

Frédéric LEGOLL**Adresse professionnelle:**

Laboratoire Navier, Ecole des Ponts ParisTech
6 et 8, avenue Blaise Pascal
77455 Marne-la-Vallée Cedex 2
Tel: 01 64 15 37 81
Fax: 01 64 15 37 41
Email: frederic.legoll@enpc.fr
<http://navier.enpc.fr/LEGOLL-Frederic>
<http://cermics.enpc.fr/~legoll/>

Adresse personnelle:

11, rue de Saint-Cloud
92150 Suresnes

Né le 15 décembre 1975

Nationalité: Française

Mise à jour: Novembre 2016

FORMATION et PARCOURS PROFESSIONNEL
--

- Sept 2005- Chercheur au Laboratoire Navier, **Ecole des Ponts ParisTech**.
Ingénieur en Chef des Ponts, Eaux et Forêts (depuis 2011).
Membre de l'équipe-projet MATHERIALS (**INRIA**).
Professeur à l'Ecole des Ponts ParisTech (depuis décembre 2012).

Habilitation à Diriger des Recherches soutenue le 17 octobre 2011.
Sujet: Contributions à l'étude mathématique et numérique de quelques modèles en simulation multi-échelle des matériaux.
- 2004-2005 Post-Doc à Minneapolis (**IMA**), participation à l'année thématique "Mathematics of Materials: multiple scales, disorders and singularities". Collaboration avec Mitchell Luskin.
- 2001-2004 Thèse en mathématiques appliquées au **CERMICS** et à **EDF**, sous la direction de Claude Le Bris et d'Yvon Maday, soutenue le 31 août 2004.
Sujet: Méthodes moléculaires et multi-échelles pour la simulation numérique des matériaux.
Mots-clés: description des matériaux à plusieurs échelles, couplage discret/continu pour la mécanique, dynamique moléculaire, simulation numérique, algorithmes pour systèmes hamiltoniens.
- 1998-2001 Ingénieur du Corps des **Ponts et Chaussées** (2001).
Formation à l'Ecole des Ponts ParisTech.
En deuxième année, stage d'un an chez **General Electric** (Gestion de projet au sein d'une équipe en charge de la conception de nouveaux disjoncteurs industriels).
Double cursus en dernière année: **D.E.A. d'Analyse Numérique** (Université Pierre et Marie Curie - Paris VI - et Ecole Polytechnique).
- 1995-1998 Ingénieur de l'**Ecole Polytechnique** (1998).
Stage de fin d'études au CEA Saclay (sous la direction de P. Bonche). Analyse et simulation numérique d'un modèle de physique nucléaire. Meilleur stage de fin d'études de l'Ecole Polytechnique en physique.

THÈMES DE RECHERCHE

Mon activité a pour but le développement, l'analyse et la mise en oeuvre de

- Méthodes numériques en homogénéisation stochastique (réduction de variance, problèmes faiblement aléatoires), homogénéisation numérique (méthode MsFEM).
- Méthodes et algorithmes pour la dynamique moléculaire (dynamiques effectives, réduction de dimension, problèmes multi-échelles en temps, algorithmes pararéels, Hamiltoniens hautement oscillants, échantillonnage).

Je m'intéresse aussi à l'analyse numérique de modèles micro-macro pour les solides, couplant un modèle atomistique avec un modèle de mécanique du continuum (problèmes variationnels, coarse-graining, température finie).

PUBLICATIONS DANS DES REVUES À COMITÉ DE LECTURE

- *Stable approximation of the advection-diffusion equation using the invariant measure*, arxiv preprint 1609.04777 et HAL preprint 01367417 (avec C. Le Bris et F. Madiot).
- *Pathwise estimates for an effective dynamics*, arxiv preprint 1605.02644 et HAL preprint 01314221 (avec T. Lelièvre et S. Olla).
- *Examples of computational approaches for elliptic, possibly multiscale PDEs with random inputs*, Journal of Computational Physics, vol. 328, 455-473, 2017 (avec C. Le Bris).
- *Stabilisation de problèmes non coercifs via une méthode numérique utilisant la mesure invariante (Stabilization of non-coercive problems using the invariant measure)*, C. R. Acad. Sci. Paris, Série I, vol. 354 (8), 799-803, 2016 (avec C. Le Bris et F. Madiot).
- *An accurate scheme to solve cluster dynamics equations using a Fokker-Planck approach*, Computer Physics Communications, vol. 207, 170-178, 2016 (avec T. Jourdan, G. Stoltz et L. Monasse).
- *A numerical comparison of some Multiscale Finite Element approaches for advection-dominated problems in heterogeneous media*, Mathematical Modelling and Numerical Analysis, accepté pour publication (version antérieure étendue: arxiv preprint 1511.08453 et HAL preprint 01235642) (avec C. Le Bris et F. Madiot).
- *Some variance reduction methods for numerical stochastic homogenization*, Philosophical Transactions of the Royal Society A, vol. 374 (2066), 20150168, 2016 (avec X. Blanc et C. Le Bris).
- *Special Quasirandom Structures: a selection approach for stochastic homogenization*, Monte Carlo Methods and Applications, vol. 22 (1), 25-54, 2016 (avec C. Le Bris et W. Minvielle).
- *Coupling a reactive potential with a harmonic approximation for atomistic simulations of material failure*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 305, 422-440, 2016 (avec I.G. Tejada, L. Brochard, T. Lelièvre, G. Stoltz et E. Cancès).
- *Stress Gradient elasticity theory: existence and uniqueness of solution*, J. of Elasticity, vol. 123 (2), 179-201, 2016 (avec K. Sab et S. Forest).
- *An embedded corrector problem to approximate the homogenized coefficients of an elliptic equation*, C. R. Acad. Sci. Paris, Série I, vol. 353 (9), 801-806, 2015 (avec E. Cancès, V. Ehrlacher et B. Stamm).

- *Periodic homogenization using the Lippmann–Schwinger formalism*, arxiv preprint 1411.0330 et HAL preprint 01080251 (avec S. Brisard).
 - *Combining a reactive potential with a harmonic approximation for molecular dynamics simulation of failure: construction of a reduced potential*, Proceedings of the 2014 IC-MSQUARE conference, Journal of Physics: Conference Series, vol. 574, 012041, 2015 (avec I.G. Tejada, L. Brochard, G. Stoltz, T. Lelièvre et E. Cancès).
 - *A control variate approach based on a defect-type theory for variance reduction in stochastic homogenization*, SIAM Multiscale Modeling and Simulation, vol. 13 (2), 519-550, 2015 (avec W. Minvielle).
 - *A parameter identification problem in stochastic homogenization*, ESAIM Proceedings, vol. 48, 190-214, 2015 (avec W. Minvielle, A. Obliger et M. Simon).
 - *An MsFEM type approach for perforated domains*, SIAM Multiscale Modeling and Simulation, vol. 12 (3), 1046-1077, 2014 (avec C. Le Bris et A. Lozinski).
 - *Approximation grossière d'un problème elliptique à coefficients hautement oscillants (Coarse approximation of an elliptic problem with highly oscillatory coefficients)*, C. R. Acad. Sci. Paris, Série I, vol. 351 (7-8), 265-270, 2013 (avec C. Le Bris et K. Li).
 - *Variance reduction using antithetic variables for a nonlinear convex stochastic homogenization problem*, Discrete and Continuous Dynamical Systems - S, vol. 8 (1), 1-27, 2015 (avec W. Minvielle).
 - *Multi-Level Monte Carlo approaches for numerical homogenization*, SIAM Multiscale Modeling and Simulation, vol. 13 (4), 1107-1135, 2015 (avec Y. Efendiev et C. Kronsbein).
 - *Effective dynamics for a kinetic Monte-Carlo model with slow and fast time scales*, Journal of Statistical Physics, vol. 153 (6), 931-966, 2013 (avec S. Lahbabi).
 - *On a variant of random homogenization theory: convergence of the residual process and approximation of the homogenized coefficients*, Mathematical Modelling and Numerical Analysis, vol. 48 (2), 347-386, 2014 (avec F. Thomines).
 - *MsFEM à la Crouzeix-Raviart for highly oscillatory elliptic problems*, Chinese Annals of Mathematics, Series B, vol. 34 (1), 113-138, 2013 (avec C. Le Bris et A. Lozinski).
- Cet article a aussi été publié sous la référence suivante: C. Le Bris, F. Legoll et A. Lozinski, MsFEM à la Crouzeix-Raviart for highly oscillatory elliptic problems, in Partial Differential Equations: Theory, Control and Approximation, P. G. Ciarlet, T. Li, Y. Maday eds., Springer, 265-294 (2014).
- *Finite-Temperature Quasicontinuum*, Applied Mechanics Reviews, vol. 65 (1), 010803, 2013 (avec E.B. Tadmor, W.K. Kim, L.M. Dupuy et R.E. Miller).
 - *A micro-macro parareal algorithm: application to singularly perturbed ordinary differential equations*, SIAM Journal on Scientific Computing, vol. 35 (4), A1951-A1986, 2013 (avec T. Lelièvre et G. Samaey).
 - *Derivation of Langevin Dynamics in a nonzero Background Flow Field*, Mathematical Modelling and Numerical Analysis, vol. 47 (6), 1583-1626, 2013 (avec M. Dobson, T. Lelièvre et G. Stoltz).
 - *Multiscale Finite Element approach for "weakly" random problems and related issues*, Mathematical Modelling and Numerical Analysis, vol. 48 (3), 815-858, 2014 (avec C. Le Bris et F. Thomines).

- *Rate of convergence of a two-scale expansion for some "weakly" stochastic homogenization problems*, Asymptotic Analysis, vol. 80 (3-4), 237-267, 2012 (avec C. Le Bris et F. Thomines).
- *Asymptotic behaviour of Green functions of divergence form operators with periodic coefficients*, Applied Mathematics Research Express, vol. 2013 (1), 79-101, 2013 (avec X. Blanc et A. Anantharaman).
- *A numerical strategy for coarse-graining two-dimensional atomistic models at finite temperature: the membrane case*, Computational Materials Science, vol. 66, 84-95, 2013 (avec X. Blanc).
- *Negative thermal conductivity of chains of rotors with mechanical forcing*, Phys. Rev. E, vol. 84 (6), 061108, 2011 (avec A. Iacobucci, S. Olla et G. Stoltz).
- *Symmetric parareal algorithms for Hamiltonian systems*, Mathematical Modelling and Numerical Analysis, vol. 47 (3), 717-742, 2013 (avec X. Dai, C. Le Bris et Y. Maday).
- *Symplectic schemes for highly oscillatory Hamiltonian systems: the homogenization approach beyond the constant frequency case*, IMA Journal of Numerical Analysis, vol. 33 (1), 30-56, 2013 (version antérieure étendue: arxiv preprint 1008.1030 et HAL 00524814) (avec M. Dobson et C. Le Bris).
- *Variance reduction in stochastic homogenization using antithetic variables*, Markov Processes and Related Fields, vol. 18 (1), 31-66, 2012 (avec X. Blanc, R. Costauvec et C. Le Bris) (version antérieure: <http://cermics.enpc.fr/~legoll/hdr/FL24.pdf>).
- *Effective dynamics using conditional expectations*, Nonlinearity, vol. 23 (9), 2131-2163, 2010 (avec T. Lelièvre).
- *Symplectic schemes for highly oscillatory Hamiltonian systems with varying fast frequencies (Intégrateurs symplectiques pour des systèmes Hamiltoniens hautement oscillants avec fréquences rapides variables)*, C. R. Acad. Sci. Paris, Série I, vol. 348 (17-18), 1033-1038, 2010 (avec M. Dobson et C. Le Bris).
- *Integrators for highly oscillatory Hamiltonian systems: an homogenization approach*, Discrete and Continuous Dynamical Systems - B, vol. 13 (2), 347-373, 2010 (avec C. Le Bris).
- *Finite-temperature coarse-graining of one-dimensional models: mathematical analysis and computational approaches*, Journal of Nonlinear Science, vol. 20 (2), 241-275, 2010 (avec X. Blanc, C. Le Bris et C. Patz).
- *Variance reduction in stochastic homogenization: proof of concept, using antithetic variables*, Boletín Soc. Esp. Mat. Apl., vol. 50, 9-27, 2010 (avec R. Costauvec et C. Le Bris).
- *Thermal conductivity of the Toda lattice with conservative noise*, Journal of Statistical Physics, vol. 140 (2), 336-348, 2010 (avec A. Iacobucci, S. Olla et G. Stoltz).
- *Beyond multiscale and mutiphysics: multimaths for model coupling*, Networks and Heterogeneous Media, vol. 5 (3), 423-460, 2010 (avec X. Blanc, C. Le Bris et T. Lelièvre).
- *Free energy calculations: An efficient adaptive biasing potential method*, Journal of Physical Chemistry B, vol. 114 (17), 5823-5830, 2010 (avec B. Dickson, T. Lelièvre, G. Stoltz et P. Fleurat-Lessard).
- *Approximation numérique d'une classe de problèmes en homogénéisation stochastique (Numerical approximation of a class of problems in stochastic homogenization)*, C. R. Acad. Sci. Paris, Série I, vol. 348 (1-2), 99-103, 2010 (avec R. Costauvec et C. Le Bris).

- *Non-ergodicity of Nosé-Hoover dynamics*, Nonlinearity, vol. 22 (7), 1673-1694, 2009 (avec M. Luskin et R. Moeckel).
- *Coupled Discrete and Continuum Approach to the Behavior of Ballast*, Ninth International Conference on Computational Structures Technology proceeding, Athènes (septembre 2008) (avec M. Hammoud, D. Duhamel et K. Sab).
- *Some improvements of the activation-relaxation technique method for finding transition pathways on potential energy surfaces*, Journal of Chemical Physics, vol. 130 (11), 114711, 2009 (avec E. Cancès, M.-C. Marinica, K. Minoukadeh et F. Willaime).
- *A temperature control technique for nonequilibrium molecular simulation*, Journal of Chemical Physics, vol. 128 (7), 074105, 2008 (avec B. Leimkuhler et E. Noorizadeh).
- *Some remarks on sampling methods in molecular dynamics*, ESAIM Proceedings, vol. 22, 217-233, 2008 (avec T. Lelièvre et G. Stoltz).
- *Dérivation de schémas numériques symplectiques pour des systèmes hamiltoniens hautement oscillants (derivation of symplectic numerical schemes for highly oscillatory Hamiltonian systems)*, C. R. Acad. Sci. Paris, Série I, vol. 344 (4), 277-282, 2007 (avec C. Le Bris).
- *Non-ergodicity of the Nosé-Hoover thermostatted harmonic oscillator*, Archives for Rational Mechanics and Analysis, vol. 184 (3), 449-463, 2007 (avec M. Luskin et R. Moeckel).
- *Theoretical and numerical comparison of some sampling methods for molecular dynamics*, Mathematical Modelling and Numerical Analysis, vol. 41 (2), 351-389, 2007 (avec E. Cancès et G. Stoltz).
- *Analysis of a prototypical multiscale method coupling atomistic and continuum mechanics: the convex case*, Acta Mathematicae Applicatae Sinica, vol. 23 (2), 209-216, 2007 (avec X. Blanc et C. Le Bris).
- *Analysis of a prototypical multiscale method coupling atomistic and continuum mechanics*, Mathematical Modelling and Numerical Analysis, vol. 39 (4), 797-826, 2005 (avec X. Blanc et C. Le Bris).
- *Long-time averaging for integrable Hamiltonian dynamics*, Numerische Mathematik, vol. 100 (2), 211-232, 2005 (avec E. Cancès, F. Castella, Ph. Chartier, E. Faou, C. Le Bris et G. Turinici).
- *High-order averaging schemes with error bounds for thermodynamical properties calculations by molecular dynamics simulations*, Journal of Chemical Physics, vol. 121 (21), 10346-10355, 2004 (avec E. Cancès, F. Castella, Ph. Chartier, E. Faou, C. Le Bris et G. Turinici).
- *Numerical homogenization of nonlinear viscoplastic two-dimensional polycrystals*, Computational and Applied Mathematics, vol. 23 (2-3), 309-325, 2004.
- *Designing reversible measure invariant algorithms with applications to molecular dynamics*, Journal of Chemical Physics, vol. 117 (23), 10452-10464, 2002 (avec R. Monneau).

CHAPITRES DE LIVRES

- *Introduction to numerical stochastic homogenization and the related computational challenges: some recent developments*, W. Bao and Q. Du eds., Lecture Notes Series, Institute for Mathematical Sciences, National University of Singapore, vol. 22, 197-272, 2011 (avec A. Anantharaman, R. Costaouec, C. Le Bris et F. Thomines).
- *Some remarks on free energy and coarse-graining*, in Numerical Analysis of Multiscale Computations, B. Engquist, O. Runborg, R. Tsai eds., Springer Lecture Notes in Computational Science and Engineering, vol. 82, Springer, 279-329, 2012 (avec T. Lelièvre).
- *Variance reduction in stochastic homogenization: the technique of antithetic variables*, in Numerical Analysis of Multiscale Computations, B. Engquist, O. Runborg, R. Tsai eds., Springer Lecture Notes in Computational Science and Engineering, vol. 82, Springer, 47-70, 2012 (avec X. Blanc, R. Costaouec et C. Le Bris).
- *Multiscale methods coupling atomistic and continuum mechanics: some examples of mathematical analysis*, dans Analytical and Numerical Aspects of Partial Differential Equations, E. Emmrich and P. Wittbold eds., de Gruyter (2009), 193-245.

ACTIVITES EDITORIALES

Membre de l'Editorial Board de

- SIAM Multiscale Modeling and Simulation (2012-)
- ESAIM Proc (2012-)

Activités de relecture pour des projets soumis aux agences de financement: ANR (France), EPSRC (UK), FWF (Autriche), NWO (Pays-Bas), SNF (Suisse), . . .

Activités de relecture pour des articles soumis dans les journaux suivants: Advances in Computational Mathematics, AIMS Mathematics, AMRX, Annals of Mathematical Sciences and Applications, Applied Mathematical Modelling, Applied Numerical Mathematics, Archive for Rational Mechanics and Analysis, BIT, Communications in Computational Physics, Computational Materials Science, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, COCV (Control, Optimisation and Calculus of Variations), Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S, ESAIM Proc, Foundations of Computational Mathematics, IMA Journal of Numerical Analysis, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Journal of Chemical Physics, Journal of Computational and Applied Mathematics, Journal of Computational Physics, Journal of Nonlinear Science, Journal of Physics: Conference Series, Journal of Statistical Physics, Mathematical Modelling and Numerical Analysis, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, Mathematics and Computers in Simulation, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Molecular Physics, Nonlinearity, Philosophical Magazine, Physica D, Proceedings of the Royal Society A, Science China Mathematics, SIAM Journals (Applied Mathematics, Mathematical Analysis, Multiscale Modelling and Simulation, Numerical Analysis, Scientific Computing), Springer Journal of Scientific Computing, Stochastic Partial Differential Equations: Analysis and Computations, . . .

ENCADREMENT

Participation à l'encadrement des thèses de

- Mouhamad Hammoud, *Modélisation et simulation numérique du couplage entre les milieux discrets et continus* (soutenue le 17 décembre 2009; directeur de thèse: D. Duhamel);
- Kimiya Minoukadeh, *Méthodes déterministes et stochastiques pour la simulation moléculaire* (soutenue le 24 novembre 2010; directeur de thèse: E. Cancès);
- Ronan Costaouec, *Techniques numériques d'homogénéisation: application aux matériaux aléatoires* (soutenue le 23 novembre 2011; directeur de thèse: C. Le Bris);
- Florian Thomines, *Techniques numériques de changement d'échelle: application à l'homogénéisation numérique des matériaux aléatoires* (soutenue le 21 novembre 2012; directeur de thèse: C. Le Bris).
- William Minvielle, *Méthodes numériques pour les matériaux multiéchelles* (soutenue le 25 septembre 2015; directeurs de thèse: C. Le Bris et F. Legoll).
- François Madiot, *Méthodes éléments finis de type MsFEM pour des problèmes d'advection diffusion* (soutenue prévue décembre 2016; directeurs de thèse: C. Le Bris et F. Legoll).
- Pierre-Loïc Rothé, *Méthodes numériques pour l'estimation des fluctuations dans les matériaux multi-échelles, et problèmes reliés* (depuis octobre 2016; directeur de thèse: F. Legoll).

“Suivi” des postdocs de

- Matthew Dobson (Septembre 2009 - Juin 2012)
- Kun Li (Septembre 2011 - Juillet 2013)
- Simon Lemaire (Juin 2014 - Septembre 2015)
- Thomas Hudson (Septembre 2014 - Août 2016)
- Michael Bertin (Mars 2015 - Février 2016)

Participation aux jurys de thèse de David Beaujouan (U. Paris-Sud, novembre 2012, rapporteur), Matteo Capaldo (ENS Cachan, novembre 2015), Yu Cong (U. Lorraine, décembre 2013), Ronan Costaouec (ENPC, novembre 2011), Daniel Elfverson (Uppsala, octobre 2015, opposant), Dena Kazerani (U. Paris 6, novembre 2016, président), Oleh Krehel (Eindhoven, octobre 2014), William Minvielle (ENPC, septembre 2015), Franck Ouaki (Ecole Polytechnique, décembre 2013, président), Florian Thomines (ENPC, novembre 2012).

Participation au jury d'HdR de Ludovic Chamoin (ENS Cachan, octobre 2013).

RELATIONS À L'INTERNATIONAL

Séjours de longue durée à l'étranger:

- IPAM Los Angeles, décembre 2012: 3 semaines (core participant au sein du programme “Materials Defects”, Sept.-Dec. 2012).
- Texas A & M University, décembre 2011: 2 semaines (collaboration avec Y. Efendiev).
- Minneapolis, mai 2009: 3 semaines à l'IMA.

- Berlin, juillet 2008: 3 semaines à la Technische Universität, dans le cadre du programme “Analytical and numerical aspects of partial differential equations”.
- Bonn, printemps 2008: 3 semaines dans le cadre du HIM Junior Trimester Program on Computational Mathematics (Numerical methods in molecular simulation, organisé avec Tony Lelièvre, Mathias Rousset et Gabriel Stoltz).
- Minneapolis, avril 2006: 3 semaines à l’IMA (collaboration avec M. Luskin et R. Moeckel).
- Minneapolis, septembre 2004 - août 2005: post-doc d’un an à l’IMA (Institute for Mathematics and its Applications).

ORGANISATION DE CONFÉRENCES et COMITÉS

Membre du comité scientifique de la conférence SciCADE 2015.

- Mini-symposium “Mathematical theory and computational techniques for multiscale materials modeling” (8th International Conference on Multiscale Materials Modeling, MMM 2016, Dijon, Octobre 2016), organisé avec W. Curtin (EPFL), C. Garcia-Cervera (UCSB), J. Kermode (Warwick), X. Li (Penn State), A. Lozinski (Besançon), M. Luskin (Minneapolis) et C. Ortner (Warwick).
- Workshop “Stochastic and multiscale inverse problems” (ENPC, Octobre 2014), organisé avec V. Ehrlacher, T. Lelièvre et K. Sab.
- Mini-symposium “Recent advances on parareal algorithms” (Conférence SciCADE 2013, Valladolid, Septembre 2013), organisé avec Y. Maday (Paris 6).
- Mini-symposium “Multi-scale methods for heterogeneous materials” (12th U.S. National Congress on Computational Mechanics, 12th USNCCM, Raleigh, Juillet 2013), organisé avec R. Cottreau (Centrale Paris), L. Graham-Brady (Johns Hopkins) et M. Ostoj-Starzewski (U. of Illinois).
- Mini-symposium “The atomistic basis of non-equilibrium thermal processes in materials” (12th U.S. National Congress on Computational Mechanics, 12th USNCCM, Raleigh, Juillet 2013), organisé avec B. Kraczek (US Army Research Laboratory), R. Jones (Sandia National Laboratories) et K. Mandadapu (Sandia National Laboratories).
- Mini-symposium “Atomistic basis of thermal processes in driven systems” (22nd International Workshop on Computational Mechanics of Materials, IWCMM XXII, Baltimore, Septembre 2012), organisé avec B. Kraczek (US Army Research Laboratory), R. Jones (Sandia National Laboratories) et K. Mandadapu (Sandia National Laboratories).
- Ecole CEA-EDF-INRIA “Simulation of hybrid dynamical systems and applications to molecular dynamics” (IHP, Paris, Septembre 2010), organisée avec E. Faou (INRIA), T. Lelièvre (ENPC) et G. Stoltz (ENPC).
- Mini-symposium “Molecular Dynamics” (Dynamics Days Europe 2010, Bristol, Septembre 2010), organisé avec B. Leimkuhler (Edinburgh).
- Mini-symposium “Coarse-graining and effective dynamics in molecular simulation” (Multiscale Molecular Modelling conference, Edinburgh, Juillet 2010), organisé avec T. Lelièvre.

- Mini-symposium “Arlequin, FE2 and other embedded domains methods for multimodel and multiscale mechanical problems: advances, analyses and computation of challenging fine scales applications” (4th European Congress on Computational Mechanics, Paris, Mai 2010), organisé avec H. Ben Dhia (Centrale), F. Feyel (ONERA) et V. Kouznetsova (Eindhoven).
- Mini-symposium “Numerical methods and their applications in molecular simulation” (Conférence ICNAAM 2009, Grèce, Septembre 2009), organisé avec E. Cancès.
- Mini-symposium “Multimodel and Multiscale Approaches in Solid Mechanics: Algorithms and Applications Advances” (10th US National Congress on Computational Mechanics, Columbus, Ohio, Juillet 2009), organisé avec H. Ben Dhia (Centrale).
- Conférence “Numerical methods in molecular simulation” (HIM, Bonn, Avril 2008), organisée avec T. Lelièvre, M. Rousset et G. Stoltz.
- Conférence “Modèles et méthodes numériques pour les milieux granulaires” (Ecole des Ponts, 19-21 novembre 2007), organisée avec François Castella (U. Rennes).
- Mini-symposium “Molecular dynamics” (Conférence SciCADE 2007, Saint-Malo, Juillet 2007), organisé avec E. Darve (Stanford).
- Séminaire “Molecular dynamics and sampling” (IMA, printemps 2005), organisé avec B. Leimkuhler (Edinburgh).

EXPOSÉS

- CASA weekly seminar (Eindhoven, Novembre 2016)
- IHP workshop on “Recent developments in numerical methods for model reduction” (Paris, Novembre 2016)
- MMM 2016 conference (Dijon, Octobre 2016)
- ECCM conference (Brussels, Septembre 2016)
- WCCM conference (Seoul, Juillet 2016), Keynote lecture
- AIMS conference (Orlando, Juillet 2016)
- Séminaire du LMS (Ecole Polytechnique, Juin 2016)
- ECCOMAS conference (Hersonissos, Juin 2016)
- EMI-PMC 2016 conference (Nashville, Mai 2016)
- Journées NEEDS – Milieux Poreux (Paris, Décembre 2015)
- Journée EDP – Probas “Homogénéisation aléatoire” (Paris, Décembre 2015)
- Workshop “Gradient flows, Large deviations and Applications” (Eindhoven, Novembre 2015)
- Weekly seminar of Numerical Analysis (KTH, Stockholm, Octobre 2015)
- Colloque “Mathématiques appliquées et nanoélectronique” (Grenoble, Septembre 2015)
- SciCADE conference (Potsdam, Septembre 2015)
- ICIAM conference (Beijing, Aout 2015)
- Workshop on “Multiscale Modeling and Analysis in Materials Science” (Shanghai, Aout 2015)
- BIRS workshop on “Developments in the Theory of Homogenization” (Banff, Juillet 2015)

- BIRS workshop on “Free-energy calculations: a mathematical perspective” (Oaxaca, Juillet 2015)
- Equadiff Conference (Lyon, Juillet 2015)
- Reunion Conference of the Materials Defects IPAM program (Los Angeles, Juin 2015)
- Workshop “Dimension reduction: mathematical methods and applications” (Penn State University, Mars 2015)
- Euromech Colloquium on “Multiscale Computational Methods for bridging scales in materials and structures” (Eindhoven, Février 2015)
- Journées annuelles du GdR ModMat (Lyon, Janvier 2015)
- Atelier du GdR ModMat “De l’atome au code industriel” (Marseille, Décembre 2014)
- Journées annuelles NEEDS (Nantes, Octobre 2014)
- MMM conference (Berkeley, Octobre 2014)
- Workshop on Multiscale Models of Crystal Defects (Banff, Sept. 2014)
- WCCM conference (Barcelona, Juillet 2014)
- AIMS conference (Madrid, Juillet 2014)
- 8th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (Lugano, Juillet 2014)
- Workshop on “Computational Multiscale Methods” (Oberwolfach, Juin 2014)
- Reunion Conference of the Materials Defects IPAM program (Los Angeles, Juin 2014)
- Séminaire du département de mathématiques (Augsburg University, Mai 2014)
- Workshop on “Computational Aspects of Multiscale Materials Modeling” (Evanston, Mai 2014)
- Workshop “From atomistic to continuum models in material science” (L’Aquila, Avril 2014)
- Séminaire du département de mathématiques (Imperial College, Février 2014)
- Symposium on Statistical Mechanics (Warwick, Décembre 2013)
- Workshop on “Stochastic Modeling of Multiscale Systems” (Eindhoven, Décembre 2013)
- MoMaS Multiphase Seminar Days (Orsay, Octobre 2013)
- SciCADE conference (Valladolid, Septembre 2013)
- CEMRACS summer school (Marseille, Aout 2013)
- SES 50th Annual Technical Meeting (Providence, Juillet 2013)
- 12th US National Congress on Computational Mechanics (Raleigh, Juillet 2013)
- SIAM conference on mathematical aspects of material sciences (Philadelphia, Juin 2013)
- Workshop on slow-fast dynamics (Barcelona, Juin 2013)
- 11ième Colloque National en Calcul des Structures (Giens, Mai 2013)
- Workshop on “Multiscale modelling and simulation in material science” (Shanghai, Avril 2013)
- Workshop on “Interplay of Theory and Numerics for Deterministic and Stochastic Homogenization” (Oberwolfach, Mars 2013)
- Séminaire du laboratoire Jacques-Louis Lions (Mars 2013)
- Séminaire du département de mathématiques (Université de Besançon, Février 2013)
- Lake Arrowhead culminating workshop, IPAM Los Angeles (Décembre 2012)

- Workshop on “Computational Methods for Multiscale Modeling of Materials Defects”, IPAM Los Angeles (Décembre 2012)
- Séminaire du groupe de travail Homogénéisation et Echelles Multiples (Paris 6, Novembre 2012)
- Workshop on “Nonequilibrium Statistical Mechanics” (Banff, Novembre 2012)
- Kickoff meeting, “Laboratoire International Associé Nancy/UIUC” (Nancy, Novembre 2012)
- 22nd Int. Workshop on Computational Mechanics of Materials (Baltimore, Septembre 2012)
- NumDiff 13 Conference (Halle, Septembre 2012)
- ECCOMAS conference (Wien, September 2012)
- WCCM conference (Sao Paulo, Juillet 2012)
- AIMS conference (Orlando, Juillet 2012)
- CECAM workshop “Free energy calculations: from theory to applications” (Paris, Juin 2012)
- Workshop “Mathematics meets chemistry and physics” (Erlangen, Mars 2012)
- American Physical Society meeting (Boston, Mars 2012)
- Workshop on “Mathematical theory and computational methods for multiscale problems” (Singapour, Janvier 2012)

- Numerical analysis seminar, Texas A & M University (College Station, Novembre 2011)
- Workshop du GdR CHANT “Interactions EDP/probas: modèles probabilistes pour la simulation moléculaire” (Grenoble, Novembre 2011)
- EMS School on Mathematics for Multiscale Phenomena (Bedlewo, Pologne, Octobre 2011)
- Summer school of the Large Scale Initiative FUSION (Paris, Septembre 2011)
- Workshop on “Mathematics in Materials Science” (Beijing, Septembre 2011)
- ENUMATH 2011 conference (Leicester, Septembre 2011)
- 11ième Congrès “US National Congress of Computational Mechanics” (Minneapolis, Juillet 2011)
- ICIAM 2011 conference (Vancouver, Juillet 2011)
- AMS von Neumann symposium on “Multimodel and multialgorithm coupling for multiscale problems” (Snowbird, Juillet 2011)
- Workshop on “Coarse-graining of many body systems” (Heraklion, Juin 2011)
- Workshop on “Ginzburg-Landau equations, Dislocations and Homogenization” (Ile de Ré, Mai 2011)
- 10ième Colloque national en calcul des structures (Giens, Mai 2011)
- Caltech ACM Seminar (Los Angeles, Avril 2011)
- Workshop on “Stochastic multiscale methods” (Banff, Mars 2011)
- Séminaire interne, Fraunhofer Institute (Kaiserslautern, Mars 2011)
- Séminaire de l’Equipe-Projet POEMS (Paris, Février 2011)
- Conférence de la Société Espagnole de Mathématiques (Avila, Février 2011)
- Mini-workshop “Mathematical analysis for peridynamics”(Oberwolfach, Janvier 2011)
- Workshop on “Random Media” (IPAM, Janvier 2011)

- Workshop “Multiscale simulation of heterogeneous materials” (Louvain, Janvier 2011)
- Séminaire “Sciences Numériques pour la Mécanique” (Ecole Centrale Paris, Novembre 2010)
- Conférence “Large scale stochastic dynamics” (Oberwolfach, Novembre 2010)
- Conférence “Highly Oscillatory Problems” (Cambridge, Septembre 2010)
- Conférence “Dynamics Days Europe 2010” (Bristol, Septembre 2010)
- Conférence “Multiscale Molecular Modelling” (Edinburgh, Juillet 2010)
- Minisymposium “Effective macroscopic descriptions of microscopic dynamics”, SIAM Conference on Dynamical Systems and PDEs (Barcelone, Juin 2010)
- Minisymposium “Theory and Applications of Computational Hybrid Models of Solids”, SIAM Conference on Mathematical Aspects of Materials Science (Philadelphie, Mai 2010)
- Séminaire interne du laboratoire Navier, “Simulations moléculaires et discrètes” (Mars 2010)
- Conférence annuelle de la Société de Mathématiques Allemande (Munich, Mars 2010)
- Conférence “Highly oscillatory problems” (Saint-Malo, Janvier 2010)
- Séminaire de Mathématiques Appliquées, Collège de France (4 Décembre 2009)
- Conférence LN3M (Lyon, Septembre 2009)
- Conférence ICNAAM 2009 (Grèce, Septembre 2009)
- Conférence “PDE and Materials” (Oberwolfach, Septembre 2009)
- Conférence Cecam “Deterministic thermostats” (Lausanne, Juillet 2009)
- 10ième Congrès “US National Congress of Computational Mechanics” (Columbus, Juillet 2009)
- Seconde conférence annuelle du “EPSRC network Mathematical challenges of molecular dynamics” (Bath, Juillet 2009)
- Conférence Capstone (Warwick, Juin 2009)
- Conférence “Computational multiscale methods” (Oberwolfach, Juin 2009)
- Conférence “Multiscale models in solids mechanics” (Oxford, Juin 2009)
- Séminaire “Mathematics and Chemistry” et conférence “Molecular simulations: algorithms, analysis and applications”, IMA (Minneapolis, Mai 2009)
- Séminaire à l’Ecole Polytechnique Fédérale (Lausanne, Avril 2009)
- Séminaire “Mathematics and Chemistry”, IMA (Minneapolis, Février 2009)
- Séminaire du Zentrum Mathematik, Technische Universität (Munich, Décembre 2008)
- Conférence “Interplay of Analysis and Probability in Physics” (Oberwolfach, Décembre 2008)
- Séminaire hebdomadaire du LAMSID EDF (Paris, Novembre 2008)
- Conférence “Development and analysis of multiscale methods”, IMA (Minneapolis, Novembre 2008, poster)
- Minisymposium “Mathematical issues in multiscale materials modeling”, Fourth International Conference on Multiscale Materials Modeling (Tallahassee, Octobre 2008)
- Séminaire du Max Planck Institute (Leipzig, Juillet 2008)

- Séminaire du groupe de travail “Modélisation, analyse numérique et équations aux dérivées partielles”, Technische Universität (Berlin, Juillet 2008)
- Conférence “Free Energy Calculations” (Banff, Juin 2008)
- Conférence “Gradient models and elasticity” (Warwick, Juin 2008)
- Conférence “ITER: aspects plasmas et matériaux” (Paris, Mai 2008)
- Minisymposium “Atomistic to Continuum Coupling Methods for Solids”, SIAM Conference on Mathematical Aspects of Materials Science (Philadelphie, Mai 2008)
- Séminaire du département de Mathématiques Appliquées (Bonn, Avril 2008)

- Conférence “Classical and Quantum approaches in Molecular Modeling”, IMA (Minneapolis, Juillet 2007)
- Conférence SciCADE 2007 (Saint-Malo, Juillet 2007)
- Conférence “Multiple time scale problems and foundation of Molecular Dynamics” (Princeton, Mai 2007)
- 8ième Colloque national en calcul des structures (Giens, Mai 2007)
- Séminaire interne du LAMI (Montpellier, Mai 2007)
- Conférence “Applying Geometric Integrators” (Edinburgh, Avril 2007)
- Programme “Highly Oscillating Problems”, Newton Institute (Cambridge, Avril 2007)
- Conférence “Second Atomistic to Continuum Coupling Methods” (Austin, Avril 2007)

- Séminaire du WIAS Institute (Berlin, Décembre 2006)
- Conférence “Understanding Molecular Simulation” (Edinburgh, Novembre 2006)
- Rencontres du GdR CHANT (Lyon, Novembre 2006)
- Conférence “7th World Congress on Computational Mechanics” (Los Angeles, Juillet 2006)
- Conférence “Networks and Heterogeneous Media” (Salerno, Juin 2006)
- Séminaire à Warwick University (Juin 2006)
- Minisymposium “Molecular Dynamics”, Canum 2006 (Lorient, Mai 2006)
- Séminaire du département Aerospace Engineering and Mechanics, University of Minnesota (Minneapolis, Avril 2006)
- Conférence “Atomistic to Continuum Coupling Methods” (Albuquerque, Mars 2006)
- Groupe de travail Méthodes Numériques (laboratoire J.-L. Lions, Paris, Février 2006)
- Rencontres du GdR CHANT (Grenoble, Janvier 2006)

- Conférence finale du programme de l’IPAM “Bridging Time and Length Scales in Materials Science and Bio-Physics” (Lake Arrowhead, Décembre 2005)
- Conférence “Meshfree Methods for Partial Differential Equations” (Bonn, Septembre 2005)
- Séminaire interne aux Sandia National Laboratories (Albuquerque, Juillet 2005)
- Conférence “Foundations of Computational Mathematics” (Santander, Juillet 2005)
- Séminaire des postdocs, IMA (Minneapolis, Juin 2005).
- Séminaire “Dynamical Systems”, University of Minnesota (Minneapolis, Mai 2005)
- Conférence “Atomic motion to macroscopic models”, IMA (Minneapolis, Avril 2005)

- Conférence “Multiscale numerical methods for advanced materials” du réseau européen MultiMat (Paris, Mars 2005)
- Séminaire “Molekule im Rechner” (FU Berlin, Décembre 2004)
- Conférence “Molecular simulation: Algorithmic and Mathematical aspects” (Paris, Décembre 2004)
- Séminaire “Sciences des matériaux”, IMA (Minneapolis, Octobre 2004)
- Conférence “XXI International Congress of Theoretical and Applied Mechanics” (Varsovie, Août 2004, poster)
- Minisymposium “Introduction au CEMRACS 2004”, Canum 2004 (Obernai, Juin 2004)
- Conférence “SIAM conference of Mathematical Aspects of Materials Science” (Los Angeles, Mai 2004, poster)
- Conférence “Accelerating dynamical simulations”, Cecam (Lyon, Mars 2004)
- Conférence “Discrete atomistic models and their continuum limits” (Berlin, Décembre 2003)
- Conférence “Structural Dynamical Systems” (Bari, Juin 2003)
- Conférence “Reactive classical potentials versus hybrid methods”, Cecam (Lyon, Juin 2003)
- Conférence “2nd Symposium on Computational Modeling of Multi-Scale Phenomena” (Petropolis, Août 2002)
- Canum 2002 (Biarritz, Mai 2002)

ENSEIGNEMENT

- | | |
|---------------------------|--|
| depuis 2015 | Responsable et enseignant pour le cours “Equations aux dérivées partielles et Eléments finis” (15h de cours en première année de l’ENPC). Programme: Espaces de Sobolev, Formulation variationnelle de problèmes aux limites coercifs, Problèmes aux limites non-coercifs (exemple de l’équation de Stokes), Approximation numérique, Mise en oeuvre informatique. |
| depuis 2015 | Cours “Outils mathématiques pour l’ingénieur” (9h de cours en première année de l’ENPC, ainsi qu’encadrement de projets): responsable d’une petite classe. Programme: Calcul différentiel, Intégrale de Lebesgue. |
| depuis 2008 | Cours de M2 “Problèmes multiéchelles: aspects théoriques et numériques” (Université Paris 6, 24h): Modèles micro-macro pour les solides, Fluides complexes, Homogénéisation, Problèmes multi-échelles en temps. |
| Sept. 2006 –
Juin 2016 | Responsable et enseignant pour le cours “Mathématiques des modèles multiéchelles” (39h en deuxième année de l’ENPC, département IMI). |
| Sept. 2002 –
Juin 2015 | Cours d’analyse (depuis 2005, 35h en première année de l’ENPC): responsable d’une petite classe. Programme: Espaces de Banach et de Hilbert, Intégrale de Lebesgue, Distributions, Problème de Poisson, Transformée de Fourier. |