

# CURRICULUM VITÆ

Francesco Vecil



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Curriculum vitæ</b>	<b>5</b>
1.1	Données personnelles . . . . .	5
1.2	Positions et affiliations . . . . .	5
1.3	Formation et titres universitaires . . . . .	6
1.4	Synthèse de l'activité d'enseignement . . . . .	6
1.5	Synthèse de l'activité de recherche . . . . .	7
1.6	Liste de publications . . . . .	8
1.7	Séminaires et communications dans des congrès . . . . .	10
1.8	Activités administratives et autres compétences . . . . .	12
1.8.1	Activité de rapporteur . . . . .	12
1.8.2	Organisation de conférences et workshops . . . . .	12
1.8.3	Langues et connaissances informatiques . . . . .	13
<b>2</b>	<b>Activités d'enseignement</b>	<b>13</b>
2.1	Commentaire général . . . . .	13
2.2	Détail des enseignements . . . . .	14
2.2.1	Intégration numérique d'équations aux dérivées partielles (TP)	14
2.2.2	Lois de conservation hyperboliques (TP) . . . . .	14
2.2.3	Mathématiques II . . . . .	14
2.2.4	Analyse numérique (cours intégré) . . . . .	15
2.2.5	Intégrales et résolution d'équations différentielles . . . . .	15
2.2.6	Analyse numérique . . . . .	15
2.2.7	Séries et Calcul Différentiel . . . . .	15
2.2.8	Mathématiques Générales 2 (11MM22) . . . . .	16
2.2.9	Module A ou B Mathématiques (11MM11) . . . . .	16
2.2.10	Mathématiques (21MP31) . . . . .	16
2.2.11	Harmonisation - Méthodes Numériques (41FM12) . . . . .	16
2.2.12	Mathématiques appliquées à la chimie (21MM311) . . . . .	16
2.2.13	Méthodes Numériques (31MM55) . . . . .	17
<b>3</b>	<b>Activités de recherche</b>	<b>17</b>
3.1	Participation à des écoles de formation et à des conférences . . . . .	17
3.2	Activités de recherche auprès d'autres centres . . . . .	18
3.3	Participation à des projets de recherche . . . . .	22
<b>4</b>	<b>Résumé des résultats obtenus</b>	<b>23</b>
4.1	Travaux de thèse . . . . .	23
4.2	Travaux postérieurs à la thèse . . . . .	25
<b>5</b>	<b>Projet de recherche</b>	<b>27</b>



# 1 Curriculum vitæ

## 1.1 Données personnelles

- **Nom** : Vecil.
- **Prénom** : Francesco.
- **Date et lieu de naissance** : 21 Février 1978, Udine (Italie).
- **Nationalité** : italienne.
- **Adresse** : 48, rue Eugène Gilbert, apt. 11, 63000 Clermont-Ferrand (France).
- **Adresse 2** : via Como, 37/B, 33100 Udine, Italie.
- **Adresse 3** : calle Mallorca, 494, 1<sup>o</sup>, 2<sup>a</sup>, Barcelona E08013, Espagne.
- **Adresse professionnelle** : Laboratoire de Mathématiques, Université Blaise Pascal (Clermont-Ferrand 2), UMR 6620 - CNRS - Campus des Cèzeaux - B.P. 80026, 63171 Aubière cedex (FRANCE).
- **Page personnelle** : [www.francescovecil.it](http://www.francescovecil.it)
- **Téléphone** : +33 (0)785764194 (France), +34 635924630 (Espagne), +39 3291298154 (Italie).
- **Courriel** : francesco.vecil@gmail.com
- **Contact skype** : francesco.vecil

## 1.2 Positions et affiliations

- **01 Octobre 2002-30 Septembre 2006** : étudiant en DEA et doctorat à la Universitat Autònoma de Barcelona, directeur José Antonio Carrillo, avec une bourse doctorale IGSOE-IQUC du gouvernement catalan.
- **01 Octobre 2006-30 Septembre 2007** : étudiant en doctorat à l'Université de Toulouse, codirecteur de thèse Naoufel Ben Abdallah, avec une bourse européenne DEASE-Marie Curie.
- **01 Octobre 2007-30 Novembre 2007** : étudiant en doctorat à la Universitat Autònoma de Barcelona avec une bourse du groupe de recherche en simulations numériques d'équations aux dérivées partielles.
- **01 Avril 2008-30 Septembre 2008** : contrat post-doctoral à l'Université de Grenade dans le cadre du projet "Ingenio Mathematica" (CSD2006-0032) notamment pour réaliser "Modèle quantique déterministe pour MOSFET 2D. Comparaison avec Monte Carlo et implémentation parallèle sur un cluster d'ordinateurs", projet financé par le Ministère espagnol de l'Éducation et de la Culture.
- **01 Octobre 2008-30 Septembre 2010** : contrat post-doctoral au Radon Institute for Computational and Applied Mathematics, Académie Autrichienne des Sciences, à Linz (Autriche).
- **01 Octobre 2010-30 Août 2013** : contrat post-doctoral, avec une bourse

Juan de la Cierva du ministère espagnol, au Département de Mathématiques Appliquées, Université de Valence (Espagne).

- **01 Septembre 2013-** : maître de conférences, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).

### 1.3 Formation et titres universitaires

- **12/07/2002** : Maîtrise en Mathématiques, Université de Padoue, Italie.  
**Titre du mémoire** : Croissance exponentielle asynchrone dans des modèles de populations avec structure d'âge.  
**Directeur(s)** : Rosanna Bressan Villella, Lorenza Tonetto.
- **2005** : DEA en Mathématiques Appliquées, Universitat Autònoma de Barcelona (Espagne).  
**Titre du mémoire** : Méthodes d'interpolation non oscillatoires appliquées à des équations cinétiques pour les plasmas.  
**Directeur(s)** : José Antonio Carrillo.  
**Jury** : Lluís Alsedà, Francesc Xavier Mora, Josep Maria Mondelo.
- **17/12/2007** : Doctorat, Universitat Autònoma de Barcelona (Espagne). **Titre de la thèse** : Une contribution à la simulation de modèles basés sur l'équation de Vlasov.  
<http://www.tesisenxarxa.net/TDX-0314108-170950/>  
**Directeur(s)** : José Antonio Carrillo, Naoufel Ben Abdallah.  
**Jury** : Rosa Donat, Josep Maria Mondelo, María J. Cáceres, Stéphane Cordier, Armando Majorana.
- **17/12/2007** : Doctorat européen, Universitat Autònoma de Barcelona (Espagne).

### 1.4 Synthèse de l'activité d'enseignement

- **Intégration numérique d'équations aux dérivées partielles**, 30 heures, année 2005-06, Département de Mathématiques, Universitat Autònoma de Barcelona (Espagne).
- **Lois de conservation hyperboliques**, 14 heures, année 2009-10, Johannes Kepler Universität, Linz (Autriche).
- **Mathématiques II**, 60 heures, année 2011-12, Ingénierie chimique, Universitat de València (Espagne).
- **Mathématiques II**, 60 heures, année 2012-13, Ingénierie chimique, Universitat de València (Espagne).
- **Analyse numérique**, 68 heures (cours intégré), année 2013-14, L1 ISIMA, Clermont-Ferrand (France).

- **Intégrales et résolution d'équations différentielles**, 28 heures (TD), année 2013-14, L3 Physique, UBP, Clermont-Ferrand (France).
- **Analyse numérique**, 14 hours (TD), année 2013-14, Polytech, Clermont-Ferrand (France).
- **Séries et calcul différentiel**, 56 heures (TD), année 2013-14, L2 Physique, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).
- **Mathématiques générales 2**, 30 heures (TD), année 2013-14, L1 Maths, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).
- **Module Mathématiques A/B**, 85 h., année 2014-15, L1, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).
- **Mathématiques (21MP31)**, 30 h., année 2014-15, L2, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).
- **Intégrales (31MM59)**, 26 h., année 2014-15, L3, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).
- **Harmonisation 2 (41FM12)**, 16 h., année 2014-15, M1, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).
- **Mathématiques Générales 2 (11MM22)**, 30 h., année 2014-15, L1, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).
- **Analyse Numérique (370P6NUM)**, 14 h., année 2014-15, Polytech, Clermont-Ferrand (France).
- **Module A ou B Mathématiques (11MM11)**, 85 h., année 2015-16, L1, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).
- **Mathématiques (21MP31)**, 30 h., année 2015-16, L2, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).
- **Intégrales, résolution d'équations différentielles (31MM59)**, 26 h., année 2015-16, L3, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).
- **Harmonisation - Méthodes numériques (41FM12)**, 16 h., année 2015-16, M1, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).
- **Mathématiques appliquées à la chimie (21MM311)**, 25 h., année 2015-16, L2, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).
- **Méthodes numériques (31MM55)**, 14 h., année 2015-16, L2, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).

## 1.5 Synthèse de l'activité de recherche

### Principaux secteurs d'activité de recherche :

- méthodes WENO, semi-lagrangiennes, splitting de Strang, Runge-Kutta en différences finies, à maillage adaptatif (Adaptive Mesh Refinement) et Galerkin discontinu pour les équations hyperboliques et cinétiques ;
- simulation réaliste de MOSFET à l'échelle nanométrique ;
- simulation des modèles d'interaction laser-plasma et centre-guide pour la phy-

- simulation de modèles aux particules et cinétiques de swarming ;
- simulation de modèles pour le transfert radiatif.

**Résumé.** Mon activité de recherche s’est développée autour de la simulation numérique de problèmes qui ont un intérêt pour la physique ou l’ingénierie, en particulier la simulation de semi-conducteurs, de plasmas, de modèles de comportement collectif et de l’équation de transfert radiatif.

Pendant ma thèse je me suis occupé de valider des méthodes numériques basées sur l’interpolation WENO et le splitting sur des cas test cinétiques de plus en plus compliqués, à partir de l’advection linéaire, en passant par le modèle Vlasov-Poisson jusqu’à un système Boltzmann-Schrödinger-Poisson pour décrire le transport et les états propres dans un dispositif MOSFET à l’échelle nanométrique, pour lequel les effets quantiques ne peuvent pas être négligés. En plus, j’ai abordé la simulation de problèmes en relation avec la physique des plasmas, avec un modèle 1D décrivant l’interaction laser-plasma.

Pendant mes affiliations post-doc (Grenade 2008, Linz 2008-2010 et Valence 2010-) j’ai développé plusieurs lignes de recherche : la parallélisation sur CPU et GPU du solveur pour les nanoMOSFETs; la simulation de modèles de comportement collectif au niveau des particules et cinétique; grâce à la participation au cemracs 2010, un schéma Galerkin discontinu pour le modèle centre-guide, qui fait partie de modèles pour l’énergie de fusion; l’implémentation d’une méthode Galerkin discontinu pour l’équation du transfert radiatif, d’intérêt pour les examens médicaux; finalement, l’application d’une stratégie à maillage adaptatif pour les lois de conservation hyperboliques et pour le système Vlasov-Maxwell décrivant l’interaction laser-plasma.

## 1.6 Liste de publications

1. J.A. Carrillo, F. Vecil, “Non oscillatory interpolation methods applied to Vlasov-based models”, **SIAM Journal on Scientific Computing** 29, 1179-1206, 2007.
2. J.A. Carrillo, A. Majorana, F. Vecil, “A Semi-lagrangian deterministic solver for the semiconductor Boltzmann-Poisson system”, **Communications in Computational Physics** 2, 1027-1054, 2007.
3. J.A. Carrillo, T. Goudon, P. Lafitte, F. Vecil, “Numerical Schemes of Diffusion Asymptotics and Moment Closures for Kinetic Equations”, **Journal of Scientific Computing**, 35, 113-149 (2008).
4. N.B. Abdallah, M.J. Cáceres, J.A. Carrillo, F. Vecil, “A deterministic solver for a hybrid quantum-classical transport model in nanoMOSFETs”, **Journal of Computational Physics**, vol. 228, nr. 17, 6553-6571 (2009).



5. J. A. Carrillo, M. Fornasier, G. Toscani, F. Vecil, “Particle, Kinetic, and Hydrodynamic Models of Swarming”, in Naldi, G., Pareschi, L., Toscani, G. (eds.) **Mathematical Modeling of Collective Behavior in Socio-Economic and Life Sciences**, Series : Modelling and Simulation in Science and Technology, Birkhauser, (2010), 297-336.
6. Pep Mulet, Francesco Vecil, “A semi-Lagrangian AMR scheme for 1D and 2D hyperbolic conservation laws”, **Journal of Computational Physics** 237 (2013), 151-176.
7. Francesco Vecil, Pauline Lafitte, Jesús Rosado, “Numerical analysis on attraction/repulsion collective behavior model”, accepté pour la publication à **Physica D Nonlinear Phenomena**, édition spéciale en occasion de la rencontre BIRS.
8. Francesco Vecil, José Miguel Mantas, María J. Cáceres, Carlos Sampedro, Andrés Godoy, Francisco Gámiz, “A parallel deterministic solver for the Schrödinger-Poisson-Boltzmann system in ultra-short DG-MOSFETs : Comparison with Monte Carlo”, **Computers and Mathematics with Applications** vol. 67 (2014), 1703–1721.
9. Francesco Vecil, Pep Mulet, Simon Labrunie, “WENO schemes applied to the quasi-relativistic Vlasov-Maxwell model for laser-plasma interaction”, accepté pour la publication sur **Comptes Rendus de Mécanique**, édition spéciale “Theoretical and Numerical Approaches for Vlasov-Maxwell Equations” (2014).

#### **Actes de congrès internationaux.**

1. Fischer, M., Moriarty J., Nordhausen, K., Panov, I. and Vecil, F. (2006), “Dynamic Traffic Control”. In Heiliö, M. and Kauranne, T. (editors) **Proceedings of the 18th ECMI Modelling Week 13.-21. August 2004**, 39-47, Research Report 101, Lappeenranta University of Technology, Lappeenranta.
2. Nicolas Crouseilles, Michel Mehrenberger, Francesco Vecil, “Discontinuous-Galerkin semi-Lagrangian method for Vlasov-Poisson”, **CEMRACS 2010 research achievements : numerical modeling of fusion**, ESAIM : proceedings vol. 32, (2011), 211-230.

#### **Articles soumis et en préparation.**

1. María J. Cáceres, Francisco Gámiz, Andrés Godoy, José Miguel Mantas, Carlos Sampedro, Francesco Vecil, “The impact of the surface roughness in the Schrödinger-Poisson-Boltzmann solver for ultra-short DG-MOSFETs”.
2. María J. Cáceres, José Miguel Mantas, Francesco Vecil, “GPU implementation of the Schrödinger-Poisson-Boltzmann solver for ultra-short DG-MOSFETs”.

3. Antonio Baeza Manzanares, Simon Labrunie, Pep Mulet Mestre, Francesco Vecil, “An electrodynamic AMR solver for the quasi-relativistic Vlasov-Ampère-Maxwell model”.
4. Massimo Fornasier, Francesco Vecil, “Numerical analysis on Cucker-Smale collective behavior models”.
5. Nicolas Crouseilles, Michel Mehrenberger, Francesco Vecil, “A Discontinuous-Galerkin semi-Lagrangian scheme for the guiding-center problem”.
6. Pauline Lafitte, Francesco Vecil, “Two-dimensional continuum simulation of attraction/repulsion collective behavior models”.
7. Armando Majorana, Francesco Vecil, “A Discontinuous-Galerkin solver for the radiative transfer equation”.

## 1.7 Séminaires et communications dans des congrès

- **Méthode semi-Lagrangienne pour interpolation WENO ponctuelle.** Département de Mathématiques, Université de Nancy (France). 1er Juin 2005. **Séminaire.**
- **Non oscillatory interpolation methods applied to kinetic equations for plasmas,** tenu aux Journées EDPs et Applications, Communauté de Travail des Pyrénées. Université Paul Sabatier, Toulouse (France). 30 Septembre 2005. **Séminaire.**
- **A solver for a coupled quantum-classical model for nanoMOSFETs,** tenu au DEASE Summer-school and Annual Meeting. Wolfgang Pauli Institut, Vienne (Autriche). 09-14 Juillet 2007. **Communication.**
- **Hybrid model for 2D quantum transport,** tenu au International Workshop in Computational Electronics. University of Massachusetts, Amherst MA (États-Unis). 08-10 Octobre 2007. **Poster.**
- **A semi-Lagrangian deterministic solver for a hybrid quantum-classical nanoMOSFET,** tenu au COMSON International Summer School on Modelling and Optimization for the Design of Electronic Circuits and Devices. Baia Samuele, Sampieri (Italie). 14-21 Juin 2008. **Communication.**
- **A semi-lagrangian deterministic solver for a hybrid quantum-classical nanoMOSFET,** tenu au minisymposium “M15 : Mathematical Problems from Semiconductor Industry”. SIMAI 9<sup>th</sup> congress, Rome (Italie). 15-19 Septembre 2008. **Communication.**
- **Splitting methods for the solution of electron transport in semiconductors,** tenu au Radon Institute for Computational and Applied Mathematics, Linz (Autriche). 7 Octobre 2008. **Séminaire.**
- **A deterministic hybrid quantum/classical solver for a nanoscaled MOSFET device,** tenu au Quantum Systems and Semiconductor Devices :

- Analysis, Simulation, Applications. Peking University (Chine). 20-24 Avril 2009. **Communication.**
- **Simulation of a Double Gate MOSFET through a hybrid quantum/classical model**, tenu au PDEs in Engineering Nanoscience and Biology. Hotel Le Royal, Hammamet (Tunisie). Mai 2010. **Communication.**
  - **Simulation of a Double Gate MOSFET through a hybrid quantum-classical model**, tenu au minisymposium “Advanced Numerical Simulations for Kinetic Equations”. Joint SIAM/RSME-SCM-SEMA Meeting Emerging Topics in Dynamical Systems and Partial Differential Equations DSPDEs’10, Barcelone (Espagne). 31 Mai-4 Juin 2010. **Communication.**
  - **Realistic simulation of a Double Gate MOSFET through a hybrid quantum-classical model**, tenu au minisymposium “MSP23 - Mathematical Models and Numerical Methods for Charge Transport in Semiconductors”. Joint SIMAI/SEMA conference on Applied and Industrial Mathematics, Cagliari (Italie). 21-25 Juin 2010. **Communication.**
  - **Simulation of a Double Gate MOSFET through a hybrid quantum-classical model**, tenu au minisymposium “MSP34 - New Trends in Kinetic Theory”. Joint SIMAI/SEMA conference on Applied and Industrial Mathematics, Cagliari (Italie). 21-25 Juin 2010. **Communication.**
  - **Some applications of kinetic equations**, Departament de Matemàtica Aplicada, Universitat de València (Espagne). 23 Février 2011. **Séminaire.**
  - **Simulation of sub-band model for ultra-short DG MOSFET devices**, tenu au congrès en mémoire de Naoufel Ben Abdallah “Kinetic models of classical and quantum particle systems”, Institut de Mathématiques de Toulouse (France), 14-18 Mars 2011. **Communication.**
  - **Implementación de simuladores realistas de dispositivos DG-MOSFET a nanoescala en plataformas de altas prestaciones** (Implémentation de simulateurs réalistes de dispositifs MOSFET Double Grille à l’échelle nanométrique sur des plate-formes de hautes prestations), tenu au Département de Mathématiques Appliquées, Université de Grenade (Espagne), 12 Juillet 2011. **Séminaire.**
  - **AP schemes for intermediate models between a kinetic equation and its diffusive limit**, tenu au 9th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics (ICNAAM 2011), G-Hotels, Halkidiki (Grèce), 19-25 Septembre 2011. **Communication.**
  - **Numerical analysis of attraction/repulsion collective behavior models**, tenu à la conférence “Analysis, Modeling and Simulation of Collective Dynamics from Bacteria to Crowds” au CISM (Centre International pour les Sciences Mécaniques), Udine (Italie), 9-13 Juillet 2012. **Communication.**
  - **A semi-Lagrangian AMR scheme for 2D transport problems in conservation form**, tenu au minisymposium “Adaptive Numerical Tech-

niques for Partial Differential Equations”, WONAPDE 2013, Fourth Chilean Workshop on Numerical Analysis of Partial Differential Equations, Universidad de Concepción, Concepción (Chili), 14-18 Janvier 2013. **Communication.**

- **A semi-Lagrangian AMR scheme for 2D transport problems in conservation form**, tenu à la session “Numerical Methods for Partial Differential Equations”, CSASC 2013, Koper/Capodistria (Slovénie), 9-13 Juin 2013. **Communication.**
- **Simulation déterministe d’un MOSFET de double grille par un solveur parallèle**, JERAA 2013, tenu à Saint-Étienne (France), 22 Novembre 2013. **Communication.**
- **Semi-Lagrangian Adaptive-Mesh-Refinement method for transport problems**, journée de l’équipe EDPAN, Laboratoire de Mathématiques, UBP, 16 January 2014. **Séminaire.**
- **Simulation déterministe d’un MOSFET de double grille par un solveur parallèle**, tenu au Laboratoire Jean Kuntzmann, Grenoble (France), 7 février 2014. **Séminaire.**
- **Deterministic simulation of a DG-MOSFET through a parallel solver**, tenu au congrès ECMI 2014, Taormina (Italie), 13 juin 2014. **Communication.**
- **A parallel deterministic solver for a DG-MOSFET device**, tenu au Département de Mathématiques Appliquées, Universitat de València, Burjassot (Espagne), 24 juillet 2014. **Séminaire.**
- **A parallel deterministic solver for DG-MOSFETs**, tenu au Workshop on PDEs : Modelling, Analysis and Numerical Simulations, Grenade (Espagne), 18 septembre 2014. **Communication.**
- **Simulación determinista de un MOSFET de doble puerta. Implementación paralela**, Grenade (Espagne), 19 juin 2015. **Seminaire.**

## 1.8 Activités administratives et autres compétences

### 1.8.1 Activité de rapporteur

Activité de rapporteur pour les revues suivantes :

- Communications in Computational Physics.
- Journal of Computational and Applied Mathematics.
- Journal of Scientific Computing.
- Journal of Computational and Theoretical Transport.

### 1.8.2 Organisation de conférences et workshops

- Minisymposium “Advanced Numerical Simulations for Kinetic Equations”, Joint SIAM/RSME-SCM-SEMA Meeting Emerging Topics in Dynamical Systems and Partial Differential Equations. Barcelone (Espagne). 31 Mai-4 Juin 2010.

Ce minisymposium a été organisé par Jingmei Qiu et moi. L’organisation consistait à contacter et inviter les éventuels participants, rédiger un programme, conduire les sessions comme chairman.

- Session spéciale “Numerical techniques for the description of charged particles transport”, 10th AIMS International Conference. Madrid (Espagne). 7-11 Juillet 2014.

Je suis le seul organisateur de cette session spéciale. L’organisation consiste à contacter et inviter les éventuels participants, rédiger un programme et conduire les sessions comme chairman.

### 1.8.3 Langues et connaissances informatiques

#### Langues :

- Italien (langue maternelle) ;
- Français (DALF C2, le niveau maximal du Cadre Européen Commun de Référence pour les langues) ;
- Anglais (Certificate of Proficiency in English, de Cambridge, correspondant au C2, le niveau maximal du Cadre Européen Commun de Référence pour les langues) ;
- Espagnol (Diploma de Español como Lengua Extranjera, niveau supérieur, de l’Instituto Cervantes, correspondant au C2, le niveau maximal du Cadre Européen Commun de Référence pour les langues) ;
- Catalan (EOI Barcelona Drassanes, C2, le niveau maximal du Cadre Européen Commun de Référence pour les langues) ;
- Arabe (débutant) ;
- Allemand (débutant).

#### Connaissances informatiques :

- Environnements : Linux (Ubuntu), Windows et MAC OS.
- Logiciels : LaTeX, Gnuplot, Office, Mathematica (débutant), Xfig.
- Langages de programmation : C++, C, Fortran 77 et 90, Bash.

## 2 Activités d’enseignement

### 2.1 Commentaire général

Pendant les années de doctorat je n’ai pas acquis beaucoup d’expérience d’enseignement, n’ayant donné qu’un cours. J’ai été le responsable des TP du cours “Intégration numérique d’équations aux dérivées partielles” de la 4<sup>e</sup> année de la maîtrise en mathématiques (BAC+4) de la Universitat Autònoma de Barcelona. Durant ma période de post-doc en Autriche j’ai donné les TP du cours “Lois de conservation hyperboliques” à la Johannes Kepler Universität de Linz, cours ouvert aux étudiants de maîtrise, master et doctorat. Pendant mon affiliation post-doctorale Juan de la Cierva à Valence, j’ai donné le cours “Mathématiques II” de la 1<sup>re</sup> année de la maîtrise (BAC+1) en ingénierie chimique.

### 2.2 Détail des enseignements

#### 2.2.1 Intégration numérique d’équations aux dérivées partielles (TP)

**Contexte :** maîtrise en mathématiques, Universitat Autònoma de Barcelona (Espagne).

**Année de cours :** BAC+4.

**Année :** 2005-06.

**Nombre d’heures :** 30.

**Programme du cours :** le cours a été dédié à l’analyse et à l’implémentation en langage C d’un solveur pour l’équation de la chaleur en une dimension.

**Responsable :** Josep Maria Modelo pour la partie théorique, Francesco Vecil pour les TP.

**Implications personnelles :** j’ai été le seul responsable des TP du cours, dont j’ai décidé le programme et la modalité de l’examen final.

#### 2.2.2 Lois de conservation hyperboliques (TP)

**Contexte :** mathématiques, Johannes Kepler Universität Linz (Autriche).

**Année de cours :** maîtrise, master, doctorat.

**Année :** 2009-10.

**Nombre d’heures :** 14.

**Programme du cours :** le cours avait comme but l’analyse de la consistance, de la convergence et de la stabilité, et l’implémentation en C++ des schémas numériques aux différences finies les plus élémentaires pour résoudre l’équation modèle de l’advection linéaire.

**Responsable :** Massimo Fonte pour la partie théorique, Francesco Vecil pour les TP.

**Implications personnelles :** j'ai été le seul responsable des TP du cours, dont j'ai décidé le programme.

### 2.2.3 Mathématiques II

**Contexte :** degré en ingénierie chimique, Universitat de València (Espagne).

**Année de cours :** BAC+1.

**Années :** 2011-12, 2012-13.

**Nombre d'heures :** 60.

**Programme du cours :** le cours avait comme but l'enseignement du calcul des dérivées partielles, des techniques d'intégration en deux et trois dimensions, de méthodes pour la résolution d'EDO, de séries, de séries de Fourier, et de fonctions en variable complexe.

**Responsable :** Cours Intégré.

**Implications personnelles :** j'ai été le seul responsable du cours, dont j'ai décidé le programme et la modalité des examens.

### 2.2.4 Analyse numérique (cours intégré)

**Contexte :** École d'ingénierie informatique ISIMA, Clermont-Ferrand (France).

**Année de cours :** BAC+3.

**Année :** 2013-14.

**Nombre d'heures :** 68 équiv. TD.

**Responsable :** Cours Intégré.

**Implications personnelles :** j'ai été responsable pour un des trois groupes.

### 2.2.5 Intégrales et résolution d'équations différentielles

**Contexte :** Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).

**Année de cours :** L3 (Physique).

**Année :** 2013-14, 2014-15, 2015-16.

**Nombre d'heures :** 26.

**Responsable :** TD.

**Implications personnelles :** j'ai été responsables des TD du cours.

### 2.2.6 Analyse numérique

**Contexte :** école d'ingénieurs Polytech, Clermont-Ferrand (France).

**Année de cours :** L2 (Génie Civil).

**Année :** 2013-14, 2014-15.

**Nombre d'heures :** 14.

**Responsable :** TD.

**Implications personnelles :** j'ai été responsables des TD d'un groupe.

### **2.2.7 Séries et Calcul Différentiel**

**Contexte :** Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).

**Année de cours :** L2 (Physique).

**Année :** 2013-14.

**Nombre d'heures :** 28 par groupe.

**Responsable :** TD.

**Implications personnelles :** j'ai été responsables des TD d'un groupe.

### **2.2.8 Mathématiques Générales 2 (11MM22)**

**Contexte :** Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).

**Année de cours :** L1.

**Année :** 2013-14, 2014-15.

**Nombre d'heures :** 30.

**Responsable :** TD.

**Implications personnelles :** j'ai été responsable des TD d'un groupe.

### **2.2.9 Module A ou B Mathématiques (11MM11)**

**Contexte :** Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).

**Année de cours :** L1.

**Année :** 2014-15, 2015-16.

**Nombre d'heures :** 85.

**Responsable :** Cours Intégré.

### **2.2.10 Mathématiques (21MP31)**

**Contexte :** Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).

**Année de cours :** L2 (Physique).

**Année :** 2014-15, 2015-16.

**Nombre d'heures :** 30.

**Responsable :** TD.

### **2.2.11 Harmonisation - Méthodes Numériques (41FM12)**

**Contexte :** Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).

**Année de cours :** M1.

**Année :** 2014-15, 2015-16.



**Nombre d'heures** : 16.

**Responsable** : TP.

### 2.2.12 Mathématiques appliquées à la chimie (21MM311)

**Contexte** : Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).

**Année de cours** : L2.

**Année** : 2015-16.

**Nombre d'heures** : 25.

**Responsable** : TD.

### 2.2.13 Méthodes Numériques (31MM55)

**Contexte** : Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (France).

**Année de cours** : L2.

**Année** : 2015-16.

**Nombre d'heures** : 14.

**Responsable** : TP.

## 3 Activités de recherche

### 3.1 Participation à des écoles de formation et à des conférences

- **1-5 Septembre 2003** : New challenges in applied mathematics, Castro Urdiales (Espagne).
- **13-21 Août 2004** : ECMI Modelling Week, Lappeenranta, Finlande.
- **29 Septembre - 1 Octobre 2005** : Journées EDPs et Applications, Communauté de Travail des Pyrénées, Université Paul Sabatier, Toulouse (France).
- **11-17 Septembre 2006** : Quantum transport : modelling, analysis and asymptotics, CIME 2006 à Cetraro (Italie).
- **09-14 Juillet 2007** : DEASE Summer-school and Annual Meeting, Wolfgang Pauli Institut, Vienne (Autriche).
- **08-10 Octobre 2007** : International Workshop in Computational Electronics, University of Massachusetts, Amherst MA (États-Unis).
- **15-21 Novembre 2007** : Advanced school on numerical solution of partial differential equations. Barcelone (Espagne).
- **14-21 Juin 2008** : COMSON International Summer School on Modelling and Optimization for the Design of Electronic Circuits and Devices, Baia Samuele, Sampieri (Italie).
- **15-19 Septembre 2008** : SIMAI 9<sup>th</sup> congress, Rome (Italie).

- **20-24 Avril 2009** : Quantum Systems and Semiconductor Devices : Analysis, Simulation, Applications, Peking University (Chine).
- **1-5 Septembre 2009** : Comson International School for Modeling and Optimization in Micro- and Nano-electronics, Cetraro (Italie).
- **15-18 Septembre 2009** : Summer School 2009 : Modelling and simulation for magnetic fusion, Strasbourg (France).
- **17-21 Mai 2010** : PDEs in Engineering Nanoscience and Biology, Hammamet (Tunisie).
- **31 Mai-4 Juin 2010** : Joint SIAM/RSME-SCM-SEMA Meeting Emerging Topics in Dynamical Systems and Partial Differential Equations DSPDEs'10, Barcelone (Espagne).
- **21-25 Juin 2010** : Joint SIMAI/SEMA conference on Applied and Industrial Mathematics, Cagliari (Italie).
- **19 Juillet - 27 Août 2010** : CEMRACS (Centre d'été de mathématiques et de recherche avancée en calcul scientifique) 2010 : "Modèles numériques pour la fusion", Marseille (France).
- **8-12 Octobre 2010** : PDEs in kinetic theories : kinetic description of biological models, Edinburgh (Écosse, Royaume-Uni).
- **14-18 Mars 2011** : Kinetic models of classical and quantum particle systems, tenu en mémoire de Naoufel Ben Abdallah à l'Institut de Mathématiques de Toulouse (France).
- **19-25 Septembre 2011** : 9th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics (ICNAAM 2011), G-Hotels, Halkidiki (Grèce).
- **9-13 Juillet 2012** : Analysis, Modeling and Simulation of Collective Dynamics from Bacteria to Crowds, Centre International pour les Sciences Mécaniques, Udine (Italie).
- **14-18 Janvier 2013** : WONAPDE 2013, Fourth Chilean Workshop on Numerical Analysis of Partial Differential Equations, Universidad de Concepción, Concepción (Chili).
- **9-13 Juin 2013** : CSASC 2013, Koper/Capodistria (Slovénie).
- **21-22 Novembre 2013**, JERAA 2013, tenu à Saint-Étienne (France).
- **9-13 Juin 2014**, ECMI 2014, tenu à Taormina (Italie).
- **8-12 Juillet 2014**, AIMS 2014, The 10th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, tenu à Madrid (Espagne).
- **15-19 Septembre 2014**, PDE-MANS 2014, Workshop on PDEs : Modelling, Analysis and Numerical Simulation, tenu à Grenade (Spain).

### 3.2 Activités de recherche auprès d'autres centres

- Laboratoire : Laboratoire MIP (Mathématiques pour l'Industrie et la Physique), Institut de Mathématiques de Toulouse, Université Paul Sabatier,

- Toulouse (France).  
 Durée : 3 semaines.  
 Année : 2004.  
 Sujet : solveurs pour des équations cinétiques.  
 Collaborateur(s) : Naoufel Ben Abdallah (Université Paul Sabatier Toulouse).
- Laboratoire : Département de Mathématiques, Université de Nancy (France).  
 Durée : 1 semaine.  
 Année : 2005.  
 Sujet : implémentation d'un schéma WENO time-splitting pour l'interaction laser-plasma.  
 Collaborateur(s) : Simon Labrunie (Université de Nancy).
- Laboratoire : Dipartimento di Matematica e Informatica, Università de Catane (Italie).  
 Durée : 1 semaine.  
 Année : 2006.  
 Sujet : implémentation d'une méthode WENO time-splitting pour le système Boltzmann-Poisson pour semi-conducteurs.  
 Collaborateur(s) : Armando Majorana (Università di Catania).
- Laboratoire : Mathematics department, Université Johannes Gutenberg, Mayence (Mainz, Allemagne).  
 Durée : 2 semaines.  
 Année : 2006.  
 Sujet : modèles Energy Transport appliqués à des problèmes de transport.  
 Collaborateur(s) : Stefan Holst (Johannes Gutenberg Universität Mainz).
- Laboratoire : Département de Mathématiques, Université de Lille (France).  
 Durée : 1 semaine.  
 Année : Novembre 2006.  
 Sujet : méthodes numériques pour des limites macroscopiques d'équations cinétiques.  
 Collaborateur(s) : Thierry Goudon (Université Lille 1), Pauline Lafitte (Université Lille 1), José Antonio Carrillo (ICREA-Universitat Atònoma de Barcelona).
- Laboratoire : Center of mathematical Sciences, Université de Cambridge (Royaume-Uni).  
 Durée : 2 semaines, 17/11/2008 - 29/11/2008.  
 Année : 2008.  
 Sujet : solveurs pour des problèmes de chemotaxis.  
 Collaborateur(s) : Peter Markowich (University of Cambridge), Klemens Fellner (University of Cambridge), Massimo Fornasier (RICAM Linz, Autriche).
- Laboratoire : Institut de Mathématiques de Toulouse, Université de Toulouse (France).

- Durée : 3 jours.  
 Année : Janvier 2009.  
 Sujet : solveur pour un modèle couplé quantique/classique pour les nano-MOSFETs.  
 Collaborateur(s) : Naoufel Ben Abdallah (Université Paul Sabatier Toulouse), José Antonio Carrillo (ICREA-Universitat Autònoma de Barcelona).
- Laboratoire : Departament de Matemàtiques, Universitat Autònoma de Barcelona (Espagne).  
 Durée : 3 semaines.  
 Année : Janvier 2009.  
 Sujet : solveurs cinétiques pour des problèmes de swarming, flocking et milling.  
 Collaborateur(s) : José Antonio Carrillo (ICREA-Universitat Autònoma de Barcelona), José Alfredo Cañizo (Universitat Autònoma de Barcelona), Jesús Rosado (Universitat Autònoma de Barcelona).
- Laboratoire : Departamento de Matemáticas, Université de Grenade (Espagne).  
 Durée : 1 mois.  
 Année : Juillet 2009.  
 Sujet : implémentation parallèle d'un solveur déterministe pour le modèle aux sous-bandes de Boltzmann-Schrödinger-Poisson pour les nanoMOSFETs.  
 Collaborateur(s) : María J. Cáceres (Universidad de Granada), José Miguel Mantas (Universidad de Granada), Carlos Sampedro (Universidad de Granada), Andrés Godoy (Universidad de Granada).
- Laboratoire : Département de Matemàtiques, Universitat Autònoma de Barcelona (Espagne).  
 Durée : 1 semaine.  
 Année : Novembre 2009.  
 Sujet : simulation numériques de modèles de comportement collectif.  
 Collaborateur(s) : José Antonio Carrillo (ICREA-Universitat Autònoma de Barcelona).
- Laboratoire : Laboratoire de Mathématiques de Toulouse, Université Paul Sabatier, Toulouse (France).  
 Durée : 1 semaine.  
 Année : Novembre 2009.  
 Sujet : schéma AP (asymptotic-preserving) pour la simulation des modèles de sous-bandes pour les nanoMOSFETs.  
 Collaborateur(s) : Naoufel Ben Abdallah (Université Paul Sabatier Toulouse), Marie-Hélène Vignal (Université Paul Sabatier Toulouse).
- Laboratoire : Centre International de Rencontres Mathématiques, Luminy, Marseille (France).

- Durée : 6 semaines, 19 Juillet-27 Août 2010.  
 Année : 2010.  
 Sujet : CEMRACS 2010 : modèles numériques pour la fusion.  
 Organisateur(s) : N. Crouseilles (INRIA Nancy-Grand-Est), H. Guillard (INRIA-Sophia Antipolis Méditerranée), B. Nkonga (Université de Nice et INRIA), E. Sonnendrücker (Université de Strasbourg et INRIA).  
 Projet : Application des méthodes Galerkin-discontinues aux équations de Vlasov. Collaborateur(s) : Nicolas Crouseilles (INRIA Nancy-Grand-Est), Michel Mehrenberger (IRMA Strasbourg).
- Laboratoire : Newton Institute for Mathematical Sciences, Université de Cambridge.  
 Durée : 2 mois, 1 Novembre 2010-22 Décembre 2010.  
 Année : 2010.  
 Sujet : Partial Differential Equations in Kinetic Theories.  
 Organisateur(s) : J.A. Carrillo (ICREA-Universitat Autònoma de Barcelona), S. Jin (University of Wisconsin Madison) et P.A. Markowich (University of Cambridge).
- Laboratoire : IRMA (Institut de Recherche Mathématique Avancée), Université de Strasbourg.  
 Durée : 1 semaine, 28 Février 2011-4 Mars 2011.  
 Année : 2011.  
 Sujet : Implémentation d'un schéma Galerkin discontinu pour le modèle centre-guide.  
 Collaborateur(s) : Nicolas Crouseilles (INRIA Nancy-Grand Est), Michel Mehrenberger (IRMA Strasbourg).
- Laboratoire : Departamento de Matemáticas, Université de Grenade (Espagne).  
 Durée : 1 mois, Juillet 2011.  
 Année : 2011.  
 Sujet : implémentation d'un solveur aux sous-bandes de Boltzmann-Schrödinger-Poisson pour les nanoMOSFETs sur des plates-formes de hautes performances.  
 Collaborateur(s) : María J. Cáceres (Universidad de Granada), José Miguel Mantas (Universidad de Granada), Carlos Sampedro (Universidad de Granada), Andrés Godoy (Universidad de Granada).
- Laboratoire : Departamento de Matemáticas, Université de Grenade (Espagne).  
 Durée : 1 mois, Juin 2012.  
 Année : 2012.  
 Sujet : parallélisation sur GPU du solveur aux sous-bandes Boltzmann-Schrödinger-Poisson pour les nanoMOSFETs.

- Collaborateur(s) : María J. Cáceres (Universidad de Granada), José Miguel Mantas (Universidad de Granada), Carlos Sampedro (Universidad de Granada), Andrés Godoy (Universidad de Granada).
- Laboratoire : Department of Applied Mathematics, Technical University of Munich (Allemagne).  
Durée : 1 semaine, Décembre 2012.  
Année : 2012.  
Sujet : analyse numérique du modèle Cucker-Smale pour les comportements collectifs.  
Collaborateur(s) : Massimo Fornasier.
  - Laboratoire : École Centrale Paris, Châteney-Malabry (France).  
Durée : 1 semaine (11-15 Février 2013).  
Année : Février 2013.  
Sujet : implémentation d'un solveur cinétique 2d pour un modèle attractif/repulsif de comportement collectif.  
Collaborateur(s) : Pauline Lafitte.
  - Laboratoire : Departamento de Matemáticas, Université de Grenade (Espagne).  
Durée : 2 semaines, Juin 2013.  
Année : 2013.  
Sujet : parallélisation sur GPU du solveur aux sous-bandes Boltzmann-Schrödinger-Poisson pour les nanoMOSFETs.  
Collaborateur(s) : María J. Cáceres (Universidad de Granada), José Miguel Mantas (Universidad de Granada), Carlos Sampedro (Universidad de Granada), Andrés Godoy (Universidad de Granada).
  - Laboratoire : Departamento de Matemáticas, Université de Grenade (Espagne).  
Durée : 20 juin-8 juillet 2014.  
Sujet : parallélisation sur GPU du solveur aux sous-bandes Boltzmann-Schrödinger-Poisson pour les nanoMOSFETs et implémentation du phénomène de scattering de la rugosité superficielle.  
Collaborateur(s) : José Miguel Mantas (Universidad de Granada), María J. Cáceres (Universidad de Granada), Carlos Sampedro (Universidad de Granada), Andrés Godoy (Universidad de Granada).
  - Laboratoire : Departament de Matemàtica Aplicada, Universitat de València (Espagne).  
Durée : 14-25 juillet 2014.  
Sujet : solveur électrodynamique pour le modèle Vlasov-Maxwell quasi-relativiste.  
Collaborateur(s) : Pep Mulet Mestre, Antonio Baeza Manzanares.
  - Laboratoire : Departamento de Matemáticas, Universidad de Granada (Spain).

Durée : 2 semaines, 2015.

Sujet : parallélisation sur GPU du solveur aux sous-bandes Boltzmann-Schrödinger-Poisson pour les nanoMOSFETs.

Collaborateur(s) : José Miguel Mantas, María J. Cáceres.

### 3.3 Participation à des projets de recherche

- Propriétés qualitatives d'équations aux dérivées partielles et de diffusion. Financé par : DGI-MEC (Ministère de l'Éducation et de la Culture). Référence : MTM2005-08024. Période : 2005-2008. Chercheur principal : José Antonio Carrillo.
- Modèle cinétique déterministe pour MOSFET 2D. Comparaison avec Monte Carlo et implémentation parallèle sur un cluster d'ordinateurs. Référence : CSD2006-0032 / FUT-C2-0041. Période : 01/12/2007-30/11/08. Chercheur principal : María J. Cáceres.
- Alta resolución y adaptatividad en modelos hiperbólicos y procesamiento de imágenes (Haute resolution et adaptativité en modèles hyperboliques et traitement d'images). Référence : MINECO MTM2011-22741 (MINisterio de Economía y Competitividad). Période : 2012-2014. Chercheurs principaux : Pep Mulet, Rosa Donat.

## 4 Résumé des résultats obtenus

### 4.1 Travaux de thèse

Mon activité principale de recherche s'est déroulée avec José Antonio Carrillo de la Universitat Autònoma de Barcelona (Espagne). Sous sa direction je me suis occupé du développement de méthodes numériques pour la simulation de problèmes évolutifs décrits par des équations aux dérivées partielles hyperboliques et cinétiques. Cette catégorie de problèmes est traditionnellement traitée par une discrétisation en temps de type Runge-Kutta, couplée à des méthodes aux différences finies ou Galerkin pour la discrétisation dans l'espace des phases, par exemple la méthode WENO (Weighted Essentially Non Oscillatory) pour la reconstruction du flux. Cette stratégie est solide et assez précise, mais la contrainte sur le pas de temps, la condition CFL, impose un nombre d'itérations élevé, et davantage proportionnellement à la finesse du maillage.

C'est pour éviter cette contrainte sur le pas de temps que les schémas splitting (de Strang) deviennent intéressants. En échange d'une baisse de l'ordre en temps

(d'habitude un splitting d'ordre 2 est utilisé contre l'ordre 3 du Total Variation Diminishing Runge-Kutta) et quelques difficultés supplémentaires à bien décrire l'état asymptotique, les méthodes splitting permettent des simulations plus rapides, et sont d'ailleurs très efficaces dans la description des états transitoires. Un autre avantage est la possibilité de décomposer un problème complexe en des problèmes plus simples, résoudre ceux-ci séparément et les recombinaison pour approcher la solution du problème complet. Notamment, dans le cas des problèmes cinétiques, l'élément fondamental est la solution d'un problème d'advection 1D, soit linéaire soit non linéaire.

La première étape de mon travail de thèse a donc été l'implémentation et la validation d'une méthode pour l'advection linéaire 1D, en particulier une méthode semi-lagrangienne basée sur la reconstruction de la fonction aux pieds des caractéristiques. Pour l'interpolation nous avons choisi le schéma PWENO (Pointwise WENO), méthode que nous avons codée à une précision arbitraire ; pourtant, au niveau pratique, quelques routines ont été optimisées pour minimiser les temps de calcul. Les résultats ont été validés par les autres méthodes de la littérature et par l'analyse du schéma et les comparaisons avec les solutions analytiques.

Une fois validée la méthode dans le cas test le plus simple, elle a été utilisée dans des problèmes de plus en plus compliqués : d'abord un test 2D avec une équation de Boltzmann avec un opérateur de relaxation et un potentiel donné, où on splitte la partie de transport de la partie de collisions (splitting en temps), on splitte l'espace des phases (splitting dimensionnel) et les advections sont linéaires. Après cela, le deuxième cas test a été un système Vlasov-Fokker-Planck, où l'advection est non linéaire. Le troisième cas test a été un système Vlasov-Poisson non collisionnel, où les étapes d'advection doivent être couplées à un solveur pour le champ électrique : nous avons implémenté les cas test classiques de l'amortissement Landau, linéaire et non linéaire et l'instabilité double faisceau. Le quatrième et dernier cas test pour valider la méthode a été une simple diode 1D avec les collisions décrites par un opérateur de relaxation. Les résultats ont été publiés dans le **SIAM Journal on Scientific Computing**.

Pendant ma thèse je suis allé à Nancy pour implémenter avec Simon Labrunie une méthode splitting pour un système Vlasov-Maxwell qui décrit l'effet d'un laser pénétrant dans un plasma. Le code a donné des bons résultats, mais ce travail n'a pas encore abouti à une publication.

Pendant ma thèse nous avons, en collaboration avec Armando Majorana de Catane, implémenté une méthode splitting pour un semi-conducteur où l'opérateur de collision décrit les scatterings dus aux phonons acoustiques et optiques avec plusieurs fréquences. Ce travail, suite à un séjour d'une semaine en Sicile, a donné des bons résultats et a été publié dans **Communications in Computational Physics**. Avec la méthode que nous proposons, il a été facile de rajouter autant de phénomènes de scattering qu'on voulait.



Un travail un peu à part, par rapport au reste de ma thèse, a été une collaboration que nous avons eue avec Thierry Goudon et Pauline Lafitte de Lille : nous nous sommes intéressés à des modèles intermédiaires entre une simple équation cinétique avec relaxation à une gaussienne et sa limite diffusive (à savoir l'équation de la chaleur). Des clôtures d'ordre 1 et 2 des équations des moments ont été écrites et des schémas pour tous ces régimes ont été écrits et codés. Les méthodes ont été validées par des cas test typiques dans ce domaine (le test de Su-Olson) et les résultats ont été publiés dans le **Journal of Scientific Computing**.

Avant la soutenance de ma thèse j'ai obtenu une bourse DEASE-Marie Curie pré-doctorale pour passer une année à Toulouse sous la co-direction de Naoufel Ben Abdallah : au MIP (Mathématiques pour l'Industrie et la Physique, Université Paul Sabatier) j'ai posé les bases pour un travail qui n'est pas encore terminé, notamment l'implémentation d'un solveur au niveau cinétique du modèle aux sous-bandes décrivant un dispositif MOSFET de double grille partiellement confiné et de taille nanométrique : les effets quantiques ne sont plus négligeables, des équations stationnaires de Schrödinger doivent être résolues dans la direction du confinement.

## 4.2 Travaux postérieurs à la thèse

Les activités de recherche ci-dessus ont été poursuivies une fois mon doctorat fini.

Avec María J. Cáceres j'ai travaillé comme post-doctorant pendant six mois à Grenade. Là-bas j'ai terminé la première partie du travail que j'avais commencé à Toulouse : un article avec les méthodes pour le calcul des états propres dans le problème du nanoMOSFET, et les simulations dans le cas simplifié d'une seule vallée dans la structure de bande du silice et un opérateur de relaxation pour les scatterings. Ce travail a été publié dans le **Journal of Computational Physics**. Une fois préparés les schémas numériques dans un cas simplifié, j'ai implémenté un modèle réaliste d'intérêt pour l'ingénierie, avec la structure de bande aux trois vallées, bandes non paraboliques, et un opérateur de scattering fait par sept phénomènes d'interaction électrons-phonons. Le but de notre code est d'être un résultat de référence pour d'autres modèles moins précis mais moins coûteux. À Grenade travaille José Miguel Mantas, un ingénieur informaticien spécialiste en parallélisation : avec lui nous avons réduit les temps de calcul de notre code grâce à la parallélisation sur un cluster de CPUs. Ce travail sera bientôt envoyé au Journal of Scientific Computing. La parallélisation sur GPU et le rajout des effets de rugosité dans l'opérateur de scattering sont **en préparation**.

Entre Octobre 2008 et Septembre 2010 j'ai été post-doctorant en Autriche (à Linz) : au RICAM (Radon Institute for Computational and Applied Mathematics) j'ai commencé à travailler avec Massimo Fornasier sur la simulation des modèles de swarming, tant au niveau des particules qu'au niveau cinétique, ce dernier étant sa

limite mésoscopique, nécessaire quand le nombre d'agents à traiter est trop élevé, comme par exemple la migration des bancs de poissons. En particulier, avec Massimo Fornasier nous nous sommes centrés sur le modèle de Cucker-Smale, qui est un simple modèle d'orientation : les agents essaient de corriger leurs vitesses en observant les agents qu'ils ont autour. Ces modèles ont un intérêt dans plusieurs domaines où un ensemble d'agents converge à un comportement uniforme même s'il n'y a pas de leader. Nous sommes en ce moment en train de modifier l'article selon les rapports envoyés par Physica D. Sur des sujets semblables je travaille aussi avec d'autres personnes, notamment Jesús Rosado et Pauline Lafitte : dans ce cas le modèle de référence essaye de capter un autre comportement des espèces animales, le fait d'être social et de vouloir rester avec les autres animaux, mais non pas trop proche ; tout cela est modélisé par un potentiel d'attraction/répulsion. Ce travail a été publié sur **Physica D**. L'extension au cas continu 2D est **en préparation**.

L'été 2010 j'ai participé au cemracs, à Luminy (Marseille), où avec Nicolas Crouseilles et Michel Mehrenberger nous avons implémenté un schéma Galerkin discontinu semi-lagrangien pour la simulation du modèle centre-guide : la première partie du travail décrit la façon dont on résout l'advection linéaire 1D et comment on passe au cas 2D par un splitting de Strang ; le solveur est ensuite validé avec les cas test classiques : amortissement Landau et bump-on-tail (publié comme **proceeding** à comité de lecture) ; la deuxième partie du travail décrit la façon dont on résout l'advection 1D et 2D non linéaire, et le couplage à un solveur pour l'équation de Poisson de façon à simuler le modèle centre-guide (**en préparation**).

Fin 2010 j'ai commencé à travailler avec Armando Majorana de Catane sur l'implémentation d'une méthode Galerkin discontinu pour l'équation du transfert radiatif. Il a eu l'idée de traiter séparément l'espace des vitesses et l'espace des positions ; le premier est traité par une méthode Galerkin discontinu d'ordre bas, ce qui donne un système d'équations aux dérivées partielles dans les autres variables, système qui a priori peut être résolu par n'importe quelle autre méthode. Ce travail est **en préparation**.

Depuis 2011, avec Pep Mulet de la Universitat de València, nous avons abordé l'application d'une stratégie à maillage adaptatif (Adaptive Mesh Refinement) aux solveurs semi-Lagrangiens pour lois de conservation hyperboliques 1D et 2D : l'idée est d'utiliser, dans le domaine, des niveaux de résolution différents, selon les caractéristiques de la fonction de distribution, pour ainsi n'employer beaucoup de points que là où cela est nécessaire et réduire la quantité totale d'intégrations en temps. Nos schémas ont été testés avec succès dans les cas test de l'advection linéaire et non linéaire, l'amortissement Landau non linéaire, l'instabilité double faisceau, le swirling deformation flow et des instabilités de Kelvin-Helmholtz. Ce travail a été publié dans le **Journal of Computational Physics**. Notre but est maintenant d'appliquer ce solveur à la simulation de l'interaction laser-plasma par le modèle Vlasov-Maxwell 1D quasi-relativiste (avec Pep Mulet, Simon Labrunie, **en**

préparation).

À la rentrée 2012 j'ai repris un travail qui est longtemps resté en attente, à savoir la simulation d'un modèle Vlasov-Maxwell pour décrire l'effet d'un laser pénétrant dans un plasma; notre but est de tester plusieurs nouveautés en même temps : un schéma splitting semi-Lagrangien pour le problème quasi-relativiste, son couplage avec la stratégie à maillage adaptatif (AMR), et aussi la transformation en AMR d'un schéma plus classique comme un Runge-Kutta en différences finies. Ce travail est **en préparation**.

## 5 Projet de recherche

- *Simulation du modèle Vlasov-Maxwell quasi-relativiste décrivant l'interaction laser-plasma par un schéma semi-Lagrangien splitting AMR.*

Les stratégies à maillage adaptatif peuvent être utilisées pour accélérer les simulations dans lesquelles il y a des zones du domaine qui ne portent pas d'information essentielle et auxquelles on peut, par conséquent, donner moins de résolution qu'à d'autres. Jusqu'à maintenant, avec Pep Mulet de la Universitat de València, nous avons implémenté un solveur 1D semi-Lagrangien, étendu au cas 2D grâce au splitting de Strang, nous l'avons couplé à un solveur rapide (FFTW) pour l'équation de Poisson et nous l'avons testé sur des cas test classiques et académiques (les résultats sont publiés dans le **Journal of Computational Physics**). Plusieurs aspects peuvent encore être améliorés : usage de pas de temps différents selon la résolution ; couplage de la stratégie AMR à un solveur différent pour la partie advection afin d'améliorer les propriétés de conservation ; utilisation d'une formule d'un ordre plus élevé pour l'approximation du Jacobien dans la formule d'intégration en temps.

Nous voulons maintenant appliquer notre solveur à un problème d'intérêt dans le domaine de la recherche sur la fusion : l'interaction laser-plasma, décrite par un modèle Vlasov-Maxwell 1D. Des schémas à maillage fixe basés sur les différences finies et une intégration en temps Runge-Kutta ont déjà été codés par Simon Labrunie. Nous voulons apporter trois nouveautés : couplage du schéma de Yee *saute-mouton* pour le calcul de la partie Maxwell avec une méthode splitting WENO pour la partie de transport, pour ainsi pouvoir augmenter le pas de temps ; couplage de cette méthode avec une stratégie à maillage adaptatif ; utilisation de la stratégie à maillage adaptatif aussi aux schémas en différences finies. Le but de tout ceci est d'avoir une idée de la manière la plus efficace d'approcher le système Vlasov-Maxwell quasi-relativiste. Cet article est **en préparation** (avec Simon Labrunie et Pep Mulet).

- *Simulation déterministe des DG-MOSFETs partiellement confinés par un modèle Boltzmann-Schrödinger-Poisson.*

Le MOSFET est l'élément de base de n'importe quel dispositif électronique. Le développement technologique produit des transistors de plus en plus petits, et maintenant des tailles ont été atteintes pour lesquelles les effets quantiques ne peuvent plus être négligés, surtout à cause du confinement dans la direction transversale. Les solveurs couramment utilisés sont soit Monte Carlo, avec les inconvénients du bruit et de la non-fiabilité de l'information dans les zones peu riches en électrons, soit macroscopiques, avec l'inconvénient du manque de précision. Pour cela il est intéressant d'avoir un solveur déterministe, qui veut être une référence au niveau des résultats même s'il n'est pas aussi performant que les autres méthodes ci-dessus. En 2006 j'ai commencé à travailler sur ce sujet à Toulouse avec Naoufel Ben Abdallah (mon codirecteur de thèse). Les méthodes numériques pour le calcul du confinement ont été mises en place (ces résultats sont publiés sur le **Journal of Computational Physics**), et un grand effort d'implémentation a été fait. Dans cette première phase nous avons utilisé des coordonnées cartésiennes pour le vecteur d'onde et un schéma splitting semi-Lagrangien en temps. Nous avons maintenant amélioré le solveur dans plusieurs directions : prise en considération de sept types différents d'interaction électrons-phonons ; utilisation de coordonnées ellipsoïdales pour le vecteur d'onde pour mieux intégrer l'opérateur de scattering ; utilisation d'une discrétisation de type Runge-Kutta en temps, couplée à un schéma WENO pour les différences finies, qui s'adapte mieux aux équations de Boltzmann en variables ellipsoïdales pour le vecteur d'onde ; développement d'un code parallèle sur un cluster de CPUs ; comparaison avec Monte Carlo. Le travail jusqu'ici sera envoyé bientôt au Journal of Scientific Computing. À part cela, nous sommes aussi en train d'améliorer le modèle grâce à la prise en considération des effets de rugosité surfacique et nous sommes en train de développer un code parallèle sur GPU (par les bibliothèques CUDA), en ayant comme dernier but la mise en place d'une plateforme de calcul ouverte (**en préparation**). Ce travail est développé en collaboration avec María J. Cáceres (mathématicienne), José Miguel Mantas (ingénieur informaticien), Carlos Sampedro, Andrés Godoy et Francisco Gámiz (ingénieurs électroniques), tous eux de l'université de Grenade.

- *Implémentation d'un schéma Galerkin discontinu semi-lagrangien pour le modèle centre-guide.*

Le modèle centre-guide est d'intérêt dans le domaine de la fusion nucléaire. Les schémas Galerkin discontinu sont intéressants parce qu'ils permettent d'améliorer la résolution de la densité grâce à un raffinement local du maillage, ce qui n'impose pas de contrainte sur le pas de temps, et en outre ouvrent

les portes à une éventuelle parallélisation du code. Pendant le cembracs 2010 nous avons, avec Nicolas Crouseilles et Michel Mehrenberger, commencé à implémenter ce type de solveurs, et nous avons testé ces méthodes pour le modèle Vlasov-Poisson, avec un splitting de Strang dans l'espace des phases. Ces résultats sont publiés comme **proceeding** (à comité de lecture). La différence dans le cas du centre-guide est que l'advection est non linéaire et que le champ est 2D. Nos simulations du modèle centre-guide récupèrent avec une bonne précision les résultats des méthodes de référence dans ce domaine. Il reste à comparer la méthode que nous avons implémentée avec les méthodes similaires dans la littérature, et à imposer la condition de divergence numériquement nulle. L'article est **en préparation**.

— *Analyse numérique de modèles de comportement collectif.*

Les modèles de comportement collectif ont comme but la description de situations dans lesquelles un certain nombre d'agents atteint un comportement uniforme malgré l'absence d'un leader, comme par exemple le vol d'oiseaux, le développement des langages dans les sociétés primitives, le moyennage des prix dans les marchés. Avec Massimo Fornasier, nous avons travaillé à l'analyse numérique du modèle de Cucker-Smale, qui est un simple modèle d'orientation : les "oiseaux" modifient leur vitesse en copiant la direction que leurs voisins ont. L'article avec les résultats est en revision chez **Physica D**. Le travail développé jusqu'ici fait référence essentiellement au cas discret ; nous voulons aussi réaliser une étude numérique approfondie dans le cas continu (**en préparation**). Avec Pauline Lafitte et Jesús Rosado, nous avons travaillé sur un modèle différent, de la catégorie attractive/repulsive ; l'étude numérique du cas discret 3D et continu 1D a été publiée sur **Physica D**, et l'extension au cas continu 2D est **en préparation**.

— *Développement et implémentation d'un schéma Galerkin discontinu pour l'équation du transfert radiatif.*

L'équation du transfert radiatif est d'intérêt dans le domaine des examens médicaux. Armando Majorana a eu l'idée de traiter les équations cinétiques d'une façon assez simple : en intégrant d'abord en vitesse par une discrétisation Galerkin discontinu d'ordre 1, il reste ensuite à résoudre un ensemble d'équations cinétiques, qui peuvent être traitées avec la méthode préférée, par exemple, par cohérence, une méthode Galerkin discontinu couplée à une discrétisation en temps de type Runge-Kutta. Le résultat est un schéma assez facile à écrire que nous voudrions implémenter et tester sur des cas test et comparer aux méthodes de la littérature. Ce travail est **en préparation**.

— *Méthodes spectrales pour l'intégration des phénomènes de scattering pour l'é-*

*quation de Boltzmann.*

Quand dans l'équation de Boltzmann l'opérateur de scattering est essentiellement donné par une somme de masses de Dirac, une méthode spectrale peut être envisagée. María J. Cáceres et Clément Mouhot avaient commencé à écrire le schéma numérique il y a quelques années. L'idée semble intéressante parce qu'elle ne rajoute pas de coût numérique aux schémas traditionnels tout en améliorant leur précision.

— *Analyse et étude numérique des oscillations du plasma.*

Quand on applique un potentiel à un transistor avec dopage positif, les trous essaient de s'opposer au déplacement des électrons. Cela produit des oscillations (avant que le système converge vers un équilibre) qui sont d'autant plus évidentes que la taille du dispositif est petite et que le bias est élevé. Ce phénomène, en principe, ne dépend pas des effets quantiques ni de l'opérateur collisionnel choisi, mais essentiellement du champ électrique autoconsistant donné par l'équation de Poisson. Avec María J. Cáceres, nous voudrions comprendre mieux cet aspect des diodes en développant une analyse et des études numériques avec de différents modèles de complexité croissante : Vlasov-Poisson 1D, Boltzmann-Poisson 1D avec une simple relaxation, etc., jusqu'à arriver aux dispositifs partiellement confinés qui tiennent compte des interactions électrons-phonons et de la rugosité surfacique.