[作业14]：（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14]：

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）