

Santiago Ignacio Badia Rodríguez

Reconocimiento: Aparte de los 43 trabajos publicados en revistas científicas internacionales, 4 artículos en proceso de revisión, 4 capítulos de libro y una monografía, con más de 1600 citas desde 2006, he disfrutado de un amplio reconocimiento por mi trabajo de investigación. En 2006 mi tesis doctoral fue seleccionada como la mejor tesis de doctorado en mecánica computacional en España, galardonada con el **premio SEMNI 2006**. Con la tesis también recibí el **premio ECCOMAS 2006** a la mejor tesis de doctorado en mecánica computacional que fue defendida en Europa ese mismo año; ECCOMAS es la asociación europea de mecánica computacional en ciencias aplicadas. En 2008 la UPC distinguió mi investigación pre y post-doctoral con el **premio extraordinario de doctorado 2005-2006**. En 2010 fui galardonado con el **premio Juan Carlos Simó** a los mejores jóvenes investigadores en el ámbito de la mecánica computacional, otorgado anualmente por SEMNI (Sociedad Española de Métodos Numéricos en la Ingeniería). En 2012 se me concedió el **Premio a Jóvenes Investigadores en Matemática Aplicada** por parte de la Sociedad Española de Matemática Aplicada, siendo el primer galardonado con formación en ingeniería en recibirlo. En 2014 recibí la **distinción ICREA Acadèmia 2014** de la Generalitat de Catalunya a los profesores de universidades catalanas con más actividad científica, que me permite reducir drásticamente la carga docente y focalizarme en la investigación.

Por otra parte, mi investigación ha sido reconocida mediante financiación de primera calidad. Conseguí una beca doctoral de la Generalitat de Catalunya para realizar el doctorado. Cuando terminé mis estudios fui contratado por el Politecnico di Milano (Italia) con una beca de investigación “**Research Training Networks**” de la UE asociado al proyecto europeo HaeModel. Allí trabajé con el prof. Quarteroni, “highly cited researcher” según el ISI. Posteriormente, la UE seleccionó mi propuesta de simulación multi-escala, y recibí un contrato “**Marie Curie Outgoing Fellowship**,” una de las becas doctorales más competitivas y mejor remuneradas. La Marie Curie me abrió una excelente oportunidad, financiando dos años de mi investigación en Sandia National Labs (New México, EE.UU.), donde trabajé con el Dr. Bochev y Prof. Gunzburger. La beca Marie Curie también cubrió un tercer año en CIMNE, Barcelona, que finalizó en noviembre de 2009. Durante 2010, recibí una **beca J.T. Oden** del Institute for Computational Engineering and Sciences de la University of Texas at Austin, que me financió la visita al Prof. TJR Hughes, probablemente la figura más prominente en la mecánica computacional. En 2010 fui seleccionado el primero en las concesiones de **contratos Ramón y Cajal** en el ámbito de Ingeniería Industrial, Naval y Aeronáutica. Uno de los mayores logros en mi carrera investigadora fue la concesión de una **Starting Grant 2010 del European Research Council** por mi proyecto sobre simulación de procesos en energía de fusión. Las acciones Starting Grant tienen como objetivo financiar la independencia de investigadores jóvenes de primer nivel, con un proceso de selección basado exclusivamente en la excelencia investigadora. El proyecto que se me ha concedido (COMFUS) está dotado con 1.320.000 EUR, y ha permitido la creación de mi propio equipo de investigación, formado por 5 doctores y 3 doctorandos, durante el periodo 2011-2016. La financiación ha sido reforzada mediante el proyecto FUSSIM, del Plan Nacional para investigación básica, en el que soy investigador principal. También lidero el proyecto europeo “Multi-physics simulation of high temperature superconducting devices” (FORTISSIMO experiment), para el periodo 2014-15, con presupuesto 148,537 EUR, financiado por la Unión Europea. Recientemente he conseguido un **Proof of Concept 2014 del European Research Council** para avanzar en el código de simulación numérica de altas prestaciones FEMPAR, que desarrollo en mi grupo, y para su futura distribución como software libre. Soy **líder del Departamento “Large Scale Scientific Computing”** de CIMNE, que incluye a 9 investigadores (5 doctores).

Además de la actividad investigadora, realizo actividad docente en las escuelas de ingenieros de caminos y aeronáuticos de la UPC, como profesor “agregat” (contratado indefinido, equivalente a contratado doctor). La docencia incluye asignaturas de grado y máster. A nivel de máster, imparto asignaturas de Análisis funcional en la mecánica de los medios continuos, métodos de descomposición de dominio, cálculo científico de altas prestaciones y propagación de ondas. He dirigido tres tesis doctorales (Ramon Planas, Héctor Espinoza y Oriol Colomé). Las dos primeras ha recibido el premio SEMNI (tercera en concurso) y en la actualidad dirijo a cuatro estudiantes de doctorado y varios de máster.

Contribuciones Científicas: Finalicé mis estudios de doctorado en Mecánica Computacional en febrero de 2006, en la Universitat Politècnica de Catalunya (UPC), bajo la supervisión del Prof. R. Codina. La tesis doctoral se tituló “Stabilized pressure segregation methods and their application to fluid-structure interaction.” Desde entonces, siempre he trabajado en el desarrollo, análisis y aplicación de métodos numéricos en diferentes áreas de la ingeniería y otras ciencias. Mi investigación se centra en **el avance de la ingeniería computacional, con el objetivo de resolver problemas cada vez más complejos**. Esta se puede organizar en tres bloques principales: (1) métodos de **elementos finitos** avanzados, (29 **resolutores de sistemas lineales** altamente

escalables y (3) simulación de problemas de **multi-física y multi-escala**. He desarrollado mi investigación en la UPC (Barcelona, 2002-2006 y 2008-presente), el **Politecnico di Milano** (Italia, abril de 2006-octubre 2006), los **Sandia National Labs** (EE.UU., noviembre 2006-octubre 2008), y **CIMNE** (Barcelona, octubre 2008-presente). Todos estos trabajos siempre han sido motivados por complejas aplicaciones en bio-ingeniería (aproximación numérica del sistema cardiovascular), ingeniería civil y eólica (aeroelasticidad en puentes/aerogeneradores), procesos de fabricación en nanotecnología e impresión 3D y tecnología de fusión. A continuación describo las contribuciones científicas más importantes.

Elementos finitos avanzados: La aproximación de ecuaciones diferenciales con estructuras complejas, e.g. de naturaleza indefinida de punto silla, requiere de técnicas numéricas avanzadas. Ejemplos de estas ecuaciones son las ecuaciones de (Navier-)Stokes, que simulan flujos incompresibles, algunas versiones de las ecuaciones de Maxwell, la ecuación de Darcy para flujo en medio poroso, etc. Una manera de aproximar estas ecuaciones es mediante técnicas de elementos finitos estabilizados, que permiten resolver las ecuaciones con exactitud y coste computacional aceptable. He realizado numerosas contribuciones en este ámbito, de las que destaco mis trabajos en la estabilización en espacio-tiempo. Mis trabajos sobre “subescalas dinámicas” ha iniciado una nueva línea de pensamiento en las técnicas de estabilización en espacio-tiempo que algunos grupos ya han adoptado. El total de citas recibido por estos trabajos supera las 300. También he trabajado en técnicas para la simulación de flujo en medio poroso (Darcy) y acoplado (Darcy/Stokes). El atractivo de los algoritmos que he propuesto permite obtener códigos para la simulación de flujo en medios poroso, mediante modificaciones menores de códigos de simulación de flujos en régimen libre. Este problema tiene numerosas aplicaciones en la hidrología y la bio-ingeniería. El total de citas recibido por estos trabajos supera las 150. También he liderado una nueva aproximación de las ecuaciones de Maxwell en la serie de artículos, que es menos costosa que las técnicas tradicionales, y está especialmente bien diseñado para problemas acoplados y multi-física. Este trabajo es pionero, porque utiliza aproximaciones Lagrangianas continuas para resolver las ecuaciones de Maxwell, en lugar de elementos finitos de Nedelec. En estos momentos, estoy focalizado en el desarrollo de técnicas de aproximación de problemas de transporte y de flujo compresible que mantengan las propiedades estructurales (positividad y monotonía) a nivel discreto. En una serie de artículos he desarrollado novedosos métodos de captura de discontinuidades y viscosidad artificial que respetan esas propiedades.

Resolutores de sistemas lineales de ecuaciones masivamente escalables: Desde mis trabajos de doctorado, siempre he estado activo en el desarrollo de resolutores de ecuaciones lineales eficientes y precisos para dinámica de fluidos computacional. He estado particularmente activo en el desarrollo de técnicas de segregación de presión, que permiten reducir el coste computacional. Fui invitado a publicar un artículo de revisión sobre este tema en la revista Archives of Computational Engineering, la segunda mejor revista en “Multidisciplinary Engineering” según ISI. Recientemente, he propuesto nuevos métodos de segregación altamente precisos que segregan el cálculo de la velocidad y la presión a nivel del integrador temporal. Todas estas técnicas se combinan con métodos LES implícitos para la resolución de flujos incompresibles turbulentos. Estas técnicas se han aplicado a diversos problemas durante mi carrera investigadora, especialmente en el ámbito de la energía (turbinas de viento), aeroelasticidad en puentes, y simulación del sistema sanguíneo. Recientemente, he extendido los métodos de pasos fraccionados a las ecuaciones de magnetohidrodinámica (MHD).

La aproximación numérica de problemas mediante elementos finitos acaba irremediabilmente en la resolución de sistemas de ecuaciones lineales. Para aproximar aceptablemente problemas reales complejos, e.g. la simulación de elementos de un reactor de fusión o la simulación completa de una pieza mediante manufactura aditiva, el tamaño de los sistemas a resolver es gigantesco, superando fácilmente mil millones de incógnitas. Además, las matrices resultantes están muy mal condicionadas. Como resultado, la única manera de proporcionar resultados de interés en problemas de ingeniería tan complejos es mediante el uso de supercomputadores con cientos de miles de núcleos de cálculo. La explotación eficiente de esas máquinas es una actividad de investigación de gran interés hoy en día. Todo se base en construir preconditionadores (buenas aproximaciones de la matriz del sistema) tales que su inversión se pueda calcular eficientemente en supercomputadores de memoria distribuida, y resolver el sistema preconditionado mediante métodos iterativos de Krylov. Mis últimos trabajos en esta línea proponen una nueva implementación de preconditionadores de descomposición de dominio que suponen una gran mejora respecto al estado del arte, y nos ha llevado a demostrar la mejor escalabilidad débil con este tipo de algoritmos que se ha publicado hasta el momento, llegando a resolver problemas de 10^{11} incógnitas en 500.000 procesadores. Por otra parte, estos desarrollos nos han permitido realizar simulaciones tridimensionales de envolturas regeneradoras en ITER, dentro del CONSOLIDER TECNO_FUS, en colaboración con el CIEMAT. Los algoritmos que propongo me han permitido alcanzar niveles de escalabilidad que no es posible alcanzar por los códigos de simulación de gran escala más avanzados del mundo (TRILINOS, HYPRE, y PETSc). La razón es que todos esos métodos utilizan métodos

multi-malla multiplicativos, que pierden irremediablemente escalabilidad a los pocos cientos de miles de procesadores. Las técnicas e implementaciones que yo propongo explotan concurrencia entre niveles de la jerarquía multinivel, que junto con técnicas recursivas que permiten un número de niveles arbitrario, nos han llevado a tener escalabilidad perfecta en el ordenador más grande de Europa. Estos resultados no tienen precedentes en el ámbito, y abren la puerta a la utilización eficiente de los futuros ordenadores de exascale (previstos para 2023) en ingeniería computacional. Ahora estoy focalizado en la extensión de estos métodos a problemas heterogéneos, con gran aplicación en la modelización de flujos subterráneos. Una de las aplicaciones en las que estoy trabajando es la simulación de residuos nucleares en repositorios profundos de roca.

Simulación de problemas de multi-física y acoplados: He publicado numerosos artículos sobre la aproximación numérica de problemas acoplados y multi-física. El ámbito en el que he estado más activo es la simulación de problemas de interacción fluido-estructura (FSI). En Julio de 2016 doy un curso en la Escuela Internacional de Estudios Avanzados (Udine) sobre FSI junto con el Prof. Farhat (Stanford) y Wall (TUM). Durante mi estancia postdoctoral en Milán (y años posteriores), desarrollé ideas fructíferas sobre cómo resolver los problemas más desafiantes en FSI, los problemas de efecto añadido de masa, que aparecen en la simulación del sistema cardiovascular. Considero que esos trabajos cambiaron de forma sustancial el estado del arte, abriendo la puerta a métodos de segregación estables basados en la modificación de las condiciones de acoplamiento. Estas técnicas las aplicamos a simulaciones cardiovasculares dentro del proyecto europeo HaeModel. Mis trabajos en interacción fluido-estructura supera las 500 citas.

Motivado por los proyectos TECNOFUS, COMFUS y FUSSIM, he investigado sobre la simulación de magnetohidrodinámica (MHD), con aplicación en el diseño de reactores de fusión. He liderado el desarrollo de un nuevo algoritmo para la simulación de las ecuaciones MHD completas. El resultado de estos trabajos son nuevos algoritmos, más eficientes, y excelentemente implementados en mi código masivamente paralelo, FEMPAR. Como resultado, FEMPAR ha sido seleccionado para participar en el programa internacional de verificación y validación de códigos numéricos para simular metales líquidos, que son de gran interés para el diseño de reactores de fusión como ITER o DEMO.

Durante mi estancia en Sandia National Labs, trabajé en un nuevo tipo de métodos de acoplamiento de modelos atomísticos y continuos para la simulación de los procesos de fabricación en nanotecnología. Dado que los modelos atomísticos son extremadamente costosos y los modelos continuos demasiado groseros en las regiones con singularidades, la única alternativa parece ser un acoplamiento de ambas técnicas, el modelo atomístico en las regiones singulares y el modelo del continuo en el resto del dominio. Lideré como primer autor un nuevo enfoque para este acoplamiento, que se plasmo en diversas publicaciones más de 300 citas.

Recientemente, he iniciado la investigación de técnicas numéricas para simular procesos de manufactura aditiva (o impresión 3D) basada en metales. Dada la velocidad y escala del laser, el comportamiento térmico y estructural y su efecto en la microestructura del material, este problema es muy complejo por su naturaleza multi-física y multi-escala. Mi investigación se centra en algoritmos escalables, técnicas adaptativas para poder captar de forma automática y con precisión el camino de escaneo, y modelos de crecimiento dendrítico para capturar la topología de la micro-estructura, acoplada al problema global mediante nuevos métodos multi-escala. Estoy integrado en dos de los proyectos más importantes del H2020 sobre manufactura aditiva (CaxMAN y Emusic) y tengo un proyecto con una SME italiana (STAM) para llevar a cabo estos desarrollos.

Producto de la investigación: Con la creación de mi propio equipo de investigación (2011), he iniciado el desarrollo de un código numérico multi-física/multi-escala de última generación para computación de altas prestaciones (FEMPAR), que incluye resolutores con propiedades de escalabilidad excelentes demostradas (de momento) hasta 70.000 procesadores, pudiendo resolver problemas con más de 10^{11} incógnitas en pocos segundos. La combinación de estas capacidades computacionales con el amplio conocimiento en esquemas numéricos del grupo me ha puesto en una situación de privilegio para abordar los problemas de ingeniería más complejos. He utilizado todo ese potencial en la simulación de componentes tecnológicos para reactores de fusión, y más recientemente he iniciado su aplicación en la manufactura aditiva y flujos subterráneos. De todos modos, estos códigos pueden ser y han sido aplicados a otros problemas de interés previamente, como problemas de aeroelasticidad en puentes y aerogeneradores, simulación del sistema cardiovascular, ventilación en túneles y edificios, etc.

FEMPAR se distribuye como software libre mediante una licencia GNU-GPL, del que soy autor (junto con los postdocs J. Principe y A. Martín). En la reciente publicación FEMPAR se ha posicionado como el código de resolución de sistemas lineales que utilizan descomposición de dominios más escalable del mundo. FEMPAR ha corrido en 2016 en 500,000 procesadores de JUQUEEN (el mayor supercomputador de Europa) con excelentes resultados de escalabilidad. Estos resultados han permitido incluir a FEMPAR en el High-Q club de los códigos científicos más escalables de Europa, según el Juelich Supercomputing Center.