

[作业15]: （0-25分；不要求编程）

一篇应用MCMC方法研究聚乙烯小球自组装结构的研究论文 “Formation of wafer-scale monolayer close packed polystyrene spheres template by thermally assisted self-assembly” 在投稿某刊物后被审稿人拒稿，现作者欲以向刊物编辑申诉。请根据文章内容和审稿人评审意见，撰写申诉理由（你认为，作者在文中阐述的方法和概念以及审稿人的评论意见有哪些是合理的，哪些是需要修正的，或者哪些是需要进一步阐明的）。进一步，如果你是作者的话，你将如何进行该工作以及建立模型？

附件：

论文原稿 manuscript.pdf

投稿附加说明材料 supplementary information.pdf

申诉信 rebuttal letter.pdf

参考文献

[作业16]: 设体系的能量为 $H = x^2/2\sigma_x^2 + y^2/2\sigma_y^2$ (以 kT 为单位), 采用Metropolis抽样法计算 $\langle x^2 \rangle, \langle y^2 \rangle, \langle x^2 + y^2 \rangle$ 并与解析结果进行比较。抽样时在2维平面上依次标出Markov链点分布, 从而形象地理解Markov链。

[作业17]: 考虑一维经典粒子组成的理想气体, 由于无相互作用, 各粒子的能量不依赖于其位置, 只需考虑它的动能, 因此体系的构型即是各粒子速度坐标值的集合。给定粒子的质量、初始速度、总粒子数、总能、demon能, 模拟足够多步后达到平衡时的粒子速度分布。微正则系综中没有定义温度, 其数值由 $\frac{1}{2}kT = \frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle$ 给出, 求平衡时的温度值。