

RAPPORT D'ÉVALUATION DE L'UNITÉ

MdS - Maison de la simulation

SOUS TUTELLE DES ÉTABLISSEMENTS ET ORGANISMES :

Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines
– UVSQ

Commissariat à l'énergie atomique et aux
énergies alternatives – CEA

Centre national de la recherche scientifique –
CNRS

Université Paris-Saclay

CAMPAGNE D'ÉVALUATION 2024-2025
VAGUE E

Rapport publié le 17/09/2025



Au nom du comité d'experts :

Stéphane Labbé, président du comité

Pour le Hcéres :

Coralie Chevallier, présidente

En application des articles R. 114-15 et R. 114-10 du code de la recherche, les rapports d'évaluation établis par les comités d'experts sont signés par les présidents de ces comités et contresignés par la présidente du Hcéres.

Pour faciliter la lecture du document, les noms employés dans ce rapport pour désigner des fonctions, des métiers ou des responsabilités (expert, chercheur, enseignant-chercheur, professeur, maître de conférences, ingénieur, technicien, directeur, doctorant, etc.) le sont au sens générique et ont une valeur neutre.

Ce rapport est le résultat de l'évaluation du comité d'experts dont la composition est précisée ci-dessous. Les appréciations qu'il contient sont l'expression de la délibération indépendante et collégiale de ce comité. Les données chiffrées de ce rapport sont les données certifiées exactes extraites des fichiers déposés par la tutelle au nom de l'unité.

MEMBRES DU COMITÉ D'EXPERTS

Président : M. Stéphane Labbé, Sorbonne Université, Paris

Experts : M. Philippe Poncet, Université de Pau et des pays de l'Adour, Pau
M. Jean-Marc Sac-Épée, Université de Lorraine, Metz, représentant CoNRS

REPRÉSENTANT DU HCÉRES

M. Marc Dambrine

REPRÉSENTANTS DES ÉTABLISSEMENTS ET ORGANISMES TUTELLES DE L'UNITÉ DE RECHERCHE

M. Étienne Augé, vice-président délégué à la science ouverte, U Paris-Saclay
M. Philippe Chomaz, directeur scientifique et des programmes de la Direction de la Recherche Fondamentale, CEA
M. Éric Dumas, vice-président recherche, UVSQ
Mme Adeline Nazarenko, directrice de CNRS Sciences informatiques

CARACTÉRISATION DE L'UNITÉ

- Nom : Maison de la Simulation
- Acronyme : MdIS
- Label et numéro : UAR3441
- Nombre d'équipes : deux
- Composition de l'équipe de direction : M. Pascal Tremblin (directeur), M. E. Audit (directeur adjoint), Mme V. Belle (assistante de direction et responsable administrative).

PANELS SCIENTIFIQUES DE L'UNITÉ

ST Sciences et technologies
ST1 Mathématiques

THÉMATIQUES DE L'UNITÉ

La Maison de la Simulation est une unité d'appui à la recherche ayant comme tutelles le CEA, le CNRS, l'UVSQ et l'Université Paris-Saclay. Sa mission est de promouvoir l'excellence et l'innovation dans le domaine du calcul scientifique. L'unité est composée de deux équipes scientifiques et d'une équipe de direction. Les équipes scientifiques sont « Science du Calcul » et « Science par le Calcul ».

L'équipe de direction est composée d'un référent informatique (IR CNRS), d'un chef d'installation (chercheur CEA), d'un directeur (chercheur CEA) et d'une assistante de direction (administrative CEA).

Les grandes thématiques scientifiques de l'unité sont le calcul haute performance et l'analyse de données haute performance et les applications du HPC/HPDA. Dans le détail des équipes, les thématiques sont, pour « Science par le Calcul » : l'astrophysique, les interactions lumière-matière, les systèmes physico-chimiques à l'échelle microscopique et les applications pour l'énergie. Pour « Science du Calcul » : les modèles de programmation pour le calcul intensif, la gestion des données pour les systèmes HPC, l'analyse de données haute performance, la visualisation, les algorithmes et les mathématiques pour le calcul intensif.

HISTORIQUE ET LOCALISATION GÉOGRAPHIQUE DE L'UNITÉ

La MdIS (UAR CNRS 3441) a été créée en juin 2010, ses tutelles sont le CEA, le CNRS, l'UVSQ et l'Université Paris-Saclay.

L'unité est bilocalisée entre le bâtiment DigiteoLabs, partie ouverte du CEA et les bâtiments de l'IDRIS sur le campus de l'Université Paris-Saclay, à environ deux kilomètres. L'équipe de direction et la salle Mandelbrot accueillant le mur d'images se trouvent au sein du bâtiment DigiteoLabs.

ENVIRONNEMENT DE RECHERCHE DE L'UNITÉ

La Maison de la Simulation a de forts liens avec l'IDRIS (Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique, centre de calcul du CNRS) et le Li-PARAD (Laboratoire d'Informatique PARallélisme Réseaux Algorithmes distribués de l'UVSQ). L'unité est très investie dans le développement d'outils pour et par le HPC comme l'illustre sa participation aux codes de calcul Gysela (fusion nucléaire, IRFM), Dyablo (astrophysique, IRFU), MDFT (chimie des matériaux, IRAMIS) ou encore une collaboration autour de l'utilisation de l'intelligence artificielle et la visualisation des données de santé (Institut Joliot).

Au sein du CEA, la MdIS est intégrée dans un réseau dense de collaborations autour du HPC dans de nombreux domaines scientifiques et techniques. Elle collabore entre autres avec le LI-HPC, Laboratoire d'Informatique pour le Parallélisme et le Calcul Haute Performance (DAM) ou encore le SGLS, Service de Génie Logiciel (DES).

EFFECTIFS DE L'UNITÉ : en personnes physiques au 31/12/2023

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	0
Maitres de conférences et assimilés	2
Directeurs de recherche et assimilés	1
Chargés de recherche et assimilés	0
Personnels d'appui à la recherche	14
Sous-total personnels permanents en activité	17
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	1
Personnels d'appui non permanents	11
Postdoctorants	0
Doctorants	9
Sous-total personnels non permanents en activité	21
Total personnels	38

RÉPARTITION DES PERMANENTS DE L'UNITÉ PAR EMPLOYEUR : en personnes physiques au 31/12/2023. Les employeurs non-tutelles sont regroupés sous l'intitulé « autres ».

Nom de l'employeur	EC	C	PAR
CEA	0	0	9
CNRS	0	1	5
UVSQ	2	0	0
Autres	0	0	0
Total personnels	2	1	14

AVIS GLOBAL

La Maison de la Simulation est une unité d'appui à la recherche ayant comme tutelles le CEA, le CNRS, l'UVSQ et l'Université Paris-Saclay dont la mission est l'appui aux activités de recherche dans le cadre de l'utilisation et du développement du calcul intensif. Elle est organisée autour de deux équipes de recherche et d'une équipe de direction et d'appui fonctionnel réparties sur deux lieux proches géographiquement.

Le comité relève un excellent niveau d'activité et une prise en compte intelligente des préconisations du précédent comité. En particulier, les collaborations internationales ont été développées et une amélioration de la gestion des personnels et de l'unité en général a été mise en place avec des entretiens annuels et des consultations des membres de l'unité quant aux évolutions et à la gestion de la structure.

La MdS a une belle activité scientifique avec des participations à des publications dans des revues de premier plan, ce qui illustre l'impact de son activité dans le domaine du calcul intensif sur la recherche dans de nombreux domaines. De plus, le développement d'outils à façon pour l'exploitation du mur d'images et en particulier pour sa virtualisation avec des casques de réalité augmentée, sont des atouts majeurs. D'autre part, l'investissement de la MdS dans des collaborations autour de la diffusion scientifique en direction du grand public est une réussite à souligner.

Afin de continuer cette dynamique, le comité recommande de développer la communication externe et interne. Externe pour mieux promouvoir non seulement les réussites scientifiques et techniques de l'unité et ainsi développer de nouvelles collaborations hors du bassin d'équipes de recherche habituel. En interne, la communication peut être améliorée afin d'aider les tutelles à mieux appréhender les besoins de l'unité en matière de personnel et de leur permettre ainsi de débloquer de nouveaux moyens, que soit administratifs (une seule personne pour le moment ce qui est juste et présente un risque de rupture en cas de départ), informatiques (2 ingénieurs de recherche prennent en charge la gestion informatique de la structure au détriment d'activités

valorisables pour leur carrière) et de recherche (le faible nombre de permanents ne permet pas de développer de nouvelles thématiques sereinement par manque de diversité de thèmes de recherche et manque d'encadrement pour de nouveaux doctorants et postdoctorants indispensables à la dynamisation de l'activité de recherche).

Pour conclure, la Maison de la Simulation est une très belle unité d'appui à la recherche qui démontre son utilité au travers de ses réalisations et s'est fixée des objectifs particulièrement pertinents pour la période à venir. Afin de pouvoir mener à bien ce programme, la MdS devra développer un programme de recrutement comme évoqué dans cet avis en trouvant une stratégie augmentant la visibilité de ses actions pour démontrer l'importance de sa mission pour la communauté.

ÉVALUATION DÉTAILLÉE DE L'UNITÉ

A - PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Globalement, les recommandations du précédent comité d'évaluation ont été bien prises en compte par l'unité.

La MdIS a lancé une chaire industrielle avec TotalEnergies et l'ANR sur laquelle elle voulait recruter un enseignant-chercheur en poste aux É.-U. Cette action répond à la recommandation du précédent rapport de développer les capacités de recherche en mathématiques appliquées en élargissant le champ des applications traitées par l'unité (en l'occurrence Sciences du Vivant pour cette chaire) et d'attirer des chercheurs expatriés. Malheureusement, la personne pressentie pour le poste s'est déditée au profit d'un poste dans une startup.

La recommandation du développement des activités de recherche autour de l'IA et de la science des données a été prise en compte en intégrant ces thématiques aux projets de recherche (projets sur le cerveau et la détection des risques d'épilepsie par exemple).

Des entretiens annuels sont maintenant organisés pour répondre à la demande d'amélioration des suivis de projets, mais aussi du dialogue autour du fonctionnement de l'unité.

La stratégie scientifique fait maintenant l'objet d'une révision régulière, présentée en assemblée générale de l'unité ; ceci répond à la suggestion du précédent comité de mieux impliquer les personnels dans l'évolution de la structure. De plus, tous les deux ans et demi (mi-mandat du directeur), une présentation de cette stratégie sera donnée à un comité d'experts extérieurs à la structure ; cette disposition vise à répondre à la question de la transparence, mais aussi de la pertinence des objectifs quant à la communauté.

Enfin, concernant les relations internationales que le précédent comité proposait de renforcer, la MdIS a œuvré dans ce sens comme l'illustre la mise en place au cours de la période de partenariats stratégiques avec des institutions internationalement reconnues telles que le Forschungszentrum Jülich, le R-CCS ou encore le Sandia National Laboratories.

B - DOMAINES D'ÉVALUATION

DOMAINE 1 : PROFIL, RESSOURCES ET ORGANISATION DE L'UNITÉ

Appréciation sur les objectifs scientifiques de l'unité

Les objectifs scientifiques de la MdIS sont en parfaite adéquation avec sa mission : être une référence en matière de calcul haute performance. L'unité se concentre sur l'exascale, l'intelligence artificielle comme outil pour le calcul intensif, le calcul frugal et la veille en matière de calcul quantique. Ces objectifs sont atteignables au vu des moyens potentiels, au sein de leurs tutelles, dont la MdIS pourrait bénéficier en développant une politique de communication en interne et en externe pour justifier d'un développement de ses ressources en personnels permanents.

Appréciation sur les ressources de l'unité

La MdIS a des ressources importantes en matière de recherche, mais manque de ressources en personnel d'encadrement et de gestion de la structure. Ce manque se fait particulièrement sentir coté administratif avec un unique personnel permanent sur lequel repose le fonctionnement quotidien de l'unité et des ingénieurs de recherche grandement sollicités pour la gestion des systèmes d'information au détriment du développement de projets de recherche.

Appréciation sur le fonctionnement de l'unité

L'unité fonctionne bien comme l'illustrent les résultats scientifiques, les projets développés ayant un fort rayonnement sur la communauté. Des voies d'améliorations seraient l'augmentation du nombre de chercheuses et de chercheurs permanents pour renforcer les capacités d'encadrement, mais aussi en renforçant la visibilité des dispositifs de soutien proposés par la MdS aux équipes de recherche dans le domaine du calcul haute performance.

1/ L'unité s'est assigné des objectifs scientifiques pertinents.

Points forts et possibilités liées au contexte

Un point saillant à mettre en avant est l'investissement scientifique payant sur l'utilisation du GPU en HPC, cela illustre une vision scientifique fine permettant de prévoir les besoins.

Les défis scientifiques sont d'accompagner et d'être acteur du passage à l'exaflopique, d'accompagner l'émergence de l'intelligence artificielle dans le calcul intensif, d'étudier et promouvoir l'utilisation des FPGA pour le calcul intensif afin de développer le numérique frugal et d'assurer une veille sur les technologies et développements d'algorithmes dans le cadre du calcul quantique.

Ces objectifs sont particulièrement pertinents. Ils allient des objectifs sur les nouvelles technologies pour le calcul intensif à des objectifs sur la façon de les utiliser optimalement et surtout frugalement dans un souci de rationalisation de la consommation énergétique. Cette approche est parfaitement en adéquation avec la mission de l'unité axée sur le soutien à la communauté pour le calcul intensif et par le calcul intensif. Les compétences sont nombreuses au sein des deux équipes de recherche, l'unité a également accès à un large panel local de chercheurs (CEA, CNRS, l'UVSQ, l'Université Paris-Saclay) et à l'extérieur au travers de nombreuses collaborations internationales (Forschungszentrum Jülich, R-CCS, Sandia National Laboratories).

La MdS a défini des objectifs pertinents tant sur le plan scientifique que sociétal. Au vu des ressources dont elle peut potentiellement disposer en matière de chercheuses et de chercheurs, ces objectifs semblent tenables.

Points faibles et risques liés au contexte

La politique de communication de la MdS n'est pas suffisante tant en interne vis-à-vis des tutelles pour les convaincre d'un soutien en personnels et qu'en externe pour diffuser ses offres.

Les objectifs risquent d'être difficiles à atteindre sans un renforcement des personnels et en particulier des personnels permanents.

2/ L'unité dispose de ressources adaptées à son profil d'activités et à son environnement de recherche et les mobilise.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'unité a des ressources de qualité lui permettant de développer des programmes ambitieux et de faire fonctionner la structure. Les personnels sont particulièrement mobilisés, souvent sur plusieurs métiers. Par exemple, les ingénieurs de recherche font aussi office de responsables SI et permettent ainsi au matériel de fonctionner et de pouvoir être mutualisé.

Plusieurs beaux projets d'outils sont développés, comme le « Mur d'Images Virtuelles » qui est attendu par de nombreuses équipes pour renforcer leurs collaborations, et mieux visualiser leurs données de calcul. De tels projets illustrent ainsi la capacité de l'unité à mobiliser ses ressources.

Points faibles et risques liés au contexte

Le risque principal est le départ des personnels permanents piliers de la structure. Ce départ peut être dû à un manque de reconnaissance professionnelle (promotions difficiles à obtenir dans le cadre d'une activité ne correspondant pas aux canons), mais aussi à un manque de personnel pouvant entraîner un décrochage par surcharge et un départ. Ce point faible est particulièrement saillant du côté administratif.

3/ Les pratiques de l'unité sont conformes aux règles et aux directives définies par ses tutelles en matière de gestion des ressources humaines, de sécurité, d'environnement, de protocoles éthiques et de protection des données ainsi que du patrimoine scientifique.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'unité a pris en main la protection de ses données avec la création d'un serveur sécurisé sur OVH. L'ensemble de la production et du stockage des données sont conformes à la norme ISO 27001. Aucune donnée ne relève du statut de confidentialité secret ou très secret.

Points faibles et risques liés au contexte

Vu que l'unité s'engage sur des applications médicales, il sera surement nécessaire de revoir la politique de protection des données pour être en conformité avec les règles en vigueur dans ce domaine.

DOMAINE 2 : ATTRACTIVITÉ

Appréciation sur l'attractivité de l'unité

Les succès de l'unité en matière d'appels à projets internationaux (participation à des projets financés par l'ERC, projet financé par l'équipex, etc.), mais aussi de participation à des projets de recherche particulièrement remarquables par ses communautés illustrent l'attractivité de l'unité. Les équipes de recherche sollicitent l'unité pour développer des projets communs (utilisation du mur d'images), développement de bibliothèques extrêmement reconnues scientifiquement (Gysela, Dyablo etc.). Par ailleurs, l'unité attire des doctorants et postdoctorants provenant d'horizons très variés (ENS, écoles d'ingénieur, universités françaises et étrangères).

1/ L'unité est attractive par son rayonnement scientifique et s'insère dans l'espace européen de la recherche.

2/ L'unité est attractive par la qualité de sa politique d'accompagnement des personnels.

3/ L'unité est attractive par la reconnaissance de ses succès à des appels à projets compétitifs.

4/ L'unité est attractive par la qualité de ses équipements et de ses compétences techniques.

Points forts et possibilités liées au contexte pour les quatre références ci-dessus

La MdIS, suivant les recommandations du précédent comité, a développé de nouvelles relations internationales fructueuses avec le Forschungszentrum Jülich, le R-CCS ou encore avec le Sandia National Laboratories.

Le comité a pu constater que les doctorants et postdoctorants se sentent chanceux d'être membres de la MdIS, ce qui montre le bon encadrement qu'ils y trouvent et la qualité des sujets qui leur sont proposés et qui permettent par la suite de trouver des postes permanents adaptés à leurs attentes.

Cette attractivité est, bien entendu, en bonne partie due à la capacité de la MdIS de répondre à des appels à projets compétitifs ou de participer efficacement à des réponses à des appels à projets proposées par équipes de recherche (par exemple le dernier programme equipex).

Enfin, les membres de l'unité ont su développer des compétences particulières en matière de visualisation des données au travers du mur d'image de la plateforme Mandelbrot (développement d'outils logiciels, de solutions virtualisées, etc.) ; le mur est aussi bien utilisé pour réaliser des émissions grand public, participant ainsi à la

dissémination scientifique ou encore pour analyser des scanners de cerveaux afin d'améliorer la prévention de l'épilepsie, ce qui est un enjeu sociétal fort.

Points faibles et risques liés au contexte pour les quatre références ci-dessus

Le risque majeur pour l'unité se situe au niveau de l'accompagnement des personnels, en particulier des personnels permanents. Deux points sont à souligner.

Le premier est que le processus de promotion des personnels, quelle que soit la tutelle, est entravé par la particularité des missions, qui semblent non compatibles avec les critères classiques de promotion, spécifiquement au CNRS pour les IR ou au CEA pour les ingénieurs-chercheurs. En effet, les tâches effectuées par les IR du groupe de soutien fonctionnel sont en grande partie tournées vers la gestion des systèmes d'information. La tâche étant particulièrement lourde, leur faible nombre (deux personnes), les pousse à y consacrer une part importante de leur temps. Malheureusement, cette activité, dans le cadre du passage de grade (en fin d'échelle), n'est pas reconnue (manque d'encadrement, moins de grands projets à impact national). Cette situation risque de fragiliser fortement l'attractivité de la structure pour ces postes et de mettre en péril son fonctionnement en cas de départ des personnels.

Le second point à souligner est que l'isolement du personnel administratif (une seule personne) semble avoir nui à son accès aux promotions. Ceci est un mal identifié dans les unités singulières au sein de grandes structures dont les personnels ne peuvent bénéficier de dynamiques de groupe et d'un poids suffisant de leur direction auprès de l'institution.

DOMAINE 3 : PRODUCTION SCIENTIFIQUE

Appréciation sur la production scientifique de l'unité

L'unité, grâce à ses collaborations avec des équipes de recherche à la pointe, mais aussi avec ses propres projets de recherche, a une production scientifique d'un excellent niveau. Cette activité est en particulier soutenue par des doctorants et des postdoctorants dynamiques et motivés.

Ses contributions sont majeures, reconnues par la communauté du calcul intensif, que ce soit en matière de développement ou d'applications.

1/ La production scientifique de l'unité satisfait à des critères de qualité.

2/ La production scientifique de l'unité est proportionnée à son potentiel de recherche et correctement répartie entre ses personnels.

3/ La production scientifique de l'unité respecte les principes de l'intégrité scientifique, de l'éthique et de la science ouverte. Elle est conforme aux directives applicables dans ce domaine.

Points forts et possibilités liées au contexte pour les trois références ci-dessus

La Maison de la Simulation a une vocation de recherche, mais ce n'est pas sa seule mission. Forte de deux équipes, sa politique de recherche est surtout, en adéquation avec ses statuts, une politique de soutien aux projets de recherche autour du calcul intensif et au développement d'outils pour la communauté. Dans ce cadre, sa production scientifique est de qualité ; les revues sont reconnues internationalement (Nature, SIAM, JCP, etc.), toutes avec comité de lecture et en « open access ».

Il faut noter qu'une grande part de la capacité de recherche des deux équipes est consacrée au développement d'outils logiciels et matériels pour la communauté. Ces développements font partie de la production scientifique, ils prennent du temps et empiètent sur la capacité à publier dans les journaux scientifiques.

Points faibles et risques liés au contexte pour les trois références ci-dessus

Les publications, de haute qualité, sont principalement concentrées sur une thématique applicative, ceci traduit peut-être un déséquilibre et représente un risque à terme.

DOMAINE 4 : INSCRIPTION DES ACTIVITÉS DE RECHERCHE DANS LA SOCIÉTÉ

Appréciation sur l'inscription des activités de recherche de l'unité dans la société

La MdIS met à disposition la salle Mandelbrot pour des émissions de diffusion scientifique, des événements autour de la recherche et des formations. De plus, certains de ses projets de recherche, comme l'étude d'imageries du cerveau pour la prévention de l'épilepsie, ont un impact sociétal important. La MdIS gagnerait à mieux diffuser l'information de ses offres, mais aussi gagnerait à communiquer sur ses succès, afin d'encore renforcer ses activités en direction de la société.

- 1/ L'unité se distingue par la qualité et la quantité de ses interactions avec le monde non académique.*
- 2/ L'unité développe des produits à destination du monde culturel, économique et social.*
- 3/ L'unité partage ses connaissances avec le grand public et intervient dans des débats de société.*

Points forts et possibilités liées au contexte pour les trois références ci-dessus

Des émissions grand public comme des épisodes de « C'est toujours pas sorcier » sont réalisées autour du mur d'images, ce qui représente une importante participation à la diffusion scientifique.

Les collaborations avec des acteurs de la recherche en médecine sont des actions pouvant avoir un impact sociétal, il est, par exemple, possible de citer l'étude sur les cerveaux de singes pour repérer les signes de suspicion d'épilepsie.

Points faibles et risques liés au contexte pour les trois références ci-dessus

Le comité pense qu'il existe un manque de promotion des savoir-faire et du matériel (salle Mandelbrot) de l'unité pour les actions de communication scientifique. Le potentiel de communication offert par ses outils semble sous-exploité.

ANALYSE DE LA TRAJECTOIRE DE L'UNITÉ

La MdIS a une bonne dynamique scientifique qui lui a permis de développer des thématiques en prévision du passage à l'exascale, en particulier l'utilisation des GPU pour le calcul intensif.

Il est à noter un léger retrait des publications (en nombre pas en qualité) durant la période qui peut être dû à plusieurs facteurs, dont le faible nombre de permanents. En effet, le développement ou la participation à des codes de calcul fortement diffusés semble avoir induit une forte pression sur les personnels permanents au fil des ans, réduisant le temps pouvant être consacré aux activités de recherche ou d'encadrement de la recherche.

Le comité a également relevé une forte marge d'amélioration possible de la communication vers l'extérieur concernant les services d'appui que l'unité peut offrir. Ceci limite les possibilités de trouver de nouvelles collaborations en dehors des canaux habituels.

Les objectifs déclarés de développement de l'IA pour le calcul et le développement du calcul frugal sont parfaitement adaptés aux évolutions scientifiques actuelles. Ce sont aussi des objectifs en accord avec les contraintes environnementales et donc avec les besoins sociétaux.

Développer la communication sur les réalisations et les besoins de la structure en direction des tutelles pour susciter un renforcement du soutien en postes permanents de chercheurs sera un enjeu majeur de la structure pour les années à venir.

RECOMMANDATIONS À L'UNITÉ

Recommandations concernant le domaine 1 : Profil, ressources et organisation de l'unité

L'une des priorités est, selon le comité, de recruter des personnels permanents, aussi bien administratifs, pour assurer la pérennité du fonctionnement de la structure en évitant un hiatus, que scientifiques pour améliorer le taux d'encadrement et permettre aux personnels en place de se libérer de tâches techniques fonctionnelles pour augmenter leur investissement dans la recherche.

Recommandations concernant le domaine 2 : Attractivité

Les tutelles ont exprimé des demandes de rapprochements forts avec les disciplines de la physique et les mathématiques pour répondre à un important besoin des laboratoires de l'Université Paris-Saclay ou du CEA en matière de calcul intensif et de méthodes numériques. Ces rapprochements, encore une fois, ne pourront être effectifs qu'avec des recrutements de permanents et de non-permanents, ce qui semble parfaitement possible au vu de la réputation de la structure auprès des doctorants ou des postdoctorants. Côté permanents, la structure risque un déficit d'attractivité si la pression excessive est maintenue et si le manque de personnels nuit à leur avancement de carrière.

Recommandations concernant le domaine 3 : Production scientifique

La production scientifique est de grande qualité, afin de l'améliorer encore et faire la vitrine des savoir-faire de la MdS, il serait intéressant de rééquilibrer les thèmes de publication.

Recommandations concernant le domaine 4 : Inscription des activités de recherche dans la société

Le comité recommande d'améliorer la promotion des réalisations de la MdS afin de mettre en avant les actions qu'elle peut mener et a menées avec succès, en particulier en matière de diffusion scientifique. Cette stratégie pourrait attirer de nouveaux projets et de nouvelles collaborations.

ÉVALUATION PAR ÉQUIPE OU PAR THÈME

Équipe 1 : Science par le Calcul

Nom du responsable : M. Karim Hasnaoui

THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

Les thématiques scientifiques sont la simulation numérique, le calcul haute performance et le calcul hybride. Les applications sont tournées vers l'astrophysique, l'interaction lumière-matière, la physique des plasmas de fusion, les systèmes physico-chimiques microscopiques et l'énergie.

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Les recommandations émises lors de la précédente évaluation étaient principalement d'ouvrir à de nouvelles applications, de gérer des données à grande échelle, de renforcer les collaborations internationales et d'étudier l'interaction entre IA et HPC. L'équipe « Science par le Calcul » est concernée par l'ensemble de ces aspects.

Depuis la dernière évaluation, deux chaires financées par l'ANR ont été montées, une chaire TotalEnergies sur la production d'hydrogène vert et une chaire industrielle. Plusieurs projets ont comme cœur d'activité le déploiement et la production exaflopique. On peut également constater les collaborations solides et productives avec Riken-CCS au Japon, FZJ en Allemagne, Sandia National Laboratories aux É.-U. Enfin, par l'intermédiaire du projet sur la dynamique atmosphérique des exoplanètes, la classification et la détection de profils non standards des résultats de simulation intensive par IA ont produit une méthode d'analyse des résultats impressionnante.

L'ensemble des recommandations du précédent comité ont donc été pleinement suivies et couronnées de succès par l'équipe « Science par le Calcul ».

EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE : en personnes physiques au 31/12/2023

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	0
Maitres de conférences et assimilés	0
Directeurs de recherche et assimilés	1
Chargés de recherche et assimilés	0
Personnels d'appui à la recherche	7
Sous-total personnels permanents en activité	8
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	0
Personnels d'appui non permanents	2
Postdoctorants	0
Doctorants	3
Sous-total personnels non permanents en activité	5
Total personnels	13

ÉVALUATION

Appréciation générale sur l'équipe

L'équipe « Science par le Calcul » se distingue par son excellence scientifique et son rôle stratégique dans le développement de logiciels et de méthodes de calcul de pointe pour les supercalculateurs exaflopiques. En combinant des compétences techniques avancées avec une vision interdisciplinaire, l'équipe contribue de manière significative à des domaines variés de la physique à toutes les échelles de la matière. Ce mélange d'innovation, de rigueur scientifique, et d'ouverture fait de l'équipe « Science par le Calcul » un acteur majeur de la recherche en simulation numérique.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe se distingue par une expertise remarquable dans le développement de codes de calcul et bibliothèques adaptés aux supercalculateurs exaflopiques, une activité essentielle pour relever les défis scientifiques contemporains. Sa capacité à produire des outils de simulation innovants, comme Dyablo, Kokkos, deMon2k ou Smilei, lui permet de modéliser des phénomènes complexes dans des domaines variés tels que l'astrophysique, la physique des plasmas, et les interactions lumière-matière. Par exemple, les travaux sur la convection adiabatique en astrophysique ont conduit à des publications majeures, notamment huit articles dans Nature en 2023. Ces réalisations sont le fruit d'une maîtrise des techniques avancées de parallélisation et d'optimisation (grand challenge Dynostar par exemple), ainsi que de collaborations fructueuses avec des acteurs internationaux (voir la section sur la prise en compte des recommandations ci-dessus).

Un autre atout majeur de l'équipe réside dans son engagement envers la science ouverte et la diffusion des connaissances. Le projet Smilei, primé en 2023 pour son impact scientifique et technique, en est une illustration. L'équipe soutient activement la communauté scientifique en organisant des formations et en développant des logiciels accessibles, tout en maintenant un niveau d'excellence dans la production scientifique. Par ailleurs, son approche interdisciplinaire, visible dans des projets comme GYSELA-X pour les plasmas de fusion ou MDFT pour les applications en chimie et biologie, témoigne de sa capacité à aborder des problématiques variées avec rigueur et innovation.

Enfin, l'équipe excelle dans la valorisation des technologies au service de secteurs stratégiques. Le développement du code CanoP pour simuler les écoulements multiphasiques dans les réacteurs de nouvelle génération ou encore les contributions à ComPASS pour la modélisation géothermique montrent l'impact concret des travaux de l'équipe.

Il a été également constaté une très bonne interaction avec l'équipe « Science du Calcul », ce qui permet une synergie entre une équipe développant les techniques et une équipe développant les outils pour leurs applications.

L'équipe « Science par le Calcul » bénéficie d'un équilibre remarquable entre personnels permanents et non permanents. Ce ratio équilibré favorise un encadrement de grande qualité, permettant un suivi régulier et efficace des projets. Cet environnement structuré se traduit par un climat de travail positif et stimulant, comme en témoignent les retours des doctorants, qui expriment un fort sentiment d'épanouissement au sein de l'équipe. La disponibilité des permanents, combinée à l'expertise diversifiée qu'ils apportent, crée un cadre propice à l'innovation et au développement professionnel des jeunes chercheurs.

Points faibles et risques liés au contexte

Une certaine fragilité en informatique de proximité et en gestion administrative (un seul personnel) pourrait potentiellement impacter l'activité de cette équipe à la moindre fluctuation des ressources humaines.

D'autre part, bien que l'équipe se distingue par son excellence scientifique et technique, une observation notable concerne la forte concentration de ses activités autour des thématiques liées au CEA. Cette orientation témoigne certes d'une synergie précieuse et d'un alignement stratégique avec les missions du CEA, mais elle peut également constituer une potentielle fragilité en matière de diversification des partenaires et des sources de financement. Le recrutement des deux chaires atténue ce risque, mais elles sont limitées dans le temps et une vigilance semble nécessaire sur le moyen terme afin de pérenniser cette ouverture.

Analyse de la trajectoire de l'équipe

En 2022, une restructuration stratégique a marqué un tournant pour l'unité, aboutissant à la création de deux équipes distinctes. Cette réorganisation a permis de clarifier les objectifs respectifs de recherche et d'appui, tout en renforçant les priorités autour des défis exascale. En parallèle, l'équipe « Science par le Calcul » a diversifié ses activités en intégrant des thématiques émergentes, notamment l'intelligence artificielle et l'analyse de données haute performance. Ces initiatives témoignent d'une volonté constante d'anticiper les besoins futurs tout en consolidant des bases solides dans les domaines établis.

L'équipe prévoit de poursuivre son développement en consolidant ses expertises historiques et en explorant de nouvelles thématiques stratégiques. Parmi les priorités identifiées figurent le développement de codes astrophysiques pour l'étude des supernovas, la finalisation de GYSELA pour les supercalculateurs européens, ainsi que le portage sur GPU de modules de simulation dans les codes Smilei et deMon2k. Ces projets, alignés sur les priorités exascale, visent à repousser encore les frontières de la modélisation scientifique dans des domaines cruciaux comme l'astrophysique et la physique des plasmas.

Par ailleurs, l'équipe ambitionne de se positionner sur des thématiques plus transversales, notamment dans les applications du numérique à la santé. Forte de son expertise en simulation haute performance, elle pourrait jouer un rôle clé dans la modélisation de processus biologiques complexes, tels que la dynamique des protéines ou les interactions moléculaires en environnement électrochimique. L'exploration de ces perspectives s'appuie sur des collaborations potentielles avec des instituts de recherche biomédicale et sur l'adaptation de ses outils, comme MDFT, à des problématiques liées à la santé. Ces initiatives illustrent une capacité d'innovation continue, combinant excellence technique et pertinence sociétale, pour maintenir l'équipe à la pointe des enjeux scientifiques du XXI^e siècle.

RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

Au-delà des deux chaires positionnées dans l'équipe, il serait judicieux de continuer à renforcer la capacité de l'équipe à explorer des collaborations avec d'autres institutions ou à développer des projets hors du périmètre scientifique du CEA.

De plus, bien que le domaine applicatif concerne les physiques à toutes les échelles (de l'atomistique à l'astrophysique) et représente un point extrêmement fort de cette équipe, il est recommandé de faire connaître les activités de l'équipe, notamment auprès des équipes de direction de l'ensemble des tutelles.

Enfin, partager avec les doctorants les diverses possibilités de trajectoires professionnelles serait un plus dans la vie de l'équipe et de l'unité en général.

Équipe 2 :

Science du Calcul

Nom du responsable : M. Julien Bigot

THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

Les thématiques scientifiques de l'équipe sont les modèles de programmation pour le calcul intensif, la gestion des données pour les systèmes HPC, l'analyse de données haute performance et leur visualisation, les algorithmes et mathématiques appliquées pour le calcul intensif. Du point de vue applicatif, l'équipe est positionnée sur le développement de bibliothèques et d'outils transverses pour les applications.

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

La position de l'équipe est particulière, puisqu'elle s'exprime aussi en tant qu'actrice à part entière de la recherche fondamentale et non uniquement comme une entité d'appui. Et lorsqu'elle se préoccupe de réalisations applicatives, elle vise la réalisation d'outils transverses, utiles de manière large.

Une première recommandation du précédent rapport était de chercher à renforcer les capacités en mathématiques appliquées avec le recrutement d'un expert. La tentative de recrutement sur une chaire d'un enseignant-chercheur expert en mathématiques computationnelles était une réponse adéquate à cette demande. Hélas, la personne s'est dédit au dernier moment et le recrutement n'a pu aboutir.

L'analyse de données haute performance et l'intégration de l'IA dans les processus d'analyse de simulations numériques ont été intensifiées pour répondre à une autre recommandation.

Une troisième recommandation du comité était d'augmenter le nombre de collaborations internationales. Pour l'équipe, la réponse s'est traduite sous forme de partenariats stratégiques avec des instituts prestigieux autour du développement de la bibliothèque Kokkos.

EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE : en personnes physiques au 31/12/2023

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	0
Maitres de conférences et assimilés	2
Directeurs de recherche et assimilés	0
Chargés de recherche et assimilés	0
Personnels d'appui à la recherche	6
Sous-total personnels permanents en activité	8
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	1
Personnels d'appui non permanents	6
Postdoctorants	0
Doctorants	6
Sous-total personnels non permanents en activité	13
Total personnels	21

ÉVALUATION

Appréciation générale sur l'équipe

L'équipe «Science du Calcul» se concentre sur les sciences sous-jacentes au calcul haute performance : l'informatique et les mathématiques appliquées. L'équipe mène des recherches et développe des outils qui s'articulent autour de cinq grands thèmes : modèles de programmation pour le HPC et le traitement accéléré ; exécution des systèmes pour la gestion des données HPC ; analyse de données haute performance et visualisation ; emballage logiciel HPC, déploiement et intégration continues ; mathématiques appliquées et algorithmes pour le HPC et l'IA.

C'est une équipe de niveau exceptionnel, avec un dynamisme et un éventail de compétences, rares et tout à fait remarquables. Elle mène des activités de recherche, pour son propre compte ou en collaboration avec des partenaires, ce qui lui permet d'aller au-delà de l'utilisation des outils de pointe en étant capable d'en créer de radicalement nouveaux.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe se distingue par ses contributions remarquables dans le domaine du calcul intensif, en combinant innovation technologique et rigueur scientifique. Elle s'illustre notamment dans la conception de modèles de programmation avancés, adaptés aux architectures modernes, ainsi que dans le développement d'outils comme la bibliothèque DDC, qui optimise la gestion des données en environnement C++/MPI. Ses recherches sur le parallélisme asynchrone ont permis de maximiser l'efficacité des architectures multicœurs et de réduire les déséquilibres de charge, en collaboration avec des centres de calcul de pointe comme le Jülich Super-Computing Center.

L'équipe excelle également dans l'optimisation des performances sur des matériels variés, notamment avec des travaux novateurs sur les FPGA et des algorithmes adaptés à la portabilité et à l'efficacité énergétique. En gestion de données, elle propose des solutions comme PDI et DEISA, qui intègrent de manière fluide les analyses *in situ*, réduisant les coûts et accélérant les traitements dans des contextes de simulation complexes. En visualisation, des outils comme TiledViz et le projet VR WALL montrent leur capacité à transformer l'analyse scientifique, notamment dans des domaines comme la neuro-anatomie ou les études atmosphériques des exoplanètes.

Enfin, ses avancées dans le domaine des algorithmes, qu'il s'agisse de méthodes numériques ou d'approches pour l'apprentissage automatique, confirment son rôle central dans l'innovation en calcul intensif, ouvrant des perspectives prometteuses pour les applications futures.

L'engagement de l'équipe en faveur de la science ouverte est louable. Il s'illustre par exemple par la cession de droits à la Fondation Linux, ou encore par une participation majeure au développement de la bibliothèque open-source Kokkos.

Points faibles et risques liés au contexte

Les points faibles et risques ne sont pas à proprement parler du fait de l'équipe. Il s'agit plutôt de faiblesses inhérentes à un manque de ressources humaines. Les efforts nécessaires pour soutenir les acteurs du calcul intensif sont importants, mais les personnels présents, déjà très mobilisés, peinent à répondre à une demande croissante. Cette surcharge limite les capacités de l'équipe à intensifier ses activités de développement et d'interactions avec des partenaires externes. Sans un renfort significatif en personnel, il sera difficile pour l'équipe d'élargir et d'intensifier son impact.

Analyse de la trajectoire de l'équipe

La trajectoire de l'équipe «Science du Calcul» repose sur plusieurs projets stratégiques visant à renforcer son rôle dans le domaine du calcul intensif. Elle s'engage activement dans le développement de la bibliothèque Kokkos à travers le projet CExA, avec des contributions comme KokkosFFT, une bibliothèque optimisée pour les FFT, et l'intégration de la bibliothèque DDC. Elle travaille également sur les bibliothèques PDI et DEISA pour la mise en place de pipelines d'analyse *in situ*, essentiels au projet exa-DOST du PEPR NumPEX. L'équipe développe des pipelines d'analyse de données haute performance intégrant l'intelligence artificielle, notamment pour la reconnaissance d'événements dans des simulations exaflopiques, en utilisant des outils comme TiledViz et la plateforme Mandelbrot. Par ailleurs, elle se concentre sur des schémas numériques avancés pour les

écoulements multiphasiques et des techniques d'algèbre linéaire, telles que la réduction de dimension, pour optimiser les modèles d'IA génératifs. Enfin, un domaine de recherche sera consacré au packaging, au déploiement et à l'intégration continue de la pile logicielle pour le calcul intensif, dans le cadre du projet Exa-DI, afin de faciliter l'adoption de ces outils par les communautés applicatives.

RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

Pour maximiser son impact, l'équipe «Science du Calcul» est encouragée à accélérer l'intégration des techniques d'intelligence artificielle dans les pipelines d'analyse, en tirant parti des avancées récentes en apprentissage automatique et en développant des modèles spécifiquement adaptés aux besoins des simulations exaflopiques.

Un accent particulier devrait être mis sur le numérique frugal, en optimisant les performances énergétiques des outils développés, notamment pour les modèles d'IA génératifs.

Il serait également pertinent d'améliorer la visibilité des outils et bibliothèques en participant à des événements internationaux, en organisant des workshops et en publiant des études de cas démontrant leur efficacité dans des scénarios concrets, afin de favoriser leur adoption et d'élargir leur rayonnement.

DÉROULEMENT DES ENTRETIENS

DATE

Début : 13 janvier 2025 à 9 h

Fin : 13 janvier 2025 à 18 h

Entretiens réalisés : en distanciel

PROGRAMME DES ENTRETIENS

9 h 15 - 9 h 30 huis clos comité

9 h 30 - 10 h présentation de l'unité par le directeur

10 h - 10 h 15 présentation de la trajectoire de l'unité par le directeur

10 h 15 - 10 h 45 présentation scientifique sur le sous-thème interaction lumière-matière

10 h 45 - 11 h 15 présentation scientifique sur le sous-thème analyse de donnée haute performance et IA

11 h 15 - 11 h 45 présentation/réunion de l'équipe science par le calcul

11 h 45 - 12 h 15 présentation/réunion de l'équipe science du calcul

14 h - 14 h 30 réunion avec l'équipe soutien fonctionnel

14 h 30 - 15 h réunion avec les personnels de rang B et équivalent

15 h - 15 h 30 réunion avec les personnels de support

15 h 30 - 16 h réunion avec les CDD doctorants, postdoctorants, alternants et ingénieurs

16 h 15 - 16 h 45 réunion avec la direction du laboratoire (directeur, directeur adjoint et responsable administratif)

16 h 45 - 17 h 15 réunion avec les tutelles

17 h 15 - 17 h 30 huis clos comité

OBSERVATIONS GÉNÉRALES DES TUTELLES

Le Président de l'Université de
Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines

A

Monsieur Stéphane Le Bouler,
Président
Haut Conseil de l'évaluation de la
recherche et de l'enseignement
supérieur
2 rue Albert Einstein - 75013 PARIS

A Versailles,
Le jeudi 17/07/2025

Ref. DER-PUR260024916 - MdIS - Maison de la simulation

Objet : Evaluation des unités de recherche – Volet Observation de portée générale

Monsieur le Président,

Nous avons pris connaissance avec le plus grand intérêt du rapport de l'HCERES concernant la demande de renouvellement de l'Unité de Recherche (UAR3441), dénommée « Maison de la Simulation (Mdls) », portée par M.Pascal Tremblin.

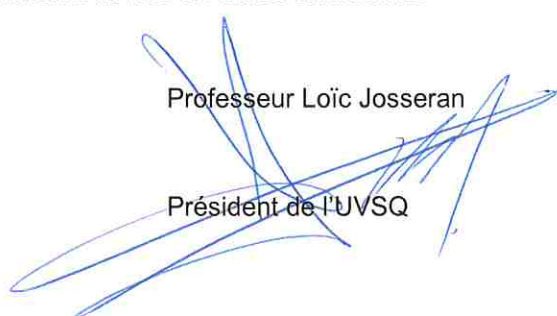
Nous remercions l'HCERES et le comité pour l'efficacité et la qualité de leur travail d'analyse et pour leurs recommandations constructives que le directeur d'unité et son équipe ne manqueront pas de mettre en œuvre avec le soutien de l'ensemble des tutelles.

Nous vous adressons ci-joint les observations et commentaires du porteur de ce projet formulés au regard du rapport de l'HCERES.

Nous vous prions de croire, Monsieur le Président, à l'expression de nos cordiales salutations.

Professeur Loïc Josseran

Président de l'UVSQ



Les rapports d'évaluation du Hcéres
sont consultables en ligne : www.hceres.fr

Évaluation des universités et des écoles

Évaluation des unités de recherche

Évaluation des formations

Évaluation des organismes nationaux de recherche

Évaluation et accréditation internationales



19 rue Poissonnière
75002 Paris, France
+33 1 89 97 44 00

