

homework-14

2024 fall

1 问题描述

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， $\frac{\partial H}{\partial q} = 0$ ， $\frac{\partial H}{\partial p} = 0$ 因此： $[\rho, H] = 0$ ，即 Liouville 定理成立 $\frac{d\rho}{dt} = [\rho, H] = 0$ 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： $\rho \propto e^{-\beta H}$

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，现在这些代表点是和时间无关的，即密度不随时间改变的，因此： $\frac{d\rho}{dt} = 0$

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 我的发言

A 和 B 的发言涉及了 Ising 模型的相空间、Liouville 定理、正则系综等概念。

对于 A 的发言：

1. 相空间：A 将 Ising 模型的相空间与经典力学中的相空间相混淆。在经典力学中，相空间确实是由粒子的位置和动量构成的 $6N$ 维空间。然而，Ising 模型是一个统计力学模型，其相空间应该由自旋状态构成，每个自旋有两个可能的状态（+1 或 -1）。

2. Liouville 定理：A 提到 Liouville 定理成立，即 $[\rho, H] = 0$ ，这意味着相空间中的概率密度分布不随时间变化。这是正确的，但需要明确这是在经典力学的背景下。对于 Ising 模型，我们需要考虑的是概率分布的变化，而不是相空间体积的守恒。

3. Boltzmann 分布：A 正确地指出了在正则系综中，系统的状态分布遵循 Boltzmann 分布。这是统计力学中的一个基本结果，适用于 Ising 模型。

对于 B 的发言：

1. 相空间的重新定义：B 正确地指出了 Ising 模型的相空间应该由自旋状态构成，而不是由位置和动量构成。这是对 Ising 模型相空间的正确理解。

2. 相空间的维度：B 正确地描述了 Ising 模型相空间的维度和可能的状态数。

3. 代表点与时间无关：B 的观点需要进一步解释。在热平衡状态下，系统的状态分布是与时间无关的，但在非平衡状态下，状态分布会随时间变化。

我的想法：

1. 相空间的理解：在 Ising 模型中，相空间应该由自旋状态构成，每个自旋有两个可能的状态。这是一个离散的相空间，与经典力学中的连续相空间不同。

2. Liouville 定理的应用：在 Ising 模型中，Liouville 定理的概念需要重新解释。由于系统是离散的，我们关注的是概率分布的变化，而不是相空间体积的守恒。

3. 正则系综和 Boltzmann 分布：在正则系综中，Ising 模型的状态分布遵循 Boltzmann 分布。这是描述系统在热平衡状态下的一个基本结果。

4. Markov 链：虽然 A 和 B 没有提到，但 Markov 链是描述 Ising 模型中自旋状态随时间演化的一个有用工具。在模拟退火和蒙特卡洛模拟中，Markov 链被用来模拟自旋的随机更新过程。

对于 A 的反驳，我认为：

1. 自旋变化的有限性：

在 **Ising** 模型中，自旋的变化确实是离散的，因为每个自旋只能取 $+1$ 或 -1 两个值。这意味着在任何给定的时间步长 dt 内，自旋的变化是有限的，而不是连续的。这与经典力学中的系统不同，后者的状态变化可以是连续的。

2. 系综理论的基础：

系综理论通常是基于经典力学中的 (q, p) 变量推导的，这是因为它描述的是粒子的位置和动量。在 **Ising** 模型这样的量子系统中，系综理论需要适应离散的自旋变量。尽管如此，系综理论的基本概念，如配分函数和统计分布，仍然可以应用于 **Ising** 模型。

总的来说，在将经典力学的概念应用于 **Ising** 模型时需要谨慎，并可能需要对这些概念进行适当的修改和扩展。

3 注

此题问 AI 即可。