REPORT 14

潘硕 PB24020526

2025 年 12 月 18 日

1 Question

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 Solution

学生 A 犯了以下错误:

1. **相空间的定义错误**. 相空间是以系统的广义坐标和广义动量为坐标轴构成的高维空间, 而不是以粒子的物理坐标和动量构成的空间.

2. **Liouville 定理的适用条件错误**.Liouville 定理适用于哈密顿系统, 要求系统的广义坐标和广义动量连续变化. 而 Ising 模型中, 自旋变量只能取 +1 或-1, 不满足连续

变化的条件, 因此 Liouville 定理不适用.

学生 B 犯了以下错误:

1. **Hamiltonian 分析错误**.Ising 模型中的自旋变量是离散变量, 通常用组态空间来描述, 而非由广义坐标和广义动量张成的相空间.
2. **Liouville 定理的适用条件错误**.Liouville 定理通常适用于连续的哈密顿系统, 而 Ising 模型中自旋变量是离散的, 不满足 Liouville 定理的适用条件.

学生 C: 在 Ising 模型中, 粒子有离散的自旋状态, 通常使用组态空间来描述系统状态, 而非连续的相空间. 此时 Liouville 定理不适用, 因为它要求系统的广义坐标和广义动量连续变化. 但是我们依然可以通过最大熵原理等方法得到正则系综的分布, 即 Boltzmann 分布. 实际研究中, 常通过 Markov 链蒙特卡洛方法在组态空间中采样, 使 Markov 链的平稳分布趋向于 Boltzmann 分布.