

주사투과전자현미경 이미지 원자 위치의 딥러닝 기반 회귀 분석

이승환, 이상철*

한국기초과학지원연구원

shlee0@kbsi.re.kr, *sclee02@kbsi.re.kr

요약

원자 단위 이미지의 정량 분석에는 각 원자의 정확한 위치 정보가 필수적이다. 기존 접근은 주사투과전자현미경 (Scanning Transmission Electron Microscope, STEM) 이미지 입력으로부터 가우시안 마스크를 예측하고 center of mass 연산으로 원자의 중심 위치를 계산하지만, 위치 오차(잔차)가 여전히 존재한다. 본 연구는 기존 마스크 기반 중심 위치 추정 파이프라인에, 딥러닝 기반 회귀 절차를 추가하여 잔차를 보정하는 방법을 제안한다. 실험 결과, TEMImageNet에서 기존 center of mass 기반 방법 대비 위치 잔차의 평균과 표준 편차를 각각 39.2%, 38.6% 감소시켜 회귀 모듈의 유효성을 보였다.

I. 서론

재료 설계의 토대인 물성 해석과 사전 예측(시뮬레이션)을 위해서는 개별 원자 위치의 정밀 예측이 필수적이다. 이를 위해 전자현미경으로 관측한 원자 배열에서 위치 불확실성을 sub-Å 수준으로 낮춰야 한다. 기존 연구로, Lin[1]은 가우시안 마스크를 예측하도록 U-Net[2]을 학습하고, 마스크 임계화와 질량중심(center of mass, COM) 연산을 결합해 2D Gaussian fit보다 높은 정밀도로 원자 위치를 추정하였다. 하지만 그럼에도 잔차가 남아 있어, 이를 보정 할 필요성이 있다. 본 논문에서는 딥러닝 기반 회귀 모듈을 활용하여 COM 기반 결과의 잔차를 추가 보정하는 방법을 제안한다.

II. 본론

2.1 TEMImageNet

TEMImageNet[1]은 STEM 이미지를 대상으로 분할(segmentation), 위치 결정(localization), 노이즈 제거(denoising), 초해상화(super-resolution) 등 다양한 과제를 다루도록 설계된 시뮬레이션 데이터셋이다. Lin [1]은 TEMImageNet으로 딥러닝 모델을 학습하여, 특히 원자 검출 및 위치 결정에서 우수한 성능을 보임으로써, 데이터셋의 유효성을 입증하였다.

2.2 Atom localization with center of mass

Lin[1]은 TEMImageNet으로 학습한 U-Net[2]을 이용해 원자 위치를 추정하였다. 구체적으로, U-Net이 입력 STEM 이미지로부터 가우시안 마스크를 예측하고, 이를 Otsu's method[3]로 임계화한 뒤 연결 성분별 COM을 계산하여 각 원자의 위치를 도출하였다. 이 방식은 간결하고 성능이 우수하나, 예측 위치와 실제 위치 사이의 잔차가 여전히 존재한다.

2.3 Position refinement with Deep Regression

본 연구는 U-Net에 회귀 모듈을 추가하여 각 픽셀 위치에서 오프셋을 예측한다. 학습 단계에서는 특정 픽셀 p 에 가장 가까운 원자 위치를 x 라 두고, 정답 오프셋을 $x - \text{round}(x)$ 로 정의하여 식 (1)을 최소화하도록 네트워크를 지도학습한다. 학습의 안전성을 위해 각 원자 중심에서 가장 가까운 픽셀을 p 로 정한다. 추론 단계에서는 2.2절에서 COM으로 얻은 초기 추정 위치에 예측 오프셋을 더해 최종 위치를 결정한다.

$$Loss = ||offset_p - (x - \text{round}(x))||^2 \quad (\text{식 1.})$$

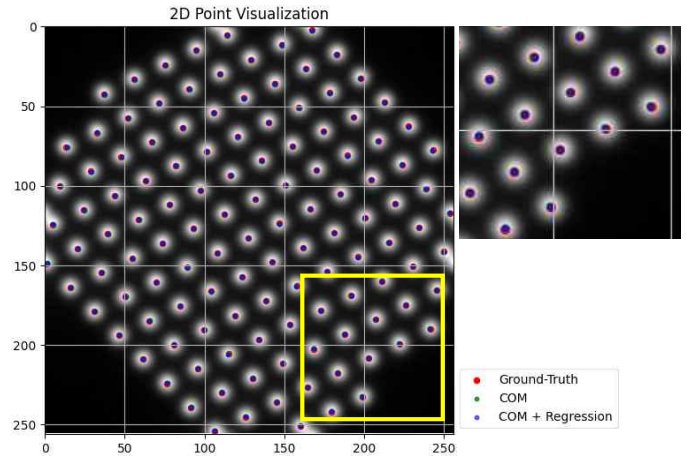


그림 1. Atom localization 비교 결과 시각화 예시.

III. 실험 및 결과

TEMImageNet으로 U-Net 기반 네트워크를 학습한다. 마스크 예측 모듈은 가우시안 마스크로 학습하며[1], 회귀 모듈은 식 (1)을 통해 학습한다. 추론 단계에서 먼저 COM 기반 방법으로 초기 좌표를 얻은 뒤, 회귀 모듈로 이를 보정 한다. 최종적으로, 두 결과에 대해 원자의 예측 위치와 정답 위치 간 유클리디언 거리를 측정하여 정확도를 비교 평가한다. 그림 1은 COM 기반 방법(초록색)과 회귀 보정 방법(파랑색)의 결과를 시각화한 것으로, 회귀 보정 후 예측 중심이 정답 위치(빨강색) 쪽으로 이동하며 잔차가 감소함을 확인할 수 있다.

표 1. 예측-정답 원자 위치 간 Euclidean distance의 평균과 표준 편차.

Label	Method	평균↓	표준편차↓
noBackgroundnoNoise	COM	0.4665	0.3175
	COM+Regression	0.2833	0.1947
image	COM	0.9524	0.4231
	COM+Regression	0.8943	0.3691

표 1은 TEMImageNet의 두 가지 label에서의 성능 통계(평균·표준 편차)를 보여준다. 각 label은 이미지 13,607장으로 이루어져 있으며, 특히 'image' label은 scan 및 Poisson 노이즈가 합성되어 있어 보다 현실적인

조건의 이미지를 제공한다. 보정 이후 잔차의 평균이 낮아져 정확도가 향상되었고, 표준 편차 또한 감소하여 각 원자 위치의 잔차 변동이 줄어 결과의 일관성이 높아졌음을 알 수 있다. 특히 'noBackgroundnoNoise' label의 결과는 평균과 표준 편차가 각각 39.2%, 38.6% 감소함을 보였다. 노이즈가 포함된 'image' label의 결과는 낮은 정밀도를 보이지만, 회귀 보정을 통해 잔차가 다소 줄어드는 것을 확인하였다. 요약하면, 기존 COM 파이프라인에 회귀 모듈을 추가해 보다 우수한 성능을 달성할 수 있음이 확인되었다.

IV. 결론

본 논문은 STEM 이미지에서의 원자 위치 추정을 위해 딥러닝 기반 회귀 모듈을 학습해 보정하는 방법을 제안했다. 본 방법은 (i) 기존 파이프라인의 COM 절차를 유지한 채 회귀 모듈을 결합하고, (ii) 단순한 오프셋 라벨링으로 구현·학습이 명료하며, (iii) 잔차의 평균·표준 편차를 낮춰 후속 물성 해석의 신뢰도를 높일 수 있다는 점에서 가치가 있다. 요약하면, 제안한 회귀 보정은 COM 기반 파이프라인의 간단하면서도 효과적인 업그레이드 수단으로, 원자 좌표의 정량적 획득을 한층 신뢰할 수 있게 한다.

ACKNOWLEDGMENT

This research was supported by the basic science research program (C524200) funded by the Korea Basic Science Institute.

참 고 문 헌

- [1] R. Lin, R. Zhang, C. Wang, X.-Q. Yang, and H. L. Xin, "TEMImageNet training library and AtomSegNet deep-learning models for high-precision atom segmentation, localization, denoising, and deblurring of atomic-resolution images," Scientific Reports, vol. 11, no. 1, p. 5386, 2021.
- [2] O. Ronneberger, P. Fischer, and T. Brox, "U-net: Convolutional networks for biomedical image segmentation," in Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention - MICCAI 2015: 18th International Conference, Munich, Germany, Oct. 5 - 9, 2015, Proceedings, Part III, vol. 9351, N. Navab, J. Hornegger, W. M. Wells, and A. F. Frangi, Eds. Cham, Switzerland: Springer, 2015, pp. 234 - 241.
- [3] N. Otsu, "A threshold selection method from gray-level histograms," IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, vol. 9, no. 1, pp. 62 - 66, 1979.