

# 计算与模拟物理实验室

计算机模拟一方面作为理论物理研究的重要手段，另一方面作为物理实验研究的重要延伸，近些年随着计算机技术的飞速发展逐渐呈现出强大的生命力，并与物理学研究结合成为一门介于理论物理和实验物理之间的独特的新领域—计算物理。计算物理特别在一些实验难以探测的情形（极端条件如极高温，高压，高密度，高强度等）和理论难以解析处理等情况发挥着不可或缺且不可替代的作用，是目前国际上非常重视的领域。本实验室正是在这种背景下应运而生。

计算与模拟物理实验室成立于 2002 年，并于当年成为校级重点实验室，得到学校的支持。实验室依托我校具有深厚科研实力的理论物理国家级重点学科、凝聚态物理北京市重点学科和物理学一级博士点，是物理学学科建设的重要组成部分，其目标是借助购置大规模计算平台和其他计算设备，整合理论物理各方向和凝聚态方面与大规模数值计算模拟相关的人力与研究资源，系统地、有计划地进行建设，为重点学科建设提供一流平台和研究成果，争取并承担国家级和省部级重大、重点科研项目，建设一流的计算物理研究团队，为国家培育、输送一流的物理学研究人才提供坚实的研究基地。



在 985、211、学校实验室建设经费和一批国家重大、重点项目的支持下，本实验室经过五年的建设与发展，已经初具规模，在硬件、环境、人员配备方面均具有很大的发展，取得了一批具有国际水平的科研成果，建设了一系列与计算物理密切相关的课程。在实验室建设的五年里，我们开辟了非线性与复杂性仿真、计算统计物理、计算凝聚态物理、量子光学与光学材料模拟等几个与大规模计算密切相关的研究方向，在计算物理方面形成了一支高水平的研究团队，成为理论物理和凝聚态物理重点学科的重要力量。

实验室在 985、211 等经费支持下，于 2004 年和 2005 年分别购置了两台 SGI 的服务器。2006 年学校高性能计算中心建立，本实验室的 SGI 计算资源与学校的 128 个 CPU 资源联网，实现了资源共享。这些计算资源使得实验室成员用于研究的大规模计算能力大大提高。

实验室目前的 SGI 服务器拥有 64 颗主频为 1.5GHz 的 CPU、96GB 的内存和 2TB 的磁盘阵列，并使用远程登录方式，每位用户可以在各自的计算机上登录

SGI 服务器，进行编写、编译程序，提交作业的工作，该服务器在不停电的条件下，每年 365 天、每天 24 小时不间断地为用户提供服务。每年约有 60 位经常的用户，每年运行约 20 万 CPU 小时。

在实验室建立的五年当中，通过扩建实验室设备和完善实验室的管理，使得我系的理论科研计算能力得到大幅提高，计算资源得到充分的利用，大大提高了全系师生的科研工作效率。例如，在微机上在需要运行一周时间的凝聚态理论研究方面的科学计算，使用 SGI 服务器进行并行计算后仅仅只需要几个小时就可完成，计算速度提高了四十多倍。另外，通过对 SGI 服务器硬件、软件、工作环境的严格、认真、细致地管理，保障了 SGI 服务器正常、高效的运行，为科研运算提供了优质、高效的服务。过去的五年中，利用实验室的 SGI 服务器的计算成果在国际、国内的学术刊物上发表了二百多篇论文，其中有很大部分是在 SCI 收录的学术期刊上发表的。

计算与模拟物理实验室对实验室成员、物理系教师和学生开放，实验室的计算平台与学校联网，计算资源共享；实验室于 2007 年购置了 40 台快速的高性能微机，可用于研究生作为计算终端、学术讲座、课程授课等，对本系研究生充分开放。

本实验室承担了本科生、研究生进行与计算物理有关的一系列教学工作。根据计算物理的特点，实验室设立了一系列计算物理课程，如计算物理基础、Fortran 语言、C 语言、分子动力学模拟、蒙特卡罗方法、Matlab 与科学计算等，形成了完整的计算物理课程体系，为更充分、更优化、高效率发挥本实验室的计算资源奠定了良好基础。实验室成员承担了以上所有课程。彭芳麟教授开设的“计算物理基础”课程面向本科生由于其注重教学科研的结合而深受本科生的欢迎，2004 年获北京市教学成果一等奖，2005 年获国家级教学成果二等奖，并成为国家级和北京市精品课进行建设。

本实验室还担负着物理实验教学中心服务器的管理、维护、以及运行的工作。该服务器专门用于物理实验教学工作的各项工作。它具有设置实验课程、登录实验教案、介绍实验仪器、进行实验教学讲座、观看实验教学录像、登录学生论文、公布实验室的规章制度、查询实验教学大纲、发布实验中心新闻等各项功能。教师可以利用该服务器批阅学生的实验报告并给出成绩；学生可以利用该系统进行实验课程的选课活动、查询自己的上课时间和任课教师，并对教师的教学工作做出评价。该系统还可以对实验室的固定资产进行管理。该系统相比过去只能提供学生选择实验课程的旧系统在功能、服务内容等各方面有了极大的提高和改善。该系统的建立和使用为我系及相关单位今年北京市物理实验教学示范中心申请成功作出了很大的贡献，对物理实验教学的智能化管理起到了极大的推进作用。