、版本、切分與品質檢查  
├── operators/    # FNO、DeepONet、圖算子與混合模型  
├── physics/      # PDE、守恒與邊界殘差  
├── topology/     # cubical complex、Betti、Euler、持久同調  
├── uncertainty/  # ensemble、校準與域外偵測  
├── validation/   # V0-V4 基準與報告  
├── certificates/ # 預測證書格式  
├── api/          # 推理、回退與批次模擬介面  
├── tests/        # 單元、回歸與收斂測試  
└── docs/         # 方法、限制與重現說明
```

9.2 最小可行版本

M0：數學與資料規格

完成材料 schema、幾何表示、求解器介面、資料卡與基準案例。

M1：二維光場代理模型

使用標量波或簡化 Maxwell 問題建立完整訓練、驗證與證書流程。

M2：三維電磁神經算子

加入複數場、邊界條件、因果時間推進與跨幾何測試。

M3：光化學與熱耦合

加入材料反應、熱擴散與多速率時間建模。

M4：拓撲與不確定性

加入持久同調、域外偵測、主動學習與回退。

M5：實體校準

連接 AOCLS 實驗設備，以量測結果建立 sim-to-real 修正與 V4 證據。

9.3 三種運作模式

- Preview：快速、低成本、允許較大誤差，但必須顯示不確定性；
- Verify：較高解析度、多模型集成，必要時自動呼叫高保真求解器；
- Sign-off：必須有指定求解器或實驗複核，代理模型不得獨立簽核。

SECTION

第十章 限制、可證偽命題與判敗條件

10.1 主要限制

- 材料參數可能比模型架構更限制準確度；
- 真實設備的像差、漂移、污染與批次差異難由理想模擬捕捉；
- 持久同調對拓撲敏感，但可能忽略幾何位置與尺寸；
- 物理殘差可因離散方式或自動微分誤差而被錯估；
- 神經算子對固定分布內插很強，對真正域外材料未必可靠；
- 多物理場耦合可能造成誤差逐層放大；
- 高保真資料生成成本不會因代理模型存在而消失，只是被轉移到離線階段。

10.2 可證偽命題

H1：物理約束改善域外泛化。

若加入 PDE、邊界與能量殘差後，在幾何或材料留出集上沒有穩定改善，則 H1 在該設定下被否證。

H2：跨格點訓練改善解析度轉移。

若多解析度模型在未見解析度上的誤差不低於單解析度基線，或收斂階更差，則 H2 被否證。

H3：拓撲損失降低錯接與斷裂。

若 Betti 數與持久圖誤差沒有改善，或幾何誤差顯著惡化，則拓撲模組需要移除或重設。

H4：主動學習降低高保真樣本需求。

若在相同誤差門檻下，主動學習所需高保真樣本不低於 Sobol 或 Latin hypercube 基線，則 H4 被否證。

H5：預測證書能有效攔截高風險樣本。

若低信心或高殘差規則無法在域外測試中達到預定召回率，則不得將系統接入自動製造。

10.3 判敗不是失敗，而是系統功能

對 AOCLS 而言，可靠地說「我不知道」比在未知材料上輸出精美但錯誤的三維預測更重要。可回退、可追蹤、可複核是模擬引擎的核心能力，不是附加功能。

SECTION

第十一章 結論

AOCLS 虛擬光刻模擬引擎的可行方向，不是把神經網路描述成能自動掌握全部物理的黑盒，也不是把拓撲、格點與守恆律堆疊成不可證偽的宏大宣言。更可行的路徑是建立一個分層混合系統：高保真求解器提供基準，神經算子提供快速近似，物理殘差揭示局部違反，拓撲描述符檢查結構性錯誤，跨格點協議檢查尺度一致性，不確定性與域外偵測決定何時回退，實驗量測則負責最後校準。

在這個框架下，「計算即證明」需要被改寫為更嚴格的工程命題：

計算結果

+

假設聲明

+

收斂證據

+

適用域

+

但它們可以共同構成一份可檢查、可反駁、可逐步增強的證據。

AOCLS 的真正價值不在於宣稱「所見必然即所造」，而在於把「所見如何轉化為可製造結構」拆成一系列可計算、可驗證、可回退的明確環節。當這些環節被完整實作後，虛擬光刻才可能從願景變成可信的工程基礎設施。

SECTION

附錄 A v1.0 至 v2.0 的主要修訂

- 刪除未有證據支撐的「99% 精度」「10,000 倍加速」「0.5 秒推理」等既成結果表述。
- 將全部數值改為驗收目標或待測欄位。
- 將固定 3D U-Net 升級為可替換的神經算子架構。
- 修正 FDTD 與 FEM 複雜度敘述。
- 修正能量守恆式，納入反射、透射與場能變化。
- 刪除一般光敏材料情境下不必要的 Chern 數要求。
- 將「拓撲恆定」改為「拓撲事件與參考解一致」。
- 引入 Betti 數、Euler 示性數與持久同調。
- 加入跨格點、跨材料、跨幾何與域外驗證。
- 加入不確定性、回退與預測證書。
- 區分論文開源授權與尚未發布的程式碼／資料授權。
- 移除 Office 轉檔殘碼與內嵌 base64 公式圖片，統一為 Markdown 與 LaTeX。

SECTION

附錄 B 主要符號

符號 意義

Θ 幾何、材料、光源、邊界與製程輸入

s 多物理場狀態

cal-F_(h,Δ t) 高保真離散解算子

cal-G_ϕ 學習式代理解算子

h 空間離散尺度

Δ t 時間步長

ρ_p 聚合或固化程度

Ω_τ 以閾值 τ 定義的固化區域

β_k 第 k 維 Betti 數

D_k 第 k 維持久圖

χ Euler 示性數

cal-U 預測不確定性

cal-Z 綜合風險與回退分數

SECTION

參考文獻

- Yee, K. S. (1966). “Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell’ s Equations in Isotropic Media.” IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 14(3), 302–307. DOI: 10.1109/TAP.1966.1138693.
- Wilson, K. G. (1974). “Confinement of Quarks.” Physical Review D, 10, 2445–2459. DOI: 10.1103/PhysRevD.10.2445.
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). “Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations.” Journal of Computational Physics, 378, 686–707. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.10.045.
- Lu, L., Jin, P., Pang, G., Zhang, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). “Learning Nonlinear Operators via DeepONet Based on the Universal Approximation Theorem of Operators.” Nature Machine Intelligence, 3, 218–229. DOI: 10.1038/s42256-021-00302-5.

-
- Li, Z., Kovachki, N., Azizzadenesheli, K., et al. (2021). “Fourier Neural Operator for Parametric Partial Differential Equations.” International Conference on Learning Representations.
 - Gu, J., Gao, Z., Feng, C., Zhu, H., Chen, R. T., Boning, D. S., & Pan, D. Z. (2022). “NeurOLight: A Physics-Agnostic Neural Operator Enabling Parametric Photonic Device Simulation.” Advances in Neural Information Processing Systems, 35.
 - Ma, P., Yang, H., Gao, Z., Boning, D. S., & Gu, J. (2024). “PIC2O-Sim: A Physics-Inspired Causality-Aware Dynamic Convolutional Neural Operator for Ultra-Fast Photonic Device FDTD Simulation.” arXiv:2406.17810.
 - Furat, O., Gogineni, V. C., Bindslev, H., & Nadimi, E. S. (2025). “Physics-Informed Neural Operators for Predicting 3D Electromagnetic Fields Transformed by Metasurfaces.” arXiv:2512.15694.
 - Brüel-Gabrielsson, R., Nelson, B. J., Dwaraknath, A., Skraba, P., Guibas, L. J., & Carlsson, G. (2020). “A Topology Layer for Machine Learning.” Proceedings of AISTATS, PMLR 108, 1553–1563.
 - Clough, J. R., Byrne, N., Oksuz, I., Zimmer, V. A., Schnabel, J. A., & King, A. P. (2022). “A Topological Loss Function for Deep-Learning Based Image Segmentation Using Persistent Homology.” IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 44(7), 3666–3678.
 - Neo.K (2025). “AOCLS 觀察式錐形光刻系統：AI 驅動的『所見即所造』製造革命。” EveMissLab 概念技術論文。
 - Neo.K (2025). “錐形透鏡：突破對稱性束縛的光學革命。” EveMissLab 概念產品論文。

版本狀態：v2.0 公開修訂版

定位：可實作、可驗證、可證偽的 AOCLS 虛擬光刻代理模擬架構