

투과전자현미경 원자분해능 이미지의 딥러닝 기반 정량 분석을 위한 AI 학습 데이터 생성 시뮬레이터 설계

이태영, 이상철*

한국기초과학지원연구원

lty87@kbsi.re.kr, *sclee02@kbsi.re.kr

요 약

딥러닝 기반 투과전자현미경(Transmission electron microscopy, TEM) 이미지 분석 연구가 급속히 발전하고 있으나, TEM 전문가와 AI 연구자 간의 도메인 지식 격차로 인해 실용적 적용에 제약이 존재한다. 본 연구는 이러한 융합 연구의 현황을 분석하고, 딥러닝 모델 학습에 필요한 대규모 TEM 이미지 데이터셋을 효율적으로 생성하기 위한 범용 시뮬레이터를 제안한다. 제안하는 시스템은 Python의 abTEM(Absorptive potential multislice TEM) 라이브러리를 계산 백엔드로 활용하여 물리적 정확성을 확보하고, C# WPF(Windows Presentation Foundation)로 구현한 직관적인 사용자 인터페이스를 통해 TEM 전문가가 프로그래밍 지식 없이도 고품질 시뮬레이션 데이터를 생성할 수 있도록 설계되었다. 시스템은 원자 vacancy 검출, 원자 종류 분류, 결정 구조 분석, 격자 변형 측정 등 다양한 TEM 분석 문제에 활용 가능하며, 구조 결합의 비율과 분포를 정밀하게 제어할 수 있다. 모든 원자의 위치와 클래스 정보를 포함한 JSON(JavaScript object notation)형식 메타데이터의 자동 생성을 통해 AI 학습 데이터의 즉시 활용이 가능하다. 이를 통해 TEM 도메인 지식과 AI 기술 간의 격차를 효과적으로 해소하고, 향후 4D-STEM(Four-Dimensional Scanning Transmission Electron Microscopy, 4D-STEM) 시뮬레이션으로의 확장 기반을 제공한다.

I. 서 론

최근 딥러닝 기술의 발전으로 TEM 이미지 분석 분야에서 AI 활용이 급속히 확산되고 있다. Ziatdinov et al.[2]의 선구적 연구 이후 원자 수준 결합 검출[3], 구조 분석[4], 나노입자 추적[5] 등 다양한 응용 분야에서 딥러닝 모델의 효과가 입증되고 있으나, 실제 연구 현장에서의 도입은 예상보다 제한적이다.

TEM-AI 융합 연구의 주요 장벽은 도메인 전문가와 AI 연구자 간 지식 격차와 대규모 라벨링 데이터셋 확보의 어려움이다. TEM 전문가는 AI 모델링에, AI 연구자는 실험 데이터의 물리적 특성 이해에 각각 한계를 보이며[6], 실험 데이터 수집은 높은 비용과 시간이 소요된다. 시뮬레이션 기반 데이터 생성이 대안으로 제시되었으나[7, 8], 기존 도구들은 AI 워크플로와의 연계성 부족과 높은 전문성 요구로 접근성이 낮다.

본 연구에서는 이러한 도메인 간 격차를 해소하기 위한 사용자 친화적 시뮬레이터를 제안한다. 물리적으로 정확한 계산 엔진과 직관적 사용자 인터페이스를 결합하여, TEM 전문가가 복잡한 프로그래밍 없이도 AI 학습에 최적화된 고품질 훈련 데이터를 효율적으로 생성할 수 있는 시스템을 제안한다.

II. 본론

2.1. 기존 연구의 기술적 성과

TEM-AI 융합 연구는 지난 5년간 괄목할만한 기술적 진전을 보여왔다. Ziatdinov et al.[2]이 제시한 약한 감독학습 방법론은 제한된 라벨 데이터로도 다양한 원자 결합을 식별할 수 있음을 입증했으며, 이는 전통적인 완전 감독학습의 데이터 의존성 문제를 크게 완화했다. Lee et al.[3]의 ResUNet 기반 접근법은 MoS₂에서 황 공공 검출에서 98%라는 높은 정확도를 달성하여 실용적 적용 가능성을 보여주었다.

동적 과정 분석에서도 의미 있는 성과가 나타났다. Maksov et al.[4]은 WS₂에서 전자빔 조사에 따른 실시간 상변화를 추적하는 데 성공했으며,

Jamali et al.[5]은 액상 TEM 환경에서 나노입자 확산의 미세한 동역학을 정량적으로 분석할 수 있음을 보였다. 이러한 연구들은 AI가 단순한 패턴 인식을 넘어 물리적으로 의미 있는 현상 해석이 가능함을 시사한다.

2.2. 실무 도입 장벽과 해결 요구사항

실제 연구 현장에서 TEM 전문가들은 AI 학습을 위한 데이터셋 생성에 대한 명확한 가이드라인 부족으로 혼란을 겪고 있으며, AI 연구자들은 TEM 이미지의 해석에 어려움을 겪는다.

이러한 문제 해결을 위해서는 물리적 정확성과 AI 학습 최적화를 동시에 만족하는 시뮬레이션 환경과 프로그래밍 없이 사용 가능한 직관적 인터페이스가 필요하다. 또한 실험 조건과 노이즈 특성을 정밀 모사하고, 원자 위치, 결합 유형 등의 메타데이터를 표준화된 형식으로 자동 생성하는 통합 시스템이 요구된다.

2.3. 제안하는 시뮬레이터

앞서 분석한 도메인 간 격차 문제를 해결하기 위해, 물리적 정확성과 사용자 접근성을 동시에 확보하는 하이브리드 아키텍처를 제안한다. 제안하는 시스템은 Python 기반의 계산 백엔드와 C# WPF 기반의 사용자 인터페이스 프론트엔드로 구성되며, TEM 전문가와 AI 연구자 모두의 요구사항을 충족하도록 설계하고자 한다(그림 1).

Python 백엔드는 검증된 abTEM[1] 라이브러리를 활용하여 multi-slice 방법 기반의 정확한 전자빔-물질 상호작용 계산을 수행한다. Multi-slice 시뮬레이션은 양자역학적 전자-시료 상호작용을 정확히 모델링하며, 전자현미경 분야에서 널리 인정받고 있는 전산 모사 기법이다[9]. 이를 통해 기존 TEM 시뮬레이션 도구들과 동등한 물리적 정확성을 보장하면서도, AI 워크플로에 최적화된 데이터 생성이 가능하다. C# WPF 프론트엔드는 MVVM(Model-View-View-Model) 아키텍처를 적용하여 결정 구조의 직관적인 3차원 시각화, 간편한 시뮬레이션 매개변수 설정, 실시간 진행

상황 모니터링 기능을 제공한다.

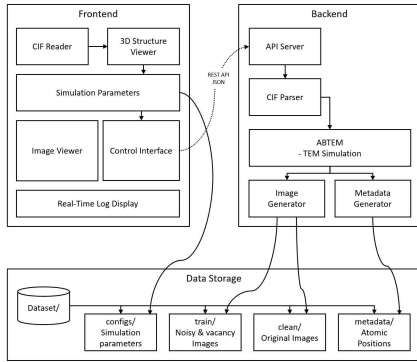


그림 1. 시스템 아키텍처 다이어그램

두 컴포넌트 간 JSON 기반 API 프로토콜을 통해 TEM 실험 조건을 AI 학습 매개변수로 자동 변환한다. 이러한 설정을 통해 TEM 전문가가 익숙한 용어로 시뮬레이션을 설정하면, 백그라운드에서 AI 훈련에 최적화된 데이터가 생성되도록 한다.

CIF 파일로부터 원자 구조를 로드하고 슈퍼셀 크기를 설정하여 다양한 관찰 영역을 구현한다. Vacancy는 원자 인덱스 지정이나 농도 비율 설정으로 간편하게 제어할 수 있으며, 다양한 defocus 값을 적용하여 실제 TEM 조건을 재현한다(그림 2). 이를 통해 복잡한 프로그래밍 없이도 다양한 AI 모델 훈련용 데이터를 생성할 수 있다.

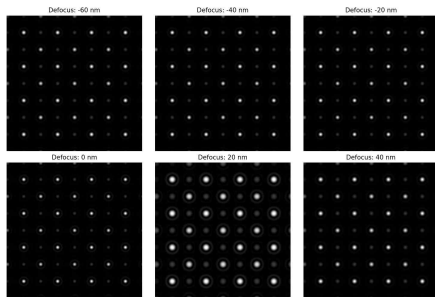


그림 2. TEM defocus 시뮬레이션 이미지

실제 TEM 조건 재현을 위해 열진동 효과, CTF 왜곡, 다중 슬라이스 포텐셜, Poisson 기반 shot noise, readout noise 등 포괄적 노이즈 모델링을 적용한다(그림 3). GPU 가속과 청크 단위 처리로 대규모 데이터셋 생성 시에도 안정적 성능을 유지한다.

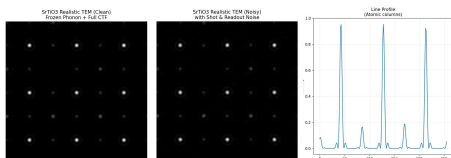


그림 3. Vacancy 및 CTF와 Noise가 추가된 이미지와 원자 위치정보 프로파일

생성 결과는 노이즈 이미지, 클린 이미지, 원자 위치 정보, 결합 라벨, 설정 값이 분리된 구조로 저장되어 다양한 딥러닝 프레임워크에 활용할 수 있다. 모든 원자의 정확한 위치와 클래스 정보를 JSON 메타데이터로 자동 생성하며, 기존 연구의 주요 병목이었던 ground truth 생성 과정을 완전

자동화한다.

III. 결론

본 연구는 TEM-AI 융합 연구의 현황을 분석하고, 도메인 간 지식 격차 해소를 위한 통합 시뮬레이터를 제안하였다. 제안하는 하이브리드 아키텍처 기반 시뮬레이터는 물리적 정확성과 사용자 접근성을 동시에 확보하여 이러한 문제들을 해결할 수 있을 것으로 기대된다. 또한, TEM 전문가가 복잡한 프로그래밍 없이도 AI 학습에 최적화된 대규모 훈련 데이터를 생성할 수 있는 환경을 제공하고자 한다. 자동화된 메타데이터 생성과 표준화된 출력 형식을 통해 기존 연구의 주요 병목이었던 ground truth 데이터 확보 과정을 효율화할 수 있다.

본 프레임워크는 vacancy 검출을 비롯하여 원자 분류, 구조 분석, 변형 측정 등 다양한 TEM 분석 문제에 적용 가능하며, 향후 4D-STEM 시뮬레이션으로 확장하여 더욱 포괄적인 전자현미경 AI 분석 도구로 발전시킬 계획이며, 이를 통해 TEM-AI 융합 연구에서 학습 데이터 생성의 접근성과 효율성을 향상시켜 더 많은 연구자들의 AI 기반 TEM 분석 기술 활용을 촉진할 것으로 기대된다.

ACKNOWLEDGMENT

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

참 고 문 헌

- [1] J. Madsen et al., "The ABTEM code: transmission electron microscopy from first principles," Open Research Europe, vol. 1, p. 24, 2021.
- [2] M. Ziatdinov et al., "Deep learning of atomically resolved scanning transmission electron microscopy images: Chemical identification and tracking local transformations," ACS Nano, vol. 11, pp. 12742-12752, 2017.
- [3] K. Lee et al., "STEM image analysis based on deep learning: Identification of vacancy defects and polymorphs of MoS₂," Nano Lett., vol. 22, pp. 4677-4685, 2022.
- [4] A. Maksov et al., "Deep learning analysis of defect and phase evolution during electron beam-induced transformations in WS₂," npj Comput. Mater., vol. 5, p. 12, 2019.
- [5] V. Jamali et al., "Anomalous nanoparticle surface diffusion in LCTEM revealed by deep learning-assisted analysis," Proc. Natl. Acad. Sci., vol. 118, p. e2017616118, 2021.
- [6] M. Botifoll et al., "Machine learning in electron microscopy for advanced nanocharacterization: Current developments, available tools and future outlook," Nanoscale Horiz., vol. 7, pp. 1427-1477, 2022.
- [7] J. Tremblay et al., "Training deep networks with synthetic data: Bridging the reality gap by domain randomization," Proc. IEEE Conf. Comput. Vis. Pattern Recognit., pp. 9967-9977, 2018.
- [8] N. M. Schneider et al., "Machine learning to reveal nanoparticle dynamics from liquid-phase TEM videos," ACS Cent. Sci., vol. 6, pp. 1894-1903, 2020.
- [9] Cowley, J.M., Moodie, A.F. (1957). The scattering of electrons by atoms and crystals. I. A new theoretical approach. Acta Crystallographica, 10, 609-619.