

光纤界面元素扩散的线性分类模型计算

张淑瑾, 张 敬, 于浩洋, 贾金升

(中国建筑材料科学研究总院特种玻璃纤维与光电功能材料研究院, 北京 100024)

摘 要: 针对硬质光纤传像元件芯皮界面元素迁移研究中存在的表征与定量分析难题, 提出一种基于多模型融合的 Tree-SVM/LDA 计算模型。该模型通过整合决策树(Tree)、线性支持向量机(SVM)和线性判别分析算法, 建立了基于扫描透射电子显微镜高角环形暗场像(HAADF-STEM)的元素迁移定量分析方法, 重点构建了特定元素平均迁移距离 D 的计算体系。采用电阻加热配套棒管的方法制备具有温度梯度的单丝样品体系, 通过获取多尺度分辨率(0.5~3.0 nm)的 HAADF 图像数据进行模型训练与评估。定量分析表明: 在优化拉丝温度区间内, K 元素平均迁移距离 $D_K \in [10, 40]$ nm, Ba 和 Ti 元素平均迁移距离分别为 $D_{Ba} \in [0, 11]$ nm、 $D_{Ti} \in [0, 13]$ nm。高分辨率(0.5 nm)条件下模型可靠性显著提升, 其中, Tree-SVM 模型分类准确率优于 Tree-LDA 模型, 但 Tree-LDA 模型展现出更优的泛化性能。该单次热过程元素扩散计算框架, 为后续多次热过程元素迁移的非线性计算模型研究提供了一种重要的方法。

关键词: 光纤; 芯皮界面; 多模型融合

中图分类号: O552 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2025)12-3779-11

网络出版时间: 2025-11-06



硬质光纤传像元件, 作为由千万乃至上亿根微米级光学玻璃纤维组成的二维阵列传像材料^[1], 在微光像增强器^[2]、空间目标探测系统^[3]等众多光学系统中有着广泛的应用。分辨率和对比度是影响该元件性能的关键指标, 芯皮界面处的元素扩散致使材料折射率呈现梯度分布, 而非理想的突变分布^[4-5], 进而降低元件的分辨率和对比度。在元件生产工艺的精细化发展需求下, 学者们需全面认知元素在芯皮界面处的扩散行为和分布状态。当前研究中, 能量色谱仪(EDS)常被用做元素分布状态的表征工具^[6-7], 但其图像分辨率较低(20 nm), 且缺乏相应的量化计算方法。本工作采用扫描电子显微镜(HAADF-STEM)来获取高精度元素空间分布图像^[8], 并提出一种多模型融合的机器学习方法, 以解决硬质光纤传像元件芯皮界面元素迁移研究中的表征和定量分析难题。

在玻璃材料领域, 机器学习常被用于预测材料结构^[9]和性能^[10-16]、解释分析相变^[17]以及识别材料

缺陷^[18-19]。监督学习通过输入数据和对应标签训练模型, 旨在使模型准确预测新标签。本工作融合决策树(Tree)、支持向量机(SVM)、线性判别(LDA) 3 种监督学习模型来完成分类任务, 从而获取元素迁移的定量指标。Tree 基于特征值递归划分数据集, 其结构类似于树形图; SVM 通过寻找最优超平面来最大化类别间隔; LDA 通过线性变换实现类间差异最大化和类内差异最小化。该类算法常与机器视觉技术联合应用, Zauner 等运用决策树与 SVM 结合接触式图像传感器(CIS)评估平板玻璃的质量^[19]; Yousefian-Jazi 等采用 SVM 等方法识别显示器玻璃基板缺陷^[20], 并表明 SVM 是所评估模型中准确率最高的分类模型^[21]。

本工作通过拉丝工艺制作不同热过程的单丝, 拍摄 HAADF 图像并用于训练 Tree-SVM/LDA 模型, 实现像素点芯皮分类及 x - y 二维空间分类, 得到元素界面扩散的定量结果, 并对模型的可靠性进行讨论。

收稿日期: 2025-02-25。 修订日期: 2025-03-24。

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(52072357)。

第一作者: 张淑瑾(2000—), 女, 硕士研究生。

通信作者: 贾金升(1971—), 男, 高级工程师。

Received date: 2025-02-25. Revised date: 2025-03-24.

First author: ZHANG Shujin (2000—), female, Master Candidate.

E-mail: zhangsj000207@163.com

Correspondent author: JIA Jinsheng (1971—), male, Senior Engineer.

E-mail: jjs9007@163.com

1 拉丝试验

1.1 材料与工艺

本工作采用中国建筑材料科学研究总院产品研发所使用的 2 种硅酸盐体系玻璃材料, 芯料含 Nb、Ba、La、Ti 等元素, 皮料含 K、Na 等元素, 芯棒与皮管示意图见图 1a。通过电阻加热配套棒管的方法, 在表 1 所示系列温度下拉制直径为 (2.800 ± 0.050) mm 的单丝样品, 电阻拉丝炉炉体见图 1b。在拉丝过程中, 控制送料速度与拉丝速度、炉体条件与环境条件、芯包比等条件保持一致, 忽略芯皮层间应力的影响。芯料与皮料在界面处发生元素相互扩散, 形成扩散边界。本工作重点考查该扩散边界区域的元素分布特征。

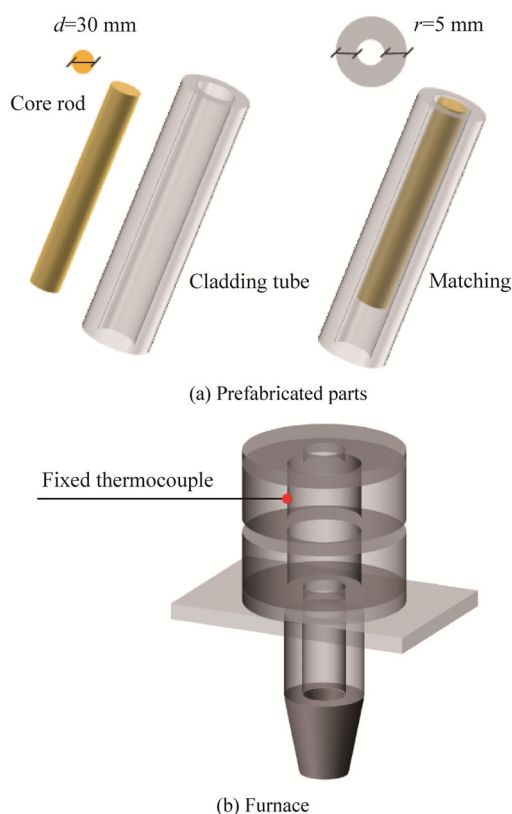


图 1 预制件与设备

Fig. 1 Prefabricated parts and equipment

表 1 样品拉丝参数

Table 1 Drawing parameters of samples

Sample No.	Temperature/°C	Diameter/mm
01	805	2.808
02	810	2.795
03	815	2.847
04	820	2.828
05	825	2.828

1.2 样品表征

目标元素浓度与仪器信噪比呈正相关, 浓度越高则噪声占比越低, 数据质量越优。基于此, 选取样品中丰度较高的 K、Ba、Ti、Si 元素进行分辨率为 3 nm 和 0.5 nm 的 HAADF-STEM 表征。在 80 000 倍放大倍数下(空间分辨率为 3 nm)获得的 K、Ba、Ti、Si 元素 HAADF 扫描结果如图 2a~图 2d 所示。在空间分辨率为 0.5 nm 的相应元素 HAADF 扫描结果如图 2e~图 2h 所示。图 2a~图 2h 图像左侧为皮区, 右侧为芯区, 发生扩散前, K 元素只存在于皮区, Ba、Ti 元素只存在于芯区, Si 元素则同时存在于芯区和皮区, 且皮区浓度高于芯区。

试验数据以 RGB 图像矩阵格式存储, 像素灰度值范围为 0~255, 其大小与探测器接收信号强度呈正相关。当像素尺度达到或小于原子尺度时, 像素灰度值不表征该点的元素浓度, 而是遵循光学系统用的点扩散函数分布规律^[22], 如图 2i 所示。在 HAADF 图像中, 一团亮点对应材料中的一个原子/原子柱, 其灰度值在中心位置达到最大值并呈径向衰减分布, 而亮点的空间密度与局部元素浓度呈正相关。

高倍率(450 000 倍)表征结果清晰揭示了芯-皮界面过渡区内元素浓度梯度分布特征, 这一现象在低倍率(80 000 倍)图中不明显。

2 模型原理

图 2 的表征结果初步表明, 拉丝过程中存在元素扩散现象, 但现有测试手段尚无法实现扩散能力的定量表征, 基于 Tree-SVM/LD 模型, 可以提取图像深度信息, 实现定量计算。

2.1 模型假设

1) Si 元素作为芯皮玻璃网络结构形成元素在扩散过程中保持稳定。其他元素的迁移距离以 Si 元素为基准进行计算。

2) 平均偏移距离(D)定义为测试范围内所有元素迁移距离的算术平均值, 用于表征元素扩散的整体行为特征, 而非个体极端值。

3) 元素做单向迁移运动, 迁移方向与浓度梯度方向一致, 在单丝样品中表现为界面的垂直方向。

4) 芯皮界面过渡区由不同元素的扩散行为叠加形成。见图 3a。

2.2 算法流程

算法流程如图 3b 所示, 主要包括以下 4 个步骤:

1) 构建训练数据集与预测数据集(图 3b①)。选

取芯区和皮区的数据点作为训练数据集, 该数据点带有芯/皮标签, 选取过渡区域数据点作为预测数据集, 不带芯/皮标签。

2) 训练决策树模型(图 3b)②。机器学习通过模拟人脑的认知过程实现分类与判断。决策树模型通过学习训练数据集中带芯/皮标签数据, 将芯区和皮

区的特征转化为量化的机器语言。该模型设置两个特征指标: 像素点灰度值及其为中心 5×5 邻域矩阵的灰度值总和(即密度值)。

3) 构建带标签的预测数据集(图 3b)③。训练后的决策树模型对过渡区的像素点进行分类并赋予标签, 也就是带标签的预测数据集。

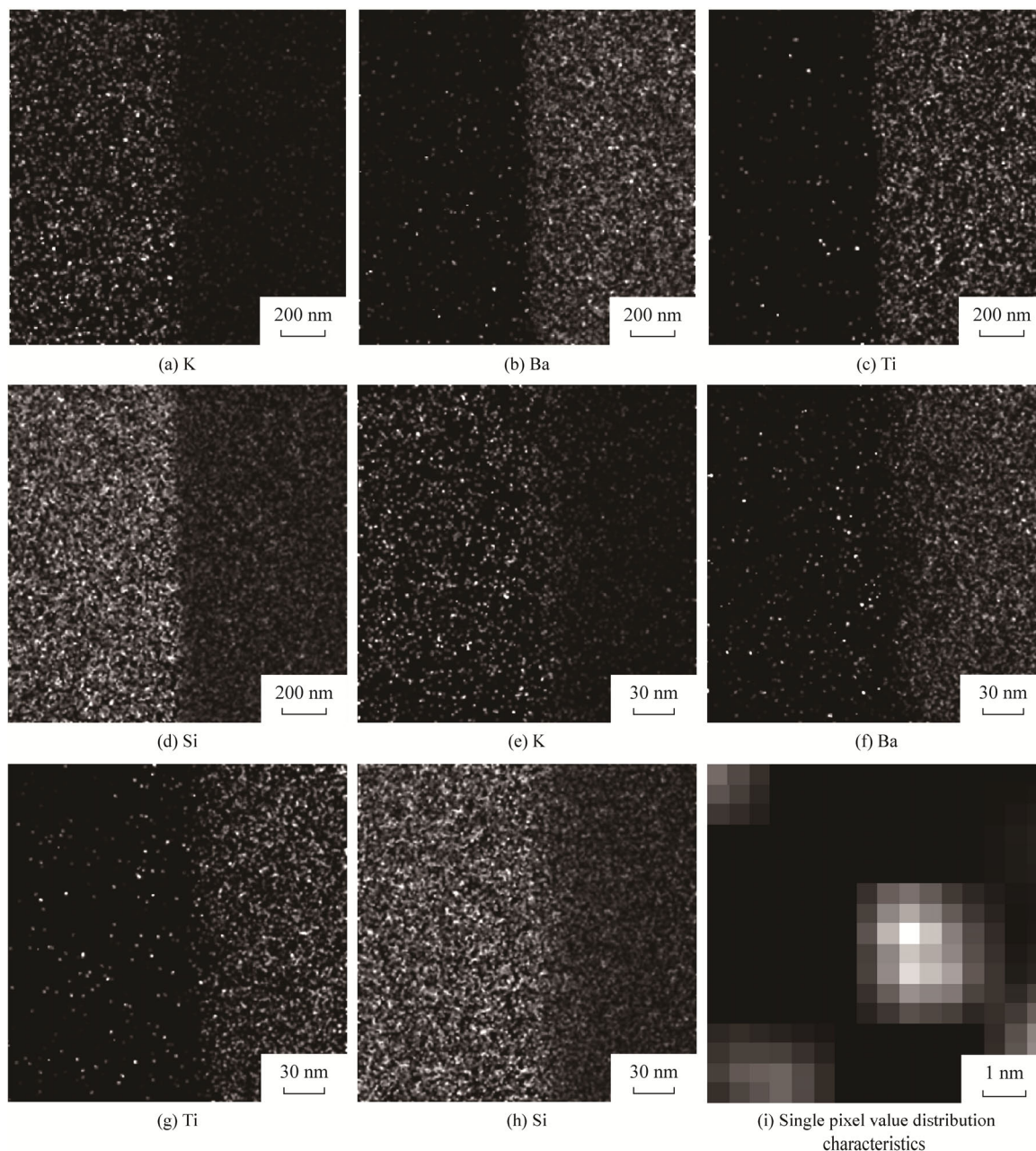
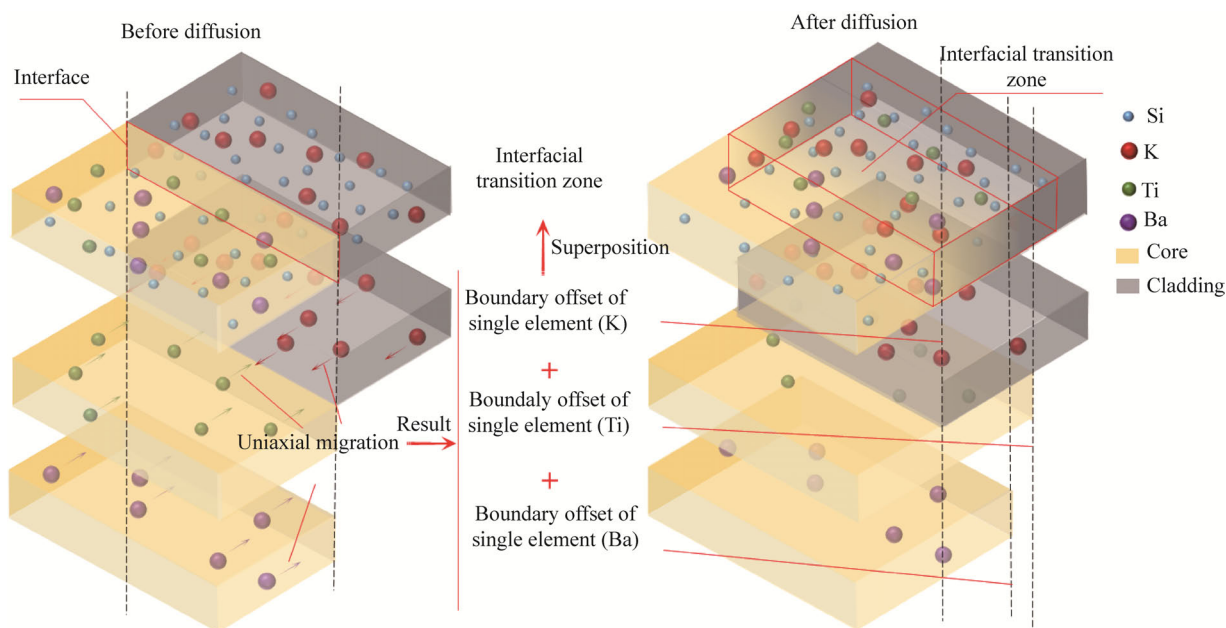


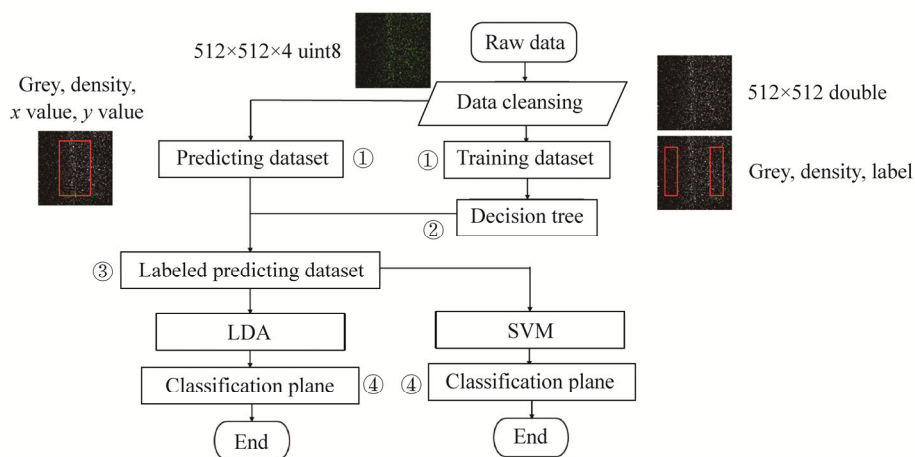
图 2 样品 01HAADF 扫描结果
Fig. 2 Sample 01 HAADF scanning results

4) 获取分类超平面参数(图 3b)④。基于过渡区所有像素点的标签及其平面坐标, 利用 SVM 和 LDA 方法构建分类超平面, 其在二维空间中表现为直线。

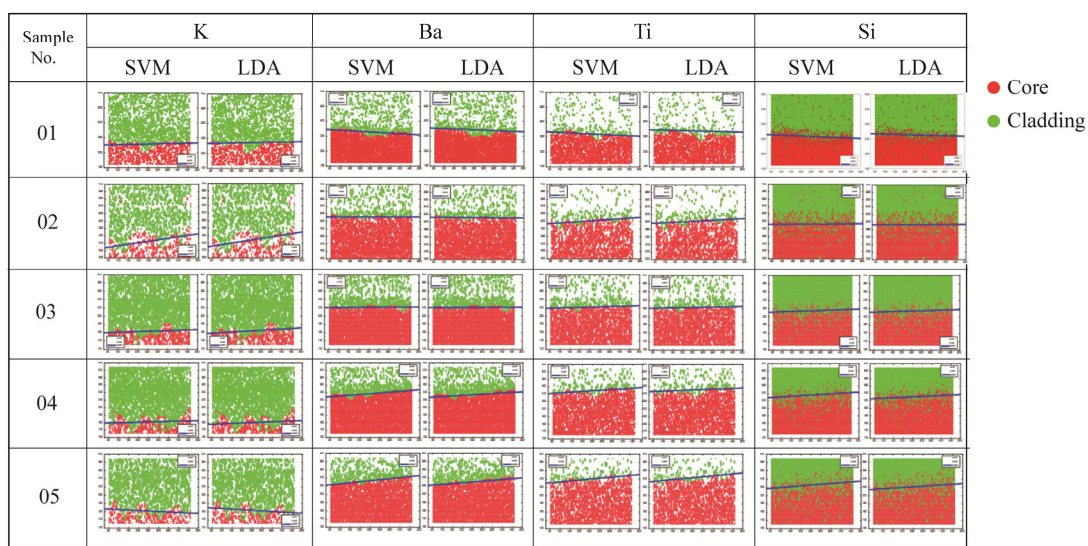
以 Si 元素界面分布计算所得界线为基准线, K、Ti、Ba 元素芯皮分界线相对于基准线的偏移的距离即该元素的平均偏移距离。K 元素由皮区向芯区扩散, 其芯皮界线相对于基准线向芯区偏移。反之,



(a) Formation process of interfacial transition zone



(b) Algorithm flowchart



(c) Core-cladding interface boundary line

图3 模型原理: 扩散假设, 算法流程与计算结果

Fig. 3 Model principle: diffusion hypothesis, algorithm flow chart and calculation results

Ba、Ti 的芯皮分界线向皮区偏移。平均偏移距离(D)定量表征了元素的扩散能力, D 值越大, 表明该元素的扩散能力越强。

图 3c 为 01~05 样品在 0.5 nm 分辨率下所得的元素芯皮界面的分界线。

2.3 模型评价方法

采用准确率与泛化能力评价模型的可靠性。泛化能力通过计算模型的 $F1$ 分数表征, 同时可考查相关辅助指标。芯皮界线确定过程涉及 2 次分类计算: 首次采用 Tree 模型对过渡区数据点的芯、皮状态进行判断, 选用模型复杂度(如节点数)作为泛化能力辅助考察指标; 第 2 次分类采用 SVM 或 LDA 模型对平面空间坐标进行分类, 考查各元素芯皮分界线是否严格平行(斜率极差), 可作为评价泛化能力的参考。模型可靠性评价指标见表 2。

表 2 模型可靠性评价指标
Table 2 Model reliability evaluation indexes

Reliability	Accuracy	Generalization ability
Tree (First classification)	Accuracy	$F1$ score, Number of nodes
SVM/LDA (Second classification)	Accuracy	$F1$ score, Slope range

采用 10 折交叉验证的方法计算可靠性相关指标, 以下为指标的计算公式:

$$\text{Accuracy} = \frac{TP+TN}{TP+TN+FP+FN} \quad (1)$$

TP(True positive): 实际为正类且被模型预测为正类的样本数。

TN(True negative): 实际为负类且被模型预测为负类的样本数。

FP(False positive): 实际为负类但被模型预测为正类的样本数。

FN(False negative): 实际为正类但被模型预测为负类的样本数。

本工作同时定义以下 4 个比率:

$$\text{TPR} = \frac{TP}{TP+FN} \quad (2)$$

$$\text{FNR} = \frac{FN}{TP+FN} \quad (3)$$

$$\text{PPV} = \frac{TP}{TP+FP} \quad (4)$$

$$\text{FDR} = \frac{FP}{TP+FP} \quad (5)$$

式中: TPR 为真正率; FNR 为假负率; PPV 为正预测值; FDR 为假发现率。正类样本和负类样本

是 2 分类任务的 2 类样本标签, 在本工作模型中根据分类情景的不同分别对应芯类和皮类。

Positive: 正类, 分类任务中更重要的类别。对于 K 元素, 本工作更关注扩散进入芯区的数据点, 故芯类样本为正类; 对于 Ba、Ti 元素, 则更关注扩散进入皮区的数据点, 故皮类样本为正类。

Negative: 负类, 分类任务中次要的类别。K 元素皮类样本为负类, Ba、Ti 元素芯区样本为负类。

$$F1 = 2 \times \frac{\text{Precision} \times \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}} \quad (6)$$

$F1$: 精确率和召回率的调和平均数, 综合反映模型在正类样本上的表现。 $F1$ 取值范围为[0,1], $F1$ 越接近 1, 说明模型泛化能力越强。 $F1$ 值在 0.7~1.0 之间的模型为表现正常的模型, $F1$ 小于 0.5 的模型泛化能力过弱, 其结果不具有参考价值。

$$\text{Recall} = \frac{TP}{TP+FN} = \text{TPR} \quad (7)$$

Recall: 召回率, 实际为正类的样本中被正确预测为正类的比例。同 TPR(真正率)。

$$\text{Precision} = \frac{TP}{TP+FP} = \text{PPV} \quad (8)$$

Precision: 精确率, 模型预测为正类的样本中, 实际为正类的比例。同 PPV(正预测值)。

3 结果与讨论

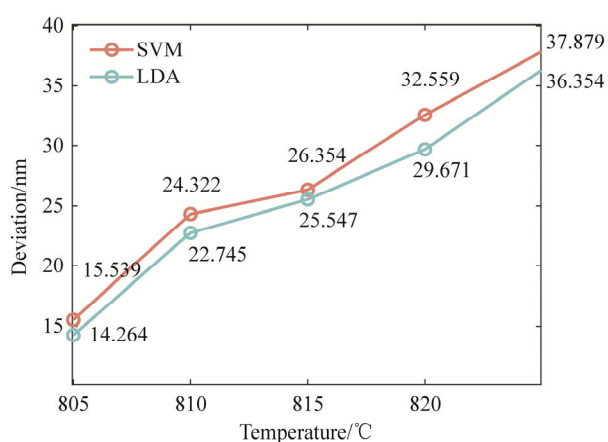
3.1 元素界面分布结果

图 4 为 2 种分辨率下 K、Ti、Ba 元素扩散引起的平均偏移距离随温度的变化规律。对于 K 元素, 由图 4a 可见, SVM 与 LDA 模型均在较高分辨率下得到符合热力学规律的结果: K 元素从皮区向芯区扩散, 且随拉丝温度升高, 其扩散驱动力增强, 扩散能力提升。在 805 °C, K 元素扩散造成的平均偏移距离约为 15 nm, 在 825 °C 增至 36 nm, 偏移范围在 10~40 nm 之间, 该结果为单丝波导计算提供了重要依据。由图 4b 可见, 在较低分辨率下, 原始数据中单个像元的宽度为 3 nm, 模型的计算误差被放大了 3 倍, 导致结果偏离实际规律。由 4c 和图 4d 可见, 在高分辨率下, Ti 元素的平均偏移距离随拉丝温度的升高而增加, LDA 模型计算结果显示其偏移范围在 0~13 nm 之间。然而, 在低分辨率下, SVM 与 LDA 模型均表现出较大误差, 尤其是在 810 °C 时, SVM 模型因 Ti 元素在皮区含量过低, Ti 元素芯皮分界线在皮区远离 Si 分界线 270 nm, 模型的准确率降低至 90%, 模型分类失效, 具体失效分析详见 3.2 小节。由图 4e 和图 4f 可见,

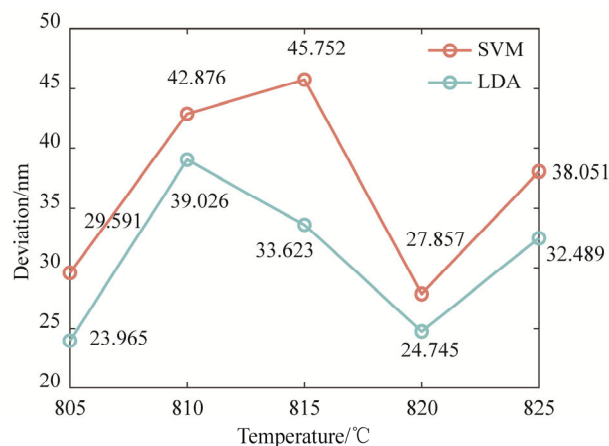
高分辨率下 Ba 元素平均偏移距离随拉丝温度升高而增加, 偏移范围在 0~11 nm 之间。由图 4e 可见, LDA 模型的计算结果随温度上升趋势更显著。同样, 在低分辨率下, 2 种模型差距明显。

研究表明, 元素平均偏移距离的计算对数据空间分辨率具有较高要求, 达到亚纳米级或更高。此外, SVM 模型与 LDA 模型的计算结果具有较好的

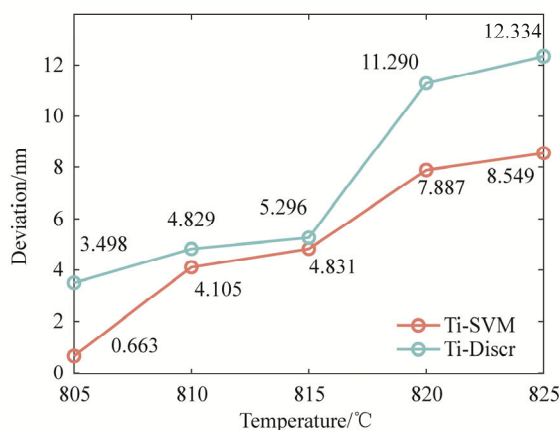
一致性, 同时呈现规律性差异。图 4a 显示 K 元素的平均偏移距离在 SVM 模型中略高于 LDA 模型, 而图 4c 和图 4e 表明 Ti、Ba 元素的平均偏移距离在 LDA 模型中略高于 SVM 模型。结合元素的扩散方向知, LDA 模型计算所得界线相对于 SVM 模型更偏向皮区, 这一规律与模型特性及芯皮区域 HAADF 图像元素分布模式的差异相关。



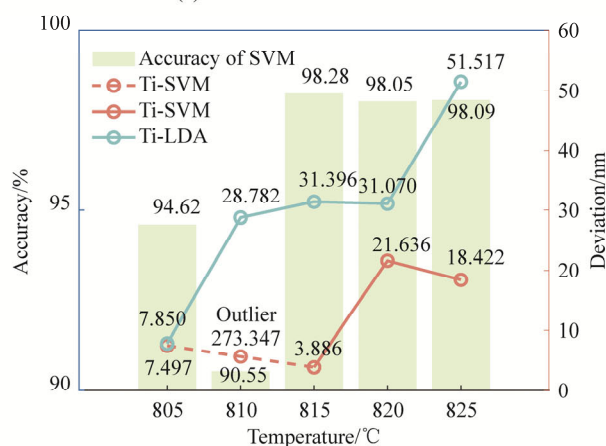
(a) D - T of K at resolution of 0.5 nm



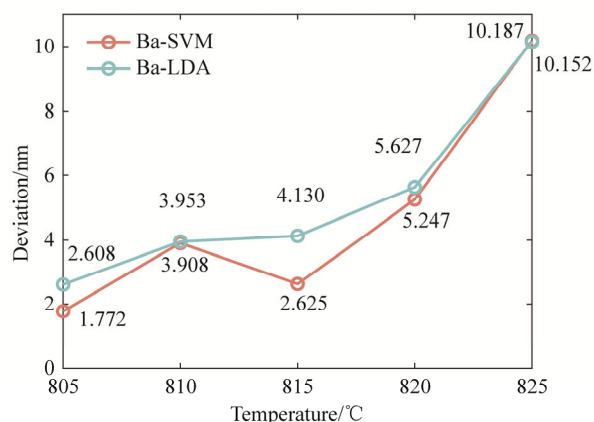
(b) D - T of K at resolution of 3 nm



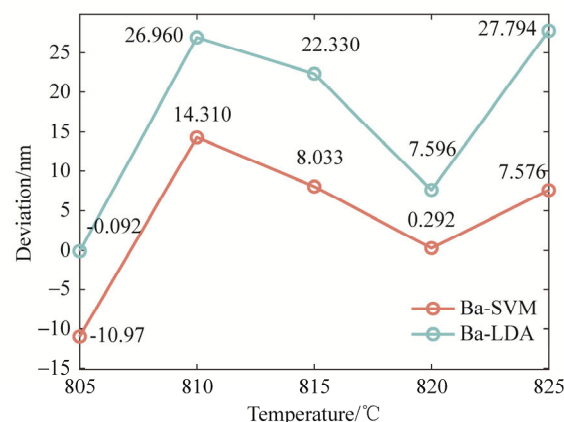
(c) D - T of Ti at resolution of 0.5 nm



(d) D - T of Ti at resolution of 3 nm



(e) D - T of Ba at resolution of 0.5 nm



(f) D - T of Ba at resolution of 3 nm

图 4 各元素平均偏移距离 D
Fig. 4 Deviation D of each element

3.2 模型失效分析

图 5a~图 5c 为 02 号样品(810 °C)在不同分辨率下采用不同模型计算所得的 Ti 分界线, 其 x 、 y 坐标数值表示空间位置, 单位是像素(pixel)。下方样本点为真实类芯类, 上方样本点为真实类皮类, 直线表示计算所得分界线的空间位置。图 5a 即分类失效模型计算结果, 该结果显示 Ti 分界线在皮区远离基准分界线的位置, 模型分类失效。但是由于正类样本点(皮区样本)数量过少, 模型的准确率维持在 90%左右。准确率忽视了少量正类样本的分类表现, 故考查该模型的混淆矩阵。由图 5d 可知, 混淆矩阵右上数值

明显异常, 大量实际为皮类的样本误分类为芯类, 与图 5a 一致。考查图 5e~图 5f, 可知正类召回率数值报警, 精确率数值正常, 计算该模型 $F1$ 分数:

$$F1 = 2 \times \frac{\text{Precision} \times \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}} = 2 \times \frac{0.086 \times 0.93}{0.086 + 0.93} = 0.157 \quad (9)$$

$F1$ 分数远小于 1, 说明该模型在准确率达到 90%的情况下分类失败, 这反映了二分类模型的典型问题: 当样本数量差异较大时, 模型易出现倾向于预测数量多的样本的情况。

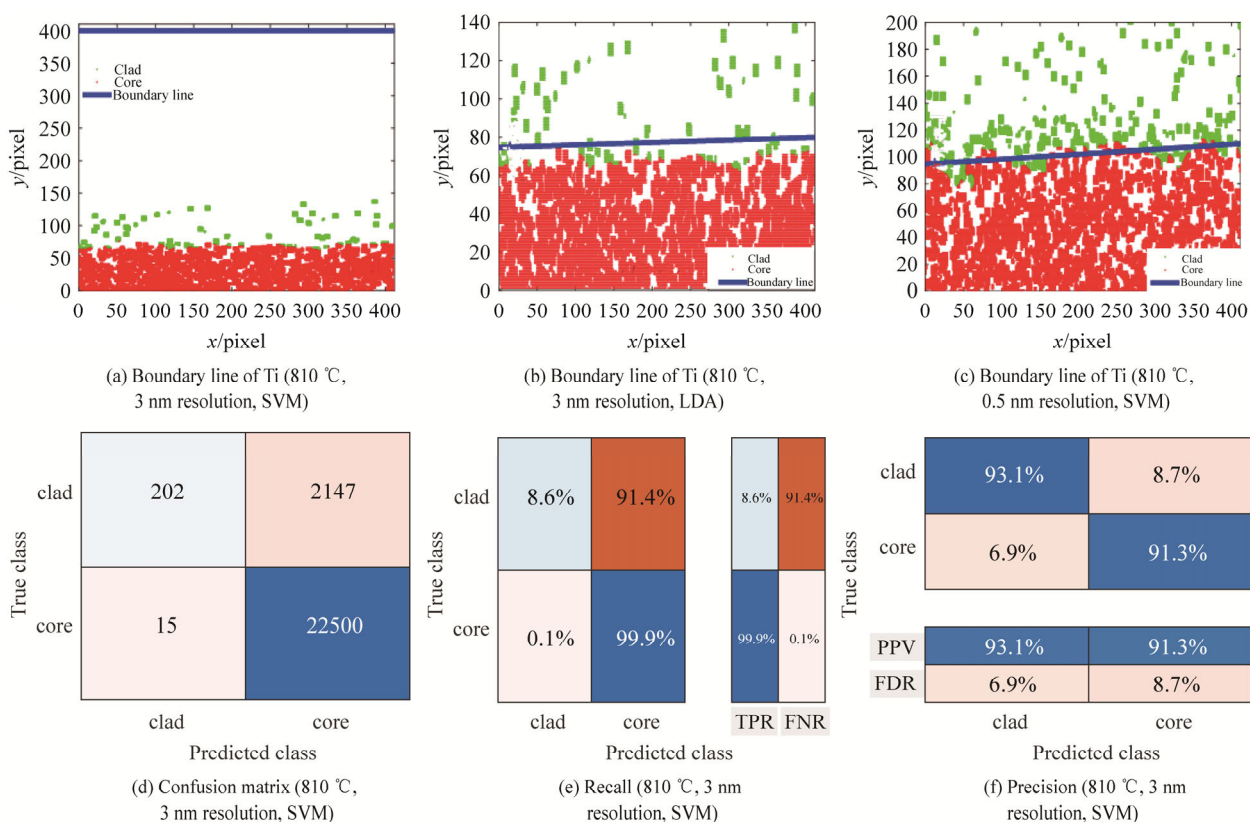


图 5 810 °C 条件下 Ti 元素分界线与混淆矩阵
Fig. 5 Boundary line and confusion matrix of Ti at 810 °C

比较图 5a 和图 5b, 可知计算同样的样本, SVM 模型分类失败的同时 LDA 模型表现良好, 这一现象表明 LDA 模型在训练集多样性方面优于 SVM, 具有更强的泛化能力。比较图 5a 和图 5c, 使用同样的模型在不同分辨率数据下计算得到差异较大的结果, 可知当原始数据分辨率提高, 过渡区变宽, 主类样本点数量增多, 降低了模型分类难度。综上可得出结论: 为避免出现该类分类失效问题, 可选用泛化能力更强的模型或提高原始数据的质量。

3.3 准确率分析

图 6 为不同条件下模型的准确率。由图 6a~图 6b 可见, 在较低分辨率(3 nm)下, 芯皮区域元素状态差异显著, 表现为灰度值和密度值的分布区间明显分离, Tree 模型分类准确率接近 100%。在较高分辨率(0.5 nm)下, 芯皮界面模糊化, 灰度值和密度值呈现连续变化, 增加了分类难度。其中, K 元素界面过渡区最宽, 导致 Tree 模型复杂度显著增加(需进行 30 余次判断), 准确率有所下降, 存在过拟合风险。

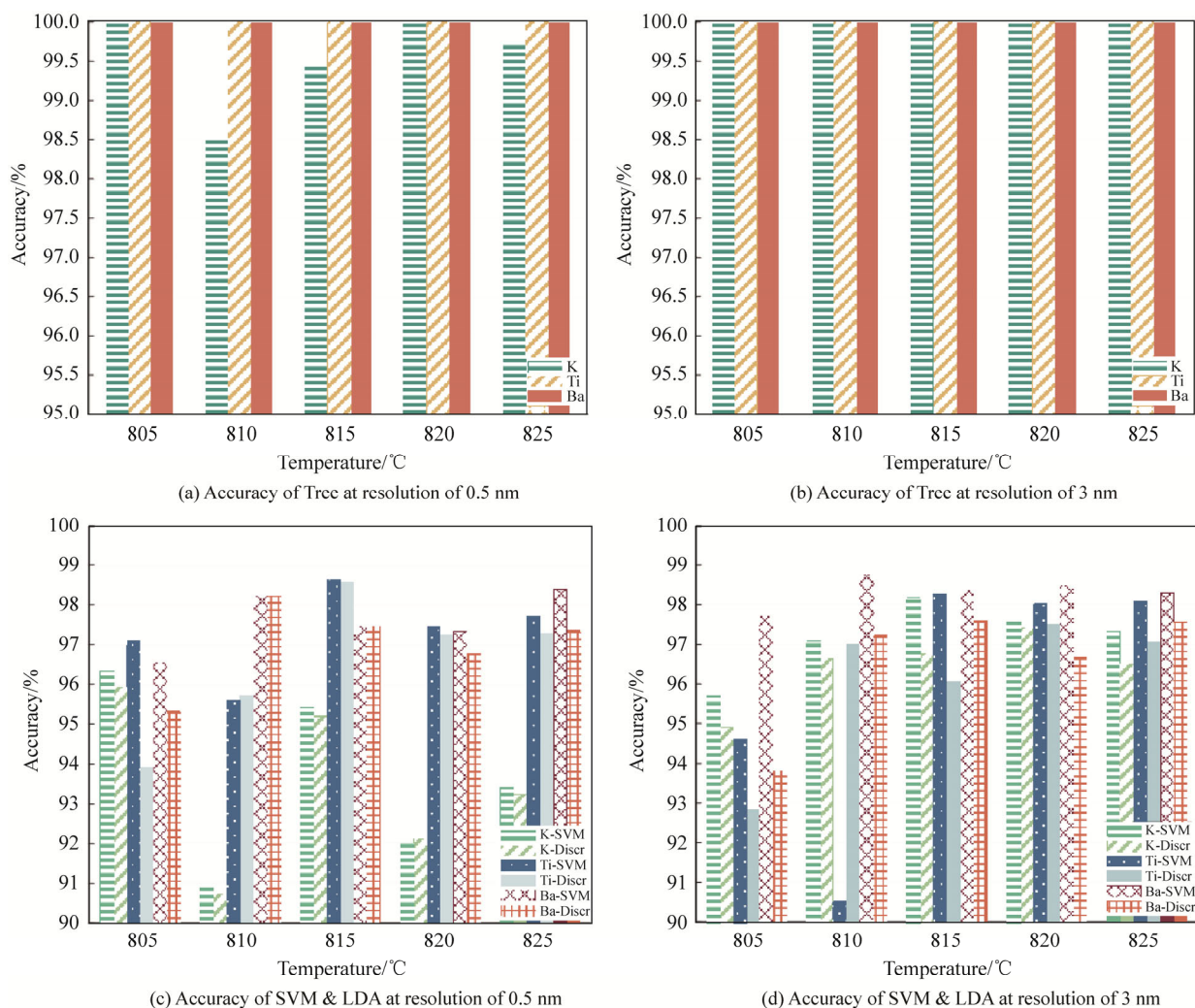


图6 不同条件下模型的准确率

Fig. 6 Model accuracy under different conditions

结果表明, 2 种分辨率下 Tree 模型的分类准确率均超过 98%, 满足分类要求。然而, 随着分辨率提高, 模型准确率略有下降, 反映了数据复杂度对模型可靠性有影响。由图 6c 和图 6d 可见, 在相同温度与分辨率条件下, SVM 模型的准确率普遍高于 LDA 模型, 在 0.5 nm 分辨率下, K 元素的分类准确率低于 Ti、Ba 元素。这是由于 K 元素过渡区较宽, 其中, 不同标签的像素点交替分布, 导致软间隔变宽, 错误分类的像素点数量增加, 这是元素扩散活跃所产生的正常计算现象。Ti、Ba 元素因含量较低, HAADF 采集的数据点少, 导致分类准确率下降, 甚至出现异常点, 如 810 °C、3 nm 分辨率下, SVM 模型对 Ti 分类失败。结合图 4 结果可知, 对于 K 元素此类扩散能力较强的元素, 高分辨率数据能够提供更详细的过渡区元素分布信息, 增加过渡区数据量, 从而部分抵消图像噪声对计算结果的影响, 使 SVM 和 LDA 模型的计算界线更接近实际

情况。因此, 仅以准确率作为模型可靠性的评价指标是不充分的, 还需考虑模型的泛化能力。

温度对模型计算准确率无明显相关关系。

3.4 泛化能力分析

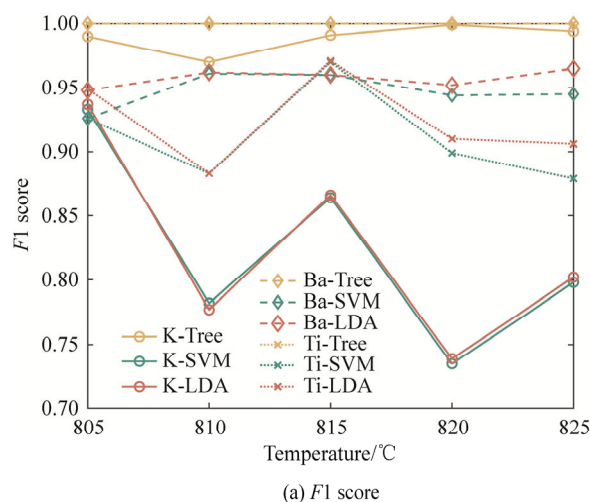
由于 3 nm 分辨率的计算结果缺乏实际应用价值, 本工作采用 0.5 nm 分辨率数据计算 $F1$ 分数作为模型泛化能力的表征指标, 如图 7a 所示。Tree 模型的 $F1$ 分数稳定在 [0.95, 1] 之间, 表现良好, 且模型结构简单(仅包含 3 个节点和 4 个叶节点), 能够高效完成分类任务。

比较图 7a SVM 与 LDA 模型, 可知在同一数据集上, SVM 与 LDA 模型的 $F1$ 值都在可接受范围内, 但 SVM 模型的 $F1$ 值普遍低于 LDA, 表明在该研究情境下 SVM 的泛化能力逊于 LDA。

图 7a 中 K 元素模型的泛化能力低于 Ba、Ti 元素, 应是 K 元素的过渡区变宽, 存在过多仪器噪声值所致, SVM 与 LDA 的计算结果呈现较高的一

致性,同时不同条件下的数据结果展现了较大的差异性,说明数据的质量影响了模型的表现。数据的质量包括芯皮数据集选区的规范性、芯皮区域结构特征导致的图像差异、以及图像噪声点的分布特征等。

模型的直接计算结果芯皮分界线是一条空间直线,其在 2.1 节的假设条件下是一组理论平行直



线。计算各个模型 K、Ba、Ti、Si 分界线的斜率并作极差,比较其斜率一致性,如图 7b 所示。极差越小, K、Ti、Ba 元素芯皮界线斜率一致性越高,表明模型计算结果越稳定,模型泛化能力越强。结果表明,同条件下 LDA 模型计算的斜率极差小于 SVM 模型,一致性更好, LDA 模型具有更好的泛化能力。

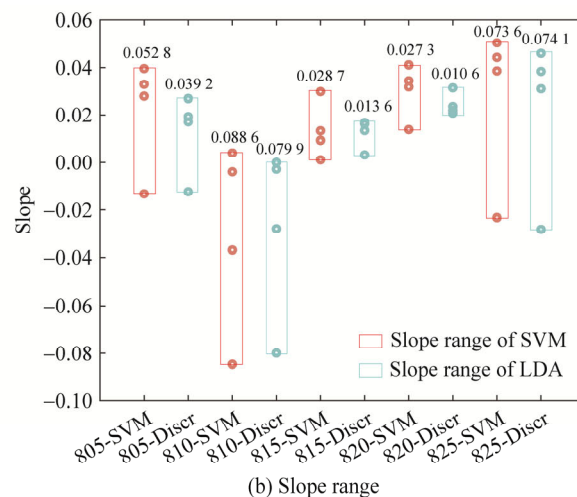


图 7 模型泛化能力

Fig. 7 Generalization ability

4 结论与展望

本工作针对玻璃光纤芯皮界面特定元素的扩散问题,提出了相应的线性计算模型,并在单次热过程条件下获得了符合热力学规律的定量结果。主要结论如下:

1) K、Ti、Ba 元素的迁移能力随拉丝温度的升高而增强。其中, K 元素的平均迁移距离为 10~40 nm, Ti、Ba 元素的平均迁移距离为 0~13 nm。

2) 模型可靠性的影响因素包括:原始数据的空间分辨率应达到原子或亚原子尺度;模型对于数据异常点敏感,需进行重复训练;扩散能力较强的元素会降低模型的正确率同时增强模型的泛化能力。

3) SVM 模型的准确率优于 LDA 模型,但泛化能力更弱。原始数据质量较高时推荐使用 SVM 模型,原始数据质量较差时 LDA 模型的结果更符合实际。

面向玻璃光纤制备工艺,未来需进一步开展多次热过程扩散行为的非线性计算研究。考虑到模型的复杂性,后续研究应综合考虑更多影响因素,包括芯皮数据集选区的规范性、芯皮区域结构特征导致的图像差异、图像噪声点的分布特征等。基于完

善的 Tree-SVM/LDA 模型,未来有望建立元素迁移过程与不同类型原子的相关关系,并建立代表性元素的迁移数据库,从而进一步展开对其他元素扩散过程的预测工作。

参考文献:

- [1] 贾金升. 高分辨低缺陷光纤倒像器制备关键技术及应用[Z]. 中国建筑材料科学研究总院有限公司, 2022-12-28.
- [2] 程宏昌, 党小刚, 冯丹青, 等. 国外微光夜视装备发展分析[J]. 红外技术, 2024, 46(12): 1399-1410.
CHENG Hongchang, DANG Xiaogang, FENG Danqing, et al. Infrared Technol, 2024, 46(12): 1399-1410.
- [3] 李闻先. 基于光纤传像元件的空间目标探测系统成像技术研究[D]. 长春: 中国科学院大学(中国科学院长春光学精密机械与物理研究所), 2022.
LI Wenxian. Research on imaging technology of space target detection system based on optical fiber image transmission element[D]. Changchun: Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, 2022.
- [4] FOURMENTIN C, GUICHARD J, DRUART G, et al. Infrared gradient refractive index (GRIN) materials through fast solid-solid Na^+/Ag^+ ionic exchange in chalcogenide glasses[J]. Adv Funct Mater, 2024, 34(29): 2312275.
- [5] 陈官俸. 纤维集成光器件的热扩散方法研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工程大学, 2020.
CHEN Gongdai. Study on thermal diffusion method of fiber integrated optical devices [D]. Harbin: Harbin Engineering University, 2020.

- [6] 吕锋, 黄亮, 罗军明, 等. Ce、La添加对DyCo晶界扩散烧结Nd-Fe-B磁体性能的影响[J]. 材料热处理学报, 2023, 44(9): 79–86.
LÜ Feng, HUANG Liang, LUO Junming, et al. Trans Mater Heat Treat, 2023, 44(9): 79–86.
- [7] 石攀, 黄永刚, 王久旺, 等. 微通道板热加工过程中芯皮玻璃界面的成分扩散[J]. 硅酸盐学报, 2018, 46(5): 700–706.
SHI Pan, HUANG Yonggang, WANG Jiuwang, et al. J Chin Ceram Soc, 2018, 46(5): 700–706.
- [8] 郝龙龙, 覃丽禄. 高质量扫描透射电子显微镜高角环形暗场像的实验关键点[J]. 实验科学与技术, 2020, 18(3): 7–10.
HAO Longlong, QIN Lili. Exp Sci Technol, 2020, 18(3): 7–10.
- [9] BØDKER M L, BAUCHY M, DU T, et al. Predicting glass structure by physics-informed machine learning[J]. NPJ Comput Mater, 2022, 8: 192.
- [10] CASSAR D R, MASTELINI S M, BOTARI T, et al. Predicting and interpreting oxide glass properties by machine learning using large datasets[J]. Ceram Int, 2021, 47(17): 23958–23972.
- [11] JANZEN G, SMIT C, VISBEEK S, et al. Classifying the age of a glass based on structural properties: A machine learning approach[J]. Phys Rev Mater, 2024, 8(2): 025602.
- [12] BAJPAI A, BHATT J, GURAO N P, et al. Accelerated design of multicomponent metallic glasses using machine learning[J]. J Mater Res, 2022, 37(15): 2428–2445.
- [13] AHMMAD S K, ALSAIF N A M, SHAMS M S, et al. Machine learning density prediction and optical properties of calcium boro–zinc glasses[J]. Opt Mater, 2022, 134: 113145.
- [14] DENG B H. Machine learning on density and elastic property of oxide glasses driven by large dataset[J]. J Non Cryst Solids, 2020, 529: 119768.
- [15] NAKAMURA K, OTANI N, KOIKE T. Multi-objective Bayesian optimization of optical glass compositions[J]. Ceram Int, 2021, 47(11): 15819–15824.
- [16] ANOOP KRISHNAN N M, MANGALATHU S, SMEDSKJAE M M, et al. Predicting the dissolution kinetics of silicate glasses using machine learning[J]. J Non Cryst Solids, 2018, 487: 37–45.
- [17] QI R, LIU S H, YANG C Q, et al. Exploring uncertainty in glass phase transitions through machine learning[J]. Phys Scr, 2024, 99(10): 1059c1.
- [18] LIU H, FU Z P, YANG K, et al. Machine learning for glass science and engineering: A review[J]. J Non Cryst Solids, 2021, 557: 119419.
- [19] SINGH J, SINGH S. A review on Machine learning aspect in physics and mechanics of glasses[J]. Mater Sci Eng B, 2022, 284: 115858.
- [20] ZAUNER G, SCHAGERL M. Machine vision based quality inspection of flat glass products[C]//Image Processing: Machine Vision Applications VII. San Francisco, California, USA. SPIE, 2014.
- [21] YOUSEFIAN-JAZI A, RYU J H, YOON S, et al. Decision support in machine vision system for monitoring of TFT-LCD glass substrates manufacturing[J]. J Process Contr, 2014, 24(6): 1015–1023.
- [22] 乔敏达, 白林阁, 王书恒, 等. 计算成像技术中的点扩散函数工程[J]. 数据采集与处理, 2024, 39(2): 271–296.
QIAO Minda, BAI Linge, WANG Shuheng, et al. J Data Acquis Process, 2024, 39(2): 271–296.

Linear Classification Model for Element Diffusion Computation at Fiber Optic Interfaces

ZHANG Shujin, ZHANG Jing, YU Haoyang, JIA Jinsheng

(Institute of Special Glass Fiber & Optoelectronic Functional Materials, China Building Materials Academy, Beijing 100024, China)

Extended Abstract

Introduction Hard optical fiber imaging components as two-dimensional array imaging materials comprised of tens of millions to billions of micro- and nano-scale optical glass fibers have extensive applications in numerous optical systems, including low-light-level image intensifiers and space target detection systems. Resolution and contrast are crucial indicators affecting the performance of these components. Elemental diffusion at the core-clad interface results in a gradient distribution of material refractive index rather than the ideal abrupt distribution, thereby degrading the resolution and contrast of the components. It is necessary for the demands for refined manufacturing processes of these components to gain a comprehensive understanding of the diffusion behavior and distribution status of elements at the core-clad interface. At present, energy dispersive spectrometry (EDS) is often employed as a characterization tool for elemental distribution status, yet it suffers from a low image resolution (20 nm) and lacks corresponding quantitative calculation methods. In this study, high-angle annular dark-field scanning transmission electron microscopy (HAADF-STEM) was utilized to acquire high-precision images of elemental spatial distribution. Furthermore, a multi-model fusion machine learning approach was proposed to address the challenges of characterization and quantitative analysis in the study of elemental migration at the core-clad interface of hard optical fiber imaging components.

Methods In this study, monofilaments undergoing various thermal processes were fabricated by a drawing technique. High-Angle Annular Dark-Field (HAADF) images were captured and utilized to train Tree-SVM/LDA models. These models enabled pixel-level core-clad classification and x - y two-dimensional spatial classification, thereby yielding quantitative results on elemental interface diffusion. In addition, the reliability of the models was also analyzed.

The Tree-SVM/LDA model is grounded on the following assumptions, *i.e.*, element Si as a key component in the formation of both core and cladding glass network structures remains stable during the diffusion process. The deviation distances of other elements are benchmarked against that of Si, the average deviation (D) is defined as an arithmetic mean of the migration distances of all elements within the tested range, serving to characterize the overall diffusion behavior of elements rather than individual extreme values, elements undergo unidirectional migration, consistent with the direction of the concentration gradient, manifesting as the

perpendicular direction to the interface in monofilament samples, the transition zone at the core-cladding interface is formed through the superposition of diffusion behaviors of different elements, and the algorithmic procedure of model encompasses the following steps (*i.e.*, constructing training and prediction datasets; training the decision tree model; developing a labeled prediction dataset; and obtaining classification hyperplane parameters).

Results and discussion The results obtained by SVM and LDA models both indicate the thermodynamic principles at higher resolutions, with the deviation $D_K \in [10, 40]\text{nm}$, $D_{Ba} \in [0, 11]\text{nm}$, and $D_{Ti} \in [0, 13]\text{nm}$. At lower resolutions, where the width of a single pixel in the raw data is 3 nm, the computational error of the models is amplified threefold, leading to the results that deviate from actual principles. At 810 °C, the SVM model exhibits a poor data separability due to the low content of Ti in the cladding region, resulting in abnormal calculation results. This phenomenon underscores the superiority of the LDA model over SVM in terms of training set diversity, demonstrating a greater generalization capability. The calculation results of the SVM model and LDA model show a good consistency, while also presenting regular differences, *i.e.*, the boundaries obtained by the LDA model tend to skew towards the cladding region relative to those of the SVM model. This regularity may be associated with differences in model characteristics and the element distribution patterns in the HAADF images of the core and cladding regions, having a further in-depth research. In general, the SVM model achieves higher accuracy than the LDA model. However, the LDA model possesses a better generalization capability.

Conclusions The migration capabilities of the elements K, Ti, and Ba intensified as the wire drawing temperature increased. Specifically, the average migration distance of element K could range from 10 nm to 40 nm, while that of elements Ti and Ba could span from 0 to 13 nm. Affecting the reliability of models were since the spatial resolution of the raw data could be in atomic or sub-atomic scale, models could be sensitive to data anomalies, thus requiring repeated training, elements with great diffusion capabilities could decrease the accuracy of the model, while simultaneously enhancing its generalization capability. The SVM model demonstrated superior accuracy, compared to the LDA model, having a weaker generalization capability. The SVM model could be recommended at a high quality of the raw data, whereas the results of the LDA model could be more realistic at a low quality of the raw data.

Keywords optical fiber; core-clad interface; multi-model fusion