



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2021년05월18일
(11) 등록번호 10-2253227
(24) 등록일자 2021년05월12일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G01N 23/2251 (2018.01) G06N 3/02 (2019.01)
(52) CPC특허분류
G01N 23/2251 (2013.01)
G06N 3/02 (2019.01)
(21) 출원번호 10-2019-0158224
(22) 출원일자 2019년12월02일
심사청구일자 2019년12월02일
(56) 선행기술조사문헌
JP2008020452 A
Jacob Madsen 등, A Deep Learning Approach to Identify Local Structures in Atomic-Resolution Transmission Electron Microscopy Images, Adv. Theory Simul., 1800037, pp1-12, 2018.1.*
Artem Maksov 등, Deep learning analysis of defect and phase evolution during electron beam-induced transformations in WS₂, npj Computational Materials (2019) 12, pp1-8, 2019.2.1.*
KR101969242 B1
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
포항공과대학교 산학협력단
경상북도 포항시 남구 청암로 77 (지곡동)
연세대학교 원주산학협력단
강원도 원주시 흥업면 연세대길 1
(72) 발명자
양동환
부산광역시 북구 의성로95번길 106 (덕천동) . 시영아파트 5동 110호
최시영
경상북도 포항시 남구 청암로 77 포항공과대학교 신소재공학과
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인아이엠

전체 청구항 수 : 총 9 항

심사관 : 정치영

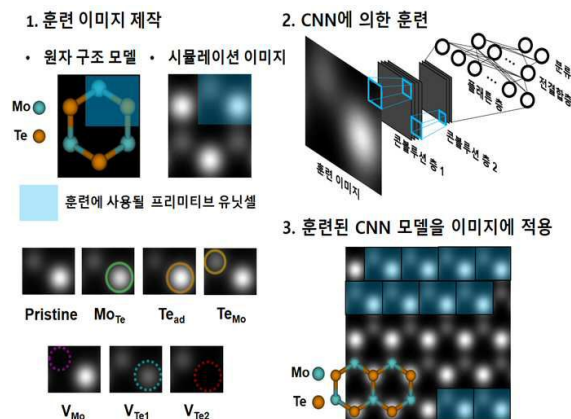
(54) 발명의 명칭 저차원 재료의 원자 이미지 분석 방법

(57) 요약

본 발명은 주사투과전자현미경을 통하여 얻어진 이미지의 특징을 인공지능 학습법 중의 하나인 지도 학습을 통하여 학습하고, 이미지에서 저차원 재료가 가질 수 있는 결함, 특히 원자가 본래 자리에 비어있거나 원자 위치에 추가되는 등의 점 결함의 구조적인 정보를 얻어내는 분석 기술에 관한 것이다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



본 발명에 따른 분석 방법은, (a) 시뮬레이션을 통해 결합이 포함된 저차원 재료의 주사투과전자현미경 이미지를 제작하여 훈련 데이터를 만드는 단계; (b) 상기 훈련 데이터를 사용한 머신러닝을 통해 예측 모델을 도출하는 단계; 및 (c) 주사투과전자현미경을 이용하여 저차원 재료에 대한 이미지를 얻고, 상기 예측 모델을 사용하여 결합을 분석하는 단계;를 포함하며, 상기 훈련 데이터는 상기 시뮬레이션에 의한 주사투과전자현미경 이미지 중에서, 상기 저차원 재료의 유닛 셀(unit cell) 보다 작은 프리미티브 유닛 셀(primitive unit cell)을 선택하여 만드는 것을 특징으로 한다.

(52) CPC특허분류

G01N 2223/401 (2013.01)

G01N 2223/426 (2013.01)

(72) 발명자

고경준

전라남도 순천시 장선배기길 89 금당대림아파트
103동 201호

김기엽

경상남도 김해시 율하3로 100 죽림마을한림폴에버
7단지아파트 714동 702호

오동고 프란시스 응곰메 오켈로

대한민국 경상북도 포항시 남구 청암로 77 2동
1305호

추유성

강원도 원주시 흥업면 연세대길 1 연세대학교 보건
과학대학 의공학부 산학관 206호

한중훈

강원도 원주시 흥업면 연세대길 1 연세대학교 보건
과학대학 의공학부 산학관 206호

양세정

강원도 원주시 흥업면 연세대길 1 연세대학교 보건
과학대학 의공학부, 백운관 406호

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1711082564
부처명	과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명	한국연구재단
연구사업명	글로벌프론티어지원(R&D)
연구과제명	신기능성 소재 특성 해석 및 첨단 분석기술 개발
기 여 율	1/1
과제수행기관명	포항공과대학교
연구기간	2019.01.01 ~ 2019.12.31

명세서

청구범위

청구항 1

- (a) 시뮬레이션을 통해 결함이 포함된 저차원 재료의 주사투과전자현미경 이미지를 제작하여 훈련 데이터를 만드는 단계;
- (b) 상기 훈련 데이터를 사용한 머신러닝을 통해 예측 모델을 도출하는 단계; 및
- (c) 주사투과전자현미경을 이용하여 저차원 재료에 대한 이미지를 얻고, 상기 예측 모델을 사용하여 결함을 분석하는 단계;를 포함하며,

상기 훈련 데이터는 상기 시뮬레이션에 의한 주사투과전자현미경 이미지 중에서, 상기 저차원 재료의 유닛 셀(unit cell)보다 작은 단위인 프리미티브 유닛셀(primitive unit cell)을 선택하여 만들고,

상기 프리미티브 유닛 셀의 선택은, 원자의 위치가 상이한 적어도 2가지 프리미티브 유닛 셀을 선택하는 방법에 의해 이루어지는, 저차원 재료의 원자 이미지 분석 방법.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 저차원 재료는 원자층 두께의 물질이 이차원적으로 배열하고 있는 것인, 저차원 재료의 원자 이미지 분석 방법.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 결함이 포함된 저차원 재료의 주사투과전자현미경 이미지는 HAADF 이미지 또는 ABF 이미지인, 저차원 재료의 원자 이미지 분석 방법.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 머신러닝은 CNN(Convolution Neural Network) 방법에 의하는 것인, 저차원 재료의 원자 이미지 분석 방법.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 (c) 단계에 있어서, 주사투과전자현미경을 이용하여 저차원 재료에 대한 이미지를 얻는 것은, 평면 이미지에서 상부에서 하부로 홀수 레이어와, 짝수 레이어를 별도로 획득하는, 저차원 재료의 원자 이미지 분석 방법.

청구항 6

삭제

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 저차원 재료는 모노레이어 또는 바이레이어로 이루어지는, 저차원 재료의 원자 이미지 분석 방법.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 결함은 공공(vacancy), 치환형 결함(substitutional defect), 침입형 결함(interstitial defect), 또는

공공(vacancy)에서 원자의 화학 흡착(chemisorption)을 포함하는, 저차원 재료의 원자 이미지 분석 방법.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 시뮬레이션을 통해 결함이 포함된 저차원 재료의 주사투과전자현미경 이미지를 제작하는 것은, 정상적으로 원자가 위치할 자리가 빈 경우, 정상적으로 위치해야 하는 원자 대신에 다른 원자가 치환된 경우, 정상적으로 존재하는 원자 위에 다른 원자가 추가되어 결합하는 경우, 정상적으로는 빈 공간에 원자가 위치하는 경우, 원자가 비어 있는 공간에 외부 원자가 화학 흡착하는 경우를 포함하도록 하여 제작되는, 저차원 재료의 원자 이미지 분석 방법.

청구항 10

제1항에 있어서,

상기 시뮬레이션을 통해 만들어진 훈련 데이터는 데이터 오그멘테이션을 통해 증가되는, 저차원 재료의 원자 이미지 분석 방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 심층 학습(deep learning)을 기반으로 주사투과전자현미경(STEM)을 통해 얻어진 저차원 재료 원자 이미지를 분석하는 기술에 관한 것이다. 보다 구체적으로, 주사투과전자현미경을 통하여 얻어진 원자 이미지의 특징을 인공지능 학습법 중의 하나인 지도 학습을 통하여 학습하고, 이미지에서 저차원 재료가 가질 수 있는 결함, 특히 원자가 본래 자리에 비어있거나 원자 위치에 추가되는 등의 점 결함의 구조적인 정보를 얻어내는 분석 기술에 관한 것이다.

배경 기술

[0003] 주사투과전자현미경 장비의 발전으로 원자 구조의 고해상도 이미지를 얻어낼 수 있고 이를 바탕으로 재료의 구조에 대한 이해가 가능하게 되었다. 이러한 이해를 바탕으로 재료의 원자 구조가 그 특성에 어떻게 영향을 미치고 구조가 변화함으로써 특성이 다르게 발현되는 지를 밝힐 수 있다. 특히 원자층 두께의 원자들이 이차원 배열을 하고 있는 저차원 재료는 적층 방법, 적층 개수 등에 다양한 변화를 줄 수 있으며, 외부 환경에 노출된 면적이 많아 자연적으로 또는 인위적으로 재료에 생긴 결함을 관찰하고 결함에 변화를 주는 등 재료의 구조적 특징과 그 특성을 규명하는데 많은 기회를 제공한다.

[0004] 주사투과전자현미경에는 HAADF(High-angle annular dark field) 이미징 모드와 ABF(Annular bright field) 이미징의 모드가 존재한다. HAADF는 무거운 원자를 이미징하는 데 사용하는 모드이며, ABF는 상대적으로 가벼운 원소(산소, 질소, 및 수소 등)를 이미징하는데 사용하는 모드로, 저차원 재료에서 HAADF 이미지와 ABF 이미지를 동시에 분석하여 존재할 수 있는 다양한 점 결함의 분석이 가능하다.

[0005] 재료가 가질 수 있는 여러 결함들과 그 결함이 재료의 전기적 특성이 미치는 영향에 대한 연구는 많은 주목을 받아왔다. 그 중 저차원 재료들은 구조적인 변형과 결함 생성이 용이하기 때문에 전기적 특성 제어에 많은 연구에 사용되고 있다. 예를 들어 2H-몰리브덴 디텔루라이드(2H-MoTe₂)의 경우 텔루륨 원자가 비어있으면 전자가 전하를 운반하는 n-형 반도체가 되며, 몰리브덴이 비어있는 경우 정공이 전하를 운반하는 p-형 반도체가 된다.

[0006] 또한, 외부에서 원자가 화학 흡착하는 경우에도 전기적인 특성을 조절할 수 있는데, 수소 원자가 화학 흡착하는 경우 전자 한 개를 제공하는 전자 공여체 역할을 하여 n-형 반도체로, 산소 원자가 화학 흡착하는 경우 전자 한 개를 받을 수 있는 전자 수용체 역할을 하여 p-형 반도체가 된다.

[0007] 이러한 원자 단위의 결함들과 그들이 저차원 재료의 전기적 특성에 미치는 영향이 많이 연구되고 있음에도 그 결함들을 분석하는데 많은 어려움이 따른다. 아무 결함이 없는 깨끗한(pristine) 상태의 저차원 재료에 비하여 원자가 비어있거나 원자가 추가된 경우 그 위치의 원자 밝기는 어두워지거나 밝아진다. 실험으로 얻어진 하나의 STEM 이미지에는 적게는 천여개, 많게는 수만개의 원자가 있으며 일일이 원자 단위에서 결함의 개수나 종류를 파악하는데 많은 시간이 들고 노력이 소모된다.

[0008] 이를 해결하기 위하여 상용 소프트웨어가 존재하는데, 이 소프트웨어는 원자 하나의 크기를 모티프(또는 기저)로 설정하여 그 영역 내의 질량 중심으로 원자의 위치(중심)를 파악하며, 이를 바탕으로 다른 위치의 원자들도 인식한다. 그런데 여기서 설정하는 모티프의 크기에 따라서 다른 위치의 원자들을 원자로 인식하거나 인식하지 못할 수도 있다. 이미지에 밝기가 나타나는 노이즈의 경우도 이를 원자로 간주할 수도 있어 추후에 이 값을 제거해야하는 번거로움도 존재한다.

[0009] 상용 소프트웨어를 이용하여 결함의 개수와 종류를 분석할 경우 기준이 될 원자에서 모티프 영역 내의 밝기를 적분하여 얻고 다른 원자 위치의 적분 강도의 비를 구하여 파악한다. 이때 결함의 종류를 파악할 상대 밝기 강도의 기준 값도 따로 통계적으로 HAADF 이미지의 시뮬레이션을 통하여 얻어야하므로 추가적인 시간이 소요된다는 단점이 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0011] (특허문헌 0001) 미국 등록특허공보 제10,176,363호

발명의 내용

해결하려는 과제

[0012] 본 발명은 점 결함이 포함된 저차원 재료의 원자 이미지를 종래에 비해 효율적이면서도 정확하게 분석할 수 있는 방법을 제공하는데 목적이 있다.

과제의 해결 수단

[0014] 상기 과제를 해결하기 위해 본 발명은, (a) 시뮬레이션을 통해 결함이 포함된 저차원 재료의 주사투과전자현미경 이미지를 제작하여 훈련 데이터를 만드는 단계와, (b) 상기 훈련 데이터를 사용한 머신러닝을 통해 예측 모델을 도출하는 단계 및 (c) 주사투과전자현미경을 이용하여 저차원 재료에 대한 이미지를 얻고, 상기 예측 모델을 사용하여 결함을 분석하는 단계를 포함하며, 상기 훈련 데이터는 상기 시뮬레이션에 의한 주사투과전자현미경 이미지 중에서, 상기 저차원 재료의 유닛 셀(unit cell)보다 작은 단위인 프리미티브 유닛 셀(primitive unit cell)을 선택하여 만드는 것을 특징으로 하는, 저차원 재료의 결함 분석 방법을 제공한다.

[0015] 본 발명에 따른 방법에 있어서, 상기 저차원 재료는 원자층 두께의 물질이 이차원적으로 배열하고 있는 것일 수 있다.

[0016] 본 발명에 따른 방법에 있어서, 상기 결함이 포함된 저차원 재료의 주사투과전자현미경 이미지는 HAADF 이미지 및 ABF 이미지의 어느 하나 또는 둘 모두가 사용될 수 있다.

[0017] 본 발명에 따른 방법에 있어서, 상기 머신러닝은 이미지 학습에 적합한 CNN(Convolution Neural Network) 방법이 사용되는 것이 바람직하나, 반드시 이에 제한되는 것은 아니며, 원자 이미지에 대한 효율적인 머신러닝이 가능한 기법이라면 특별히 제한되지 않는다.

[0018] 본 발명에 따른 방법의 상기 (c) 단계에 있어서, 주사투과전자현미경을 이용하여 저차원 재료에 대한 이미지를 얻는 것은, 바람직하게, 평면 이미지에서 상부에서 하부로 홀수층과, 짝수층을 구분하여 이루어질 수 있다.

[0019] 본 발명에 따른 방법에 있어서, 상기 프리미티브 유닛 셀의 선택은, 원자의 위치가 상이한 적어도 2가지 프리미티브 유닛 셀을 선택하는 방법에 의해 이루어질 수 있다. 이와 같이 위치가 상이한 2가지 이상의 프리미티브 유닛 셀을 사용하여 학습을 수행하게 되면, 유닛 셀 단위로 훈련 데이터를 만드는 방법에 비해, 저차원 재료에 포함되는 결함에 대해 보다 정확한 예측 모델을 도출하는데 유리할 수 있다.

[0020] 본 발명에 따른 방법에 있어서, 상기 시뮬레이션을 통해 결함이 포함된 저차원 재료는 모노레이어(monolayer) 또는 바이레이어(bilayer)로 이루어질 수 있으나, 반드시 이에 제한되는 것은 아니다.

[0021] 본 발명에 따른 방법에 있어서, 상기 결함은 공공(vacancy), 치환형 결함(substitutional defect), 침입형 결함(interstitial defect), 또는 공공(vacancy)에서 원자의 화학 흡착(chemisorption)을 포함할 수 있다.

[0022] 본 발명에 따른 방법에 있어서, 상기 시뮬레이션을 통해 결합이 포함된 저장원 재료의 주사투과전자현미경 이미지를 제작하는 것은, 정상적으로 원자가 위치할 자리가 빈 경우, 정상적으로 위치해야 하는 원자 대신에 다른 원자가 치환된 경우, 정상적으로 존재하는 원자 위에 다른 원자가 추가되어 결합하는 경우, 정상적으로는 빈 공간에 원자가 위치하는 경우 및 원자가 비어 있는 자리에 외부 원자가 화학 흡착하는 경우를 포함하도록 하여 제작될 수 있다.

[0023] 본 발명에 따른 방법에 있어서, 상기 시뮬레이션을 통해 만들어진 훈련 데이터는, 바람직하게 데이터 오그멘테이션(data augmentation)을 통해 증가시킬 수 있다.

발명의 효과

[0025] 본 발명에 따른 방법은 사람이 일일이 원자 단위로 분석해야 하는 수고를 덜어주고, 현재까지 개발된 상용 소프트웨어의 낮은 분석의 신뢰성을 보완할 수 있는 신뢰성을 제공한다.

[0026] 또한, 훈련 이미지만 확보되면 기존에 밝혀지지 않았던 저장원 재료의 재료의 구조 분석에도 적용할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0028] 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 원자 이미지 분석 방법의 과정을 개략적으로 나타낸 것이다.

도 2는 본 발명의 실시예에서 사용한 저장원 재료인 $2H-MoTe_2$ 의 상면과 단면에서 본 구조를 개략적으로 나타낸 것이다.

도 3은 시뮬레이션을 통해 원자 위치가 상이한 2가지 프리미티브 유닛 셀을 선택하여 층 수의 변화와 함께 훈련용 데이터를 만드는 예를 나타낸 것이다.

도 4는 시뮬레이션을 통해, 공공, 치환형 결합 및 침입형 결합을 포함하는 훈련용 데이터를 만드는 예를 나타낸 것이다.

도 5는 레이블링된 훈련용 데이터를 나타낸 것이다.

도 6은 이미지 콘볼루션을 나타낸 것이다.

도 7은 콘볼루션층과 신경망을 나타낸 것이다.

도 8은 CNN 아키텍처 중 훈련 방법을 나타낸 것이다.

도 9는 CNN의 손실을 측정하는 방법을 설명하기 위한 것이다.

도 10은 CNN의 정확도를 측정하는 방법을 설명하기 위한 것이다.

도 11은 CNN의 훈련 과정 및 결과를 나타낸 것이다.

도 12는 주사투과전자현미경 테스트 이미지로부터 CNN 적용을 위한 이미지를 추출하는 과정을 나타낸 것이다.

도 13은 시뮬레이션된 테스트 데이터를 CNN에 적용한 결과를 나타낸 것이다.

도 14는 실제 주사투과전자현미경 이미지를 CNN에 적용하기 위한 CNN의 신뢰성 테스트와 CNN을 실제 이미지에 적용한 결과를 나타낸 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0029] 이하 본 발명의 실시예에 대하여 첨부된 도면을 참고로 그 구성 및 작용을 설명하기로 한다.

[0030] 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 기능 또는 구성에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 불필요하게 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명을 생략할 것이다. 또한, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함"한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.

[0032] 훈련용 데이터 제작

[0033] 본 발명의 실시예에서는 저장원 재료의 주사투과전자현미경의 원자 이미지에서 결합을 분석하는 방법으로 CNN을 통해 원자 이미지에 포함된 결합을 분석할 수 있는 예측 모델을 도출하고 이를 통해 주사투과전자현미경의 원자

이미지를 분석하는 방법을 사용한다. 이 방법은 도 1에 도시된 것과 같이, 훈련용 데이터를 만드는 단계와, 훈련용 데이터를 CNN 아키텍처를 통해 학습하여 예측 모델을 도출하는 단계와, 도출된 예측 모델에 실제 주사투과 전자현미경을 적용하는 단계를 포함하여 이루어진다.

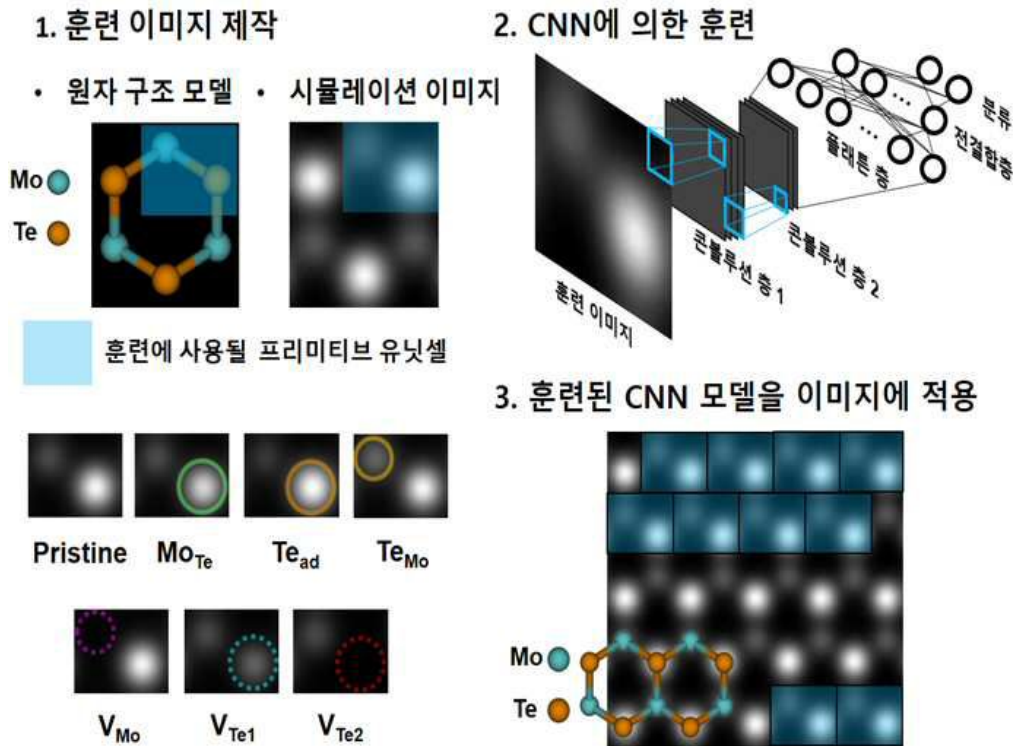
- [0034] 이를 위한 첫 번째 단계로, 지도 학습을 위해, 저차원 재료에서 가능한 결합들을 포함시킨 HAADF 이미지를 시물레이션을 통하여 얻는다. HAADF 이미지의 시물레이션은 프리미티브 유닛 셀(primitive unit cell)의 선택과, 선택된 부분에 대한 결합 도입으로 이루어진다.
- [0035] 도 2는 본 발명의 실시예에서 사용한 저차원 재료인 2H-MoTe₂의 상면과 단면에서 본 구조를 개략적으로 나타낸 것이고, 도 3은 시물레이션을 통해 원자 위치가 상이한 2가지 프리미티브 유닛 셀을 선택하여 훈련용 데이터를 만드는 예를 나타낸 것이다.
- [0036] 도 2에 나타낸 것과 같이, 훈련용 이미지를 얻기 위한 저차원 재료인 2H-MoTe₂는 상면에서 보면(top view), 몰리브덴 원자와 텔루륨 원자가 육각형을 이루는 형상을 나타내고, 단면에서 보면(cross sectional view), 몰리브덴과 텔루륨이 두께 방향으로 소정 거리를 두고 몰리브덴과 텔루륨이 배치된 구조를 나타낸다.
- [0037] 이러한 2H-MoTe₂의 저차원 재료에 대한 평면의 HAADF 이미지에서, 훈련용 이미지는, 도 3에 나타낸 것과 같이, 최 상단층의 몰리브덴 원자와 텔루륨 원자로 이루어진 프리미티브 유닛 셀(primitive unit cell)을 대상으로 만든다. 이 경우, 도 3에 나타낸 것과 같이, 몰리브덴이 좌측 상부에 위치하고 텔루륨이 우측 하부에 위치하는 프리미티브 유닛 셀과, 반대로 몰리브덴이 우측 상부에 위치하고 텔루륨이 좌측 하부에 위치하는 프리미티브 유닛 셀을 선택할 수 있는데, 이러한 방식은 실험에서 얻어진 이미지에 따라 유연하게 프리미티브 유닛 셀을 선택할 수 있어, 머신러닝의 훈련 효율을 높이는데 바람직하다.
- [0038] 도 4는 시물레이션을 통해, 공공, 치환형 결합 및 침입형 결합을 포함하는 훈련용 데이터를 만드는 예를 모노레이어 2H-MoTe₂로 도시한 것이다. 도 4에서 V_{Mo}는 Mo 원자 1개가 비어 있는 상태, V_{Te1}의 경우 Te 원자 1개가 비어 있는 경우, V_{Te2}는 2개의 Te 원자가 모두 비어 있는 상태를 의미한다. 또한, Te_{ad}는 Te 원자가 본래 Te 원자 위에 위치하고 있는 경우를 의미하고, Mo_{Te}는 Mo가 Te에 위치한 경우를 의미하며, Te_{Mo}는 Te가 Mo에 위치한 경우를 의미한다. 이러한 방법을 통해 총 6개 포인트의 결합을 가지는 훈련용 이미지를 만들 수 있으며, 실험 결과와 분석의 목적에 맞게 다양한 층 수에 따른 다양한 결합을 추가로 만들 수 있다.
- [0039] 도 5는 도 4에서 훈련용 데이터를 레이블링한 것이다. 상기한 시물레이션으로 얻은, 결합이 없는 'pristine' 포함한 각각의 이미지에 0부터 n번까지 레이블링을 하여 지도 학습이 이루어지도록 한다. 그리고 레이블링 이미지마다 데이터 오그멘테이션(data augmentation)을 사용하여 훈련시킬 이미지의 개수를 증가시킨다. 데이터 오그멘테이션은 지도 학습에 필요한 수의 훈련용 이미지를 확보하게 함과 동시에, 이상적인 결합의 상태에서 어느 정도 벗어나는 경우까지도 학습시킬 수 있도록 하는 이점이 있다. 또한, 얻어진 이미지에 노이즈(noise)를 입히는 등의 서브 샘플링(subsampling)도 부가하여 훈련용 데이터를 만들 수 있다.
- [0041] CNN에 의한 훈련
- [0042] CNN은 콘볼루션과 신경망의 합성어로, 콘볼루션 단계에서는 도 6에 나타낸 것과 같이 결합을 포함하는 저차원 재료의 훈련용 이미지를 필터를 사용하여 콘볼루션한다. 이때 이미지를 콘볼루션할 필터의 행렬 크기, 필터의 개수 등이 변수가 된다.
- [0043] 복수 개의 필터가 이미지를 콘볼루션하면서 하나의 훈련 이미지에서 여러 가지의 특징들을 뽑아내거나 유지할 수 있고, 그 결과 도 7에 도시된 것과 같이 콘볼루션 층(convolutional layer 1)이 만들어진다. 콘볼루션 후에는 이미지의 특징을 강화하는 맥스 풀링(max pooling) 층을 포함하여 서브 샘플링하는 방법도 사용 가능하다.
- [0044] 다음 콘볼루션(convolutional layer 2) 단계에서는 새로운 복수 개의 필터를 사용하여 이미지를 콘볼루션 하고, 마지막으로 콘볼루션 단계의 콘볼루션 층들을 하나의 열 또는 행 벡터로 만들어 신경망의 입력 변수로 만든다.
- [0045] 신경망은 도 8에 도시된 것과 같이 신경들이 그물처럼 연결되어있다는 의미로, 입력된 변수들이 각 신경(또는 노드)로 보내진다. 각 노드에서는 들어오는 입력 변수에 가중치를 추가하기 위해 웨이트(weight)가 곱해지고, 바이어스(bias)가 더해진다.
- [0046] 각 입력 변수들이 노드들로 들어오는데, 같은 단계에 있는 노드들이 하나의 층을 이루며 이를 은닉층(hidden layer)라 한다. 은닉층(hidden layer)에 존재하는 각 노드들의 웨이트(weight)와 바이어스(bias)를 묶어 각각

간단한 행렬로 나타낸다.

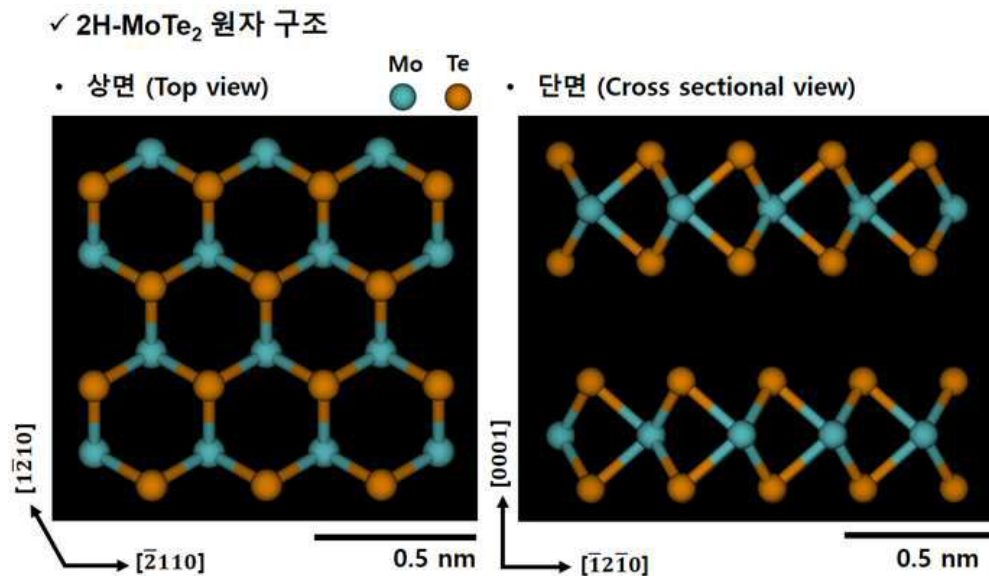
- [0047] 은닉층을 통하여 가중치가 더해진 데이터들은 최종적으로 전결합층(fully connected layer)을 통하여 결함을 예측하여 분류(classification)한다. 이때 훈련이 잘 되는지를 판단하기 위하여 훈련 정확도(training accuracy), 훈련 손실(training loss), 검증 정확도(validation accuracy), 검증 손실(validation loss) 값들을 사용한다.
- [0048] 손실 값을 측정하는 방법은, 도 9에 도시된 것과 같이, 트루(true) 레이블과 CNN 모델이 각 레이블 별로 예측한 확률을 이용하여, 도 9의 식을 이용하여 구한다.
- [0049] 정확도를 측정하는 방법은, 도 10에 도시된 것과 같이, 트루(true) 레이블과 예측된 레이블을 비교하여, 트루 레이블과 예측된 레이블이 동일하면 1을 부여하고, 예측이 틀리면 0을 부여하며, 얻어진 1과 0의 평균을 계산하는 방식으로 이루어진다. 이 때, 예측된 레이블은 손실에 사용된, CNN이 모델이 예측한 레이블들의 확률 중, 가장 높은 확률 값을 1로, 나머지 확률을 모두 0으로 만드는 원-핫 인코딩(one-hot encoding) 방법을 사용한다. 본 발명의 실시예에서는 준비된 데이터의 70%를 훈련용으로 사용하고, 나머지 30%를 테스트용으로 사용하여 훈련 정확도 및 검증 손실을 평가하였다.
- [0050] 한편, 본 발명의 실시예에서 CNN을 통해 통하여 훈련(학습)을 한다는 것은, CNN 아키텍처를 구성하는 각각의 은닉층(hidden layer)의 웨이트(weight)와 바이어스(bias)를 CNN 모델이 조정하여 최대 정확도와 최소의 손실 값을 가지도록 한다는 것을 의미한다.
- [0051] 도 11은 CNN 아키텍처를 이용한 훈련 과정 및 결과를 나타낸다. 전체 훈련 데이터에 대하여 학습이 한 번 완료되면, 훈련 에폭(training epoch)이 한 번 끝난 것이다.
- [0053] CNN 예측 모델의 적용
- [0054] CNN 예측 모델의 적용은, 훈련에 사용하지 않은 새로운 이미지를 통해 수행한다. 본 발명의 실시예에서는 시물레이션을 통한 테스트용 이미지와, 실제 주사투과전자현미경 이미지를 사용하여 실시하였다.
- [0055] 구체적으로, 실험을 통해 얻어지거나 테스트용으로 만들어진 저차원 재료의 주사투과전자현미경 이미지에서, 훈련시킨 이미지와 같은 동일하게 프리미티브 유닛 셀 단위로 이미지를 가져와 CNN 모델에 입력하여, 예측 모델에 의해 도출된 결함을, 적용한 이미지 내에 마킹을 하는 것과 동시에 가져온 프리미티브 유닛 셀의 좌표 추출을 통해 점 결함의 통계적 분석까지의 최종적인 결과를 얻는다.
- [0056] 이때, 예측 모델에 입력할 이미지는, 도 12에 도시된 것과 같이, 상부에서 하부의 순으로 홀수층과 짝수층을 구분하여, 각각 서로 다르게 취득(crop)하여 적용하는 것이 바람직하다.
- [0057] 도 13은 도 4의 훈련 데이터를 이용하여 시물레이션된 테스트 데이터를 CNN에 적용한 결과를 나타낸 것이다. 도 13에 나타낸 것과 같이, 시물레이션으로 얻은 결함이 있는 이미지를 모두 정확하게 예측하고 있으며, 특히 육안으로 구분이 어려운 결함도 정확하게 예측을 하는 결과를 나타내었다.
- [0058] 도 14는 실제 주사투과전자현미경 이미지를 CNN에 적용하기 전 점 결함 예측의 신뢰성 확인과 CNN을 적용한 결과를 나타낸 것이다. 도 14에 나타낸 것과 같이, CNN 신뢰성 테스트에서 시물레이션으로 얻은 결함이 존재하는 이미지를 모두 정확하게 예측하고 있으며, 실제 실험을 통해 얻은 2H-MoTe₂ 바이레이어 물질에 대한 주사투과전자현미경 이미지를 예측 모델에 적용 및 통계적인 분석이 가능하였다.

도면

도면1

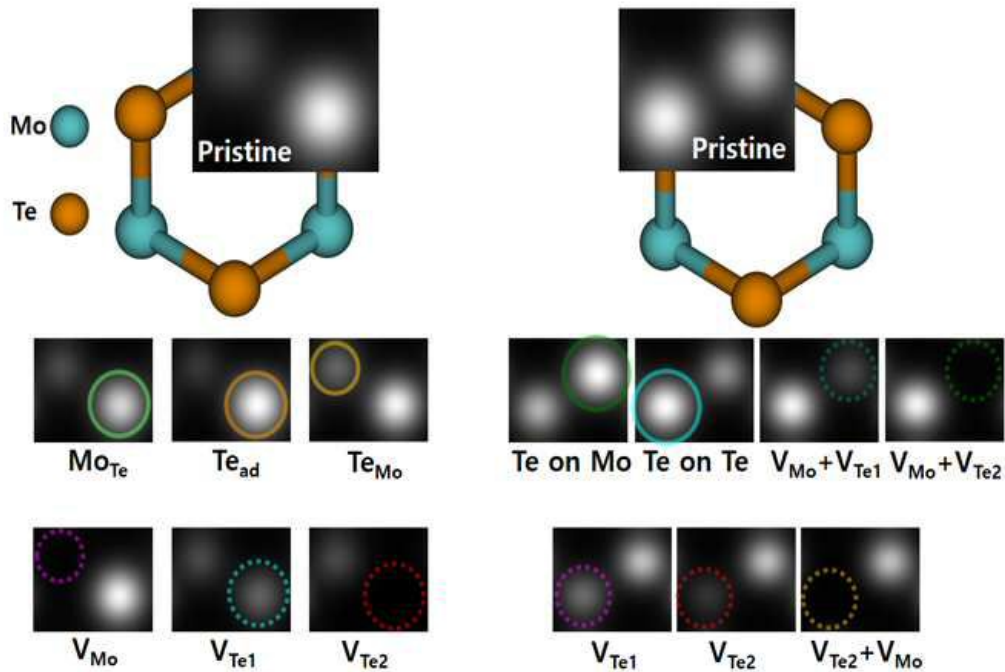


도면2



도면3

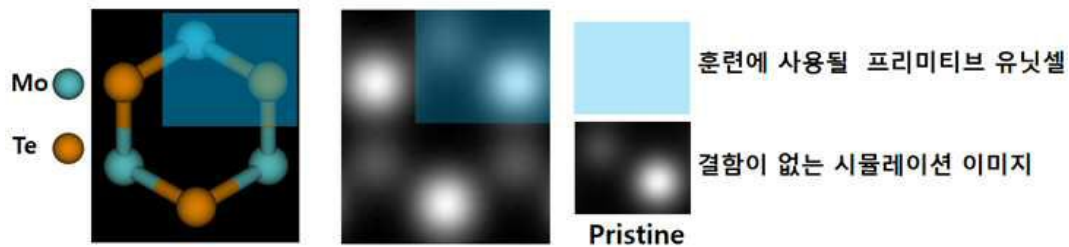
✓ 시뮬레이션된 모노레이어 2H-MoTe₂ ✓ 시뮬레이션된 바이레이어 2H-MoTe₂



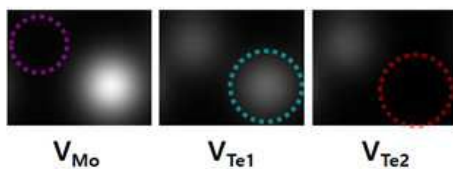
도면4

✓ 시뮬레이션으로 생성된 모노레이어 2H-MoTe₂의 결함

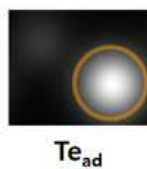
- 원자 구조 모델 • 시뮬레이션 이미지



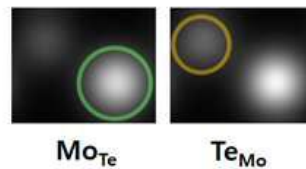
✓ 공공



✓ 침입형 결함

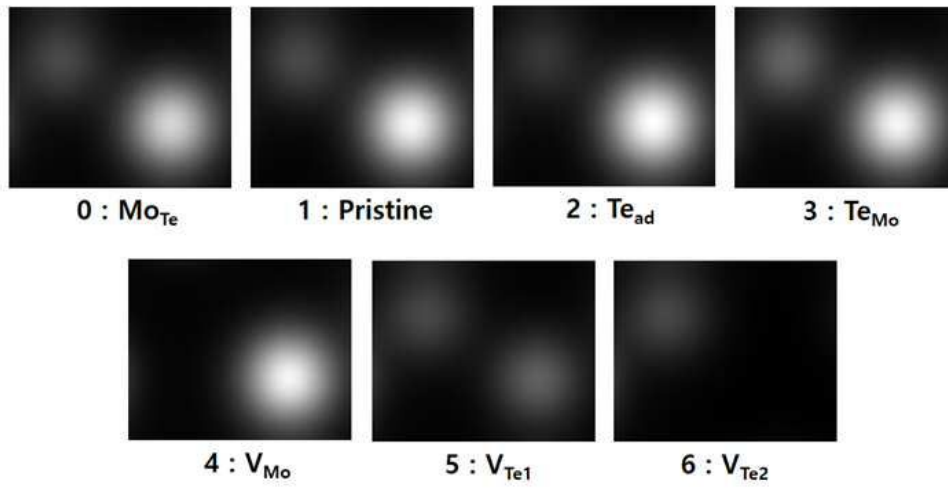


✓ 치환형 결함

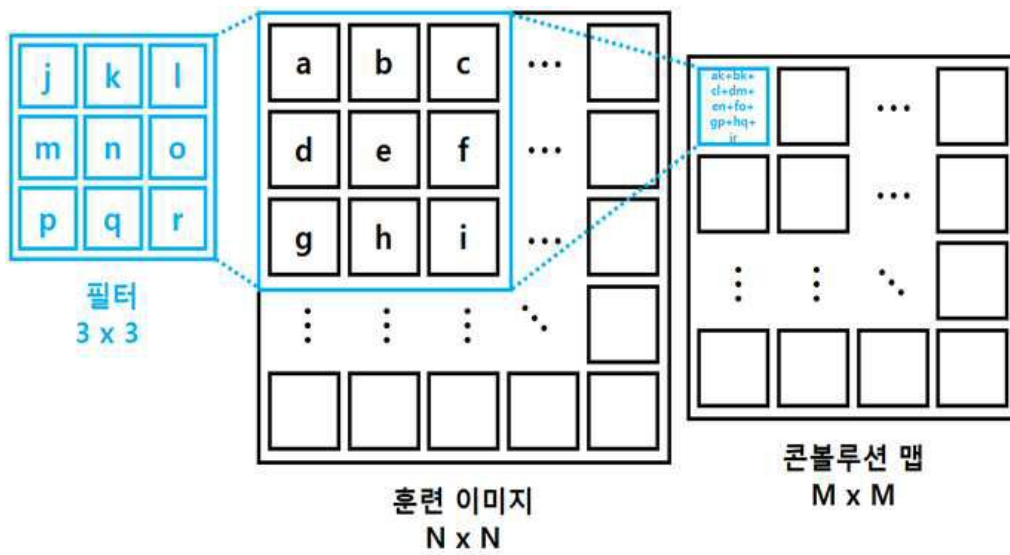


도면5

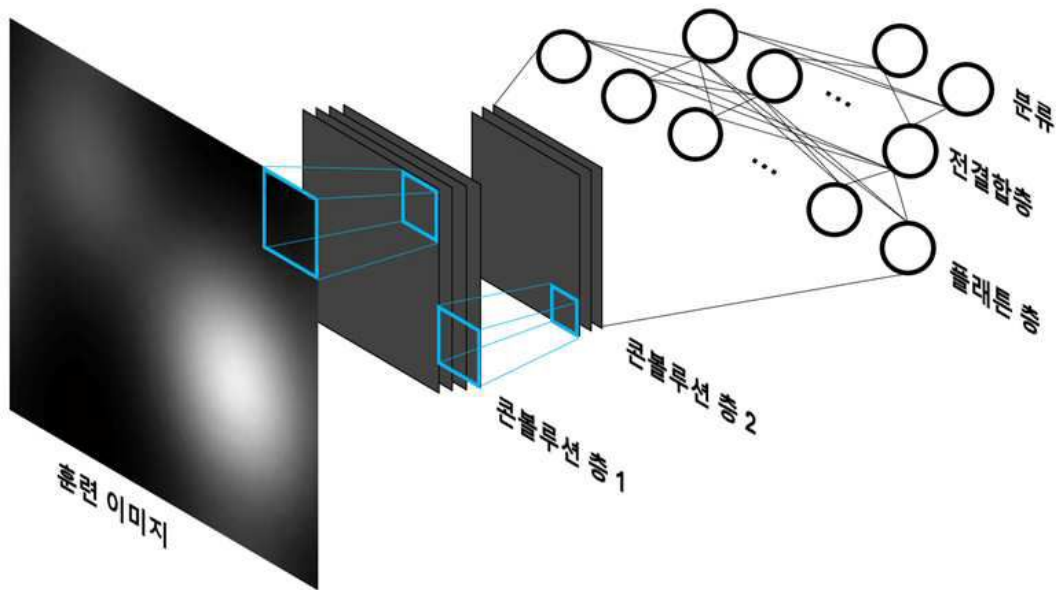
✓ 훈련 데이터 세트의 레이블링



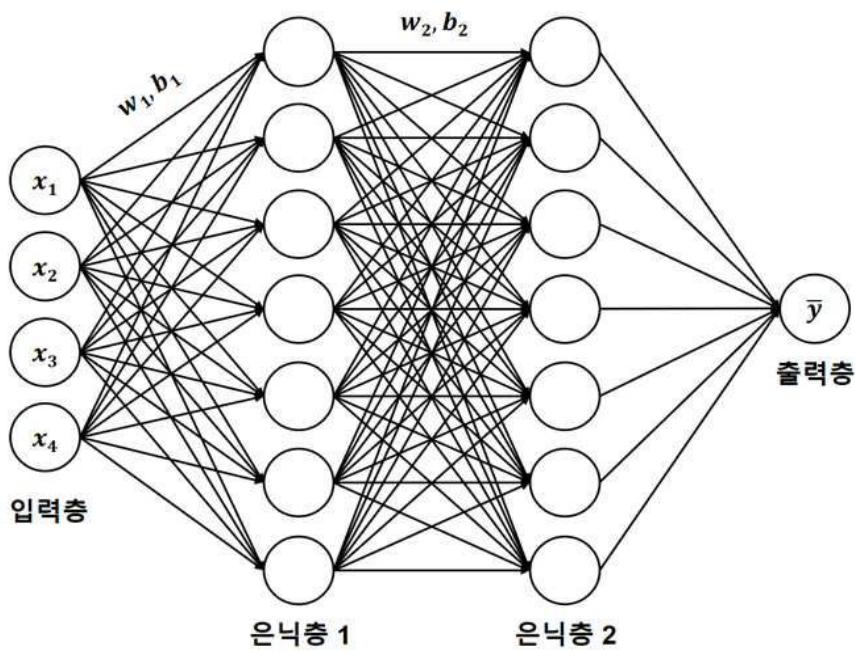
도면6



도면7

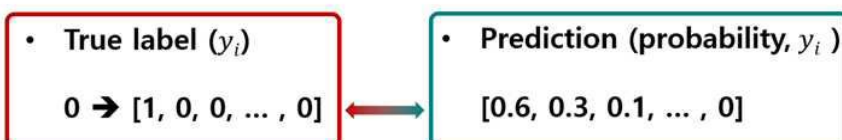


도면8

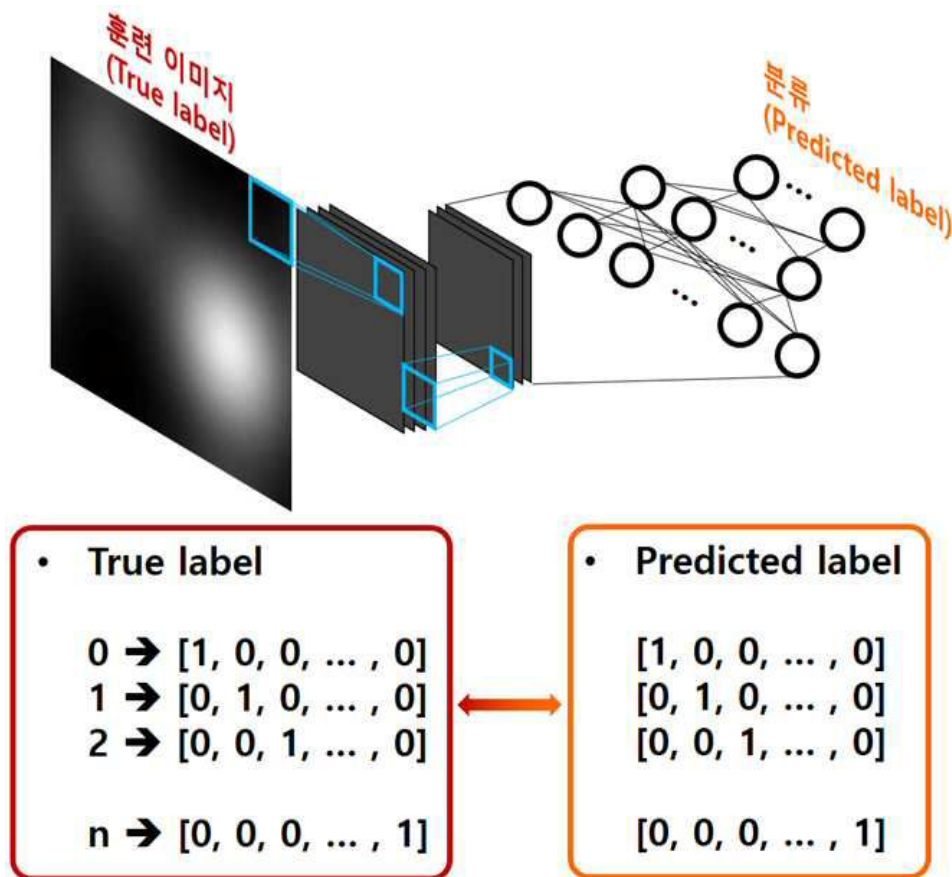


도면9

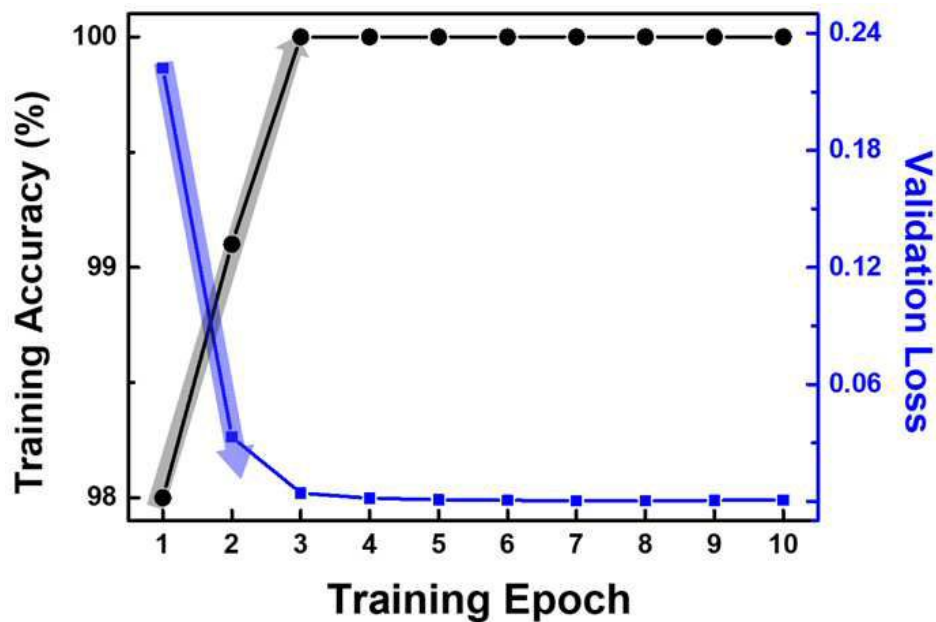
$$Loss = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y}_i)^2$$



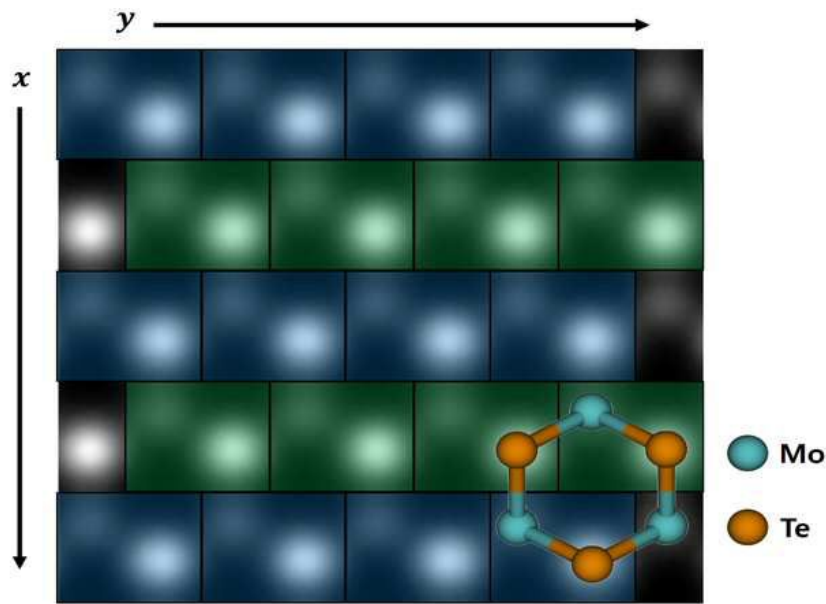
도면10



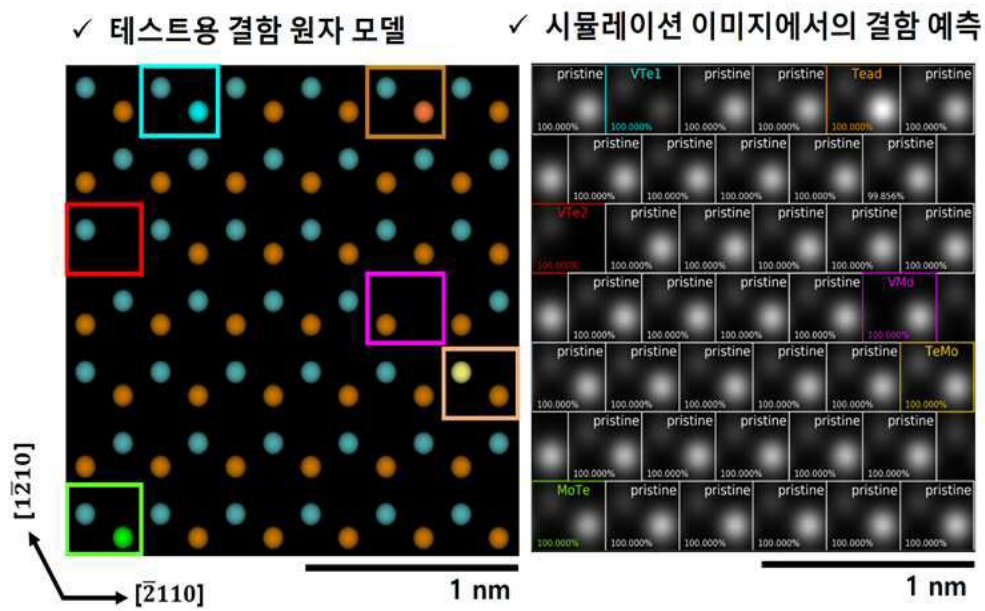
도면11



도면12



도면13



도면14

