Al–Cu 合金的扩散与析出：三块试样，三个终态

过饱和固溶体怎样走向析出？

Al–4.0 wt.% Cu（约 1.74 at.% Cu）在 485 °C 均匀化 24 h，水淬后分组时效。

时效温度	保温时间	观察结果
165 °C	8 h	GP II 区
190 °C	8 h	θ' 薄片，直径约 180 nm、厚约 8 nm
260 °C	4 h	θ' 薄片

三个试样分别给出一个终态。仅凭这些数据，能求出平衡 θ 的份额吗？

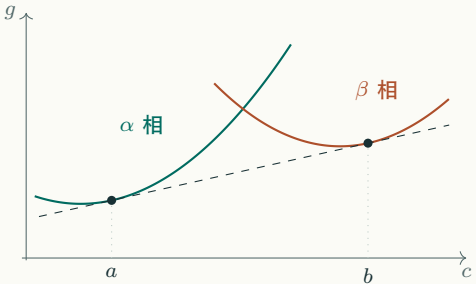
实验来源：Biswas 等，*Acta Materialia* 59 (2011)，图 2–3。 DOI 10.1016/j.actamat.2011.06.036

两相成分由哪一条线选出？

固定 T, P。令 c 为铜原子分数，$g(c)$ 为每摩尔原子的 Gibbs 自由能。

$$\mu_{\mathrm{Al}} = g - cg',$$
$$\mu_{\mathrm{Cu}} = g + (1-c)g'.$$

同一切线给出相同的两个组元化学势；稳定平衡还要求这条线是全局下支撑线。



自由能示意图。定比 θ 可用 $c_\theta = 1/3$ 的单点构造下支撑线。

自由能图上读出接触组成 a, b。将两点放到同一温度的相图上，就得到水平系线。

让 Lean 核验一次物料平衡

按组成原子的物质的量计

平均铜含量 $c_0 = 0.0174$。练习取基体端点 $a = 0.005$，富相端点 $b = 1/3$。

$$c_0 = (1-p)a + pb, \qquad p = \frac{c_0 - a}{b - a} \approx 3.78\%.$$

检查输入了什么

`common_tangent_equal_mu`

输入共同斜率和两个接触点，推出两相组元化学势相等。

`lever_from_mass_balance`

核验物料平衡移项后的交叉乘积。

这里求得富铜相的原子数份额。要与体积分数比较，另需两相的摩尔体积。

演示命令：在 `00-evidence-and-lean` 中运行 `lean AlCu.lean`。

把两段未知组成留作真正的考题

给定有噪声的扩散势，预测未观察到的组成窗口

$$g(x) = (x - 0.20)^2 (x - 0.80)^2 + 0.10x, \qquad \mu(x) = g'(x).$$



75 个训练点，26 个测试点；棕色区间整体封存。x 是合成归一化坐标，与实际 Al–Cu 的铜原子分数没有换算关系。

先预测 $\mu(x)$ 的形状，再决定怎样检查网络能否恢复曲率和共存端点。

训练同一份数据上的两种模型

线性基线

$\widehat{\mu} = ax + b$，其斜率恒定。你预计它能同时表现正、负曲率区吗？

```
python start.py
```

两隐层多层感知机

两个 16 节点 $\tanh$ 隐层，Adam 更新所有层。以相同的训练划分和验收指标比较。

```
python reference.py
```

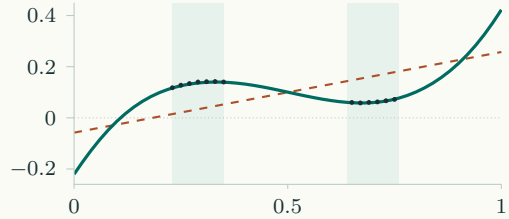
$$\widehat{g}(x) = g(0) + \int_0^x \widehat{\mu}(s)\,\mathrm{d}s, \qquad g(0) = 0.0256.$$

导数无法分辨 g 和 $g + C$。多个相独立拟合时，还须对齐它们之间的能量基准。

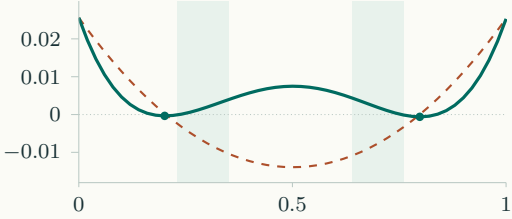
在 `01-learn-free-energy` 中执行上述命令。

看留出误差，也看网络画出的相区

带噪观测与预测扩散势 $\widehat{\mu}$



积分重建的能量 $\widehat{g}(x) - 0.10x$



阴影与黑点为留出区及其观测；**实线为两隐层网络**，**虚线为线性基线**。右图减去同一仿射函数，便于看清共存接触点。

测试 μ 的 RMSE：线性 0.10065，网络 0.001614。网络共存端点为 0.201、0.798，曲率符号准确率达 99.4%。

扩散宽度怎样随时间改变？

从势梯度到通量

$$J = -M\frac{\partial \Delta\mu}{\partial z}, \qquad \frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial z}.$$

这里 $\Delta\mu = \mu_{\mathrm{Cu}} - \mu_{\mathrm{Al}}$；固定晶格位点密度，$J$ 为归一化通量。

正常扩散，常数 $D > 0$

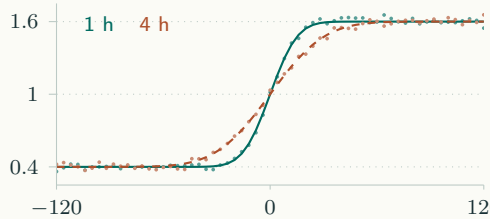
$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \qquad \ell \propto \sqrt{Dt}.$$

以 1 h、4 h 合成剖面估计 D，封存完整 9 h 剖面作独立检验。

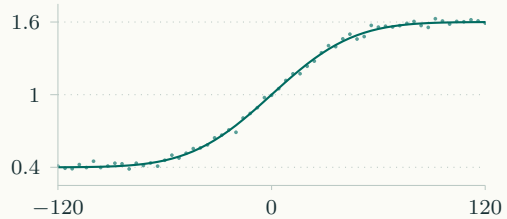
在同一 D 下，9 h 与 1 h 的特征宽度之比是多少？　$\ell_9/\ell_1 = \sqrt{9} = 3$。

只用前两个时刻，能预测第三个吗？

训练：1 h、4 h 合成剖面



留出：9 h 整条剖面



纵轴为 Cu 原子百分数，横轴为位置 z（nm）。点为教学合成观测，曲线为常数 D 的误差函数解。

$D = 1.993239 \times 10^{-20}\ \mathrm{m^2\,s^{-1}}$；9 h 测试 RMSE 为 0.020604 at.% Cu。

课间休息

10 分钟

第二课时从一颗给定晶核开始。

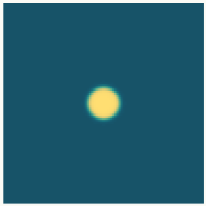
一段程序保存了总铜量，还可能在哪个方程上出错？

一颗给定的晶核从哪里得到 Cu？

同一位置记录成分 c 和结构 η

$$h(\eta) = \eta^2(3-2\eta),$$
$$q = c - c_\alpha - \Delta c\, h(\eta),$$
$$f(c,\eta) = \tfrac{1}{2}Aq^2 + W\eta^2(1-\eta)^2.$$

$c_\alpha = 0.005,\ c_\theta = 1/3,\ \Delta c = c_\theta - c_\alpha$。



$t = 0$ 的实际教学成分场；圆核 $R_0 = 7$。

周期域远场初值为 0.020，全域平均约 0.02534。此教学核的长度、时间均为无量纲。

成分输运与结构弛豫共用一个自由能

$$F=\int_\Omega\Big(f+\frac{\kappa_c}{2}|\nabla c|^2+\frac{\kappa_\eta}{2}|\nabla\eta|^2\Big)\,\mathrm{d}A,\qquad \mu=\frac{\delta F}{\delta c},\quad \xi=\frac{\delta F}{\delta\eta}.$$

成分守恒 · Cahn–Hilliard

$\partial_t c=\nabla\cdot(M\nabla\mu)$

结构弛豫 · Allen–Cahn

$\partial_t\eta=-L\xi$

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}=-\int_\Omega\big(M|\nabla\mu|^2+L\xi^2\big)\,\mathrm{d}A\le 0.$$

周期边界，$M,L\ge 0$。`coupled_energy_nonincrease` 检查两个单元的瞬时收支；时间离散仍需独立验收。

给大模型一份能验收的编程任务

请输出可运行的 NumPy 代码，并解释两个场的更新

模型	$h=\eta^2(3-2\eta)$，$q=c-0.005-(1/3-0.005)h$，$f=20q^2+\eta^2(1-\eta)^2$。
初态	半径 $R_0=7$ 的平滑圆核，远场 $c=0.020$，$c=0.020+(1/3-0.020)h$。
推进	96^2 周期网格，$\Delta x=1$，$\Delta t=0.2$，共 3000 步；五点差分、FFT 半隐式。
参数	$\kappa_c=0.5$，$\kappa_\eta=1.5$，$M=0.05$，$L=0.5$。

先给出 μ,ξ 与 c 的零模更新，再检查方向差分、总铜量和逐步自由能。

完整提示词与工作文件：`03-phase-field/LLM_STUDIO.md`。

这个实现守恒了，为什么仍要退回？

人工植入一个符号错误，运行 `python start.py`

验收量	错例输出
全域平均 c 的最大漂移	3.47×10^{-18}
单位面积自由能最大单步正增量	$+0.002613$
自由能方向导数相对误差	4.16%

把表交给模型：提出一个无需推进时间、能够区分“步长过大”和“驱动力写错”的检验。

修改哪一行，怎样复验？

先独立核对链式法则

$$\frac{\partial q}{\partial \eta} = -\Delta c\, h'(\eta),$$
$$\frac{\partial (Aq^2/2)}{\partial \eta} = -Aq\,\Delta c\, h'(\eta).$$

只改 `student_terms` 中的耦合符号，保留独立的自由能验收函数。

用同一个方向做中心差分

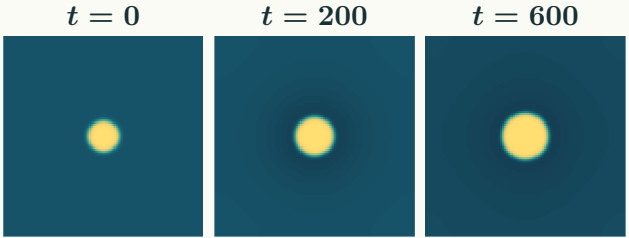
对 (c, η) 同时施加 $\pm\varepsilon(u, v)$，比较自由能差商与

$$\langle \mu u + \xi v \rangle.$$

修复后方向导数相对误差约 2.91×10^{-11}；本次计算自由能最大正增量为 0。

在 `03-phase-field` 运行 `python start.py`，再运行 `python reference.py --check-only`。

晶核长大时，基体中的铜去了哪里？



Cu 原子分数

0 — 1/3

三个时刻共用成分色标。等效半径按 $\eta \geq 0.5$ 的面积换算。

基体平均铜从 2.001 降至 1.333 at.%，全域平均保持 2.5337 at.%。

图来自本课 96^2 周期网格计算，长度和时间均无量纲。

让模型为“半径一样”设计反例

在相同网格推进到 $t = 600$，$\Delta t = 0.4, 0.2, 0.1$ 均给出阈值半径 10.280。

比较相邻时间步	c 场均方根差	η 场均方根差
0.4 与 0.2	4.1445×10^{-4}	1.0015×10^{-3}
0.2 与 0.1	2.0934×10^{-4}	5.0585×10^{-4}

$$p = \log_2\left(\frac{e_{0.4,\,0.2}}{e_{0.2,\,0.1}}\right) \approx 0.985.$$

相同阈值半径可以掩盖完整场的变化。两个场在这组步长上都给出接近一阶的时间收敛。

两种深度学习研究，各要留下什么证据？

学习自由能

Teichert 等用 Ni–Al 的原子尺度自由能导数学习势函数，再连接到相场。

验证对象：化学势、相稳定性与组织演化。

Teichert 等（2020）· 论文

学习组织演化

Yang 等用卷积循环网络从早期的计算图样预测后续组织。

课堂方案：整条轨迹留出，再检查质量、界面尺度和长时预测误差。

Yang 等（2021）· 论文

回到真实 θ' 板片：量化厚度、直径与取向，补充取向相关界面能、弹性与独立实验标尺。

各交出一条可以被推翻的预测

平衡

只平移一个相的自由能，本相导数数据与两相共存端点会怎样？

输运

看过留出 9 h 的剖面残差，再用它调整 D，需要补什么数据？

组织

若预置晶核模型给出圆形组织，如何判断它能否解释真实 θ' 薄片？

独立写下预测、相应的检验，以及一项可能推翻该预测的观测。