

富律文

lyuwenfu@zhejianglab.edu.cn • +86 180-7290-1557 • lyuwenfu.me

工作经历

之江实验室, 杭州, 浙江, 中国

智能计算研究院, 高级研究专员, 助理研究员 (自然科学)

2022 年 7 月 – 至今

- 完成对 MuST 多散射理论密度泛函计算软件的算法优化和国产超算架构上的移植优化工作, 实现最高 100 倍的算法优化以及最高 20 倍的硬件优化
- 开展强关联多体问题的模型计算工作
- 开展基于群论的材料声子及声子间相互作用计算方法以及配套材料数据库的开发工作
- 开展基于群论的深度神经网络势函数的开发
- 开展应用组数值计算集群的搭建和运维, 提供超百万核时算力

教育经历

Columbia University, New York, New York

Ph.D. in Materials Science

2017 年 1 月 – 2021 年 10 月

- 导师: Professor Chris Marianetti
- 研究内容: 材料第一性原理计算, 材料声子及声子相互作用的算法设计
- 毕业论文: Thermodynamics of Interacting Phonons (doi:10.7916/d8-wkbr-m336)

Columbia University, New York, New York

Master of Science in Materials Science

2015 年 9 月 – 2016 年 12 月

- GPA: 3.81 / 4.00
- 所学课程: 固体物理, 复杂材料电子结构的计算, 晶体的群论, 材料机械性能, 等

北京科技大学, 北京, 中国

材料物理 工学学士

2011 年 9 月 – 2015 年 6 月

- 导师: 滕蛟教授
- 毕业论文: 阻变存储器的量子输运的研究
- GPA: 3.46 / 4.00

科研经历

Columbia University, New York, New York

Department of Applied Physics and Applied Mathematics

2016 年 5 月 – 2021 年 10 月

- 科研项目: Thermodynamics of interacting phonons
- 指导教授: Professor Chris Marianetti
- 开发计算材料声子及声子间相互作用和预测材料电声子性能的算法和软件 (代码体量约 2 万行);
- 实现相比于现有同类软件超过 10 倍的计算效率提升;
- 设计出可广泛应用在多种材料性能研究的模块化软件包;
- 在高性能计算机集群上执行超过 10 万次第一性原理计算作业并管理课题组内超过 80 个节点的计算机集群;
- 软件包文档主页: marianettigroup.github.io。

北京科技大学, 北京, 中国

本科生毕业设计, 材料物理与化学学院

2015 年 2 月 – 2015 年 6 月

- 指导教授: 滕蛟教授;
- 课题: 研究阻变存储器的量子输运性能;
- 设计薄膜阻变存储器的制备工艺, 实现阻变存储器的阻变效应;
- 研究阻变存储器的原理及理论背景, 以及量子各向异性磁电阻效应的实现条件;
- 研究、测试制成阻变存储器样品的阻变效应以及电阻输运性能。

本科生科研项目, 新材料技术研究院

2013 年 10 月 – 2014 年 5 月

- 课题: 一维 IrO₂ 纳米阵列传感器的电化学性能的研究;
- 指导教授: 孟惠民教授;
- 开发一维 IrO₂ 纳米阵列的新制备方法并研究电极的电化学性能。

技能总结

- 编程语言: Proficient in Python, C/C++, Fortran, Familiar with Objective-C, Java, C#.
- 第一性原理计算: VASP, Quantum ESSRESSO, Abinit, MuST.
- 其他软件: L^AT_EX, Docker, Singularity, Blender, Ansible, Adobe Photoshop.

研究重心

第一性原理计算和模拟; 声子和声子间相互作用; 材料热力学及热传导性能; 强关联多体物理; 材料智能计算; 高性能并行计算与加速计算; 容器化计算。

发表文章

1. Fu, L., Kornbluth, M., Cheng, Z., & Marianetti, C. A. (2019). Group theoretical approach to computing phonons and their interactions. *Physical Review B*, 100(1), 014303.
第一作者, SCI-2 区, 影响因子: 4.036, 25 页, 入选 Editors' Suggestion
2. Bryan, M. S., Fu, L., et al. (2020). Nonlinear propagating modes beyond the phonons in fluorite-structured crystals. *Communications Physics*, 3(1), 1-7.
第二作者, SCI-1 区, 影响因子: 6.368, 7 页
3. Ding, X., Yao, T., Fu, L., et al. (2020). Magnetic, transport and thermal properties of δ -phase UZr₂. *Philosophical Magazine Letters*, 1-11.
第三作者, SCI-4 区, 影响因子: 0.980, 11 页
4. C.A. Dennett, ..., L. Fu, et al. (2021). An Integrated Experimental and Computational Investigation of Defect and Microstructural Effects on Thermal Transport in Thorium Dioxide, *Acta Mater.*, 213, 116934.
第七作者, SCI-1 区, 影响因子: 8.203, 13 页
5. M. A. Mathis, A. Khanolkar, L. Fu, et al. (2022). Generalized quasiharmonic approximation via space group irreducible derivatives, *Physical Review B*, 106, 014314.
第三作者, SCI-2 区, 影响因子: 4.036, 23 页
6. E. Xiao, H. Ma, M. S. Bryan, L. Fu, et al. (2022). Validating First-Principles Phonon Lifetimes via Inelastic Neutron Scattering, *Physical Review B*, 106, 144310.
第四作者, SCI-2 区, 影响因子: 4.036, 6 页

会议演讲

1. Fu, L., Kornbluth, M., & Marianetti, C. A. (2018). An optimal approach to computing phonons and their interactions via finite difference. APS March Meeting 2018, X29.00006.
2. Fu, L., Kornbluth, M., Cheng, Z., & Marianetti, C. A. (2019). An optimal approach to computing phonons and their interactions via finite displacements. APS March Meeting 2019, H22.00003.
3. Fu, L., Mathis, M., Xiao, E., & Marianetti, C. A. (2020). Phonon interactions in rock salt and fluorite structures. APS March Meeting 2020, P44.00009. (会议由于新冠疫情取消)

发明专利

1. 富律文, 郑欢欢, 杨树祥, 张峻溪, 朱正平, 杨星辰. 基于申威主从核架构的异步并行矩阵计算优化方法. 2023.11, 已受理
2. 张峻溪, 杨树祥, 富律文, 朱正平, 郑欢欢, 杨星辰. 一种 Fortran 科学计算软件中函数的自动化无损分离方法. 2023.11, 已受理