
Dossier de création du réseau thématique Calcul

Pour la période 2026-2030

RT CALCUL

Juin 2025

Table des matières

1	Contexte du RT Calcul	2
2	Projet scientifique	3
2.1	Les grands axes du projet	3
2.1.1	Apprentissage machine et interactions	3
2.1.2	Calcul quantique	5
2.1.3	Modèles stochastiques	5
2.1.4	Méthodes numériques pour les EDPs	6
2.2	Les axes transverses	8
2.2.1	Problèmes réels avec données réelles	8
2.2.2	Impact environnemental et éthique du numérique	9
2.3	Les sujets de société	10
2.3.1	Science ouverte	10
2.3.2	Mission parité	10
2.3.3	Jeunes chercheurs et chercheuses	10
3	Activités envisagées	11
3.1	Fonctionnement et animation du site https://calcul.math.cnrs.fr	11
3.2	Organisation d'événements scientifiques	11
3.3	Partenariats	12
4	Les membres du RT Calcul	12
5	Organisation interne	13
5.1	Porteur du projet	13
5.2	Comité de pilotage	13
5.3	Conseil scientifique	14
6	Budget du RT	14

1 Contexte du RT Calcul

En 2024, les réseaux de recherche de l'INSMI se sont réorganisés, les anciens Groupements de Recherche (GdR) se sont regroupés par thématiques de recherche similaires et sont devenus des Réseaux Thématiques (RT). À cette occasion, le GdR Calcul en a profité pour repenser sa structuration et, en raison de sa particularité, a reçu un délais supplémentaire pour finaliser son projet.

Historiquement le GdR Calcul a été créé par les membres du Groupe Calcul, un groupe sans reconnaissance formelle auprès des institutions, créé en 2003 au sein du département SPM du CNRS à l'intérieur du groupe Mathrice (GdS 2754 du CNRS regroupant les administrateurs système et réseau des laboratoires de mathématiques). Depuis 2009, le Groupe Calcul est structuré en deux entités reconnues par le CNRS :

- le GdR Calcul (INSMI, CNRS),
- le Réseau métier Calcul (MITI, CNRS).

Ce découpage a été mûrement réfléchi et correspond à deux aspects bien distincts mais très liés et complémentaires du calcul scientifique : les aspects recherches et les aspects technologiques. Ils ne sont néanmoins pas disjoints et

se recoupent pour un certain nombre de thématiques.

Le RT Calcul s'inscrit dans la suite du GdR Calcul, qui se terminera fin 2025. Dans une continuité avec celui-ci, les thématiques traitées seront les méthodes numériques et les algorithmes à la pointe de la recherche en calcul scientifique et intensif.

Le calcul scientifique est un domaine qui est par nature pluri-disciplinaire (physique, chimie, biologie, etc.), ce qui crée des liens avec les autres RT de l'INSMI (MAIAGES, NUTS, ...), ainsi qu'avec les autres instituts et organismes de recherche.

Quant au calcul intensif, il apparaît logiquement dans le RT Calcul mais n'en constitue pas un axe principal. En effet, les nouvelles méthodes numériques sont, de nos jours, souvent développées pour être parallélisées mais pas nécessairement au point d'entrer dans le domaine du calcul intensif.

Par ses actions de communication et de formation, le RT Calcul souhaite participer à la diffusion des nouvelles méthodes numériques ainsi que des outils logiciels les mettant en oeuvre afin de participer à leur adoption par la communauté. Grâce à son action de veille scientifique et technologique, le RT Calcul suit les évolutions récentes en calcul scientifique, notamment la percée de l'apprentissage machine et du calcul quantique.

2 Projet scientifique

2.1 Les grands axes du projet

2.1.1 Apprentissage machine et interactions

Les avancées récentes en apprentissage automatique posent un certains nombres de questions théoriques et numériques sur de nouveaux modèles d'approximation. On peut citer leur capacité d'approximation, leur optimisation en pratique mais aussi leurs interactions avec le calcul scientifique plus classique. Il paraît essentiel que le futur RT Calcul se saisisse de ces thématiques dans sa nouvelle mouture. Les 5 axes suivants semblent importants pour l'avenir.

1. **Programmation différentiable hybridée avec le calcul scientifique.** Les résultats impressionnants du papier Neural GCM [1], qui propose un nouveau modèle de climat basé sur le mélange d'un modèle principal de mécanique des fluides couplé avec un réseau de neurones pour le reste de la physique, démontre l'intérêt de l'association entre EDP et ML, afin d'améliorer la prédiction de phénomènes physiques. De manière similaire, des hybridations où une partie du schéma est apprise, ou encore où un réseau est utilisé comme préconditionneur, ont montré l'étendue des possibilités de ces approches. Il est donc important de poursuivre et d'étudier les meilleures façons d'hybrider ces deux mondes, pour être efficaces et avec le maximum de garantie. Afin d'apprendre correctement son modèle, Neural GCM est basé sur une écriture totalement différentiable de l'intégralité du code, ce qui a permis d'apprendre en différenciant des simulations entières. Il est essentiel d'accroître notre compréhension théorique des méthodes de différentiation, améliorer les bibliothèques de différentiation automatique [2], et encourager la communauté du calcul à considérer les gains que cela peut apporter.

[1] Kochkov et (2023), Neural General Circulation Models for Weather and & V. Roulet. (2024). The elements of differentiable que cela programming. arXiv preprint arXiv:2403.14606.

2. **Modèles génératifs, problème inverse, turbulence.** Depuis un certain temps les modèles génératifs permettent d'approcher des distributions de probabilités complexes. Les plus récents, comme les modèles de flow matching [3] ou de diffusion, sont reliés à des équations différentielles stochastiques, ainsi qu'à l'équation de Fokker-Planck, afin de transformer une distribution usuelle en une distribution cible. Concernant ces

modèles, de nombreuses questions théoriques et numériques restent entières : l'approximabilité des modèles, leur capacité à traiter des types de données variés, voire multimodales, ou encore la réduction d'inférence. Concernant le calcul scientifique, ces modèles sont les plus à même de capturer des flots chaotiques comme les flots turbulents ou des à priori plus riches pour des problèmes inverses [4]. Dans ce cadre, l'imposition de contraintes physiques et leur couplage avec des codes de simulations usuels restent des questions assez ouverte.

[3] Lipman, Y., Chen, R. T., Ben-Hamu, H., Nickel, M., & Le, M. (2023). Flow matching for generative modeling. ICLR.

[4] R. Molinaro et al (2024). Generative AI for fast and accurate statistical computation of fluids, arXiv:2409.18359

3. **Modèles réduits et jumeau numérique, *Neural Operator*.** Un grand nombre d'applications industrielles nécessitent de résoudre un problème pour un ensemble large de paramètres ou de configurations physiques. Pour faire cela, un modèle réduit est construit à partir d'un nombre plus limité de données, avant d'être utilisé de très nombreuses fois. Deux approches dominent : *i)* la réduction de dimension [5]. Un espace très compressé est construit avec des méthodes de type POD ou autoencoder, et le problème en basse dimension est résolu par une méthode de Galerkin ou des approches neuronales/ *ii)* Les opérateurs neuronaux [6] qui sont des architectures de réseaux de neurones (type Transformer ou variantes des CNN) spécialisées dans l'apprentissage des opérateurs inverses des EDP considérés. Dans ce cadre, il est important de comprendre les capacités de ces méthodes à approcher des problèmes paramétriques ou des opérateurs complexes, à généraliser à différentes grilles et surtout géométries, à capturer les propriétés (géométriques par exemple) des problèmes physiques, notamment en temps long, et à passer à l'échelle dans un cadre de couplage HPC avec des méthodes plus usuelles.

[5] Jan S Hesthaven, Cecilia Pagliantini, Gianluigi Rozza, Reduced basis methods for time-dependent problems

[6] Kovachki, N., Li, Z., Liu, B., Azizzadenesheli, K., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2023). Neural operator: Learning maps between function spaces with applications to pdes. *Journal of Machine Learning Research*, 24(89), 1-97.

4. **Apprentissage et régression symbolique.** La régression symbolique [7] vise à découvrir automatiquement des expressions mathématiques à partir de données, en cherchant des formules interprétables plutôt que des modèles numériques opaques. Contrairement aux approches classiques de régression, elle explore un espace d'expressions symboliques, souvent à l'aide de méthodes d'évolution génétique, des approches de renforcement, de programmation différentiable ou de réseaux neuronaux spécialisés. Parmi les applications notables [8] figurent la redécouverte de lois physiques comme des fermetures, des énergies, des lois constitutives de matériaux. Les défis ouverts incluent l'explosion combinatoire de l'espace des formules, la robustesse aux données bruitées, l'intégration de contraintes physiques, et l'évaluation de la généralisation hors-distribution.

[7] Nour Makke, Sanjay Chawla (2024). Interpretable Scientific Discovery with Symbolic Regression: A Review. *Artif Intell Rev* 57, 2. [8] Wassim Tenachi, Rodrigo Ibata, Foivos I Diakogiannis (2023). Deep symbolic regression for physics guided by units constraints: toward the automated discovery of physical laws. *ApJ* 959 99

5. **Approximation et garantie théorie d'approximation des architectures.** La compréhension théorique des capacités d'approximation des architectures d'apprentissage profond est essentielle pour évaluer leurs performances, leur expressivité et leurs limites. La théorie de l'approximation cherche à caractériser les fonctions qu'une classe de modèles peut approximer efficacement. Dans ce cadre, plusieurs travaux [9] ont montré comment les réseaux profonds peuvent approcher des classes de fonctions non triviales en s'appuyant sur des espaces d'approximation classiques issus de l'analyse fonctionnelle. Il a été démontré [10] que les Transformers peuvent approximer n'importe quelle règle d'apprentissage à partir de quelques exemples contextuels. Ces résultats ouvrent la voie à une compréhension plus fine des capacités de généralisation des LLMs et de leur comportement en apprentissage implicite.

[9] Gribonval, R., Kutyniok, G., Nielsen, M., & Voigtlaender, F. (2022). Approximation spaces of deep neural networks. *Constructive approximation*, 55(1), 259-367. [10] Furuya, T., de Hoop, M. V., & Peyré, G. (2025). Transformers are universal in-context learners. *ICLR*.

2.1.2 Calcul quantique

Le calcul quantique introduit un nouveau paradigme dans la façon de poser et de résoudre des problèmes numériques. Contrairement aux ordinateurs classiques qui reposent sur des opérations binaires sur des registres de bits, les ordinateurs quantiques effectuent des opérations linéaires sur des systèmes physiques quantiques. Les contraintes de la physique quantique nécessitent de revoir en profondeur les algorithmes développés ces dernières décennies pour le calcul scientifique. Toutefois, ce formalisme quantique permet pour certaines tâches spécifiques de gagner un facteur exponentiel en temps de calcul. Un exemple particulièrement frappant est l'algorithme de Shor (1994) pour la décomposition en facteurs premiers de nombres entiers. Ces gains exponentiels ne sont pour le moment pas exploitables sur les ordinateurs quantiques actuels, pour des raisons de stabilité des calculs sur ordinateurs quantiques. Malgré les nombreuses architectures disponibles (atomes froids, ordinateurs photoniques, etc...), développées en partie par des start-ups françaises (Pasqal, Alice et Bob, Quandela...), l'utilisation à grande échelle des ordinateurs quantiques n'interviendra probablement pas avant quelques décennies.

Le développement d'algorithmes pour le calcul quantique se concentre sur deux axes :

- la prise en compte du bruit des ordinateurs quantiques actuels ;
- la réécriture des problèmes issus du calcul scientifique pour une résolution sur architecture quantique.

Des algorithmes ont été développés dans le cadre des ordinateurs actuels bruités (dits NISQ pour Noisy Intermediate Scale Quantum) que ce soit pour les problèmes d'optimisation (QAOA pour Quantum Approximate Optimisation Algorithm) ou pour la résolution de systèmes linéaires ou le calcul de valeurs propres (VQE pour Variational Quantum Eigensolver ou VQLS Variational Quantum Linear Solver). Ces algorithmes couplent l'utilisation d'ordinateurs classiques et d'ordinateurs quantiques. En France, le PEPR HQI (Hybrid Quantum Initiative) lancé en 2022 vise à étudier le potentiel du calcul quantique dans le régime NISQ pour différentes applications physiques.

Le calcul scientifique sur architecture quantique est un domaine récent qui a débuté avec des méthodes pour la résolution d'équations aux valeurs propres (Quantum Phase Estimation) ou la résolution de systèmes linéaires (HLE). Ces méthodes ne sont adaptées qu'à des ordinateurs quantiques parfaits. La transposition des problèmes de calcul scientifique usuels dans le formalisme quantique nécessite une gymnastique inhabituelle. Au niveau national, il est nécessaire de former les acteur·ice·s en calcul scientifique à ce nouveau paradigme. Ce rôle porté par le CEMRACS 2025, une école d'été avec des projets industriels pour les doctorant·e·s et postdoctorant·e·s sur le calcul quantique pour le calcul scientifique et la cryptographie, nécessite d'être soutenu à l'avenir.

Bien qu'il existe des ordinateurs quantiques utilisables via le TGCC du CEA ou le Fraunhofer institute, ces ordinateurs sont trop bruités pour tester des algorithmes à grande échelle. Il est alors essentiel de tester numériquement ces algorithmes sur des émulateurs tels que Qiskit (en Python, IBM), Cirq (Python, Google) ou MyQLM (Python, Eviden). Ces bibliothèques reproduisent des calculs sur parfois plusieurs centaines de qubits, grâce à des techniques avancées de compression. Le développement de ces bibliothèques est essentiel dans l'élaboration d'algorithmes quantiques car elles permettent de prévoir les régimes dans lesquels ces algorithmes seront plus performants que leurs pendants classiques.

2.1.3 Modèles stochastiques

Au vu de la diversité des utilisations des modèles stochastiques en dynamique moléculaire, machine learning, statistique, etc..., le RT calcul se propose de poursuivre et étendre les collaborations fructueuses de l'ancien GdR

avec les différentes communautés qui utilisent différents aspects du calcul stochastique.

Une attention particulière sera portée au développement de méthodes stochastiques sur variétés [1,2], en lien avec les applications en statistique géométrique et en machine learning [3,4]. Étant donné une dynamique soumise à des contraintes, la connaissance de la géométrie (géodésiques, transport parallèle,...) permet la création de méthodes efficaces respectant naturellement cette géométrie, tout en réduisant les coûts et les instabilités, dans un objectif de sobriété numérique. De plus, la formalisation intrinsèque de ces méthodes pourrait permettre de généraliser d'autres techniques usuelles telles que la réduction de variance, ou la création de méthodes robustes.

L'étude des modèles et simulations numériques liés à des EDPS sera poursuivie, avec un focus sur les méthodes d'échantillonnage pour EDPS ergodiques, ainsi que sur l'utilisation d'aléatoire dans des méthodes de résolution d'EDP par techniques d'apprentissage [5].

Les thèmes traités mêlant diverses notions avancées d'une variété de domaines mathématiques différents, une importance particulière sera donnée à la communication auprès de la communauté du calcul scientifique des problématiques spécifiques à la simulation des modèles stochastiques, ainsi qu'aux outils nécessaires à leurs compréhension et implémentation (en particulier, la géométrie différentielle et le calcul stochastique).

Un effort pour rassembler les experts du domaine autour de projets fédérateurs liés aux thématiques mentionnées sera fait, notamment autour de la création de packages de résolution numérique de dynamiques stochastiques complets et accessibles.

Tous ces thèmes sont en forte interaction avec le RT-UQ de l'INSMI. Des liens avec celui-ci se développeront naturellement.

[1] K. Bharath, A. Lewis, A. Sharma, and M. V. Tretyakov. Sampling and estimation on manifolds using the Langevin diffusion. arXiv:2312.14882, 2023. [2] E. Bronasco, A. Busnot Laurent, and B. Hugué. High order integration of stochastic dynamics on Riemannian manifolds with frozen-flow methods. arXiv:2503.21855, 2025. [3] M. Brubaker, M. Salzmänn, and R. Urtasun. A family of MCMC methods on implicitly defined manifolds. In Artificial intelligence and statistics, pages 161–172, 2012. [4] P. Diaconis, S. Holmes, and M. Shahshahani. Sampling from a manifold. In Advances in modern statistical theory and applications: a Festschrift in honor of Morris L. Eaton, volume 10 of Inst. Math. Stat. (IMS) Collect., pages 102–125. Inst. Math. Statist., Beachwood, OH, 2013. [5] M. Raissi, P. Perdikaris, G. E. Karniadakis, Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, Journal of Computational Physics, 378, 686–707, 2019.

2.1.4 Méthodes numériques pour les EDPs

1. **Résolution d'équations aux dérivées partielles en grande dimension** La résolution des équations aux dérivées partielles (EDP) en grande dimension constitue aujourd'hui un défi majeur en calcul scientifique en raison de la malédiction de la dimension qui rend les méthodes classiques inefficaces au-delà de quelques variables spatiales. Les directions de recherche les plus actives et prometteuses visent à contourner ces limitations en exploitant des approches innovantes. Parmi elles, les méthodes basées sur les réseaux de neurones, comme les Physics-Informed Neural Networks (PINNs) ou les neural operators. Parallèlement, les méthodes probabilistes (comme Deep BSDE (Backward Stochastic Differential Equations par exemple) exploitent des reformulations stochastiques pour résoudre numériquement des EDPs dans des espaces de très grande dimension. Enfin, les techniques de décomposition tensorielle (telles que les formats tensor-train ou QTT) et les méthodes probabilistes gagnent en popularité pour leur capacité à approcher efficacement les solutions sans échantillonner l'ensemble de l'espace des variables. Les méthodes de réduction de modèles ont pour objectif de développer des techniques spécifiques visant à contourner la malédiction de la dimensionalité dans le cas spécifique où la grande dimension des EDPs considérées vient du grand nombre de paramètres dont

celles-ci dépendent. Ces axes de recherche, fortement interdisciplinaires, marquent une convergence entre calcul numérique, apprentissage automatique et analyse stochastique, ouvrant de nouvelles perspectives pour de très nombreux domaines telle que la simulation en physique, chimie, en finance quantitative ou encore en biologie computationnelle. Par ailleurs, l'intérêt industriel pour ce type de développement est immense dans de nombreux secteurs (énergie, transports, médical...). Par ailleurs, le développement d'estimateurs d'erreur a posteriori sera crucial pour garantir la précision des solutions approchées calculées à partir de ce type d'approches.

2. **Algorithmes frugaux (peu consommateurs en énergie)** Face à la croissance exponentielle des données et aux limitations énergétiques des infrastructures de calcul, concevoir des méthodes numériques à faible coût en ressources tout en maintenant un niveau de précision acceptable est un enjeu majeur pour la simulation numérique. Ces approches s'appuient souvent sur des techniques avancées d'apprentissage machine, de réduction de modèles ou encore d'approximation adaptative, permettant de diminuer considérablement le nombre d'opérations nécessaires et la consommation mémoire. L'innovation réside notamment dans la capacité de ces algorithmes à exploiter au mieux l'information essentielle du problème, en évitant les surcoûts liés à des discrétisations fines ou à des schémas de résolution itératifs trop lourds. Ce domaine de recherche, au croisement de la modélisation numérique, de l'analyse mathématique et de l'intelligence artificielle, répond ainsi aux besoins croissants de calcul rapide et durable dans des secteurs tels que la simulation industrielle, la météorologie ou encore les sciences du vivant.
3. **Méthodes numériques pour résolution d'EDPs préservant la structure et la géométrie des problèmes** La conception de méthodes numériques pour la résolution d'équations aux dérivées partielles (EDP) qui préservent la structure et la géométrie sous-jacentes du problème constitue aujourd'hui un domaine de recherche particulièrement dynamique. Un premier axe de recherche extrêmement actif concerne le développement de méthodes de volumes finis et d'éléments finis adaptées à des maillages complexes ou non structurés, avec un fort impact pour des applications industrielles complexes. Mentionnons également le développement de méthodes numériques adaptées pour approcher numériquement la solution d'EDPs définies sur des variétés ou sur des domaines mobiles, par exemple dans des contextes d'optimisation de forme. Un autre axe de recherche concerne les développements récents visant à garantir le respect de propriétés fondamentales de systèmes physiques ou biologiques mêlant plusieurs types d'espèces, telles que la conservation de la masse, de l'énergie, de l'entropie ou des invariants géométriques. Dans ce contexte, la théorie du transport optimal influence la création de schémas numériques qui respectent la structure métrique des espaces de probabilité, avec des applications croissantes en dynamique des fluides, en apprentissage machine et en modélisation géométrique.
4. **Algorithmes quantiques ou hybrides pour la résolution d'EDPs** La recherche sur les algorithmes quantiques et hybrides pour la résolution d'équations aux dérivées partielles (EDPs) connaît un fort essor, marquant un tournant majeur dans le domaine du calcul scientifique. Cette dynamique s'inscrit dans le contexte actuel de développement rapide des technologies quantiques, avec l'ambition de dépasser les limites des méthodes classiques face à des problèmes de très grande dimension ou fortement non linéaires. Les algorithmes quantiques, basés sur des principes tels que la superposition et l'intrication, offrent des perspectives inédites pour accélérer certaines étapes clés de la résolution d'EDPs, comme la résolution de systèmes linéaires ou la simulation de dynamiques complexes. En parallèle, les approches hybrides, qui combinent ressources quantiques et classiques, cherchent à exploiter le meilleur des deux mondes, en déléguant à l'ordinateur quantique les sous-tâches les plus coûteuses en temps ou en mémoire. L'innovation réside ici dans le développement de nouveaux schémas de calcul, dans l'adaptation des formulations mathématiques aux architectures quantiques naissantes, et dans la conception d'algorithmes tolérants aux erreurs propres aux machines actuelles. Ces travaux ouvrent ainsi la voie à des avancées prometteuses pour la simulation numérique à grande échelle, tout en posant des défis fondamentaux en termes de modélisation, de complexité algorithmique et d'implémentation.

matérielle.

La résolution de systèmes linéaires et de problèmes aux valeurs propres occupe une part non négligeable des ressources de calcul utilisées pour résoudre des EDPs. Ainsi les algorithmes d'algèbre linéaire numériques sont cruciaux dans le développement d'outils de simulation efficaces. Les techniques de randomisation [1] permettent, notamment grâce au sketching et aux approximations de rang faible (low rank approximations) d'accélérer significativement de nombreuses opérations. Parmi les plus significatives on trouve le calcul de valeurs propres extrêmes, la résolution de problèmes aux moindres carrés et la résolution de systèmes linéaires par des méthodes directes et grâce au préconditionnement.

Aux éventuelles imprécisions commises par les méthodes de randomisation s'ajoutent les sources d'erreur plus habituelles liées aux modèles eux-mêmes, à l'approximation discrète (notamment dans des contextes non linéaires) et aux erreurs de troncature inhérentes à l'arithmétique flottante. Il est nécessaire de concevoir des algorithmes et des implémentations résilientes, ou stables, au regard de ces sources d'erreurs. Une autre vision est qu'autoriser certaines imprécisions peut augmenter la performance globale d'un algorithme. Dans cette veine, l'arithmétique à précision mixte [2] consiste à utiliser plusieurs formats de précision numérique dans un même calcul afin de concilier performance et précision.

Un autre avantage de considérer plusieurs précisions dans la conception des algorithmes est de supporter leur portabilité vers des architectures de calcul hétérogènes. En effet, non seulement la parallélisation devient toujours plus massive avec l'avènement du calcul exascale mais les composants de ces machines mélangent à la fois des CPUs, GPUs et autres processeurs spécialisés. Un autre défi lié à la parallélisation est la nécessité d'augmenter l'intensité de calcul au niveau des noeuds et la réduction des communications tant en fréquence qu'en volume.

[1] Martinsson, P-G, and Tropp, J. A.. "Randomized numerical linear algebra: Foundations and algorithms." *Acta Numerica* 29 (2020): 403-572. [2] Baboulin, M., Buttari, A., Dongarra, J., Kurzak, J., Langou, J., Langou, J., ... & Tomov, S. (2009). Accelerating scientific computations with mixed precision algorithms. *Computer Physics Communications*, 180(12), 2526-2533.

2.2 Les axes transverses

2.2.1 Problèmes réels avec données réelles

L'intégration des cas d'étude réels et des données associées constitue un enjeu majeur pour le développement des outils de calcul scientifique. La validation des méthodes numériques sur des situations réalistes permet de confronter les hypothèses des modèles aux contraintes imposées par des données issues du monde physique – données expérimentales, observations naturelles ou mesures instrumentées. Cette confrontation est souvent à l'origine d'innovations méthodologiques, mais elle révèle aussi de fortes limites : erreurs de mesure mal caractérisées, hétérogénéité des formats, lacunes spatio-temporelles, complexité des conditions aux limites, incertitudes non modélisées.

Dans de nombreux cas, les algorithmes développés dans des environnements de test bien contrôlés ne parviennent pas à converger sur des cas réels, notamment lorsque la montée en complexité numérique (fort couplage multi-physique, grands contrastes d'échelle, etc.) s'ajoute à celle des données. Ce constat devient encore plus critique à l'échelle exascale : les solveurs qui convergent efficacement sur des machines traditionnelles montrent parfois des comportements imprévus, voire des instabilités, lorsqu'ils sont portés sur des architectures massivement parallèles ou hétérogènes. Cela pose la question du couplage robuste entre modèles, données et architectures de calcul, avec une exigence accrue de résilience numérique.

Par ailleurs, le développement d'outils numériques pour répondre à des situations de crise (séismes, éruptions, événements hydrologiques extrêmes, accidents industriels) impose un cadre de calcul en urgence sur des données

partielles, incertaines ou bruitées. Il devient alors essentiel de disposer de protocoles robustes de traitement, d'outils d'inversion ou d'assimilation rapides, et de tests méthodologiques croisés en amont.

Le RT Calcul pourrait jouer un rôle structurant dans ce contexte, en facilitant les interactions entre modélisateurs numériques, producteurs de données et spécialistes du traitement de l'incertitude. Le réseau pourrait notamment organiser des actions communes avec les réseaux thématiques d'autres instituts du CNRS, tels que le RT NUTS de l'INSU, qui fédère plusieurs communautés autour des systèmes naturels complexes. Des liens pourraient également être établis avec des réseaux relevant de l'INSIS ou de l'INEE, selon les domaines applicatifs. Une telle activité favoriserait l'émergence de bases de cas-tests documentés, la circulation d'outils validés, et la création de méthodologies d'analyse intégrant conjointement aspects numériques, physiques et statistiques.

2.2.2 Impact environnemental et éthique du numérique

L'impact de l'espèce humaine sur la planète Terre est aujourd'hui très bien documenté par la science (GIEC[1], limites planétaires[2], rapport Meadows[3]). Pour ne citer ici qu'un élément de la synthèse du 6^e rapport du GIEC[4], la limitation du réchauffement climatique nécessite une diminution forte et à court terme des émissions de gaz à effet de serre. La science, au delà de son rôle dans la documentation des événements en cours, doit prendre part à la bifurcation nécessaire de nos sociétés et nos modes de vie. En ce sens, les instances du CNRS se sont dotées de deux outils. Tout d'abord, le schéma directeur développement durable et responsabilité sociétale (DDRS)[5] propose un cadre dans lequel des actions contribuant à cette bifurcation peuvent s'inscrire. Typiquement, le présent axe transverse vise à contribuer aux points I.4 (mesurer l'empreinte, évaluer les actions), I.6 (valoriser, communiquer, essaimer), II.9 (accompagner la transformation des pratiques de recherche), II.13 (accompagner le déploiement de l'éthique environnementale) et III.14 (Piloter une stratégie numérique responsable et résilient) de ce schéma directeur. De plus, le comité d'éthique du CNRS (COMETS) a été saisi et a émis un avis sur "Intégrer les enjeux environnementaux à la conduite de la recherche – Une responsabilité éthique"[6]. Pour ne citer que la 1^{re} recommandation, il est nécessaire de [...] reconnaître que la prise en compte de l'environnement fait partie intégrante de l'éthique de la recherche; affirmer à ce titre la responsabilité des acteurs et actrices de la recherche de penser leur activité au regard des enjeux environnementaux ; cette responsabilité concerne non seulement l'empreinte des pratiques de recherche mais plus généralement l'impact environnemental négatif ou positif que le choix de tel ou tel sujet de recherche et de telle ou telle voie pour le traiter peut engendrer pour l'environnement au sens large, à court, moyen ou long terme.]

Le présent axe transverse se donne pour objectif d'accompagner les membres du RT dans le questionnement des objets de leur recherche et leur contextualisation avec les enjeux environnementaux et éthiques actuels.

Les personnes qui contribueront à cet axe se réuniront une fois par an pour discuter spécifiquement de ces sujets et des actions en cours au sein du RT Calcul. L'objectif sera bien entendu de monter en compétence en faisant intervenir des spécialistes de ces questions mais surtout de réfléchir à comment incarner cet aspect transverse à l'ensemble du RT.

Deux actions sont envisagées pour commencer :

- i) Encourager et accompagner les oratrices et orateurs qui interviendront dans un événement organisé par le RT afin d'intégrer une planche dans leur présentation sur les impacts environnementaux et les enjeux éthiques de leur recherche ;
- ii) Réserver un créneau pour un exposé ou une discussion portant sur les enjeux environnementaux ou éthiques lors de chaque événement organisé par le RT d'une durée de plus d'une demi-journée.

De plus, une collection de ressources d'auto-formation sera constituée à destination en priorité des jeunes chercheuses et chercheurs : quizz sur les impacts environnementaux, e-formation, guides de bonnes pratiques, etc.

Il sera aussi proposé aux membres du réseau thématique de réaliser des actions de sensibilisation afin de monter collectivement en compétences sur ces thématiques et offrir des lieux de débats et de discussions.

Enfin, pour inscrire ces actions dans le temps, les membres de l'axe soutiendront la création d'un groupe de travail pour mener une action de prospective sur la place du calcul à l'horizon 2035. Cela permettra d'identifier et planifier les actions stratégiques à mener.

Par ses membres au COPIL et dans le conseil scientifique, le RT Calcul est déjà en lien avec le GDRS Ecoinfo et le réseau métier Calcul de la MITI. Il s'agira de créer des liens avec d'autres groupes existants par ailleurs qui traitent de thèmes similaires (RT MAIAGE, GDR Internet, IA et Société, GDR Labo1.5, etc.).

[1] [Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat](#) [2] [Limites planétaires](#) [3] [Les Limites à la croissance](#) [4] [CLIMATE CHANGE 2023](#) [5] [Schéma directeur développement durable et responsabilité sociétale](#) [6] [Avis du COMETS](#)

2.3 Les sujets de société

2.3.1 Science ouverte

La science ouverte est devenue une stratégie clé ces dernières années non seulement en Europe mais aussi au niveau international. Elle pose en particulier des questions d'accessibilité et de transparence des données et des logiciels. Concernant l'accessibilité aux données, un exemple flagrant de l'importance de la science ouverte est, dans le contexte politique actuel aux États-Unis, la disparition du jour au lendemain de données de recherche car hébergées à un unique endroit et en accès restreint.

Le RT Calcul propose de faire la promotion de la science ouverte en organisant des formations pour montrer comment rendre la recherche reproductible. En particulier, comment partager les codes et données de calcul de façon à ce que les résultats d'un article soient reproductibles; quelles licences choisir pour partager les logiciels. Le RT Calcul continuera à organiser des événements sur ces thématiques, comme a pu le faire le GdR Calcul avant lui. Le RT fera aussi la promotion des actions et outils déjà disponibles comme le catalogue des logiciels libres de l'ESR.

2.3.2 Mission parité

Dans le domaine du calcul scientifique, et plus particulièrement dans la communauté visée par le RT calcul qui est à l'interface entre les mathématiques et l'informatique, les femmes sont particulièrement peu nombreuses. Le RT Calcul propose deux types d'actions pour tendre vers un meilleur équilibre :

1. Montrer l'exemple en portant une attention particulière lors des événements organisés par le RT à la proportion de femmes, à la fois parmi les intervenants et intervenantes, et parmi les comités d'organisation.
2. Financer et participer à l'organisation d'événements destinés aux lycéennes et/ou collégiennes tels que les "Journées filles, maths et informatique: une équation lumineuse", "L codent, L créent", "Maths C pour L" et d'autres initiatives dans cet esprit.

2.3.3 Jeunes chercheurs et chercheuses

Le RT Calcul cherchera à mettre en avant les travaux des jeunes chercheurs et chercheuses en faisant des appels à présentations lors des différentes journées scientifiques qu'il organise. La mise en place d'un événement récurrent tel que les "journées du RT", tous les deux ans par exemple, avec un créneau jeunes chercheurs et chercheuses, pourra favoriser cette démarche.

Afin d'aider les jeunes chercheurs et chercheuses à participer à des événements en lien avec le RT Calcul, un système de bourses sera mis en place pour financer leurs missions. Il fonctionnera sous la forme d'un appel à candidature au fil de l'eau tout comme d'autre RT le font déjà.

Enfin, le RT Calcul continuera à proposer son système d'offre d'emploi à la communauté car il permet en particulier aux jeunes d'avoir une certaine visibilité des offres autour du calcul scientifique tout au long de l'année. En effet, il n'est pas toujours aisé d'avoir accès à ces informations qui sont souvent distillées un peu partout.

3 Activités envisagées

Le RT Calcul offre des formations sous formes d'écoles thématiques ainsi que des journées scientifiques et des séminaires. Il anime également le site <https://calcul.math.cnrs.fr> permettant à la fois d'annoncer ses actions et d'archiver les supports numériques associés. Le site permet également de publier des offres d'emploi (ingénieurs, doctorats, postdoctorats, stages, etc.) dans le domaine du calcul aussi bien au niveau académique qu'industriel. Enfin, le RT Calcul anime, conjointement avec le réseau métier Calcul, la liste de discussions calcul@listes.math.cnrs.fr du Groupe Calcul, de plus de 2400 abonnés.

3.1 Fonctionnement et animation du site <https://calcul.math.cnrs.fr>

Le site web du GdR Calcul a évolué en 2023 afin de se conformer à la RGPD. Autrefois sur un seul dépôt Gitlab public, une scission du contenu du site et du moteur de génération du site en deux projets Gitlab a été nécessaire. La partie contenu est maintenant un projet privé auquel seul les membres du bureau peuvent accéder protégeant ainsi les données, et la partie moteur est sur un dépôt public afin de partager le travail réalisé à la communauté.

Ce site regroupe le réseau métier MITI et le RT. Il a évolué en 2024 afin d'avoir une séparation plus claire entre les deux, notamment au niveau des événements organisés.

La rubrique des offres d'emplois fonctionne très bien avec 226 offres d'emploi publiées sur l'année 2024 réparties de la façon suivante : 48 CDD, 36 CDI, 9 concours, 36 postdoctorats, 30 thèses, et 67 stages. C'est une ressource particulièrement utile pour les jeunes chercheurs et chercheuses intéressés par le calcul scientifique.

Les nouvelles offres sont annoncées sur la liste de diffusion du Groupe Calcul sous forme de *digest* deux fois par semaine. Cette activité d'animation du site persistera dans le RT Calcul.

3.2 Organisation d'événements scientifiques

L'ensemble des manifestations organisées par le GdR, et prochainement par le RT, sont répertoriées sur https://calcul.math.cnrs.fr/tag/evt_sci.html.

Pour donner une idée des types d'actions organisées par le RT Calcul, voici une liste d'actions organisées précédemment par le GdR Calcul et son conseil scientifique :

- des écoles thématiques dans le domaine de la reproductibilité des calculs ou encore celui de l'analyse de données géométriques ;
- l'exploration de l'apprentissage machine et de la science des données sous la forme d'une ou plusieurs journées ;
- des mini-symposiums lors des congrès SMAI ou CANUM permettant de présenter des résultats récents sur des thématiques bien précises (précision des calculs, résolution d'EDP par machine learning, etc.) ;
- la promotion de bibliothèques mathématiques *open source* sous forme d'ANF ;

- la diffusion des nouveaux langages (Julia) et environnements pour le calcul (Jupyter).
- un CEMRACS sur le calcul quantique (1 semaine d'école d'été suivie de 5 semaines de recherche sur projet)

Enfin, des cafés calcul (webinaire en ligne d'une heure) sont organisés environ une fois par mois.

En plus de ces actions, un événement général autour des axes du RT pourrait être organisé tous les deux ans par exemple pour suivre les évolutions de ces différentes thématiques. Il pourrait se dérouler sur un ou deux jours et faire un état des lieux du calcul dans la communauté de l'INSMI. Ce serait l'occasion d'avoir une action récurrente représentative du RT Calcul, ainsi que d'y inviter les jeunes chercheurs et chercheuses à y proposer des présentations.

3.3 Partenariats

La thématique du calcul scientifique est très transverse et touche tous les instituts du CNRS. Le RT Calcul cherchera à organiser ses événements en collaboration avec d'autres GdR/RT du CNRS, y compris en dehors de ceux de l'INSMI. Ces collaborations pourront se faire via l'organisation d'événements en commun ou encore via la constitution de groupes de travail.

Les RT INSMI suivant sont naturellement proches des thématiques de Calcul

- **T&E** sur les aspects EDP, IA, et HPC.
- **MAIAGES** sur les thèmes de l'IA et de son impact environnemental. Les questions d'éthique sont également intéressantes.
- **UQ** autour de l'axe du calcul stochastique.
- **Optimisation** sur les aspect IA et calcul quantique.

En dehors de l'INSMI, le RT Calcul est en contact avec le RT NuTS de l'INSU, qui s'intéresse au numérique en Terre Solide. L'organisation d'événements conjoints est prévue, par exemple sous la forme d'une école thématique. Les axes de recherche "Apprentissage machine et interactions" et "Problèmes réels avec données réelles" sont particulièrement concernés par ces collaborations. Le lien avec le RT NuTS est formalisé par la présence de Laëtitia Le Pourhiet, qui dirigera le RT NuTS à partir de 2026, dans le comité scientifique.

Une journée de prospective est organisée le 14 octobre 2025 afin de décrire le panorama du calcul à l'INSMI. Elle sera constituée de présentations sur les thèmes d'actualités et pertinents pour le RT Calcul. Les membres du conseil scientifique seront sollicités à cette occasion, ou bien pour donner une présentation ou bien pour proposer des thèmes et des experts. Ainsi, cette journée sera l'occasion de réfléchir aux différents groupes de travail intéressant à mettre en place. Nous faisons aussi le constat que beaucoup d'entreprises du numérique sont présentes sur la liste de diffusion. Il pourrait être intéressant de constituer un groupe de travail avec AMIES pour renforcer ces liens académiques / privés.

4 Les membres du RT Calcul

À titre d'information, un sondage a été réalisé par le GdR Calcul en 2024 sur la liste de diffusion. Un peu plus de 600 personnes y ont répondu. Les employeurs de ces 600 personnes sont réparties de la façon suivante : 210 CNRS, 138 Universités, 34 CEA, 22 INRAE, 38 en écoles d'ingénieurs, 38 INRIA, et 127 Autres. Parmi les "Autres", la plupart sont dans des entreprises privés ou des agences de recherche en lien avec le calcul scientifique.

La liste de diffusion est commune avec le réseau métier Calcul de la MITI. À partir de cette liste de diffusion, nous avons établi une liste des membres permanents et faisant partie d'une UMR INSMI. Ceci donne un total de 151 personnes.

Il est aussi possible de regarder le nombre de participants ou inscrits aux précédents événements organisés par le GdR.

- Les mini-symposium aux Congrès SMAI et CANUM : les salles sont pleines à chaque fois et accueillent environ 25 personnes.
- Le CEMRACS 2025 : il est difficile de savoir qui fait partie du GdR dans le CEMRACS 2025. Le thème est le calcul quantique, c'est une communauté très transverse qui mélange mathématiques, informatique, et physique. Le GdR finance et participe à l'organisation qui est principalement composée de mathématiciens et mathématiciennes. Le 30/06, il y avait 130 inscrits en présentiel et 73 inscrits à distance.
- Les JCAD : comme pour le CEMRACS, il est difficile de savoir qui fait partie du GdR.
- Les cafés calcul :
 - Différentiation automatique : 64 inscrits
 - Générateurs de nombres aléatoires parallèles : 68 inscrits
 - Sur le droit d'auteur et les licences pour votre logiciel : 18 inscrits
- Les 20 ans du Groupe Calcul : 60 inscrits.
- Les journées Julia et optimisation : organisée deux fois. 170 inscrits la première fois, 60 la deuxième.
- Les journées calcul et apprentissage : 60 participants
- Le workshop sur les algorithmes de différentiation automatique.

Les événements sont annoncés sur la liste de diffusion et touchent donc à la fois les chercheur.se.s, enseignant.e.s-chercheur.r.se.s, et ingénieur.e.s. Suivant les événements, une communauté plus qu'une autre sera intéressée. Par exemple, les mini-symposium aux congrès SMAI et CANUM ou encore le CEMRACS 2025 sont plus suivis par les chercheur.se.s et enseignant.e.s-chercheur.r.se.s que par les ingénieur.e.s de part la nature de ces événements. À l'inverse, les JCAD seront plus centrées sur les ingénieur.e.s. Enfin, certains événements permettent de toucher tout le monde, comme les cafés calcul, les événements plus généraux comme les 20 ans du Groupe Calcul, ou encore les événements en rapport avec l'IA.

5 Organisation interne

5.1 Porteur du projet

Benoît Fabréges, ingénieur de recherche

benoit.fabreges@univ-lyon1.fr
ICJ, UMR 5208, Université Claude Bernard Lyon 1
21, avenue Claude Bernard
69100 Villeurbanne
+33 (0) 4 72 44 85 23

5.2 Comité de pilotage

Le RT Calcul se dote d'un comité de pilotage permettant de faire le lien avec le Réseau Calcul et les autres GdR/RT. Il est l'organe exécutif du RT. Nous en proposons la composition suivante :

- Matthieu Boileau, *CNRS Mathématiques*, Institut de Recherche Mathématique Avancée, Strasbourg ;
- Anne Cadiou, *CNRS Ingénierie*, Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique, Lyon ;
- Benoît Fabréges (**responsable**), *Université Claude Bernard Lyon 1*, Institut Camille Jordan, Lyon ;
- Daphné Giorgi (**responsable adjointe**), *CNRS Mathématiques*, Laboratoire de Probabilités, Statistique & Modélisation, Paris ;

- Philippe Helluy, *Université de Strasbourg*, Institut de Recherche Mathématique Avancée, Strasbourg ;
- Violaine Louvet, *CNRS Mathématiques*, Laboratoire Jean Kuntzmann, Grenoble ;
- Pierre Navaro, *CNRS Mathématiques*, Institut de Recherche Mathématique de Rennes, Rennes ;

5.3 Conseil scientifique

Le conseil scientifique est réuni au moins une fois par an afin de :

- faire le bilan des actions menées,
- définir de nouvelles actions thématiques à partir de discussions et de travail de brainstorming,
- s'organiser en groupes de travail pour mener ces actions avec l'appui du comité de pilotage.

Sollicités pour aborder les thématiques visées dans ce projet de RT, les experts suivants ont accepté de rejoindre le prochain conseil scientifique (CS) :

- Alexis Arnaud, *Université Grenoble-Alpes*, GRICAD, Grenoble ;
- Adrien Busnot Laurent, *Inria Rennes*, projet MINGuS - IRMAR, Rennes ;
- Mi-Song Dupuy, *Sorbonne Université*, LJLL, Paris ;
- Virginie Ehrlacher, *École Nationale des Ponts et Chaussées*, CERMICS, Marne la Vallée ;
- Emmanuel Franck, *Inria Nancy Grand Est*, projet MACARON - IRMA, Strasbourg ;
- Virginie Grandgirad, *CEA*, IRFM, Cadarache ;
- Laëtitia Le Pourhiet, *Sorbonne Université*, IStEP, Paris ;
- Nicole Spillane, *CNRS Mathématiques*, CMAP, Palaiseau ;
- Samuel Vaiter, *CNRS Mathématiques*, Laboratoire J.A. Dieudonné, Nice ;

6 Budget du RT

Le GdR fonctionne actuellement avec un budget de 18k€ par an. Ce budget étant suffisant pour le GdR, les mêmes montant sont demandés pour le fonctionnement du RT Calcul qui prend la suite du GdR Calcul.