17：相关概念的辩论

许传奇 PB16021546

1 题目

苏格拉底：诘问法是发现真理和明确概念的有效方法，请同学们以Ising经典自旋模型为例，论述相空间、Liouville定理、正则系综、Markov链等概念。

学生A：相空间是以N个粒子的位置坐标q和动量p展开的$6N$维空间。Ising模型中的Hamiltonian仅与自旋变量有关，与坐标和动量无关，$\partial H/\partial q = \partial H/\partial p = 0$，因此：$[\rho, H] = 0$，即Liouville定理成立，$d\rho/dt = [\rho, H] = 0$，几率密度分布因此为H的函数，因此它就是正则系综中的Boltzmann分布：$\rho \propto \exp(-\beta H)$

学生B：非也。将自旋作为广义坐标，则同样得到自旋也是广义动量。相空间是以物理问题中的自由度为坐标展开的高维空间，对N个自旋体系展开的则是N维空间，空间的每一维坐标只有两个取值：+1和-1。如对 2 个自旋的相空间，代表点只能取(+1,+1)、 (+1,-1)、(-1,+1)、 (-1,-1) 这 4 个点。类似地，多自旋情况下代表点也只能位于多维相空间立方盒子的顶点上。不同于坐标q和动量p组成的相空间中代表点是流动的情况，现在这些代表点是与时间无关的，即密度不随时间改变的，因此$d\rho/dt = 0$。

学生A：我不能同意你的观点。如果相空间是这样的话，由于代表点只能取在顶点上，连几率密度分布本身都是离散的，而不是在该相空间中连续分布的。另外，$d\rho/dt = \sum_i (d\rho/d\sigma_i)(d\sigma_i/dt)$，在无穷小的时间变化$dt$内，自旋的变化$\Delta\sigma$则是有限的，不能得到Liouville定理。更何况系综理论推导时基于的也是(q, p)变量。

学生C：（请以学生C的身份参与辩论）

2 学生C的解释

2.1 综述

1. **Ising模型中，并不存在明确的时间、广义坐标和广义动量等我们在经典力学中使用的概念的定义。**

   我们研究的过程，是一个一个时间点而言的。换言之，时间在Ising模型中是用来描述系统状态变换的一种说法，并不对应我们一般所说的时间。因此，Ising模型中所说的时间不具备通常意义上的时间所具有的性质，与时间相关的概念自然也失去了意义。

   广义坐标是一种可以脱离时间定义的物理量，但在Ising模型中没有明确的、传统意义上的坐标参数，因此无法选取传统意义上的坐标参数作为广义坐标。

   广义动量在经典力学中的定义是:

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \tag{1}$$

其中的$\dot{q}$是广义坐标对时间的导数。但按照前面的叙述，在Ising模型中没有以往的时间概念，因此对时间的导数也没有意义了。

2. **Ising模型中，没有明确的动力学中随时间的演化规律。**

   依照前面对时间的叙述，Ising模型中的时间应该更确切的是一种离散的、有顺序的标志，从一个标志的状态到达紧接着的下一个标志的状态时，系统的组成会遵守一定的规律，发生一定的变化。

   但这种变化不是经典力学中的哈密顿正则方程决定的状态，而是一种遵守某种规律的非连续的跃迁，即Ising模型中的自旋反转。

2.2 针对学生A第一次的发言

相空间是以N个粒子的位置坐标q和动量p展开的$6N$维空间。Ising模型中的Hamiltonian仅与自旋变量有关，与坐标和动量无关。

这句话没有错误，自由度为3的N个粒子组成的系统的相空间确实是以N个粒子的位置坐标q和动量p展开的$6N$维空间。

Ising模型的Hamiltonian为：

$$E = -\sum_{\rangle i,j\langle=1}^{N} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \mu_B H \sum_{i=1}^{N}\sigma_i \tag{2}$$

与自旋变量有关，而与坐标和动量无关。

$\partial H/\partial q = \partial H/\partial p = 0$，因此：$[\rho, H] = 0$，即Liouville定理成立，$d\rho/dt = [\rho, H] = 0$

这句话存在问题。首先，尽管我们能说H与坐标q和动量p无关，但就像综述中所说的，Ising模型中因为各种原因，并不遵守经典力学中的哈密顿正则方程，即$\partial H/\partial q \neq -\dot{p}, \partial H/\partial p \neq \dot{q}$并不能运用到Ising模型中，因此也不能推出$[\rho, H] = 0$。

此外，Liouville定理成立要求的是$d\rho/dt = [\rho, H] + \partial\rho/\partial t = 0$，而条件中并没有$\partial\rho/\partial t = 0$，因此也不能直接证明Liouville定理成立。

几率密度分布因此为H的函数，因此它就是正则系综中的Boltzmann分布：$\rho \propto \exp(-\beta H)$

这句话显然也存在错误。就算前面所说的条件成立，我们也不能推出几率密度分布就是H的函数。因为几率密度中如果含有和H对易的变量，也满足前面的要求。更何况前面的证明已经在前面被我们否定了。

2.3 针对学生B的发言

非也。将自旋作为广义坐标，则同样得到自旋也是广义动量。相空间是以物理问题中的自由度为坐标展开的高维空间，对N个自旋体系展开的则是N维空间，空间的每一维坐标只有两个取值：+1和-1。如对 2 个自旋的相空间，代表点只能

取(+1,+1)、 (+1,-1)、(-1,+1)、 (-1,-1) 这 4 个点。类似地，多自旋情况下代表点也只能位于多维相空间立方盒子的顶点上。

首先，就像之前叙述的那样，广义动量的定义非常模糊。可以用自旋来作为广义坐标，但由经典力学中的广义动量的定义并不能推出自旋也是广义动量。除此之外的叙述，都有道理，例如多自旋情况下代表点也只能位于多维相空间立方盒子的顶点上等。

不同于坐标q和动量p组成的相空间中代表点是流动的情况，现在这些代表点是与时间无关的，即密度不随时间改变的，因此$d\rho/dt = 0$。

这句话过于武断。这些点确实是与时间无关的，但系统的状态在相空间中的点可能会在这些点之间变化，变化前后的密度可能会改变，因此不能认为密度是不随时间改变的。

2.4 针对学生A第二次的发言

我不能同意你的观点。如果相空间是这样的话，由于代表点只能取在顶点上，连几率密度分布本身都是离散的，而不是在该相空间中连续分布的。

这句话有一定道理。几率密度确实是离散的，表点只能取在顶点上的，但离散和连续之间没有不可逾越的鸿沟。

在电磁学中也存在这个问题：我们如果要把点电荷这种理想模型并入到现有的理论当中，可以通过Dirac-Delta函数，将电荷密度定义为$\rho(\vec{r}) = Q\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$，而Dirac-Delta函数具有连续函数的一些性质，如积分和微分等。这样就将离散的电荷分布转化成了连续的电荷分布。

同样，在这里我们也可以定义密度函数为$\rho(\vec{r}) = \rho_0\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$，这样将离散的密度函数转化成了连续分布的密度函数。

另外，$d\rho/dt = \sum_i (d\rho/d\sigma_i)(d\sigma_i/dt)$，在无穷小的时间变化$dt$内，自旋的变化$\Delta\sigma$则是有限的，不能得到Liouville定理。更何况系综理论推导时基于的也是(q, p)变量。

前面已经说明，时间在Ising模型中不是传统意义上的时间。

Ising模型中，系统过一段时间可能就会发生变化，但我们如果要问多长时间内，系统会发生一次“单位”变化？或者说，系统发生一次某种变化的时间是多少？这两个问题都是没有办法回答的。因此这句话中的“在无穷小的时间变化dt内，自旋的变化$\Delta\sigma$则是有限的”就显得很没有意义。

“系综理论推导时基于的也是(q, p)变量”没错，但并不意味着只能基于(q, p)变量。我们合理设置变量，就可以将以往的结论进行推广。这也是研究中常见的手段。

3 总结

综述中提到的两点：Ising模型中没有相关的概念的定义与没有动力学随时间演化的规律，是这两位同学争论的主要原因。

因为Ising模型的特殊性，我们如果想把它纳入到已有的框架中进行讨论，则需要将现有的理论进行相应的推广。例如定义一个变量，让它与经典力学中的时间相对应。这样做后，如果由这个变量推出的

各种结论都能与经典力学中的结论相对应，而且这个变量的引入也在理论上非常自洽，我们就可以用这种推广来研究Ising模型。

通过Liouville定理，我们可以知道系统平衡时，几率密度是H的函数，因此系统是正则系综，从而使用正则系综的结论来讨论Ising模型。

但我们可以从其他的方面来进行系综的描述。讲义中写到，当系统处于温度为T的环境中时，系统的自旋构型并非是一成不变的，它与环境之间不断交换能量，最终达到一个平衡态，在有限的温度下系统将围绕此平衡态进行涨落。这种状态与温度的关系在统计力学中用正则系综进行描述。简单说来，在正则系综中系统处于状态α的几率正比于Boltzmann因子，即：

$$P_\alpha = \frac{e^{-E_\alpha/k_B T}}{Z(T)}, \; Z(T) = \sum_\alpha e^{-E_\alpha/k_B T} \tag{3}$$

这样也将Ising模型纳入到了正则系综的框架中，而没有用到Liouville定理。

对于计算机模拟而言，我们可以采用以下方法：

如果某一时刻x取值的条件几率是独立于上一时刻之前的所有x值的话，即：

$$p(x_n | x_{n-1,\ldots,x_1}) = p(x_n | x_{n-1}) \tag{4}$$

我们就说这个随机序列是Markov链。

虽然Markov过程是不能应用于完全决定论的体系的，但更多情况下我们关心的不是体系中每个粒子的状态，而只是要求一个粗粒平均的图像，因此，可以用认为Ising模型就是一种Markov过程。由于正则系综的几率分布函数就是Boltzmann分布，直接代入Metropolis抽样方法就可以模拟出Ising模型的演化。