국방품질연구논집 Vol. 7 No. 2 : 64-74, Dec. 2025 https://doi.org/10.23199/jdqs.2025.7.2.006

딥러닝 기반 질량분석 스펙트럼 분석을 이용한 생물 탐지 정확도 향상 연구

ISSN 2671-4744(Print)
ISSN 2671-9673(Online)

Enhancing Accuracy of Bio-detection by Analyzing Mass Spectrometry Spectra Using Deep Learning

정재윤, Jae-Yun Jeong
경상국립대학교, 기계융합공학과
㈜사이버네틱스이미징시스템즈, 연구원
Department of Mechanical Convergence, Engineering, Gyeongsang National University
Reseacher, Cyberneticsimagingsystems Co., Ltd

문상준, Sangjun Moon
경상국립대학교, 기계융합공학과, 교수
㈜사이버네틱스이미징시스템즈, 대표
Professor, Department of Mechanical Convergence Engineering, Gyeongsang National University
CEO, Cyberneticsimagingsystems Co., Ltd

추원식†, Won-Shik Chu
경상국립대학교, 기계융합공학과, 교수
Professor, Department of Mechanical Convergence Engineering, Gyeongsang National University

Abstract

This paper presents a highly reliable biological detection method to improve the field performance of chemical and biological mass spectrometry. Existing algorithms, which rely on a few pre-selected biomarkers, are susceptible to false alarms owing to external interference in real-world environments. Our approach leverages a deep-learning-based classification algorithm, specifically the ResNet-50 architecture, which is trained to recognize the entire spectral pattern from ion mass spectrometry data. Datasets were secured from both laboratory and field environments, including samples of bacteria, spores, biological toxins, and a “no agent injected” control. Data augmentation techniques were developed to simulate device malfunctions and enhance the robustness of the algorithm. The trained model was deployed on a military-grade single-board computer , which achieved real-time analysis within 5 s. Field testing on new and unseen data resulted in a classification accuracy of 99.348%, thus demonstrating a significant improvement over conventional biomarker-based methods. Additionally, the LIME technique was utilized to provide interpretability, which showed that the model focused on specific biomarker regions for classification. This study provides a robust and high-performance solution for detecting biological agents under challenging field conditions.

keywords : deep learning, biological agents, mass spectrometry, Chemical and Biological Mass Spectrometer(CBMS), Residual Neural Network(ResNet)

† Corresponding Author : Won-Shik Chu
Tel : +82-55-250-7302, email : wschu@gnu.ac.kr
Gyeongsang National University, Changwon Industry-Academia Campus, 54, Charyong-ro 48beon-gil, Uichang-gu, Changwon-si, Gyeongsangnam-do 51391, Republic of Korea
Received September 29th. 2025 Revised October 22th. 2025 Accepted December 30th. 2025 Published December 30th. 2025

1. 서 론

가스 물질 식별에 대한 연구는 가스 감지 센서, 가스 포집 기술, 휴대용 장비 기술을 포함한 광범위한 분야에 걸쳐 있다. 가장 일반적인 분석 방법은 가스 크로마토그래피와 질량 분석법이다. 이 연구는 대기 성분 및 유해 물질 탐지에서 시작되어 생화학 테러 및 화학 폭발 대응을 위해 확장되었다.

생화학 테러는 대량 살상을 목적으로 생물학 및 화학 무기를 사용하는 행위이다. 생물학 작용제는 병원성 미생물로, 화학 무기 및 핵무기와 함께 대량살상무기(Weapon of Mass Destruction, WMD)로 분류된다. 생물학 무기는 박테리아, 바이러스, 독소 등을 포함하며, 화학 무기는 생리적 효과에 따라 신경, 수포, 혈액, 질식, 최루 작용제로 나뉜다. 1975년 발효된 생물무기협약(Biological Weapons Convention, BWC)은 세균 및 독소 무기의 개발, 생산, 비축을 금지한다. 그러나 북한을 포함한 일부 국가들이 협약에 서명하거나 비준하지 않아 위협은 여전히 존재한다. 북한은 13종의 생물학 무기 병원체와 25종의 화학 작용제를 보유하고 있는 것으로 알려져 있다.

생물학 무기는 탐지가 어렵고 잠복기 이후 광범위한 피해를 유발할 수 있다. 1978년 소련 탄저균 유출 사고, 1995년 도쿄 지하철 사린 가스 테러, 2001년 미국 탄저균 편지 테러와 같은 사건들은 이러한 위험성을 잘 보여준다. 따라서 신속하고 정확한 위기 대응 시스템과 민·군 이중 감시망이 필수적이다. 이러한 무기 탐지를 위한 군사 장비는 영국과 미국을 포함한 여러 국가에서 개발되고 있으며, 대한민국도 자체적으로 생산한다 (Table 1). 주로 사용되는 기술은 이온 이동성 분석 및 질량 분석이며, 광학 기반 장비는 비교적 최근에 개발되었다.

(주)HKC의 화학·생물 질량분석기(Chemical and Biological Mass Spectrometer, CBMS)는 질량 분석 기반 알고리즘을 사용하여 생물학 및 화학 위협을 모두 탐지한다. 초기 생물학 탐지 알고리즘은 소수의 바이오마커만을 사용하여 매우 높은 정확도를 보였다. 그러나 실제 현장 환경에서는 외부 오염 물질과 공기 중 노이즈로 인해 오경보가 발생할 수 있다. 이를 극복하고 현장 성능을 향상시키기 위해서는 기존의 생물학 탐지 알고리즘을 개선해야 한다.

가스 식별 및 분류에 대한 기존 연구는 질량 분석, 전기 신호 변화, 광학 분석과 같은 방법을 사용하여 특성 데이터를 얻은 후, 이를 기계 학습 또는 딥러닝을 사용하여 분석하는 방식을 사용한다. 하지만 기존 연구에는 몇 가지 한계점이 있다. 예를 들어, Kim (2011a, 2011b)은 바이오마커를 이용하여 박테리아를 분류했으나, 세포 수 변화에 따른 스펙트럼 패턴의 변화로 인해 현장 적용에 어려움이 있었다[1-2]. Song et al. (2018)은 화학 센서의 정전용량 변화를 분석했으며[3], Xu et al. (2018)은 KNN(K-Nearest Neighbor) 알고리즘을 사용하여 혼합 가스를 분류했다[4]. Choi et al. (2019)은 라만 스펙트럼의 고유 피크를 분석하여 화학 물질을 군집화했다[5]. 최근에는 Papagiannopoulou et al. (2020)과 Jirayupat et al. (2021)이 머신러닝을 사용하여 병원체를 식별했으며[6-7], Wang et al. (2022)은 라만 분광학과 딥러닝을 결합하여 고정확도 병원체 식별을 달성했다[8].

Table 1. Trends in Detection Equipment Developed for Military Purposes to Detect BWA, CWA, and TIC

Country	Model	Analyte			Method
		BWA	CWA	TIC	
KOR	KCAM2	×	○	×	IMS
	CBMS	○	○	○	Mass spectrometry
	BTDS	○	×	×	Fluorescence
UK	LCD3.3	×	○	○	IMS
	GID-3	×	○	○	IMS
	ACD-ID	×	○	○	Raman spectroscopy
USA	pBDi	○	×	×	Electrochemical biochip

* BWA : Detect Biological Warfare Agents, CWA : Chemical Warfare Agents, TIC : Toxic Industrial Substances, IMS : Ion Mobility Spectrometry

이러한 선행 연구들은 실제 현장 환경에서 생물학 작용제를 식별하는 데 따르는 어려움을 보여준다

Table 2. Research Trends Using Machine Learning or Deep Learning to Classify Gaseous Substances

Analyte			Data acquisition	Bio marker	Classification method	Reference
BWA	CWA	ETC				
○	-	-	Py-MS	○	PCA	[1]
○	-	-	Py-MS	○	Weighted-PCA	[2]
-	○	-	Chemo-capacitive sensor	×	PCA	[3]
-	-	○	MOS sensor array	×	KNN	[4]
-	○	-	Raman spectrometry	○	PCA	[5]
○	-	-	MALDI-TOF MS	×	FCN	[6]
-	-	○	GC-MS	×	ML	[7]
○	-	-	Raman spectrometry	○	CNN	[8]

* Py-MS : Pyrolysis Mass Spectrometry, MOS : Metal Oxide Semiconductor, MALDI-TOF MS : Matrix-Assisted Laser Desorption/Ionization-Time-of-Flight Mass Spectrometry, GC-MS : Gas Chromatography Mass Spectrometry

(Table 2). 따라서 현장에서 얻은 질량 분석 데이터를 분석하고 해석할 수 있는 고신뢰성 분류 알고리즘에 대한 연구가 시급하다.

본 연구에서는 기존 CBMS 알고리즘보다 신뢰성이 높은 새로운 생물학적 검출 방법을 제안한다. 이를 위해 CBMS를 활용하여 실험실 및 실제 현장 환경에서 세 가지 생물학적 작용제로부터 질량 스펙트럼 데이터를 수집하였다. 이후 딥러닝 기법을 적용하여 물질을 식별하였으며, 기존 접근 방식처럼 특정 바이오마커를 사전에 선별하지 않고, 전체 스펙트럼 패턴을 인식하도록 신경망을 학습시켰다. 이러한 방법은 기존의 알고리즘보다 더 높은 신뢰도를 제공한다.

이러한 접근법은 바이오마커 연구에 필요한 과정을 생략하고, 기존 방식 대비 10배 이상 많은 수의 마커를 활용함으로써 외부 간섭에 강건한(robust) 분류 알고리즘을 구현할 수 있었으며, 본 논문에서 제안하는 훈련된 신경망의 성능은 향후 현장 시험을 통해 검증될 수 있을 것이다.

2. 스펙트럼 데이터 처리

본 연구에서는 CBMS 기반 탐지 장비를 이용하여 주입된 샘플로부터 이온 스펙트럼 데이터를 획득하였다. 생물학적 작용제 분류를 위해 신경망 모델을 설계하고, 지도 학습(supervised learning) 방식으로 스펙트럼 이미지를 입력 데이터로 사용하였다. 훈련된 신경망은 스펙트럼 내 특징 패턴을 추출하며, 산출된 특징 점수(feature score)를 바탕으로 분류를 수행한다(Figure 1).

실험실 환경에서는 액체 샘플을 점적하여 제작한 검체를 활용하였으며(Figure 2), 현장 환경에서는 CBRN(Chemical, Biological, Radiological, Nuclear) 정찰 차량에 장착된 시료 수집기 근처에 샘플을 분사한 후 공기와 함께 채취하여 분석을 수행하였다. 연구 대상은 박테리아, 포자, 생물학적 독소의 세 범주로 구분되며, 실제 작용제와 모의 물질 모두를 포함한다. 모든 라벨은 실험실 조건에서 평가 가능하지만, 현장 시험에서는 박테리아와 포자의 특성이 변질되어 안정적 데이터 확보가 어렵기 때문에 독소 및 미주입 조건에 한정하였다.

데이터 획득 과정에서 다양한 농도, 장비, 환경 조건을 고려하여 반복적인 실험을 수행하였다. 이온 스펙트럼 데이터(Figure 3)는 질량 대 전하 비율(X축), 시간(Y축), 신호 강도(Z축)로 구성된다. 보안상의 이유로 질량 대 전하 비율은 375개의 마커로 치환하였다. 시간축은 전체 측정 주기를 나타내며, 반응 이전

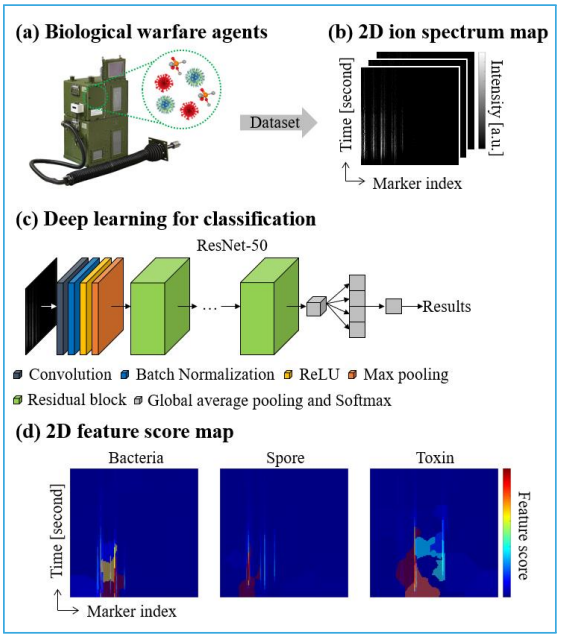

Figure 1. Overview on robust deep learning algorithm for classification of biological agents ion spectrum.

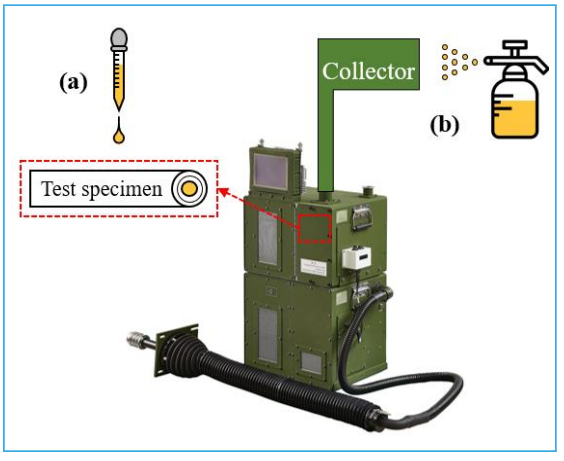

Figure 2. Preparation of samples for mass spectrometry of biological agents; (a) The test specimen with biological agents, (b) Spray biological agents around the collector exposed to the outside of the K-NBC reconnaissance vehicles

의 준비 구간은 센서의 불규칙성이 크므로 분석에서 제외하였다.

반응 구간은 마커 1-128에서 주로 관찰되며, 마커 129-375는 비관련 노이즈로 간주된다. 실험실 데이터는 66-116초, 현장 데이터는 185-235초 구간에서 주요 반응이 나타났다.

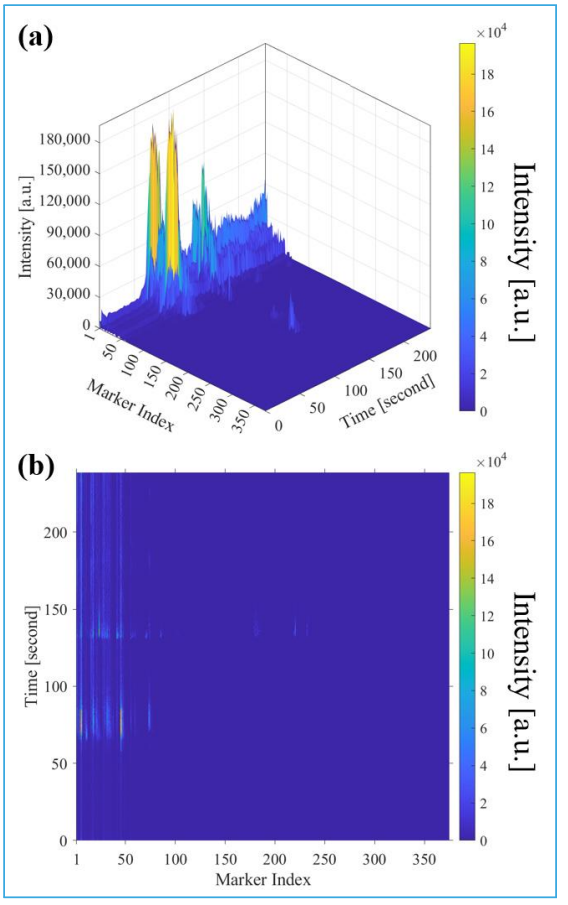

Figure 3. Visualize the ion spectrum data of biological agents obtained by mass spectrometry

신경망 입력은 2차원 그레이스케일 이미지로 변환된 데이터이다. 원본은 시간-신호 강도 행렬이며, 결측값은 0으로 대체하였다.

또한 신뢰성이 낮은 5개의 마커를 제거하여 총 370개의 마커를 사용하였다. 데이터는 최소-최대 정규화와 선형 보간법을 거쳐 370×370 크기의 8비트 부호 없는 정수형 배열(unit8)로 변환되었으며, 이는 신경망 학습을 위한 이미지 입력과 동일한 형식이다.

최종적으로 총 6,438개의 데이터를 확보하였다. 이 중 박테리아 1,716개, 포자 1,807개, 독소 1,835개, 미주입 데이터 1,080개로 구성되며(Table 3),

각 데이터셋은 8:2 비율로 무작위 분할하여 학습 및 검증에 활용하였다.

미주입 데이터는 생물학 작용제를 의도적으로 주입하지 않고 장비의 정상 작동 상태 및 주변 환경의 공기만을 측정한 데이터를 의미하며, 실험실 환경, 현장 시험(야전) 환경 등 다양한 환경에서 단순히 장비만 구동하여 데이터를 확보하였다. 이는 장비의 배경 신호(background signal)와 공기에 의한 노이즈를 학습하여 실제 현장에서 발생할 수 있는 다양한 비위협 신호들을 위협으로 잘못 판단하는 오경보(false positive)를 줄이는 역할을 수행한다. 전체 데이터셋에서 차지하는 비율은 다른 클래스에 비해 다소 적지만(약 16.8%) 다양한 환경에서의 배경 신호를 충분히 대표할 수 있도록 수집하여, 최종적으로 훈련된 모델의 검증 및 현장 시험에서 매우 낮은 오경보율을 보이는 것을 확인하였다.

훈련된 모델의 성능은 현장 데이터로 평가하였다. 추가적으로, 장비 결함으로 인한 최대 18초의 측정 지연을 모의하기 위해 데이터 증강(data augmentation)을 적용하였다. 구체적으로, Y축에 무작위 0 배열을 삽입하여 측정 지연 및 신호 조기 발생 상황을 재현하였다(Figure 4(a), Figure 4(b)). 반면, X축 변형은 마커 위치의 왜곡을 초래하여 식별 정확도에 부정적 영향을 미치므로 적용하지 않았다.

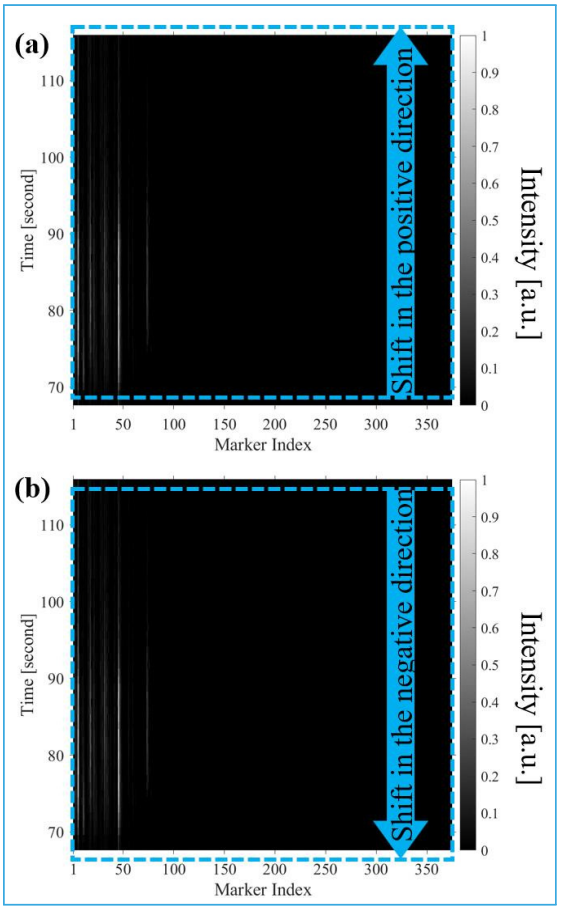

Figure 4. Data augmentation for the time(Y axis) of neural network input data

Table 3. The Number of Ion Spectrum Data of Biological Agents Acquired to Develop the Deep Learning Algorithm

Label	Training (80%)	Validation (20%)	Sum
Bacteria	1,373	343	1,716
Spore	1,446	361	1,807
Toxin	1,468	367	1,835
Non-BWA	864	216	1,080
Sum	5,151	1,287	6,438

3. 지도 학습 기반 스펙트럼 분석

본 연구에서 채택한 모델은 딥러닝 기반 합성곱 신경망(Convolutional Neural Network, CNN)이다. 이 접근법은 이미지 분류에 강점을 가진 CNN 구조를 활용하여 생물학적 작용제의 이온 스펙트럼을 분류하는 데 목적을 둔다. Ismail Fawaz et al. (2019)은 시계열 분류 연구에서 CNN과 심층 잔차 신경망(Deep Residual Networks, DResNet)이 우수한 성능을 보임을 확인하였으며[9], He et al. (2015)은 잔차 학습(residual learning) 프레임워크를 제안하여 과적합(overfitting)과 기울기 소실(vanishing gradient) 문제를 효과적으로 극복할 수 있는 ResNet 구조를 개발하였다[10].

ResNet-50은 50개 층으로 구성된 CNN으로, 잔

차 유닛(residual unit)을 통해 입력 x와 가중치 층의 출력 $F(x)$를 연결하여 잔차를 최소화한다(Figure 5(b)). 각 층의 출력은 ReLU(Rectified Linear Unit) 활성화 함수로 처리된다. 본 연구에서는 새로운 분류 과제를 위해 ResNet-50의 입력 및 출력 층을 수정하였다. 입력 층은 370×370 크기의 그레이스케일 이미지를 처리하도록 설계하였으며, 출력 층은 대상 클래스 수에 맞게 조정하였다. 최종 분류는 소프트맥스(softmax) 활성화 함수를 통해 이루어지며, 출력 확률은 0과 1 사이의 값을 가지면서 총합이 1이 되므로 각 클래스에 대한 확률로 해석할 수 있다. 따라서 네트워크의 최종 결과는 예측된 라벨과 그에 대응하는 확률로 제시된다.

신경망 학습을 위해 다양한 최적화 설정을 구성하였다. 가중치 최적화에는 확률적 경사 하강법(Stochastic Gradient Descent, SGD)을 개선한 Adam(Adaptive Moment Estimation) 최적화 알고리즘을 사용하였다. Adam은 모멘텀 항을 포함하여 학습의 안정성과 성능을 향상시킨다. 또한 초기 학습률, 학습률 감소 전략, L_2 정규화 계수 등의 하이퍼파라미터를 함께 조정하였다. 학습 과정에는 미니 배치(mini-batch) 방식이 적용되었으며, 최대 에포크(epoch) 수와 배치 크기를 설정하였다 (Table 4). 더불어, 검증 손실(validation loss)에 기반한 조기 종료(validation patience) 기법을 도입하여 불필요한 과적합을 방지하고 훈련 효율을 향상시켰다.

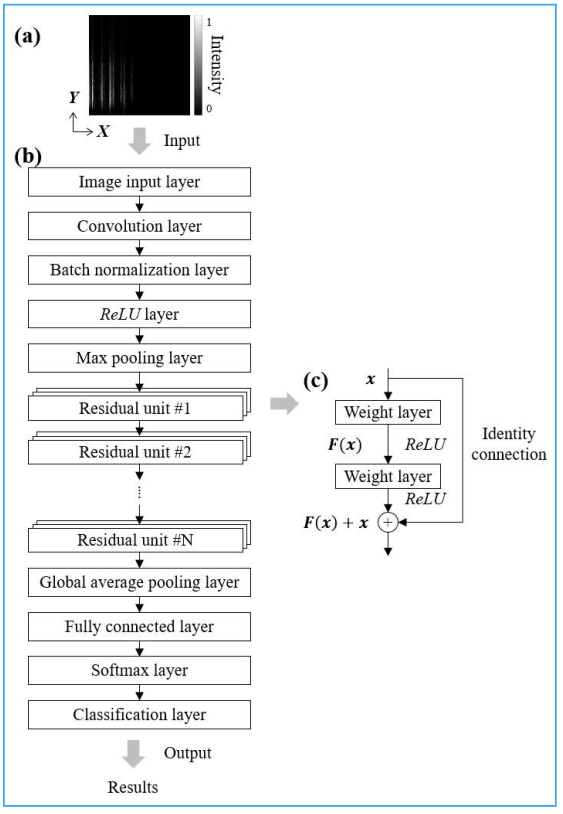

Figure 5. Deep learning neural network architecture; (a) Example of input data for a trained neural network, (b) Neural network layer based on ResNet, (c) Concept of residual unit

Table 4. Input Arguments and Corresponding Values Specified to Train a Neural Network Based on ResNet

Variable	Value
Solver	adam
InitialLearnRate	0.0001
LearnRateSchedule	piecewise
LearnRateDropPeriod	10
LearnRateDropFactor	0.7
L_2 Regularization	0.00001
SquaredGradientDecayFactor	0.99
MaxEpochs	50
MiniBatchSize	64
Shuffle	every-epoch
ValidationData	imdsValidation
ValidationFrequency	10
ValidationPatience	10
ExecutionEnvironment	multi-gpu

본 연구의 훈련 과정은 4개의 NVIDIA GeForce RTX 3090 GPU를 장착한 고성능 컴퓨터에서 수행되었으며, 다중 GPU 병렬 풀(multi-GPU parallel pool)을 활용하여 병렬 연산을 가속화하였다.

최적화 알고리즘 관련하여 Adam은 각 파라미터

에 대한 그래디언트의 1차 모멘텀(방향성)과 2차 모멘텀(학습률 크기)을 함께 고려하여 가중치를 업데이트한다. 이러한 적응적 학습률 조정 방식은, 본 연구에서 다루는 것과 같이 복잡하고 노이즈가 많은 고차원 데이터(스펙트럼 이미지)의 학습에서 발생할 수 있는 안장점(saddle point)이나 지역 최적해(local minimum) 문제를 회피하고, 빠르고 안정적인 수렴을 유도하는 데 매우 효과적인 것으로 알려져 있다. Adam의 내부 파라미터인 Squared Gradient Decay Factor (파라미터명: SquaredGradientDecayFactor)는 원 논문에서 제안된 표준 권장값인 0.99를 그대로 사용하여 안정성을 확보하였다.

학습률 운용 전략(learning rate strategy)에 있어서, 초기 학습률(initial learn rate)은 ImageNet으로 사전 훈련된 ResNet-50 모델을 질량 스펙트럼 데이터에 맞게 미세 조정(fine-tuning)하는 방식으로 본 연구에 적용하였다. 사전 훈련을 통해 이미 강력한 특징 추출 능력을 갖춘 모델의 가중치를 급격하게 변경할 경우, 기존에 학습된 유용한 정보가 손상될 수 있다. 따라서 0.0001이라는 비교적 낮은 초기 학습률을 설정하여, 기존의 지식을 유지하면서 새로운 데이터에 안정적으로 적응하도록 하였다. 학습률 계획(learn rate schedule)적용에 있어 학습 과정 전반에 걸쳐 고정된 학습률을 사용하기보다는, 학습 진행 상황에 따라 학습률을 동적으로 조절하는 구간별(piecewise) 스케줄을 사용하였다. 이는 10에포크(learn rate drop period)마다 학습률을 이전 단계의 70% 수준(learn rate drop factor)으로 점진적으로 감소시키는 방식이다. 이 전략은 학습 초반에는 비교적 큰 보폭으로 빠르게 최적점을 향해 나아가고, 최적점 근처에 도달했을 때는 보폭을 줄여 더 정밀하게 최적해를 탐색할 것으로 판단된다. 과적합 방지 기법(regularization)에 있어 L_2 정규화(L_2 regularization)는 가중치 감쇠(weight decay)라고도 불리며, 손실 함수에 모든 가중치의 제곱합에 비례하는 페널티 항을 추가하는 방식이다. 이를 통해 모델이 특정 가중치에 과도하게 의존하는 것을 막고, 전반적으로 가중치 값을 작고 고르게 유지하도록 유도한다. 결과적으로 모델의 복잡도가 감소하여 일반화 성능이 향상된다. 페널티의 강도는 0.00001로 설정하여, 학습을 방해하지 않는 선에서 과적합을 억제하도록 하였다. 조기 종료(validation patience)관련하여 훈련 과정에서 검증 데이터셋(validation dataset)의 손실 값을 지속적으로 모니터링하였다. 만약 10회의 검증 주기 동안 손실 값이 더 이상 감소하지 않고 정체되거나 증가할 경우, 이는 모델이 일반화 성능을 잃고 과적합을 시작했다는 신호로 간주하여 훈련을 자동으로 중단시켰다. 이 기법은 불필요한 추가 학습을 막고, 검증 성능이 가장 좋았던 시점의 모델을 최종 결과로 채택하여 과적합을 효과적으로 방지한다.

데이터셋은 모든 마커와 분석 시간을 조합하여 구성되었으나, 일부 마커는 작용제 반응이 없거나 노이즈를 포함하고 있어 분석 범위를 Figure 6에 제시된 영역으로 제한하였다.

합성곱 신경망은 입력 스펙트럼 이미지를 기반으로 물질 유형을 분류하지만, 분류 결정에 대한 직접적인 해석은 제공하지 않는다. 따라서 모델의 판단 근거를 설명하기 위해 해석 가능성 기법을 적용하였다.

본 연구에서는 LIME(Locally-Interpretable

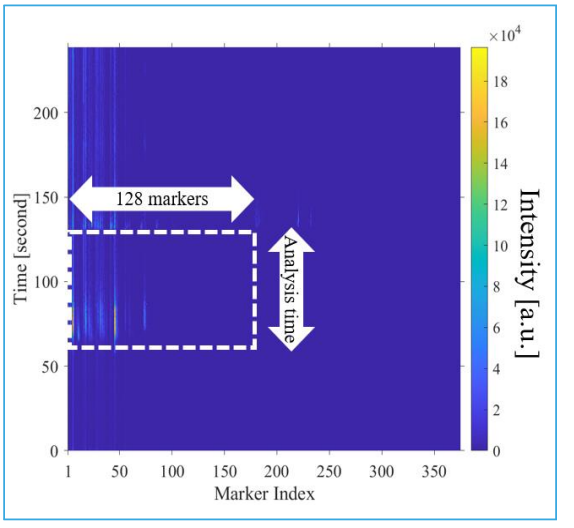

Figure 6. The range of ion spectrum changes depending on the type of biological agents

Model-agnostic Explanation) 기법을 활용하여 입력 이미지 내에서 분류에 기여하는 영역의 중요도를 산출하였다. 구체적으로, 회귀 모델에 적합한 imageLIME 함수를 이용하여 입력 이미지 특징을 점수 맵(score map)으로 시각화하였다(Figure 7). 해당 출력 행렬은 입력과 동일한 크기를 가지며 배정밀도(double-precision) 배열 값으로 구성된다. 이를 시각화하기 위해 데이터 유형과 범위를 입력과 일치시킨 후, 컬러 점수 맵을 투명도로 조정하여 그레이스케일 이미지 위에 중첩시켰다.

훈련된 신경망은 단일 모델 형태뿐 아니라 컴파일된 동적 연결 라이브러리(Dynamic Link Library, DLL) 형태로도 배포 가능하다. 또한 ONNX(Open Neural Network Exchange) 포맷을 통해 다양한 프레임워크에서의 상호 운용성을 확보하였다. ONNX 파일에는 네트워크의 층 구조와 가중치가 포함되며, ONNX 런타임(runtime)을 이용해 여러 운영 체제와 하드웨어 환경에서 분류 작업을 수행할 수 있다(Figure 8).

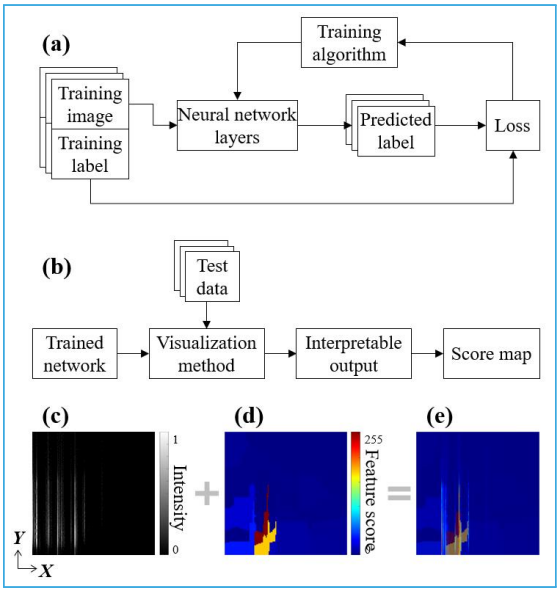

Figure 7. Schematic diagram for extracting spectral features by supervised learning; (a) Supervised learning with training dataset, (b) Extracting features for test images using trained neural network, (c) Example of input data for a trained neural network, (d) Visualization of areas, and (e) Score map

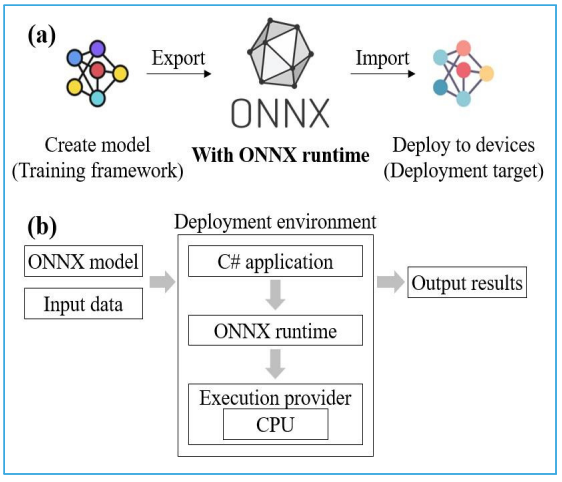

Figure 8. Deployment of trained neural network; (a) Export trained models to ONNX format, (b) ONNX runtime works with hardware acceleration libraries through its extensible execution providers framework

장비 운영 소프트웨어에 신경망을 통합하기 위해 .NET 프레임워크 기반 환경에 맞게 수정하였다. 배포 대상 장비의 단일 보드 컴퓨터(Single Board Computer, SBC)는 GPU가 없는 Intel Celeron 프로세서를 탑재하고 32비트 Windows 7 운영 체제를 사용한다. 이 환경에서의 신경망 실행은 NuGet 패키지를 통해 제공되는 ONNX 런타임 및 관련 종속 항목을 설치하여 가능하다.

신경망 모델 외에도 데이터 전처리와 결과 처리는 C# 언어로 구현하였다. 개발 환경과 배포 환경 간의 일관성을 유지하기 위해 변수 유형 차이에 따른 오차를 면밀히 조정하였다. 최종적으로, C# 기반 분석 소프트웨어는 장비 운영 소프트웨어로부터 데이터를 수신한 뒤 신경망을 통한 분석을 수행하고, 그 결과를 다시 전송하는 구조로 구현되었다.

4. 결 과

본 연구에서는 딥러닝 프레임워크로 MATLAB 및 해당 딥러닝 툴박스를 사용하였다. 지정된 경로의 이미지는 데이터저장소(data store) 객체로 관리하였으며, 훈련 및 검증 데이터셋은 무작위 분배를 통해 준비하였다. 지도 학습을 위한 라벨은 데이터저장소의 하위 폴더 이름에 따라 자동 지정되었으며, 데이터는 박테리아, 포자, 생물학적 독소, 그리고 작용제 미주입의 네 가지 범주로 구분되었다.

ResNet-50 기반 신경망은 Table 4에 제시된 조건으로 훈련하였다. 두 가지 훈련 방식을 수행하였는데, 첫 번째는 검증 조건을 만족하면 조기에 종료되는 모델(조기 종료값을 유한 정수로 설정)이며, 두 번째는 최종 에포크까지 학습을 진행하는 모델(조기 종료값을 무한대로 설정)이다. 조기 종료 모델은 7 에포크를 수행하는 데 10분 57초가 소요되었으며, 100.0%의 검증 정확도를 달성하였다. 최종 에포크 모델은 50 에포크를 87분 40초에 걸쳐 수행하였고 동일하게 100.0%의 검증 정확도를 달성하였다. 훈련 시간과 학습률에 차이가 있었음에도 두 모델 모두 검증 데이터셋을 완벽히 분류하였다. 모델의 분류 성능은 혼동 행렬(confusion matrix)을 통해 시각화하였다.

훈련된 신경망은 일반적인 분류 함수에 의해 입력 데이터를 라벨과 유사도 점수로 변환한다. 이후 image LIME 기법을 적용하여 분류 결과에 기여하는 이미지 영역을 식별하였다. 입력 데이터와 분류 결과를 함께 제공하면, image LIME은 각 특징의 기여도를 점수 맵(score map)으로 출력하며, 이를 통해 Figure 9와 같이 분류에 영향을 미친 영역을 시각적으로 확인할 수 있다. 입력 데이터는 370×370 행렬(136,900셀)로 구성되며, 출력 점수를 이진화하여 값이 1인 셀의 비율을 계산하였다. 분석 결과, 박테리아의 경우 평균 6.26%, 포자는 4.44%, 생물학적 독소는 7.49%의 영역에 집중하였다. 반면, 작용제 미주입 데이터는 평균 23.23%의 넓은 영역을 활용하였다. 이는 규칙성이 뚜렷한 데이터(박테리아, 포자, 독소)의 경우 상대적으로 좁은 영역에 집중하는 반면, 불규칙한 데이터(미주입)의 경우 훨씬 넓은 영역을 필요로 함을 의미한다.

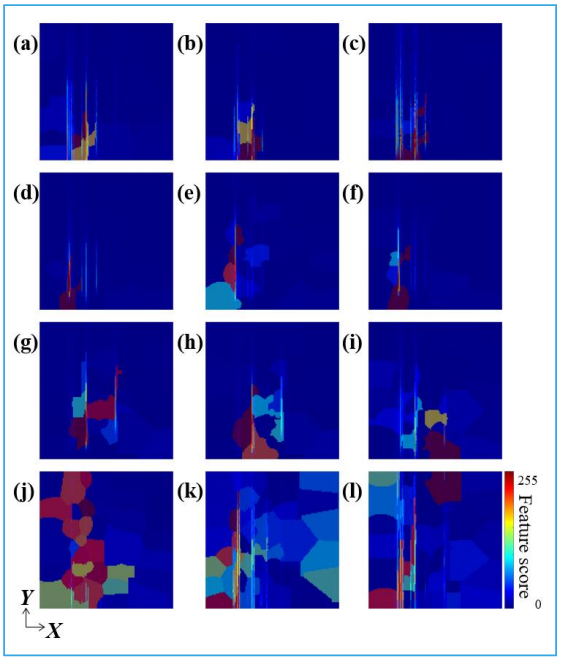

Figure 9. Visualize as a score map based on importance scores that contribute to classification decisions of trained neural network; (a, b, c) Score map of data labeled bacteria, (d, e, f) Score map of data labeled spore, (g, h, i) Score map of data labeled toxin, (j, k, l) Score map of data labeled non-BWA.

또한, 본 연구에서는 CBMS에 통합된 딥러닝 알고리즘의 현장 운용 가능성을 검증하기 위해 IOC (Initial Operating Capability) 평가를 수행하였다. 실험실 데이터로 훈련/검증된 모델의 성능 평가는 수집 시기, 장비, 환경이 완전히 다른 IOC 데이터셋을 통해 수행하였다. 본 연구에 사용된 훈련 데이터셋은 서로 다른 여러 대의 CBMS 장비, 2020년 ~ 2023년에 걸친 다양한 측정 시기, 그리고 환경 차이가 존재하는 조건에서 수집된 데이터들을 모두 포함하고 있다. 시험은 군에서 운용 중인 신형 CBRN 정찰 차량에 탑재된 단일 CBMS 장치를 대상으로 실시하였으며, 다양한 기상 및 지리적 조건에서 수행되

었다. 현장 시험에서는 생물학적 독소와 작용제 미주입 시나리오에 대한 새로운 데이터를 실시간으로 획득하고 분석하였다. 데이터 획득 직후 SBC에 이식된 딥러닝 알고리즘이 활성화되었으며, 최대 5초 이내에 분류 결과가 도출되었다.

현장 시험을 통해 총 460개의 새로운 데이터가 수집되었으며, 이 중 생물학적 독소는 77개, 작용제 미주입 데이터는 383개였다. 훈련에 사용되지 않은 이 데이터로 분석한 결과, 전체 분류 정확도는 99.348%로 나타났으며(Figure 10), 성능평가지표는 Table 5에 나타내었다.

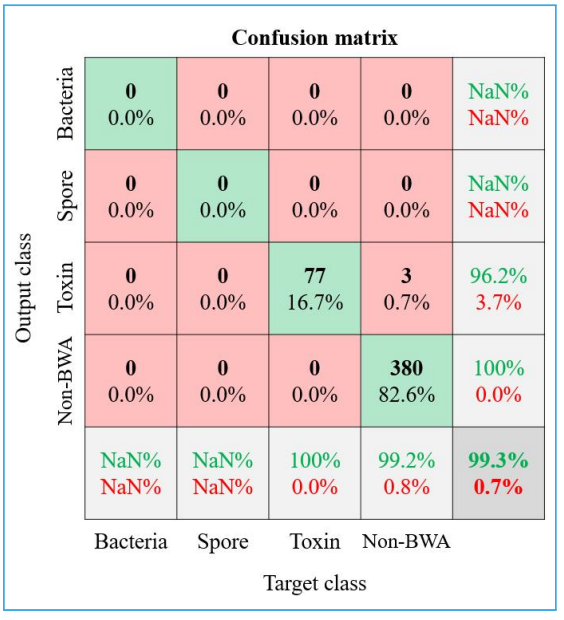

Figure 10. Confusion matrix that analyzes new dataset obtained from field tests using trained neural network

Table 5. Result of Precision, Recall, F1-Score Based on Confusion Matrix

Class	Precision	Recall	F1-Score
Toxin	0.963	1.000	0.981
Non-BWA	1.000	0.992	0.996
Macro Avg.	0.982	0.996	0.989
Weighted Avg.	0.994	0.993	0.994

단, 미주입 데이터를 독소로 잘못 분류한 3건의 오경보(false positives)가 발생하였다. 이는 현장 환경에서 추가 데이터 수집 및 학습이 필요함을 시사한다.

5. 결 론

생물학적 작용제로 인한 대규모 피해를 예방하고 신속한 제독 및 치료 체계를 구축하기 위해서는 고성능 탐지 및 분석 기술이 필수적이다. 또한 현장 환경에서 안정적인 식별 성능을 확보하기 위해서는 현장 데이터의 고유 특성에 대한 정밀한 연구가 요구된다. 본 연구에서는 실험실 환경에서 획득한 데이터셋(박테리아, 포자, 생물학적 독소, 작용제 미주입)과 현장 시험에서 수집한 데이터셋(생물학적 독소, 작용제 미주입)을 비교·분석하였다. 이를 위해 신뢰성이 검증된 딥러닝 기반 분류 알고리즘을 적용하였다.

1. **특징 시각화**: 분류 알고리즘에서 추출된 특징을 점수 맵으로 시각화하여 각 작용제 유형별 바이오마커 영역을 도출하였다. 분석 결과, 포자는 가장 협소한 영역으로도 식별이 가능하였으며, 생물학적 독소는 상대적으로 넓은 영역을 요구하였다. 한편, 특정 마커가 부재한 '작용제 미주입' 조건은 세 가지 작용제보다 약 4배 이상 넓은 영역을 필요로 하는 것으로 나타났다.
2. **현장 시험 성능**: 생물학적 독소 및 '작용제 미주입' 시료에 대해 현장 시험을 수행한 결과, 본 모델은 훈련에 포함되지 않은 신규 데이터에서 99.348%의 높은 분류 정확도를 달성하였다. 이는 일부 제한된 바이오마커에 의존하던 기존 알고리즘 대비 강건한 성능을 입증하는 결과이다.
3. **실시간 분석**: 본 알고리즘은 군용 시스템의 SBC(Single Board Computer)에 구현되었을 때 CPU 연산만으로도 5초 이내에 분석 결

과를 산출하였다. 이는 딥러닝 모델의 경량화와 소프트웨어 최적화에 기인하며, 실시간 모니터링 체계로의 적용 가능성을 보여준다.

본 연구에서 제안한 방법론은 현재 현장 시험에서 제외된 박테리아 및 포자에 대해서도 현장 데이터가 확보될 경우 동일하게 적용 가능하다. 또한 기존 바이오마커 기반 방식으로는 해결이 어려웠던 실제 야전 환경에서의 생물학 작용제 탐지라는 문제에 딥러닝 방법론을 성공적으로 적용하고, 저사양 군용 SBC 환경에 실제 배포하여 실시간 분석 가능성까지 입증하였다. 이를 바탕으로, 생물학적 작용제 데이터셋이 확장될수록 비지도 학습 기반 접근법을 통해 신경망을 훈련시키고, 생물학적 특성 변화를 효과적으로 식별할 수 있을 것으로 기대된다.

참고문헌

1. Kim, J. H., "Application of TMAH-based Pyrolysis Mass Spectrometry to a Biological Detection System", *Journal of the Korea Institute of Military Science and Technology*, 14(2), pp. 289-298, 2011a.
2. Kim, J. H., "Analysis of Pyrolysis MS Spectra in Top-down Approach and Differentiation of Gram-type Cells", *Journal of the Korea Institute of Military Science and Technology*, 14(4), pp. 719-725, 2011b.
3. Song, S. G., Ha, S., Cho, H. J., Lee, M., Jung, D., Han, J. H., & Song, C., "Single-walled carbon-nanotube-based chemocapacitive sensors with molecular receptors for selective detection of chemical warfare agents", *ACS Applied Nano Materials*, 2(1), pp. 109-117, 2018.
4. Xu, Y., Zhao, X., Chen, Y., & Zhao, W., "Research on a mixed gas recognition and concentration detection algorithm based on a metal oxide semiconductor olfactory system sensor array", *Sensors*, 18(10), pp. 1-17, 2018.
5. Choi, S. K., Jeong, Y. S., Koh, Y. J., Lee, J. H., Nam, H. W., & Lee, J., "Analysis of Raman Spectral Characteristics of Chemical Warfare Agents by Using 248-nm UV Raman Spectroscopy", *Bulletin of the Korean Chemical Society*, 40(3), pp. 279-284, 2019.
6. Papagiannopoulou, C., Parchen, R., Rubbens, P., & Waegeman, W, "Fast pathogen identification using single-cell matrix-assisted laser desorption/ionization-aerosol time-of-flight mass spectrometry data and deep learning methods", *Analytical chemistry*, 92(11), pp. 7523-7531, 2020.
7. Jirayupat, C., Nagashima, K., Hosomi, T., Takahashi, T., Tanaka, W., Samransuksamer, B., Zhang, G., Liu, J., Kanai, M., & Yanagida, T., "Image processing and machine learning for automated identification of chemo-/biomarkers in chromatography –mass spectrometry", *Analytical chemistry*, 93(44), pp. 14708-14715, 2021.
8. Wang, L., Tang, J. W., Li, F., Usman, M., Wu, C. Y., Liu, Q. H., Kang, H. Q., Liu, W., & Gu, B., "Identification of Bacterial Pathogens at Genus and Species Levels through Combination of Raman Spectrometry and Deep-Learning Algorithms", *Microbiology spectrum*, 10(6), pp. 1-11, 2022.
9. Ismail Fawaz, H., Forestier, G., Weber, J., Idoumghar, L., & Muller, P. A., "Deep learning for time series classification: a review", *Data mining and knowledge discovery*, 33(4), pp. 917-963, 2019.
10. He, K., Zhang, X., Ren, S., & Sun, J., "Deep residual learning for image recognition", *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pp. 770-778, 2016.