

Actes du colloque

Organisé par le CNRS et l'Académie des technologies

# MODÉLISATION

succès  
et limites

6 DÉCEMBRE 2016

CNRS - CAMPUS GÉRARD MÉGIE  
3 RUE MICHEL ANGE - PARIS 16<sup>E</sup>



ACADÉMIE  
DES TECHNOLOGIES

POUR UN PROGRÈS RAISONNÉ, CHOISI ET PARTAGÉ



# Sommaire

Virginie Bonnaillie-Noël, Alain Dollet, Erol Gelenbe, Mathieu Lewin et Alain Pavé,  
*Modélisation, succès et limites : Introduction* .....5

Franck Varenne, *Histoire de la modélisation : quelques jalons*.....9

## **Session 1 : Modélisation et simulation, faut-il toujours plus de puissance de calcul ?**

Serge Gratton, S. Gürol, E. Simon et Ph.L. Toint, *Les algorithmes et la puissance de calcul dans les techniques de prévision pour les géosciences en grande dimension vus sous l'angle de l'optimisation mathématique*.....37

Frédéric Alexandre, *L'approche systémique : simuler moins pour modéliser plus en neurosciences*.....49

Christophe Denis, *Les défis scientifiques pour mener les simulations numériques de demain*.....61

Michaël Beuve, *Du bon usage des ordinateurs et du cerveau des chercheurs*.....69

## **Session 2 : Modèles simples ou modèles complexes ? Simplification ou complexification ?**

Hubert Charles, *Modélisation : complexifier ou simplifier ? Quelques réflexions*...81

Michel Loreau, *Potentialités et écueils de la modélisation prédictive en écologie*...89

Léna Sanders, *Analyse spatiale de phénomènes sociaux : modèles simples versus complexes*.....99

François Képès, *Modélisation pour la biologie de synthèse*.....117

## **Session 3 : Rôle de la modélisation dans le dialogue entre la recherche académique et l'industrie**

Francesco Chinesta, Emmanuelle Abisset-Chavanne, Jose Vincente Aguado, Domenico Borzacchiello, Elena Lopez, Anais Barazinski, David Gonzalez, Elias Cueto, Chady Ghnatios, Jean-Louis Duval, *Big Data, Machine learning, data-based models and data driven simulations, avatars and internet of things*.....131

Benjamin Rotenberg, *Exemple du projet Cigéo (Centre industriel de stockage géologique)*.....147

Virginie Bonnaillie-Noël, Alain Dollet, Erol Gelenbe, Mathieu Lewin et Alain Pavé,  
*Tables rondes et quelques conclusions* .....151



# Modélisation, succès et limites

## Introduction

Comité d'organisation<sup>1</sup>

Les modèles, notamment les modèles mathématiques, ont envahi la pratique scientifique. Ils sont aussi des objets technologiques et sont même entrés dans la vie de tous les jours. Une économie en pleine expansion les concerne : des modèles sont vendus et des prestations payantes peuvent accompagner leurs utilisations. Un marché est en train de se développer.

Au-delà de la science, notre vie quotidienne est concernée par cette évolution, que ce soit pour la santé, pour les prévisions météorologiques, pour le suivi des fluctuations des marchés financiers, sans oublier les multiples contrôles de systèmes techniques, les réalisations architecturales, l'aménagement et la gestion des territoires. Et ce ne sont que des exemples.

Les mises en œuvre informatiques possibles ont multiplié les usages et les impacts des modèles. Cependant, les questions relatives aux incertitudes, à la formulation des problèmes et à l'interprétation des résultats, les limites pratiques et théoriques de leur utilisation, ainsi que les aspects qui concernent la programmation, la mise en œuvre et la validation de logiciels de modélisation et de simulation, doivent être abordés de façon pertinente et efficace. Enfin et au-delà des aspects opérationnels, le modèle est également un outil conceptuel, ainsi que de diffusion des connaissances, aussi bien dans la pratique scientifique que dans le développement technologique.

C'est sur la base de ce constat qu'un colloque a été organisé en commun par l'Académie des Technologies et le CNRS pour faire le point sur les développements récents, ainsi que sur les succès et les limites de la modélisation. Des exemples illustratifs ont été empruntés à divers secteurs scientifiques et technologiques : industrie, agriculture, santé, environnement, numérique, économie, mais aussi informatique, un domaine où la modélisation est efficace, non seulement pour la

---

<sup>1</sup> Virginie Bonnaillie-Noël (Directrice de recherche au CNRS et Directrice adjointe scientifique à l'Insmi CNRS), Alain Dollet (Directeur de recherche au CNRS, et Directeur Adjoint Scientifique à l'Insis, CNRS), Mathieu Lewin (Directeur de recherche au CNRS et chargé de mission à l'Insmi, CNRS), Erol Gelenbe (Académie des technologies, Professeur à l'Imperial College, Londres) et Alain Pavé (Académie des technologies, Professeur émérite à l'Université Claude Bernard Lyon 1 et ancien directeur de programmes interdisciplinaires du CNRS).

Insmi : Institut National des Sciences Mathématiques et de leurs interactions  
Insis Institut des Sciences de l'Ingénierie et des Systèmes

Modélisation : succès et limites

mise en œuvre de modèles mathématiques, mais aussi de formalisation (modèles multi-agents) ou pour ses besoins propres. Pour organiser les débats, quelques questions communes ont été identifiées et ont fait l'objet de trois sessions.

**Session 1 : Modélisation et simulation, faut-il toujours plus de puissance de calcul ?**

Cette interrogation est récurrente, mais l'accroissement des puissances de calcul permet-elle toujours d'améliorer les performances des modèles ? Peut-on raisonnablement penser que la croissance « indéfinie » est possible ? Dans certaines situations, ne serait-il pas aussi intéressant de revisiter le modèle, même si les moyens techniques sont disponibles ?

**Session 2 : Modèles simples ou modèles complexes ? Simplification ou complexification ?**

Le choix entre petits modèles et grands modèles, ou entre grands modèles simplifiés et grands modèles plus détaillés, est un problème récurrent, guidé par des raisons méthodologiques ou théoriques, et par des considérations pratiques. Il s'agit alors de comparer deux démarches : partir d'un petit modèle puis l'élargir et le complexifier tant que besoin, ou à l'inverse élaborer un modèle le plus exhaustif possible et le simplifier si nécessaire. Le choix d'une démarche est fortement lié à la confrontation avec les observations, avec l'expérience et avec les questions d'identification et de validation en fonction des objectifs de la modélisation. Outre les aspects opérationnels, on peut ajouter la capacité heuristique des modèles et leur rôle dans la conception de procédés nouveaux.

**Session 3 : Rôle de la modélisation dans le dialogue entre la recherche académique et l'industrie**

Cette méthodologie est largement partagée, mais quel est plus précisément son rôle dans chacun des deux secteurs et dans l'interaction entre les deux ? Quelles sont les industries qui sont les plus grandes utilisatrices ? Ont-elles été transformées par la modélisation ? Quel est le business des modèles ? Comment les chercheurs s'intègrent-ils dans le développement de modèles pour l'industrie et, plus généralement, pour le secteur productif ? Quelles sont les contraintes induites par la mise en œuvre de programmes informatiques de simulation et de modélisation ? Les logiciels et l'informatique ne sont-ils pas le moyen de transfert et de communication entre la recherche en modélisation, et l'industrie ?

Bien entendu, ce colloque n'épuise pas les nombreuses questions liées à la modélisation. Il faut d'ores et déjà envisager d'aller plus loin, par exemple en examinant et en confrontant les pratiques dans divers secteurs scientifiques. L'utilisation des modèles mérite encore une approche critique. Leur redoutable efficacité peut parfois conduire à des excès, par exemple s'ils sont utilisés comme

arguments d'autorité dans le dialogue social. Quand le modèle représente un système technique, s'il n'est pas adapté, le rappel à l'ordre est rapide, le système en question ne fonctionne pas ou mal. Quand il s'agit de situations plus délicates, plus complexes, le diagnostic est plus difficile, d'autant plus que derrière peuvent se cacher des visions plus ou moins idéologiques qui sont alors implicitement imposées. C'est particulièrement le cas pour les systèmes sociaux, économiques et même écologiques. Enfin, dans certains cas ils peuvent favoriser les analogies rapides et des transferts audacieux, par exemple entre les sciences de la vie et les sciences sociales, ce qui n'exclut pas que des modèles identiques peuvent être pertinents dans chaque cas. Le terrain étant balisé, il s'agit alors d'utiliser cette méthodologie précieuse avec clairvoyance.

Avant les différentes sessions, le comité d'organisation a souhaité programmer un exposé introductif sur l'histoire et l'épistémologie de la modélisation. La version écrite constitue aussi la partie introductive de cet ouvrage. Les autres contributions sont regroupées en trois chapitres correspondant aux trois sessions. Puis des comptes rendus sommaires des trois tables rondes et une brève conclusion ont été regroupés dans le dernier chapitre.

Cependant, avant de « donner la parole » à l'histoire des sciences et à l'épistémologie de la modélisation, il est bon de retracer, en quelques lignes, une histoire contemporaine et institutionnelle du domaine. En ce qui concerne l'Académie des technologies, cette histoire se confond avec les histoires individuelles, encore que des groupes de travail et des commissions ont abordé le sujet dans divers rapports, notamment celui intitulé « Enquête sur la simulation numérique » publié en 2005. On pourra également se référer à celui consacré à l'« Impact des TIC sur la consommation d'énergie à travers le monde » (2015). Pour le CNRS, on peut rappeler quelques initiatives institutionnelles ayant imprimé les tendances actuelles, même si ceux qui y participent aujourd'hui n'en ont pas conscience car elle fait maintenant partie de la culture commune des chercheurs et ingénieurs. Ce sont pourtant en grande partie ces initiatives qui ont créé cette culture. Il y eut bien sûr des réalisations dans les divers secteurs disciplinaires, c'est-à-dire dans des départements scientifiques, notamment du CNRS. Nous n'avons retenu ici que ce qui a été fait de façon transversale, souvent interdisciplinaire et inter-organismes. La liste n'est évidemment pas exhaustive, elle n'est donnée qu'à titre indicatif :

- Les travaux menés dans le cadre du GRECO<sup>2</sup> Rhône-Alpes « Analyse des systèmes » à la fin des années 1970 et le début des années 1980, créé et soutenu par le département SPI (Sciences Physique de l'Ingénieur).
- L'effort considérable de modélisation du climat coordonné par le département TOAE (Terre, Océan, Atmosphère, Espace) puis par l'INSU (Institut national des

---

<sup>2</sup> Groupe de REcherches COordonnées

## Modélisation : succès et limites

sciences de l'Univers), avec des partenariats importants, notamment de météoFrance, et une forte insertion dans les programmes internationaux de recherche sur le climat.

- Les réflexions menées, fin des années 1980, par le groupe « interactions des mathématiques », présidé par Jean-Pierre Kahane, dans le cadre de la préparation du rapport de conjoncture publié en 1990.

- Les initiatives impulsées par Jacques-Louis Lions dans de très nombreux secteurs, dont les recherches sur l'environnement.

- Les logiciels de simulation numérique tels que QNAP (Queueing Network Analysis Package) des années 1980 qui ont donné lieu à des "start-ups" de l'Inria telles que SIMULOG, les clubs « Modulef ou Moduleco » (années 1970) pour la modélisation en éléments finis, l'analyse numérique et économie, et le club « Edora » (Équations différentielles ordinaires et récurrentes appliquées) où se retrouvaient des chercheurs de divers organismes (années 1980 et début des années 1990).

- Le Programme interdisciplinaire MSN (Modélisation et Simulation Numérique) du CNRS, dans les années 1990, regroupant des chercheurs de multiples disciplines, impliquant largement ceux du département SPM (Sciences Physiques et Mathématiques), d'autres composantes du CNRS et d'autres partenaires.

- Les initiatives des Programmes interdisciplinaires de recherche sur l'environnement en matière de modélisation pour l'environnement (années 1990, début des années 2000).

- La création de la Mission pour l'interdisciplinarité en 2011.

- La création de la Mission Calcul et Données (MiCaDo) en 2015.

- etc.

Au total, c'est grâce à ces efforts que la modélisation est devenue une pratique courante, largement partagée, dans tous les secteurs scientifiques. Après l'âge d'or des années 1980-1990 dont la liste ci-dessus témoigne, nous sommes entrés dans une nouvelle étape, peut-être une nouvelle « ruée vers l'or » de la modélisation, dont ce colloque peut témoigner.

Tout cela étant dit, se pose encore une question : peut-on définir un métier de modélisateur et une formation correspondante ?

---

# Histoire de la modélisation : quelques jalons

**Franck Varenne**

Université de Rouen – UFR LSH  
Rue Lavoisier  
76821 Mont-Saint-Aignan  
franck.varenne@univ-rouen.fr

---

*RÉSUMÉ. Ce chapitre ne prétend à aucune exhaustivité quant à l'histoire de la modélisation. Il propose un panorama rapide ainsi qu'un regard sélectif choisi avec pour seule ambition d'être clarificateur et pour cela utile dans la pratique contemporaine. Dans un premier temps, il présente une classification des vingt principales fonctions des modèles. Ensuite, il propose de repérer et de caractériser deux tournants historiques majeurs dans l'histoire de la modélisation depuis le début du 20<sup>ème</sup> siècle. Enfin, il entend montrer que, ces dernières années, sous l'effet de ces tournants mais aussi des développements de nouvelles techniques tant matérielles que formelles, la modélisation permet de plus en plus une complémentarité opérationnelle des différentes fonctions des modèles à la différence des périodes précédentes, si bien que les questions suivantes concernant les limites de la modélisation n'appellent plus de réponses aussi tranchées que par le passé mais au contraire des réponses méthodologiquement et épistémologiquement nuancées et informées : faut-il toujours plus de puissance de calcul ? Faut-il toujours préférer un modèle simple à un modèle complexe ? La modélisation reste-t-elle soit du côté de la recherche académique, soit du côté du développement industriel ? Ce chapitre entend montrer spécifiquement que, du fait des développements techniques récents, la pluralité des fonctions des modèles s'est confirmée et même amplifiée, mais, qu'en même temps, certaines de ces fonctions tendent à être nouvellement compatibles voire complémentaires, parfois dans un même modèle complexe ou dans un même système de modèles, sans nécessairement toujours s'exclure.*

*MOTS-CLEFS : modèles, modélisation, histoire, épistémologie, pluralisme, complexité.*

---

## 1. Introduction

On constate un essor continu des pratiques de modélisation dans les sciences et techniques depuis le début du 20<sup>ème</sup> siècle, en particulier depuis les années 1930. Ce mouvement est massif mais aussi pluriel. Il présente de très nombreux visages. Il est tellement divers que certaines des épistémologies ou méthodologies générales qui ont, çà et là, tenté de le circonscrire ne manquent pas en fait d'entrer en conflit, de se contrarier, et, en un sens, de ne valoir finalement que localement ou pour des pratiques bien spécifiques. On continue cependant souvent et majoritairement à opposer la conceptualisation élégante et économe - qu'il faudrait à tout coup préférer - aux calculs massifs et jugés forcément insignifiants des « dévoreurs de nombres » comme sont parfois qualifiés nos ordinateurs. Or, dans les deux cas, il y a bien des modèles en jeu, de natures certes différentes. On oppose aussi les modèles complexes aux modèles simples, cela en toute généralité, en arguant du fait - supposé définitif et acquis - que toute modélisation doit chercher à simplifier, et que donc, nécessairement croit-on, toute modélisation doit chercher à produire une « représentation simple ». Enfin, on exige souvent qu'un modèle choisisse son camp : il sert tantôt à la recherche théorique, académique ou en amont, tantôt à la recherche applicative et au développement industriel ; mais il ne semble pas pouvoir conjoindre les deux approches.

Face à cette pluralité persistante des injonctions méthodologiques comme des épistémologies appliquées sur le terrain, on pourrait en venir à penser que ce n'est pas bien grave : pour juger de la pertinence et de la validité d'une modélisation, il suffirait de s'en remettre chaque fois au contexte normatif précis de la recherche en question ainsi qu'à la demande sociale spécifique qui accompagne le projet. Mais adopter ce point de vue trop exclusivement relativiste peut conduire à remettre en question l'unité comme la cohérence propre de la méthode scientifique. Si on donne trop tôt et exclusivement raison au pluralisme des normes et méthodes, les sciences et techniques risquent de n'être reconnues que comme de pures productions rhétoriques parmi d'autres, dépendant exclusivement de leur contexte de production ainsi que des forces sociales singulièrement en présence. La conséquence de ce relativisme exclusif réside dans le fait que l'on se retrouve alors plus que jamais désarmé face à la menace de ce qu'il est aujourd'hui convenu d'appeler les « vendeurs de doute ». Car, si les modèles sont pluriels, si leurs normes de validation sont chaque fois fluctuantes et complètement dépendantes du contexte, il devient tout à fait possible - voire légitime - de penser pouvoir faire dire ce que l'on veut à un modèle, pourvu qu'il soit suffisamment financé - en tout cas plus que d'autres - et seulement raisonnablement - c'est-à-dire comme d'autres - validé.

Cette conséquence épistémologique paraît dangereuse et, heureusement, très contestable. En fait, il est de nombreux indices qui montrent que la diversité des types de modélisation et de leurs fonctions associées n'est pas infinie, et qu'elle n'a

donc pas, pour cela, à être uniquement et exclusivement rapportée au contexte chaque fois singulier de la production du modèle, en particulier si l'on souhaite aussi pouvoir formuler ses normes de validité et de validation. Un des premiers objectifs de ce chapitre sera justement de montrer que cette diversité, bien que grande, reste finie et qu'elle peut être rendue compréhensible et caractérisable au moyen d'analyses comparatives de type épistémologique. À cette fin, la seconde section de ce chapitre présentera d'abord une classification des modèles en vingt fonctions principales. Elle tâchera d'esquisser la preuve que les normes de calibration, de vérification et de validation de ces modèles dépendent de ces fonctions qu'on veut prioritairement leur faire assurer. La troisième section de ce chapitre contrebalancera l'approche trop synchronique - et pour cela en partie artificielle - de la section précédente. Elle proposera une succincte mise en perspective historique en choisissant de se concentrer sur deux des principaux tournants qu'ont successivement connu les pratiques de modélisation depuis le début du 20<sup>ème</sup> siècle : le tournant formel puis le tournant computationnel. Cette section montrera en particulier comment ces deux tournants ont eu pour effet majeur de modifier les relations structurelles entre modèle et théorie physique, dans un premier temps, puis, plus radicalement, entre modèle et formalisme mathématique, dans un second temps. La section quatrième montrera que ces assouplissements dans les déterminations structurelles réciproques ont eux-mêmes pour effet aujourd'hui d'autoriser une intrication et une complémentarité bien plus fortes entre les différentes fonctions des modèles, parfois à l'intérieur d'un même modèle ou d'un même système de modèles, ces systèmes étant rendus parfois spécifiquement complexes. Ce qui a pour effet en retour de nous obliger à réarticuler et à diversifier les réponses à nos trois questions récurrentes concernant les limites des modèles.

## 2. Etat des lieux sur les fonctions des modèles

### 2.1. Modélisation et modèle

Mais d'abord, qu'appelle-t-on une modélisation ?<sup>1</sup> Disons, pour faire bref, que le terme modélisation ne désigne pas un modèle mais désigne toute la procédure<sup>2</sup> ou toute la pratique individuelle ou collective au cours de laquelle on recourt à un ou - le plus souvent - à plusieurs modèles, cela de manière systématique et

---

<sup>1</sup> Cette section synthétise la classification qui a été publiée sous des formes légèrement différentes dans (Varenne, 2013) et (Varenne, 2014).

<sup>2</sup> On peut même parler de « stratégie de construction et d'utilisation de modèles » (Pavé 1994 : 25).

éventuellement itérative, en s'orientant selon une certaine perspective et selon certains objectifs d'enquête bien définis au départ. Au final, la pratique de la modélisation consiste à choisir, concevoir ou produire un ou des modèles pour lesquels on a les moyens de les évaluer comme étant parmi les plus performants dans une ou plusieurs des fonctions de connaissance attendues (cognition pratique ou théorique), cela dans un cadre donné.

Qu'appelle-t-on alors un modèle ? On l'aura compris avec la caractérisation précédente, la fonction de connaissance entendue au sens large est centrale dans la modélisation en contexte scientifique et technique. Suivant la caractérisation qui nous paraît la plus souple et donc la mieux adaptée et adaptable, sans être complètement attrape-tout, celle de Marvin Minsky, nous dirons ici que « *pour un observateur B, un objet A\* est un modèle d'un objet A dans la mesure où B peut utiliser A\* pour répondre à des questions qui l'intéressent au sujet de A* »<sup>3</sup>. Certes, un modèle est souvent prioritairement défini ou caractérisé dans la littérature scientifique comme une représentation : on lit souvent qu'un modèle est avant tout la représentation simplifiée d'un système cible. Mais la caractérisation de Minky présente le premier avantage de rappeler que ce n'est pas absolument nécessaire. Dans certains cas, il peut être conçu plutôt à l'image d'une grille de lecture, d'un filtre, d'une lentille grossissante. Jean-Marie Legay voyait ainsi les modèles comme des outils permettant d'amplifier l'expérimentation mais pas prioritairement comme des représentations<sup>4</sup>. Alain Pavé propose une caractérisation qui peut se révéler plus large et consensuelle que celle de Legay puisqu'elle fait droit à la fonction de sélection d'aspects qu'opèrerait tout modèle et à laquelle Legay attachait tant d'importance, tout en maintenant l'idée de représentation : « *un modèle est une représentation symbolique de certains aspects d'un objet ou d'un phénomène du monde réel* »<sup>5</sup>.

Dans cette section, nous nous rallierons toutefois à la caractérisation plus large de Minsky dès lors que l'idée même de symbole, elle aussi problématique, n'y est pas non plus convoquée. Cette caractérisation présente en effet le deuxième avantage de suggérer qu'un modèle est déterminé selon une double relativité : relativité par rapport à la question principale posée, relativité par rapport à l'observateur précis qui pose cette question. La question est posée dans un certain contexte par une catégorie de personnes qui y ont un certain intérêt cognitif, et pour un certain objectif.

Le troisième avantage de cette caractérisation tient au fait que le modèle est conçu comme étant, lui aussi, un « objet », même si ce peut être bien sûr une équation mathématique ou un système d'équations. Avec cette caractérisation supplémentaire, intervient l'idée qu'un modèle, même si sa conception a pu

---

<sup>3</sup> (Minsky 1965).

<sup>4</sup> (Legay 1997).

<sup>5</sup> (Pavé 1994 : 26).

initialement s'en inspirer, n'est jamais uniquement une formulation, une façon de parler, une tournure de langage, une simple analogie, mais qu'il va jusqu'à donner existence à un certain objet dont le comportement n'est pas complètement élucidé ni évident dès le moment où on le choisit, le définit ou le crée. Un modèle doit posséder une certaine indépendance ontologique en ce sens, un minimum de quant à soi ontologique. C'est cela qui permet d'expliquer que dans les pratiques de modélisation, on se propose souvent d'explorer le comportement encore mal connu de tel ou tel modèle, d'expérimenter sur le modèle, comme on expérimente justement et couramment sur des *objets* physiques.

## **2.2. La fonction générale des modèles**

Au regard de la caractérisation de Minsky et de ses particularités, quelle est finalement la fonction la plus générale qu'assure un modèle pour le questionneur ? Il apparaît que c'est celle d'une médiation, plus exactement celle d'une *facilitation de médiation*, cela dans le cadre d'une enquête à visée cognitive, à tout le moins pour ce qui est des modèles en sciences et techniques. On recourt au modèle quand le questionnement ne peut être direct : il y faut une médiation. Mais quelles sont les grandes fonctions et fonctions spécifiques de facilitation de médiation ? L'énumération ci-dessous entend en proposer une classification et une synthèse<sup>6</sup>. Il est entendu qu'un même modèle peut assurer simultanément plusieurs de ces fonctions spécifiques. Toutefois, classiquement, il est considéré qu'un même modèle assure un petit nombre et, au maximum, deux ou trois de ces fonctions, pas plus, cela dans la mesure où les contraintes méthodologiques associées à chaque fonction ont souvent semblé se contredire irrémédiablement.

## **2.3. Première grande fonction : faciliter une observation, une expérimentation**

Dans ce premier type de médiation, ce que le modèle facilite est avant tout l'accès sensible et/ou le rapport interactif avec l'objet cible. Le modèle sert alors éventuellement de substitut au système cible.

- 1) Rendre sensible (écorché de cire, maquette du système solaire, maquette de dinosaure...).
- 2) Rendre mémorisable (modèles pédagogiques, diagrammes, comptines...).

---

<sup>6</sup> Source principale : (Varenne 2014). Dans cet ouvrage, je prolonge l'analyse en distinguant ensuite les *principes* et les *natures* des modèles. Un modèle doit pouvoir être ainsi caractérisé complètement si l'on connaît sa fonction, son principe et sa nature.

Franck Varenne

- 3) Faciliter l'expérimentation en la concentrant sur un type d'objet ou organisme modèle (modèles vivants en biologie: drosophile, porc, E. coli...) facilement disponible (pour des raisons matérielles, financières, techniques, morales, déontologiques...).
- 4) Faciliter la présentation de l'expérimentation (non la représentation de l'objet expérimenté) *via* un modèle statistique d'analyse de données.

#### **2.4. Deuxième grande fonction : faciliter une présentation intelligible**

La présentation cette fois-ci intelligible peut se faire *via* une représentation mentale figurée ou schématique ou même déjà *via* une conceptualisation et une interaction de concepts, un concept étant une idée générale bien définie et applicable à certains objets ou phénomènes réels ou réalisables.

- 5) Faciliter la compression et la synthèse de données disparates pour l'utilisation ultérieure : modèles de données. Certains positivismes ou instrumentalismes ont souvent considéré à tort qu'il n'existait quasiment que ce type de fonction pour les modèles.
- 6) Faciliter la sélection et la classification des entités pertinentes dans un domaine : modèles conceptuels, modèles de connaissance, ontologies, modèles d'objets typés.
- 7) Faciliter la reproduction et l'extrapolation d'une évolution observable : modèle descriptif, modèle phénoménologique, modèle prédictif, analyse prédictive, *data analytics*.
- 8) Faciliter l'explication d'un phénomène en donnant à voir ou à intuitionner ses mécanismes d'interaction élémentaires : modèles explicatifs (ex. : modèles mécanistes en physiques, modèles individus-centrés en écologie ou en sociologie).
- 9) Faciliter la compréhension d'un phénomène en donnant à voir les principes qui gouvernent une dynamique d'ensemble proche de celle qui est observée : modèles à principe variationnel, modèles à optimisation (ex. : modèles topologiques ou à systèmes dynamiques en morphogenèse).

### **2.5. Troisième grande fonction : faciliter une théorisation**

Un modèle se distingue fondamentalement d'une théorie, même s'il peut passer parfois pour une théorie approchée. Une théorie peut être définie comme un ensemble d'énoncés - éventuellement formalisés et/ou axiomatisés - formant système et donnant lieu à des inférences susceptibles de valoir descriptivement pour tout un domaine de réalités ou pour tout un type de phénomènes. Un modèle peut servir de médiateur dans l'entreprise de théorisation, et cela de diverses manières.

- 10) Faciliter l'élaboration d'une théorie non encore mature (modèle théorique).
- 11) Interpréter une théorie, en montrer sa représentabilité, comme cherche à le faire Boltzmann (modèle de théorie, de type 1).
- 12) Illustrer une théorie par une autre théorie, comme cherche à le faire Maxwell ; recherche d'analogies pour le calcul (modèle pour la théorie).
- 13) Tester la cohérence interne d'une théorie formelle, en lien avec la théorie mathématique des modèles (modèle de théorie, de type 2).
- 14) Faciliter l'application de la théorie, i.e. son calcul et sa reconnexion avec le réel (ex. : modèles heuristiques ou asymptotiques des équations de Navier-Stokes).
- 15) Faciliter l'hybridation de théories dans les systèmes hétérogènes (ex. : modèles de systèmes physiques polyphases).

### **2.6. Quatrième grande fonction : faciliter la médiation entre discours**

Pour cette fonction, il s'agit de faciliter la médiation, la confrontation et la circulation des idées et des représentations entre discours portés par plusieurs types d'observateurs. Donc il ne s'agit plus d'une médiation supposée intervenir à l'intérieur d'un seul type de représentation ou d'un seul type de sujet observateur.

- 16) Faciliter la communication entre disciplines et chercheurs (ex. : partage de bases de données).
- 17) Faciliter l'écoute, la délibération et la concertation (ex. : Modèle RAINS pour les pluies acides favorisant une concertation autour de la qualité de l'air<sup>7</sup>).
- 18) Faciliter la co-construction d'hypothèses de gestion, par exemple pour les systèmes mixtes de type sociétés-nature (ex. : modélisation d'accompagnement ou modélisation interactive des systèmes agricoles).

---

<sup>7</sup> (Kieken 2004).

### **2.7. Cinquième grande fonction : faciliter la médiation entre représentation et action**

Pour cette fonction, la médiation n'a même plus lieu entre représentations imagées, conceptuelles ou plus généralement entre représentations discursives mais entre représentation et action. On pense ici aux modèles pour la décision et pour l'action.

- 19) Faciliter la décision et l'action rapides dans un contexte effectivement complexe (modèles de gestion d'épidémie, de gestion de catastrophes) où la fidélité du modèle au système cible n'est pas recherchée pour elle-même.
- 20) Faciliter la décision et l'action rapide dans un contexte où le modèle est auto-réalisateur et où il est, par conséquent, jugé contreproductif de faire l'hypothèse de la complexité ou de réalisme (ex. : modèles de produits dérivés en finance, habituellement auto-réalisateur mais cycliquement auto-réfutants, d'où les krachs<sup>8</sup>).

### **2.8. Sur quelques conséquences : normes de méthode et relations entre fonctions**

Soulignons une fois de plus, afin que ne demeure aucune ambiguïté à ce sujet, que bien des modèles assurent en réalité deux ou trois des fonctions précédemment citées. Simplement, certaines sont compatibles alors que d'autres le sont difficilement, en tout cas à première vue. Une carte de géographie par exemple assure au moins les fonctions n°1 (rendre sensible), n°2 (rendre mémorisable) et n°6 (sélectionner et qualifier les entités pertinentes). Un modèle mathématique d'un phénomène physique peut être à la fois explicatif (fonction n°8) et prédictif (fonction n°7). Mais il arrive parfois à de tels modèles d'assurer l'une de ces fonctions sans pouvoir assurer l'autre.

Nous ne pouvons rentrer ici dans le détail de la démonstration. Mais on se doute bien que les contraintes méthodologiques varient considérablement au gré des fonctions que l'on veut voir prioritairement assurées par le modèle en question. Par exemple, si la fonction prioritaire est la n°17 (concertation), le modèle doit mettre en scène des concepts permettant de faire transiter des idées générales sur le système cible d'un savoir disciplinaire à un autre, sans trop d'égards pour la reproduction détaillée des valeurs mesurées ou des données. Tandis que si la priorité est mise sur la fonction n°7 (modèle prédictif), tout le soin doit être au contraire apporté à la qualité et à la quantité des données prises en compte. Autre situation : si le modèle cherche à être théorique (fonction n°10), sa généralité va être prioritairement recherchée, alors que ce n'est pas forcément le cas d'un modèle substitut pour la

---

<sup>8</sup> (MacKenzie 2004) ; (Aglietta 2008).

représentation (fonction n°3). Toutefois, pour le cas des organismes modèles en biologie et en médecine (fonction n°3), il se pose justement la question de la possible très forte spécificité du modèle : comment, si nous ne travaillons pas en même temps à montrer que les processus sous-jacents sont suffisamment génériques - donc non spécifiques - d'une espèce à une autre, voire d'un individu à un autre (d'où un certain besoin d'explication là aussi et donc de la fonction n°8), considérer que la substitution (fonction n°3) pourra être valide dans le cadre d'une expérimentation de médication déléguée par exemple (test de médicament sur des animaux modèles) ? Dans ce cas, la fonction n°3 semble exiger que la fonction n°8 soit aussi en partie assurée. Comme on ne peut ici que l'entrevoir à partir de ces exemples succincts, il y a donc certainement des compatibilités, des incompatibilités comme aussi des implications mutuelles entre certaines fonctions.

Cette classification des fonctions des modèles, qui ne prétend nullement être définitive ou complète, a proposé jusqu'à présent une mise en ordre raisonnée probablement utile, mais passablement anhistorique et statique. Pour les besoins même de sa cause, la classification écrase l'histoire et ne permet pas de comprendre directement les évolutions, les nouveaux défis comme les nouvelles tensions et interrogations à l'œuvre dans les pratiques contemporaines de modélisation. Jetons un œil maintenant sur les deux tournants majeurs qu'a récemment connus la modélisation.

### **3. Deux tournants majeurs dans l'histoire de la modélisation**

Dans la section précédente, nous avons fait une place très synthétique à une lecture épistémologique et classificatoire des fonctions des modèles<sup>9</sup>. Dans cette section, il sera fait une place à l'histoire des modèles et des simulations. Mais elle restera là aussi extrêmement allusive et synthétique.

---

<sup>9</sup> Pour des approfondissements, voir (Delattre & Thellier 1979, (Varenne & Silberstein 2013), (Varenne *et al* 2014) et leurs bibliographies.

### 3.1. *Le tournant formel*

Concentrons-nous d'abord sur ce qui peut apparaître à l'historien des modèles comme un des tournants majeurs de la modélisation, pour tout dire, comme étant le tournant qui a mis ou remis au premier plan les méthodes des modèles en sciences, à côté des pratiques expérimentales et des pratiques de théorisation : à savoir le tournant formel.

#### 3.1.1. *Sa nature*

Même si on en connaît des signes avant-coureurs dès les années 1880 et même si on peut en retrouver des préfigurations dans l'œuvre antérieure de Fourier ou, plus tard, dans la pratique de Faraday ou Maxwell, le tournant formel de la modélisation intervient massivement, et de manière représentative, autour des années 1920-1940. Il consiste non directement en une révolution ni en une modification radicale des types de fonctions attribuées aux modèles, mais plutôt dans un changement de la nature substantielle préférentielle des modèles, ce qui aura certes des effets - mais indirects - sur l'économie des fonctions des modèles et sur les interactions entre fonctions. Qu'ils soient descriptifs, théoriques, substitutifs ou de données, les modèles deviennent de plus en plus souvent formels, ce qui signifie de nature mathématique essentiellement (statistique, algébrique, analytique).

Le recours aux mathématiques pour concevoir des modèles a eu un premier effet, en dehors des relations entre modèles à proprement parler, à savoir un effet sur les relations entre théories et formalismes mathématiques. Jusqu'à l'essor des modèles formels, les formalismes mathématiques étaient préférentiellement employés pour concevoir des *théories* ou des *lois*, mais non des modèles<sup>10</sup>. Nous avons vu plus haut comment on peut définir une théorie et sa fonction épistémique, ou fonction de connaissance. Une loi, quant à elle, peut être définie comme la formulation d'une relation constante, nécessaire et universelle entre des phénomènes ou des propriétés de choses. Il est significatif de voir que, alors même que leur fonction épistémique n'est pas identique à celle des modèles<sup>11</sup>, bien des lois, du fait de leur nature souvent déjà formelle depuis longtemps (ainsi en est-il des lois dites de Kepler), ont été assez rapidement, entre les années 1920 et 1950, requalifiées et rebaptisées « modèles ». Ce fut principalement le cas pour les lois qui ne semblaient pas devoir s'accompagner d'une théorie susceptible de les fonder, de les déduire calculatoirement, au contraire des lois de Kepler qui peuvent être déduites par calcul de la théorie de Newton et qui ont pour cela, *a contrario* et donc significativement, conservé leur nom. Ce changement de nom affecta en revanche systématiquement

---

<sup>10</sup> (Varenne 2010a).

<sup>11</sup> Car l'énoncé d'une régularité censée affecter le monde naturel ou social n'est pas identique à la facilitation d'une médiation dans une enquête cognitive.

certaines autres lois comme les « lois » logistiques, de Lotka-Volterra, d'allométrie, de puissance, de Reilly (dite aujourd'hui « modèle gravitaire »). Toutes ces relations, qui furent donc initialement formulées au titre plein et entier de « lois », sont préférentiellement appelées « modèles » aujourd'hui, même si bien des scientifiques ignorent ou ont perdu le souvenir de cette requalification.

### 3.1.2. Ses conséquences

Le tournant formel eut pour première conséquence majeure ce que nous proposons d'appeler un *a-physicalisme* des modèles, c'est-à-dire un agnosticisme physique. Nous entendons désigner par là le fait que ce tournant a libéré les pratiques de modélisation traditionnelles en permettant une formalisation mathématique plus directe, sans nécessaire besoin de passer par la représentation et la formalisation préalable d'un substrat physique comme tel, avec ses lois. Il ne s'agit toutefois pas de nier l'existence du substrat physique ni même son influence mais, simplement, de ne pas se prononcer, dans le modèle, au sujet de son rôle : d'où cette analogie avec ce qu'on appelle un agnosticisme.

Cet *a-physicalisme* a causé en retour un assouplissement du rapport des modèles à la théorie puisque la théorie physique n'était plus d'emblée convoquée, mais qu'on pouvait au contraire utiliser la modélisation formelle pour explorer les théories possibles : la fonction n°10 devenait possible et même légitime. La possibilité de concevoir et manipuler des modèles formels dépourvus de théorie préalable pour les fonder devenait pensable, au sens où une théorie formelle impeccable prenant la forme d'un système formel axiomatisée peut effectivement provisoirement manquer. C'est là que certaines lois, encore purement phénoménologiques donc, purent nouvellement gagner le statut de modèles.

Un autre déplacement doit être signalé ici : comme la physique n'était plus le nécessaire fondement de la représentation formelle, les modèles pouvaient encore plus radicalement se libérer de leur lien avec l'amont, avec la théorie, pour se déterminer parfois exclusivement selon l'aval et ses demandes spécifiques, ce qui favorisait en retour l'essor des fonctions de description ou de pure prédiction, de compression de données, de médiation entre discours, ou encore de modèles pour l'action.

La formalisation des modèles a par contrecoup également ouvert la voie à une pluralité de formalismes, donc à une liberté nouvelle à l'intérieur même des choix possibles en mathématiques. Aux modèles de nature matérielle, par comparaison, s'imposait un nombre plus restreint de natures spécifiques, tout au plus quatre, au début du 20<sup>ème</sup> siècle : ils pouvaient être mécaniques, électriques, chimiques ou encore biologiques. Après le tournant formel, ils peuvent être géométriques, algébriques, analytiques, différentiels, intégrodifférentiels, statistiques, probabilistes (processus stochastiques), réticulaires (réseaux trophiques), à compartiments,

Franck Varenne

graphiques (théorie mathématique de graphes), topologiques (de topologie différentielle ou de topologie algébrique), etc.

Ainsi, la formalisation des modèles a permis une pluralisation des axiomatiques utilisées sans que soient toujours préférés par principe et sans discussions les formalismes jusque là majoritairement présents dans telle ou telle partie de la physique. Certains formalismes issus d'abord des sciences humaines - en statistiques exemplairement - ont ainsi pu migrer vers les modèles de la biologie et inversement sans nécessaire traduction intermédiaire dans un langage physicaliste.

À côté de cette pluralisation des axiomatiques a pu régner aussi et règne encore un *pluralisme de coexistence* entre modèles. Cela signifie qu'un même objet ou un même phénomène peut très bien être modélisé avec des formalismes différents et que cela ne conduit pas à une contradiction mais plutôt à une juxtaposition des modèles, à une coexistence pacifiée. On dit simplement que des aspects différents sont modélisés ou que des fonctions différentes en sont attendues. C'est devenu possible pour des modèles formels alors que si ces formalisations étaient encore considérées comme des lois ou des théories, cela aurait été bien plus difficile, du fait même de l'ambition épistémique unitaire, totalisante et exclusive qui accompagne en revanche aussi bien le concept de théorie que celui de loi.

### **3.2. Le tournant computationnel**

Avec cette expression de « tournant computationnel », nous entendons désigner l'ensemble des modifications des pratiques de modélisation liées à l'émergence puis à l'essor du *computer*, c'est-à-dire de la machine numérique programmable de type Turing puis Von Neumann (avec stockage en mémoire des données et des programmes) comme on en voit partout de nos jours.

#### *3.2.1. Quelques repères historiques*

Dans les années 1950, on observe d'abord d'une part le développement de simulations numériques de modèles mathématiques. Ces modèles sont discrétisés et traités ensuite de manière itérée et approchée pour permettre leur résolution. Des techniques semblables de résolution par discrétisation existaient déjà auparavant, notamment au 19<sup>ème</sup> siècle, en calcul des structures par exemple. Mais le computer en permet le traitement rapide et itéré.

Dans ces mêmes années, et même dès la fin des années 1940, se développent d'autre part les approches Monte Carlo, c'est-à-dire des approches de formalisation et de résolution de modèle formel présentant deux aspects essentiels mais différents : une approche centrée sur les individus et sur leur comportement individuel (neutrons, cellules, atomes, molécules, etc.), doublée d'une approche

recourant au hasard simulé (nombres pseudo-aléatoires) pour modéliser ce même comportement. Les techniques de dynamique moléculaire dites *ab initio* en seront issues, plus tard, en chimie. Elles seront nommées ainsi du fait de l'approche *bottom up* qui les caractérise.

Dans les années 1960-1980, à ces deux premiers types de simulation sur *computer* viennent s'ajouter des approches de modélisation et de simulation à fondement directement discret et à principe directement algorithmique : le *computer* - sa logique - devient ainsi lui-même l'inspirateur des formalismes et non seulement le simple outil qui les traite. La simulation se fait parfois ainsi à base de règles : on développe des modèles à grammaires génératives, des L-systèmes, des modèles logiques ou des modèles à automates de tous ordres. Ainsi en est-il des automates cellulaires, ces réseaux d'automates coexistant sur une grille, originellement proposés par Stanislaw Ulam. Ce déplacement de la logique de l'outil de traitement sur le formalisme traité lui-même a pour effet de solliciter, à leurs frontières, les mathématiques et de contribuer à augmenter encore le nombre des possibilités de formalisation, au-delà donc de la liste des classiques formalismes mathématiques.

Dans les années 1990, les langages de programmation continuent à diversifier leurs principes. Plusieurs langages apparaissent qui se révèlent toujours mieux adaptés à leur utilisation. Certains de ces langages se révèlent particulièrement efficaces dans la modélisation directe de systèmes complexes ou composites, cela parce qu'ils ne sont pas fondés sur une traduction préalable uniformisante de type mathématique ou logique. Ce sont les langages à programmation orientée objets. Le type de programmation qui les accompagne s'oppose à la programmation procédurale et impérative. Ils permettent la conception de modèle à base d'objets (informatiques) comme les systèmes multi-agents (SMA). À partir des années 1990, les modèles à SMA se développent considérablement en écologie, en sociologie, en économie, mais aussi en biologie du développement.

Depuis les années 2000, enfin, on peut dire que le tournant computationnel présente trois aspects majeurs : la pluralisation et la massification des flux de données, les nouvelles architectures de calcul, l'essor des techniques de simulation intégrative.

### 3.2.2. Ses conséquences

Une des conséquences du tournant computationnel, dont on a rappelé les multiples étapes et facettes, est que les simulations computationnelles qui, initialement, étaient au service des formalisations mathématiques se trouvent parfois dans la position hiérarchique inverse : ce sont de plus en plus les mathématiques qui sont au service de la simulation, de sa vérification, des identifications de ses paramètres, de sa calibration, du test de sa robustesse, etc.

Si bien que nous proposons de dire que ce tournant a pour principal effet de mener les modèles formels vers une étape nouvelle après celle d'un a-physicalisme, à savoir celle d'un *a-mathématisme*. Cela signifie qu'il n'est plus toujours besoin de concevoir préalablement tout modèle formel sous un format rigoureusement mathématique pour qu'il puisse être traitable ou utilisable par un computer, comme ce fut le cas à l'ère de la domination quasi-exclusive de langages de type FORTRAN (encore en usage cependant). On peut parfois concevoir un modèle computationnel direct, en se fondant sur l'ontologie formelle plus souple acceptée par le langage de programmation.

On assiste de fait à un essor des modèles formels dits « de simulation » (*simulation models*). Ces modèles favorisent les approches désagrégées et par individus et/ou par éléments le plus souvent spatialement situés. Les variables d'état  $y$  sont directement désagrégées au lieu d'être discrétisées après coup. On devrait alors plutôt les décrire désormais comme des simulations informatiques plutôt que comme des simulations numériques au sens étroit. Les approches de modélisation de type « modèles d'Ising » se multiplient et se diffusent au-delà de la physique du magnétisme. Dans ce type de modèle, rappelons qu'il s'agit de représenter explicitement les interactions de petits éléments au voisinage les uns des autres, interactions (magnétiques au départ) non toujours réductibles formellement par des moyens statistiques. Les approches lagrangiennes, par suivi de particules, sont de nouveau préférées aux approches eulériennes, par champs de vitesse. Les approches « Lego », brique par briques, semblent séduire de plus en plus de chercheurs pour la modélisation de dynamiques spatiales, de croissances ou de morphogénèses alors que leur principe même reste controversé selon les contextes. Le problème de la séparabilité des briques se pose crument, surtout pour la modélisation de systèmes vivants très intégrés comme un cerveau. Nous pouvons renvoyer ici à certaines des controverses internes au *Human Brain Project*. Il n'en demeure pas moins qu'une tendance forte existe : derrière les acronymes DEVS (Discrete Event System specification)<sup>12</sup>, ABM (Agent-Based Models)<sup>13</sup>, IBM (Individual-Based Models)<sup>14</sup>, il s'agit toujours de favoriser une approche discrète (discontinue) dès le départ, au besoin en se fondant sur une représentation quasi-iconique des éléments du système cible comme de leurs interactions.

Pour le cas des conséquences du tournant précédent, nous avons dit qu'on avait observé une pluralisation des axiomatiques mathématiques à disposition des modèles formels. Pour ce qui concerne le tournant computationnel, cette pluralisation s'est encore renforcée en permettant que se développe de nouveaux formalismes mathématiques d'abord, mais pas seulement : ainsi par exemple de la géométrie discrète ou numérique utilisée intensivement par les modélisateurs 3D, de

---

<sup>12</sup> (Zeigler *et al.* 2000).

<sup>13</sup> (Phan Amblard 2007).

<sup>14</sup> (Grimm 1999).

l'analyse combinatoire ou encore de la théorie des processus de ramification stochastiques. Nous avons dit pluralisation mathématique, mais pas seulement : des formalismes plus proches du traitement logique ou sémantique que proprement mathématique (comme des logiques alternatives) ont vu le jour également.

Par ailleurs, ce pluralisme n'est plus uniquement de coexistence, il devient parfois, et de manière clairement inédite, un pluralisme d'intégration. C'est-à-dire qu'un même modèle ou un même système de modèles formels peut simultanément prendre en charge, grâce à l'infrastructure formelle du langage de programmation et grâce au programme, une pluralité d'axiomatics formelles<sup>15</sup>. Ce qui est souvent recherché pour la modélisation multi-échelles. Pris de nouveau à la racine de ce qu'il est, à savoir une Machine de Turing approchée, on redécouvre que le computer permet avant tout l'intrication pas à pas de sous-modèles mathématiques au cours même de la computation<sup>16</sup>. Historiquement, comme résultat de cela, on observe qu'une alternance constructive dans les stratégies de modélisation se manifeste dans un nombre croissant de domaines : on y observe en effet une alternance entre pratiques de démathématisation et de mise en simulation des systèmes cibles (simuler informatiquement d'abord), d'une part, et pratiques de remathématisation, *i.e.* de reformulation mathématique synthétique du modèle de simulation antérieur (modéliser mathématiquement ensuite)<sup>17</sup>. Si bien que de plus en plus de stratégies de modélisation cherchent à modéliser des simulations. Elles recherchent la simplification mathématique *ex post* de modèles de simulation déjà existants mais devenus trop lourds pour le traitement ou le développement.

Parmi les autres conséquences frappantes, on peut signaler qu'un accent est de plus en plus mis sur les ontologies au détriment des seules théories. Les ontologies (systèmes de spécification de concepts et de leurs interactions mutuelles) sont en effet plus souples et sont pour cela de plus en plus recherchées dans les premiers temps d'un travail de modélisation. Elles sont clarifiantes, plus directes et plus ergonomiques du point de vue de la reconnexion avec les concepts disciplinaires que des concepts directement théoriques, cela sans imposer d'entrée de jeu une dynamique contraignante dans le système de simulation. Car, avec l'étape « ontologie » venant avant ou même sans la théorisation, la dynamique globale du système de simulation est séparée de l'énonciation de ses concepts formels : elle est déléguée de fait au programme et à la computation.

---

<sup>15</sup> (Varenne, 2007).

<sup>16</sup> Paraphrasant Pascal qui disait qu'un peu de science éloigne de Dieu mais que beaucoup y ramène, on pourrait dire qu'un peu de langage évolué éloigne de la machine de Turing et de sa généricité radicale, mais qu'un surcroît de langage évolué y ramène.

<sup>17</sup> (Varenne, 2007).

### **3.3. Bilan sur le siècle passé : les nouveaux sens du pluralisme**

Formons un rapide bilan des acquis principaux du siècle passé en matière de modélisation. On observe d'abord un mouvement de dématérialisation des modèles qui deviennent d'abord majoritairement mathématiques. Ce mouvement de dématérialisation a pour effet de conduire à une diversification et à une pluralisation très nette des mathématiques utilisables et donc utilisées, ainsi qu'à une coexistence de faits entre de nombreux modèles de natures formelles chaque fois différentes.

Cette pluralisation s'est ensuite encore accentuée avec le tournant computationnel. Elle a été telle qu'elle en vient aujourd'hui à prendre un autre aspect dès lors qu'elle mène parfois les formalismes aux lisières des mathématiques. Avec le *computer*, on peut en effet développer des modèles formels qui sont au-delà ou si l'on préfère en-deçà de formalisations mathématiques bien fondées et mono-axiomatisées.

Cette pluralisation pourrait confiner à un éclatement des approches si elle n'était en même temps corrigée par un vaste mouvement de formalisation intégrative aidée par le *computer*. À la faveur de la mise à disposition de langages de programmation plus souples, les modèles sont parfois remplacés par des systèmes de modèles formels (multi-modèles) permettant la prise en charge computationnelle, *i.e.* donc par le *computer* et son langage, de modèles multi-aspects, multi-échelles, multi-physiques, multi-processus et donc finalement de modèles de simulation à visée principalement intégrative.

Une des conséquences, on l'aura compris, est la complexification du modèle à quoi engage ce type de modélisation. Dès lors, un certain nombre de questions semblent appelées à être radicalement renouvelées dans leur portée : quelles sont les conséquences de ces changements considérables sur les fonctions des modèles elles-mêmes, sur leurs dynamiques, sur leurs rapports réciproques, sur leurs incompatibilités, voire sur leurs conditionnements mutuels ? La dernière section proposera quelques suggestions en termes de constats et d'analyses.

## **4. Les rapports entre les fonctions des modèles à l'ère computationnelle**

Nous évoquerons donc ici les conséquences des bouleversements récents que nous avons précédemment rapportés sur les rapports entre les fonctions des modèles. Nous le ferons en nous appuyant tour à tour sur chacune des trois interrogations majeures qui ont structuré le colloque « Modélisation : succès et limites » organisé par le CNRS et l'Académie des Technologies, en décembre 2016.

#### **4.1. Faut-il toujours plus de puissance de calcul ?**

##### *4.1.1. Ce qui plaide pour davantage de puissance de calcul*

Il faut d'abord comprendre que, dans les laboratoires comme dans les bureaux d'études, une solution computationnelle reste encore aujourd'hui souvent ce qu'elle a quasi-exclusivement été dès les années 1950 : une solution numérique. Une solution de traitement de modèle est numérique quand la discrétisation permet de remplacer une déduction formelle ou un calcul analytique non soluble par une numérisation suivie d'un grand nombre de computations pas à pas et effectuées à grande échelle, c'est-à-dire à un niveau inférieur à celui des variables d'état. Cet usage n'a jamais disparu, au contraire. Il s'est intensifié. Or, le nombre par unité de temps en est bien la clé. C'est pourquoi les usages du computer pour la conception et le traitement numérique de modèles formels n'ont jamais cessé d'exiger que des nombres toujours plus grands de nombres puissent être pris en compte et ce, avec des computations de plus en plus rapides. Une masse de calculs plus grande traitée en un temps plus court, c'est exactement la définition d'une augmentation de puissance de calcul.

Par ailleurs, avec ce que nous avons indiqué de la tendance plus récente - apparue sous l'effet du tournant computationnel - au développement parallèle des simulations multi-échelles, multi-physiques ou multi-aspects, il faut souligner que le nombre ne signifie plus uniquement la force brute de la répétition rapide et massive de computations simples sur des éléments ou des différences finis. Le nombre permet aussi d'aller dans le sens du « multi » et de l'intégration. Pour des automates cellulaires très vastes ou pour des systèmes multi-agents assez compliqués, la puissance de calcul reste aujourd'hui aussi une limitation importante, en particulier quand il s'agit de prendre en compte l'interaction non pas de plusieurs centaines mais de plusieurs milliers ou dizaines de milliers d'éléments : qu'on songe aux solutions de calcul en grille ou sur des processeurs graphiques, toujours plus utilisées. La puissance de calcul est donc favorable aussi à cette tendance à l'intégration qui a pu sembler pourtant, à ses débuts, aller dans le sens d'une économie de moyens computationnels.

Enfin, si l'on souhaite améliorer la réalisation des fonctions n°4 (analyse de données), n°5 (synthèse de données) ou n°7 (modèle phénoménologique, modèle prédictif) ou même encore la fonction n°19 ou 20 (modèle de décision ou d'action), la capacité à prendre en compte massivement des données elles-mêmes toujours plus massives est plus que jamais exigée et reste un facteur limitant important pour de futurs développements.

#### 4.1.2. *Ce qui plaide pour moins de puissance de calcul*

En revanche si l'on cherche à faire assurer au modèle la fonction n°9 (compréhension), il peut être tout à fait contre-productif de s'appuyer sur le calcul massif et le tout-simulation. Il faut au contraire tâcher de maintenir une compréhension du fonctionnement général du modèle sur la base de paramètres qui eux-mêmes doivent conserver un sens, et donc une identifiabilité, dans le domaine disciplinaire à l'étude. Si tel n'est plus le cas, si par exemple notre stratégie de modélisation nous a malgré nous conduits à recourir à des paramétrisations *ad hoc*, il faut chercher à remodeliser la simulation complexe en y retrouvant du sens. Il faut chercher à s'installer à une échelle méso et pas seulement micro. Il faut par exemple rechercher des faits stylisés ou, d'entrée de jeu, en partir<sup>18</sup>.

On pourrait également objecter que, même dans le cas où l'on veut ne faire assurer par le modèle que la fonction n°7 (description, prédiction, interpolation ou extrapolation), des problèmes de robustesse peuvent se présenter, en particulier si la formalisation du modèle amène à des non-linéarités. C'est-à-dire que le modèle peut être exagérément sensible aux légères variations de conditions initiales. Il devient alors difficile de l'utiliser sur le terrain, où l'estimation des conditions initiales restera approchée de fait, pour la fonction recherchée. Il faut donc davantage réfléchir aux formats même du modèle et à ses mécanismes plutôt que de ne faire confiance qu'à l'augmentation de la puissance de calcul pour résoudre ces problèmes de sensibilité, cela même si l'analyse de sensibilité recourt certes elle-même en amont à une forte puissance de calcul. La sensibilité à la forme du modèle (position d'un paramètre, type de traitement des échéances, des événements) doit aussi faire l'objet d'une réflexion approfondie car, avec une puissance de calcul non limitée, on peut toujours calibrer un modèle inutilisable ou absurde, comme on le rappelle souvent et à juste raison. Cette disponibilité d'une puissance de calcul bon marché peut inciter les chercheurs à ne plus nécessairement développer ces réflexions et à faire porter leur effort sur autre chose ; ce qui n'est pas souhaitable, on le comprend bien.

Une autre raison - fondamentale - pour laquelle la simple augmentation de la puissance de calcul n'est pas toujours désirable dans l'absolu est liée au fait que même si elle n'est pas au départ une fonction prioritairement recherchée dans une stratégie de modélisation, la fonction n°9 (compréhension) revient souvent et reste périodiquement demandée. Elle l'est en particulier dans les projets de modélisation de longue haleine, ne serait-ce justement que pour nous rendre toujours à même de trouver des solutions formelles alternatives face aux problèmes de robustesse éventuellement découverts par expérimentation numérique sur le modèle complexe initial. Mais la compréhension redevient périodiquement essentielle aussi pour des raisons techniques et pas seulement conceptuelles, même si ce point peut sembler

---

<sup>18</sup> (Banos Sanders 2013).

paradoxal. Expliquons-le un peu mieux. Plusieurs enquêtes historiques sur de récents modèles de simulation intégratifs montrent qu'il y a des problèmes toujours plus fréquents aujourd'hui liés à l'ajout et à l'intégration de modules formels nouveaux dans les infrastructures de simulation complexes déjà existantes<sup>19</sup>. Pour résoudre ces problèmes, les chercheurs et développeurs ont périodiquement besoin de comprendre de nouveau - ou au moins de donner un sens stabilisé et vérifiable - à ce qui se passe aux interfaces informatiques entre les sous-modèles ou modules du système de simulation intégrative<sup>20</sup>.

#### **4.2. Modèles simples ou modèles complexes ?**

##### *4.2.1. Le constat d'un changement certain*

On a compris, à partir des analyses précédentes, que le tournant computationnel s'accompagne d'un accroissement et d'une amélioration de l'*expressivité* des langages de programmation mais qu'il conduit, du même coup, à une diversification et une complexification des formalismes implémentables dans les programmes grâce à ces langages.

Comme conséquence de cela, un nouveau choix devient possible pour la modélisation, choix qui va en partie à l'encontre d'un discours épistémologique longtemps installé et dominant : le choix de la complexité. Ce choix de la complexité peut prendre plusieurs formes : soit on choisit de faire représenter au modèle plus de propriétés et donc on accroît sa représentation du détail en abaissant sa capacité d'idéalisation, soit on choisit de lui faire représenter simultanément des mécanismes plus nombreux, soit on choisit de lui faire représenter des mécanismes unitaires plus complexes en eux-mêmes (bouclages, couplages internes, couplages inter-niveaux, non-linéarités, etc.), soit encore on rend les mécanismes évolutifs et adaptatifs au cours de la computation et cela en informatique temps réel ou non. La récente querelle polie autour des approches KISS (Keep It Simple, Stupid!) *Vs.* KIDS (Keep It Descriptive, Stupid!) en sciences sociales computationnelles est représentative du déplacement et du renouvellement des options possibles en ce domaine<sup>21</sup>. Selon l'approche KIDS, en particulier, il n'est plus illégitime d'augmenter le nombre de paramètres mais on doit tout de même faire attention que chaque paramètre conserve une signification donc une valeur explicative directe.

---

<sup>19</sup> En manière de boutade, on peut dire que, dans le cas de ces modèles de simulation complexe et intégratif, le computer a périodiquement « besoin de comprendre ce qu'il fait » (Varenne, 2007 : 151).

<sup>20</sup> Ce problème du « handshaking » entre sous-modèles est soulevé par (Winsberg 2006).

<sup>21</sup> (Banos Sanders 2013) ; (Varenne 2010b).

Franck Varenne

Cette hésitation entre simplicité et complexité est ancienne et récurrente. On la tranche traditionnellement en se fondant sur des raisons de natures différentes. Nous proposerons ici une rapide classification de ces raisons afin de voir ce qui peut changer dans leurs pondérations relatives aujourd'hui.

#### 4.2.2. Raisons de l'appel à la simplicité

##### 4.2.2.1. Raisons métaphysiques

Une première raison métaphysique peut être dite ontologique. Elle s'inspire du rasoir d'Occam (14<sup>ème</sup> siècle) selon lequel, dans l'enquête cognitive, il ne faut pas multiplier les êtres - donc ici les paramètres - sans nécessité car la nature est certainement économe, en soi. Elle ne fait rien en vain disait déjà Aristote.

Une seconde raison métaphysique repose sur l'hypothèse souvent soutenue de l'intelligibilité de principe de la nature, intelligibilité par les hommes ou plus exactement - on dirait aujourd'hui, - par des esprits humains non aidés ou non augmentés. Selon cette hypothèse, comme la nature doit être intelligible par l'esprit humain non aidé et que l'esprit humain ne peut traiter en même temps plus de 5 à 7 items, il doit donc, exister quelques mécanismes causaux *majoritaires* derrière chaque phénomène : on a donc toujours raison de chercher à négliger, idéaliser ou abstraire. Cette idée - qui n'est en fait qu'une hypothèse optimiste anthropocentrée - fut encore explicitement soutenue par Stuart Mill (1843) au sujet de l'explication causale, pourtant si problématique, en sciences humaines et sociales.

##### 4.2.2.2. Raisons épistémiques

Une première raison épistémique - c'est-à-dire déterminée par la nature même de la connaissance cette fois-ci - consiste à dire que l'on doit toujours pouvoir continuer à comprendre ce que fait le modèle sinon dit-on souvent « la carte va être aussi complexe que le territoire » (allusion à une nouvelle de Borgès), ce qui est rejeté d'emblée comme inutile par l'opinion commune qui souvent confond allègrement les fonctions des modèles. Cette raison consiste donc à rendre la fonction n°9 (compréhension) absolument déterminante et toujours nécessaire pour toute modélisation, ce qui nous paraît aujourd'hui hautement contestable au regard des distinctions que nous avons proposées.

Une seconde raison épistémique tient à ce que Lenhard et Winsberg ont nommé le « holisme de confirmation »<sup>22</sup> : trop d'intrications dans les modèles de simulation intégratifs empêchent aussi bien la corroboration décisive que la réfutation cruciale de tel ou tel sous-modèle. C'est un problème proche de celui qui été soulevé par

---

<sup>22</sup> (Lenhard Winsberg 2010).

Pierre Duhem et Willard v. O. Quine. Mais on peut objecter que les techniques de validations croisées simultanées (*cross validations*) valables en particulier pour les modèles multi-échelles ou multi-aspects peuvent réduire considérablement ces effets systémiques et holistiques sans pour autant supposer que le modèle complexe ou composite développe une pure approche « Lego »<sup>23</sup>.

#### 4.2.2.3. Raisons techniques

Une première raison technique tient au fait qu'il faut éviter le surajustement (*over-fitting*) du fait de la sous-détermination des modèles par les données. Il faut donc au contraire rechercher plutôt des modèles simples parce que ce sont eux qui pourront proposer en même temps - si toutefois il en existe - une forme de généralité qui rendra la modèle robuste et utilisable assez largement.

Une seconde raison technique tient au fait qu'il peut être préférable de ne travailler que sur des modèles simples (au sens d'un modèle formel présentant un petit nombre de mécanismes éventuellement non linéaires) car c'est uniquement comme cela que l'on peut y maîtriser, en les comprenant en esprit, les émergences et les bifurcations ainsi que leurs effets.

#### 4.2.3. Raisons de l'appel à la complexification

##### 4.2.3.1. Raison épistémique

Une raison épistémique - cette fois-ci en faveur de la complexification - tient au fait que même pour faire assurer au modèle la fonction n°5 (synthèse de données) ou n°7 (reproduction virtuelle du terrain, reconstruction phénoménologique d'organisme ou d'organe complet en croissance, etc.), il peut être nécessaire de concevoir un modèle détaillé, plus fidèle en cela à l'hétérogénéité constitutive du terrain, ce niveau de détail ne pouvant pas toujours être commodément ni utilement resynthétisé par des formules mathématiques abrégées et génératives. C'est le cas par exemple lorsque l'on couple une scène numérisée complexe ou même un SIG (un système d'information géographique) avec un modèle explicatif de comportement simple ou complexe pour les individus évoluant dans cette scène ou sur ce terrain virtuel.

##### 4.2.3.2. Raisons techniques

Une première raison technique repose sur un constat fait à l'issue de certaines enquêtes historiques, comme nous l'avons déjà évoqué. Ces enquêtes montrent qu'il est parfois nécessaire aux modélisateurs de simuler de manière complexe un système

---

<sup>23</sup> (Varenne 2013).

Franck Varenne

cible lui-même complexe avant d'espérer pouvoir éventuellement le modéliser de façon élégante et ramassée conceptuellement<sup>24</sup>.

Une deuxième raison technique réside dans le fait qu'une approche « Lego » est plus souvent possible qu'on ne le croit, en particulier lorsque les couplages ou les causalités descendantes et ascendantes sont faibles ou inexistantes. Quand on modélise un système compliqué parce que composite, on ne cherche pas forcément les non-linéarités et les émergences. Ainsi, il peut ne pas y en avoir du tout, comme c'est le cas de nombreux systèmes artificiels seulement compliqués, non complexes au sens strict<sup>25</sup>.

Enfin une troisième raison peut résider dans le constat que, même si on se trouve face à des émergences inter-échelles, le modèle multi-échelles en question reste souvent calibrable par morceaux et ainsi contrôlable par des processus de validation soit séparés et locaux, soit encore simultanés et croisés<sup>26</sup>.

#### ***4.3. La modélisation : vecteur de dialogue entre la recherche académique et l'industrie ?***

La modélisation est-elle un promoteur d'expansion, de libération et de potentialisation mutuelle pour la recherche académique et l'industrie ou bien est-elle plutôt un facteur d'asservissement ? Dès les années 1960, la pratique de la modélisation a été régulièrement accusée de promouvoir un asservissement de la recherche académique aux objectifs de l'industrie<sup>27</sup>. Une science qui ne procède plus que par modèles et qui semble renoncer par là aux théories présente pour certains le visage d'une connaissance dévoyée parce qu'irréremédiablement ciblée et intéressée, de fait déterminée par l'intérêt plutôt particulier que général. D'un autre côté, l'essor de la pratique de la modélisation dans les sciences, et pas seulement dans les techniques et dans les technologies, semble opportunément enseigner aux scientifiques une modestie épistémologique de bonne méthode, en même temps qu'une ouverture inédite - on l'a longuement décrite plus haut - à un pluralisme des possibles formels. Il y a donc à prendre des deux côtés. Le débat n'est pas aisé à trancher, on s'en doute. Nous ne pourrions là aussi que formuler quelques idées succinctes tant la question est considérable et ne peut être traitée en quelques lignes.

---

<sup>24</sup> (Varenne 2007).

<sup>25</sup> Un système est souvent dit complexe au sens strict quand il consiste en un grand nombre d'entités en interaction, dont le pattern résultant (propriété globale) n'est pas anticipable à partir de la seule connaissance des lois de comportements de chaque entité.

<sup>26</sup> (Moss Edmonds 2005) ; (Varenne 2013).

<sup>27</sup> Par des philosophes au premier chef.

#### 4.3.1. *Évolutions dans l'ingénierie*

Rappelons d'abord très succinctement que la pratique de la modélisation est immémoriale dans les premières formes de l'ingénierie. Les historiens ont bien montré qu'on repère un recours très ancien aux modèles matériels, dès l'Antiquité au moins, cela pour résoudre des problèmes techniques relativement concrets, sur la base de maquettes ou de substituts matériels de tous ordres<sup>28</sup>. Aux époques médiévales et modernes, les modèles matériels sont également employés à cette fin, en particulier rappelle Hélène Vérin, pour « assurer la monstration des effets »<sup>29</sup>.

Quelles sont donc les nouveautés concernant les usages des modèles dans l'ingénierie contemporaine ? Une première nouveauté consiste dans l'amplification toujours plus considérable « pour la monstration des effets » justement des fonctions n°5 (modèles de données) et n°7 (modèles prédictifs) à la faveur du tournant formel puis du tournant computationnel.

L'essai de mécanismes possibles ou alternatifs a également été rendu bien moins cher et plus accessible aussi à partir de ces tournants : la fonction n°8 (explication) a été amplifiée et a de plus en plus permis de tester les objets conçus en amont de la conception matérielle des prototypes. Le prototypage formel puis computationnel a pu devenir la règle.

Une autre nouveauté tient au fait que cela est devenu aussi une affaire d'ingénieur et de modélisateur de savoir comment tordre les théories académiques formellement (par modèles) pour les rendre applicables (fonction n°14), pour les hybrider (fonction n°15) mais aussi pour décider parfois sans elles d'une action urgente (fonction n°20).

Concernant la conception d'objets, le tournant computationnel spécifiquement a permis des couplages inédits de fonctions des modèles. Prenons un seul exemple : il a permis entre autres un couplage de la fonction n°3 (expérimentation déléguée) et de la fonction n°6 (modèle conceptuel). Ainsi, l'ingénieur-modélisateur peut-il expérimenter directement sur des concepts ou sur des objets typés.

Les conséquences de ces évolutions sont importantes. On leur doit en particulier une diversification et une intensification des dimensions de dialogue constructif entre les méthodes académiques et les méthodes de recherche et de développement industriels. Les espaces d'expérimentations d'objets futurs ressemblent de plus en plus à des espaces de recherches de théorie ou de mécanismes explicatifs. C'est non seulement la conception mais aussi l'innovation qui est assistée par le computer

---

<sup>28</sup> Ian Hacking (Hacking 1983), après plusieurs anthropologues, a rappelé opportunément que la pratique préhistorique et antique de la modélisation n'était pas sans rapport aussi avec les différents usages de figurations, figurines ou effigies de tout type dans les religions : un modèle sert aussi à résoudre des problèmes d'ordre religieux ou esthétique, bien sûr, ne l'oublions pas.

<sup>29</sup> (Vérin 1993).

(IAO), en particulier sur la base des techniques de réalité virtuelle ou de réalité augmentée, mais pas seulement. Car les modèles de simulation intégratifs favorisent en outre les couplages de modèles à statuts épistémiques nettement différents : comme le couplage du prospectif et du descriptif, de l'évaluatif (ou du normatif) et du physiquement déterminé. C'est aujourd'hui souvent le cas pour un projet de design ou pour un projet urbanistique par exemple ou encore pour un projet de conception architecturale.

#### 4.3.2. *Dialogues inter-disciplines et inter-champs*

On a décrit plus haut la convergence qui pouvait être réalisée, dans les modèles de simulation intégratifs, entre différents types de formalismes. Cette convergence, nous la décrivons comme agrégante plutôt que comme absorbante<sup>30</sup>. Cela signifie qu'une telle convergence ne se fait plus au profit d'un seul formalisme auquel tous les autres devraient préalablement se réduire ou dans lequel les autres devraient se traduire. Cette possibilité, nouvelle dans la modélisation formelle, fait beaucoup pour rapprocher les techniques académiques de conceptualisation des techniques industrielles de conception. Aux interfaces multiples, on voit ainsi se développer un pluralisme d'intégration. La pluriformalisation de certains modèles complexes permet que des disciplines diverses (physiologie, génétique, physique, chimie) voire des champs divers (SHS, mathématiques et sciences formelles, sciences de la matière, sciences de la vie, sciences de l'ingénieur) collaborent sans que l'une de ces disciplines ou que l'un de ces champs soit nécessairement dominant ou impose une réduction préalable de tous les autres dans son langage et dans sa théorie.

Par ailleurs, l'ergonomie des nouveaux formalismes, dont ceux mobilisés préférentiellement par les approches de modélisation à agents ou individus-centrées, permet un regain de pertinence, de précision et d'efficacité dans les pratiques de modélisation d'accompagnement ou participative (fonctions des modèles n°16, 17, et 18). De nouveaux savoirs constitués, jusque là rétifs à la modélisation formelle, peuvent s'associer étroitement, et de manière cette fois-ci opérationnelle, aux sciences plus traditionnelles et par là démultiplier leurs prises sur le réel ou encore leurs angles d'analyse et leurs questionnements.

Enfin, il apparaît une complexité nouvelle, problématique, mais en elle-même féconde : c'est celle qui ressort de la combinaison des fonctions de connaissance des modèles. Ainsi, les fonctions de connaissance globales d'un modèle de simulation intégratif ne sont pas toujours déductibles trivialement des fonctions particulières de chacun des sous-modèles qui contribuent au modèle de simulation global. En particulier, il arrive que des modèles que l'on dit tirés des données (*data-driven*) soient couplés à des modèles tirés de concepts ou de théories (*concepts-driven*) : le produit final mêle des connaissances empiriques et des connaissances plus

---

<sup>30</sup> (Varenne 2007).

théoriques, mais toutefois pas pour les mêmes aspects ni pour les mêmes éléments du système cible. Le statut épistémique du modèle résultant reste donc problématique *a priori* si l'on n'en sait pas davantage sur les techniques de calibration employées ou sur les analyses de sensibilité, sensibilité aussi bien aux conditions initiales qu'à la variation des formes mêmes du modèle global.

## 5. Conclusion

Ce chapitre est parti d'un état des lieux classificatoire se concentrant principalement sur la variété - jugée grande mais toutefois assignable et compréhensible - des fonctions des modèles. Il s'est ensuite focalisé sur deux événements historiques majeurs intervenus dans les huit dernières décennies et ayant fortement affecté les pratiques de modélisation traditionnelles : le tournant formel et le tournant computationnel. Il a enfin tâché de donner quelque idée des conséquences de ces bouleversements quant à trois grandes questions de principes que nous pouvons soulever aujourd'hui concernant la modélisation, cela en restant attentifs aux développements différentiels des fonctions des modèles déjà exposées au début, comme à l'évolution de leurs relations mutuelles.

Au final, on peut dire que l'on constate une pluralisation mais aussi une interaction à la fois croissante et complexifiée des fonctions des modèles à l'ère computationnelle. À côté de la vague des données massives (*big data*) qui pose des problèmes épistémologiques d'un type proche mais différent, ce chapitre a essayé de montrer qu'il existe aujourd'hui des innovations méthodologiques décisives mais beaucoup moins médiatiques, qui se font à bas bruit donc. Il s'agit notamment de ce tricotage serré des fonctions rendu nouvellement possible par la modélisation et la simulation intégratives. On y repère une combinatoire complexe mais qui se révèle toutefois élucidable si l'on dispose des bons concepts. Cette combinatoire est telle qu'il paraît encore moins possible que par le passé de prétendre répondre unilatéralement et *a priori* aux questions de savoir ce qu'il faut préférer : l'augmentation de la puissance de calcul ou pas, un modèle simple ou pas, une recherche académique « pure » ou pas ?

Comme on le verra sans doute dans les autres chapitres de cet ouvrage, ces trois questions admettent des réponses variables selon les contextes et selon les fonctions des modèles prioritairement recherchées. Nous avons essayé de montrer que cette variabilité ne nous condamne toutefois pas à un relativisme complet des méthodes et des normes de la modélisation, mais qu'elle nous engage à un contextualisme informé doublé d'un perspectivisme explicite, tous deux conformes à la caractérisation du modèle que Minsky proposait dès 1965. Finalement, de toute cette enquête, il résulte cette idée que les méthodes de modélisation, au-delà de leur

Franck Varenne

diversité et de leur évolutivité, possèdent une complémentarité à la fois rationnelle et conceptuellement explicable. La méthode scientifique, y compris quand elle recourt au modèle, ne manque donc pas d'unité, même si cette unité n'est pas aussi évidemment ni médiatiquement perceptible que pour d'autres pratiques.

## 6. Bibliographie

*Avertissement : cette bibliographie est une esquisse. Elle reste tout à fait sommaire au vu de l'ampleur du sujet qui n'a pu être ici qu'évoqué (histoire de la modélisation). Elle doit être complétée par les bibliographies des autres auteurs de cet ouvrage comme aussi par les bibliographies des ouvrages cités ci-dessous.*

Aglietta, M., *Macroéconomie financière*, Paris, La Découverte, 2008.

Banos, A., Sanders, L., « Modéliser et simuler les systèmes spatiaux en géographie », *Modéliser & simuler. Épistémologies et pratiques de la modélisation et de la simulation – Tome 1, vol. 2*, Paris, Éditions Matériologiques, 2013, p. 839-869.

Delattre, P. & Thellier, M., *Elaboration et justification des modèles*, Paris, Maloine, 1979.

Grimm, V., “Ten years of individual-based modelling in ecology: what have we learned, and what could we learn in the future?”, *Ecological Modelling*, 1999, 115, p. 129–148.

Hacking, I., *Representing and Intervening*, Cambridge (UK, Cambridge University Press, 1983.

Kieken, H., « RAINS : Modéliser les pollutions atmosphériques pour la négociation internationale », *Revue d'histoire des sciences*, 2004, Tome 57, vol. 2, p. 379-408

Legay, J. M., *L'expérience et le modèle. Un discours sur la méthode*, Paris, INRA éditions, 1997.

Lenhard, J., Winsberg, E., “Holism, entrenchment, and the future of climate model pluralism”, *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, 2010, 41, p. 253-262.

Levy, J.M. (dir.), *Les modèles, possibilités et limites*, Paris, Éditions Matériologiques, 2014.

MacKenzie, D. A., “Models of Markets: Finance theory and the historical sociology of arbitrage”, *Revue d'histoire des sciences*, 2004, Tome 57, vol. 2, 407-431

Minsky, M., “Matter, Mind and Models”, *Proc. of the IFIP Congress*, 1965, p. 45-49.

Moss S., Edmonds B., “Sociology and Simulation: Statistical and Qualitative Cross-Validation”, *American Journal of Sociology*, 2005, 110(4), p. 1095-1131.

Pavé, A., *Modélisation en biologie et en écologie*, Lyon, Aléas, 1994.

Phan D., Amblard, F., *Agent-based Modelling and Simulation in the Social and Human Sciences*, Oxford, The Bardwell Press, 2007.

Varenne, F., *Du modèle à la simulation informatique*, Paris, Vrin, 2007.

Franck Varenne

- Varenne, F., *Formaliser le vivant : lois, théories, modèles ?*, Paris, Hermann, 2010.
- Varenne, F., « Les simulations computationnelles dans les sciences sociales », *Nouvelles Perspectives en Sciences Sociales*, 5 (2), 2010, p. 17-49.
- Varenne, F., "Chains of Reference in Computer Simulations", working paper publié par la FMSH, FMSH-WP-2013-51, GeWoP-4, 2013.
- Varenne, F., « Modèles et simulations dans l'enquête scientifique : variétés traditionnelles et mutations contemporaines », *Modéliser & simuler. Épistémologies et pratiques de la modélisation et de la simulation - Tome 1*, F. Varenne et M. Silberstein (dir.), Paris, Éditions Matériologiques, 2013, vol. 1, pp. 9-47.
- Varenne, F., « Épistémologie des modèles et des simulations : tour d'horizon et tendances », *Les modèles, possibilités et limites*, J.M. Levy (dir.), Paris, Éditions Matériologiques, 2014, pp. 13-46.
- Varenne, F., Silberstein M. (dir.), *Modéliser & simuler. Épistémologies et pratiques de la modélisation et de la simulation – Tome 1, vol. 1 & 2*, Paris, Éditions Matériologiques, 2013.
- Varenne, F., Silberstein M., Dutreuil, S., Huneman, P. (dir.), *Modéliser & simuler. Épistémologies et pratiques de la modélisation et de la simulation - Tome 2*, Paris, Éditions Matériologiques, 2014.
- Vérin, H., *La gloire des ingénieurs. L'intelligence technique du XVIème au XVIIIème siècle*, Paris, Albin Michel, 1993.
- Winsberg, E., "Handshaking Your Way to the Top: Simulation at the Nanoscale", *Philosophy of Science*, Vol. 73, No. 5, December 2006, p. 582-594.
- Zeigler, B. P., Praehofer, H., Kim Tag, G., *Theory of Modeling and Simulation. Integrating Discrete Event and Continuous Complex Dynamic Systems*, 2000, 2nd edition, New York, Academic Press.



# Les algorithmes et la puissance de calcul dans les techniques de prévision pour les géosciences en grande dimension vus sous l'angle de l'optimisation mathématique

S. Gratton<sup>\*</sup>, S. Gürol<sup>†</sup>, E. Simon<sup>‡</sup> and Ph. L. Toint<sup>§</sup>

## 1 Les hypothèses sous-jacentes au problème de prévision

### 1.1 La prévision de l'état d'un système dynamique issu des Géosciences

Les problèmes de prévision dans les géosciences sont multiples et importants. Les enjeux applicatifs en sont extrêmement nombreux et bien connus de tous, qu'il s'agisse notamment de la prévision dans les domaines météorologiques, océanographiques, ou en neutronique, pour ne citer que quelques exemples.

Nous décrivons ici les principaux ingrédients rencontrés dans un système de prévision Géophysique, en empruntant principalement des dénominations issus de la prévision numérique du temps [13, 38]. L'objectif peut-être de déterminer, voire de prédire, l'état d'un système dont le comportement peut-être décrit par des équations mathématiques formalisant des relations entre des variables d'état du système et leurs dérivées. Il peut aussi s'agir d'utiliser de telles équations pour mieux comprendre les propriétés de certains système physiques, notamment dans le cadre de ré-analyses de situations passées. Ces équations modélisent des relations de la physique mathématique, comme la relation fondamentale de la dynamique, ou la conservation de quantités telles que la masse. Appelées *équations du modèle*, ces équations sont considérées comme une bonne approximation de la réalité du phénomène physique observé, et les résoudre permet d'obtenir les états du système sur une fenêtre temporelle donnée. Pour

---

<sup>\*</sup>Université de Toulouse, INP, IRIT, Toulouse, France. Email: serge.gratton@enseeiht.fr

<sup>†</sup>CERFACS, Toulouse, France. Email: selime.gurol@cerfacs.fr

<sup>‡</sup>Université de Toulouse, INP, IRIT, Toulouse, France. Email: ehouarn.simon@enseeiht.fr

<sup>§</sup>NAXYS, University of Namur, Namur, Belgium. Email: philippe.toint@unamur.be

fixer les idées, les variables d'état d'un système sont des quantités physiques, pouvant être par exemple des champs de vitesse, de pression, de densité ou de température d'un fluide. Le système dynamique peut par exemple résulter des équations de Navier-Stokes dans le cas de la prévision numérique du temps.

Malheureusement les représentations disponibles des systèmes dynamiques en jeu ne permettent pas de réaliser des prévisions sur de (suffisamment) longues périodes temporelles, pour un certain nombre de raisons. La plus fondamentale d'entre elles résulte de la nature chaotique des systèmes considérés : lorsque la trajectoire d'un système est simulée à partir d'une certaine condition initiale, l'état à un instant donné caractéristique de l'équation considérée présente une forte dépendance à la condition initiale, ce qui nécessite une connaissance très précise de celle-ci, souvent difficile, voire impossible à obtenir. Une autre raison est la nature approchée des modèles utilisés pour représenter la physique, qui ne représente que d'une manière imparfaite la réalité. Une troisième consiste dans le fait que les équations mathématiques sont écrites avec des variables continues, que les champs physiques recherchés sont eux même des fonctions de ces variables, et qu'il est nécessaire de réaliser des approximations discrètes de ces équations pour les résoudre sur ordinateur.

Une démarche adoptée de longue date, que l'on pourrait faire remonter aux travaux de Gauss du début du 19<sup>ème</sup> siècle, consiste à utiliser, en plus des modèles dynamiques précités des *observations* pour recalculer périodiquement les prédictions à la réalité. Ce procédé fécond connu sous la dénomination d'"assimilation de données", a été l'objet de progrès qualitatifs importants ; l'approche actuellement utilisée s'appuie fortement sur les travaux autour du filtre de Kalman introduit dans le milieu du 20<sup>ème</sup> siècle, et sur des évolutions ayant permis de le rendre utilisable pour des problèmes de grande dimension, qui se retrouvent sous la domination d'"assimilation variationnelle de données".

## 1.2 Modélisation variationnelle du problème

L'approche sur laquelle nous allons nous focaliser repose dans sa version la plus simple sur le problème d'estimation d'un état  $x_0$  à l'instant  $t_0$  à partir de  $m$  observations  $y_i, i = 1 \dots m$ , réalisées par des dispositifs terrestres ou satellitaires. Le système dynamique est représenté par un opérateur de résolution non linéaire  $\mathcal{M}_i$  tel que l'état  $x_i$  à un instant  $t_i$  est obtenue par l'évaluation  $x_i = \mathcal{M}_i(x_0)$ . Les observations  $y_i$  à l'instant  $t_i$  sont obtenues à partir de la connaissance de l'état du système  $x_i$  grâce à un opérateur  $\mathcal{H}$ , dit d'observation, non linéaire dans le cas général. Cet opérateur permet de reconstruire une approximation de  $y_i$  de la forme  $\mathcal{H}(x_i)$ . Un décompte du nombre d'inconnues (appelé aussi nombre de degré de libertés du problème) par rapport au nombre d'observations disponibles révèle souvent la nature sous-déterminée du problème. Il faut alors ajouter une information qualifiée d'*a priori* pour pallier cette déficience. Une approche répandue consiste alors à introduire une connaissance approchée de l'état  $x_0$ , par exemple obtenue suite à un exercice de prévision mené sur des données passées.

Le cadre mathématique permettant de construire cette approximation repose

aussi sur la modélisation des erreurs de mesures et d'*a priori*. Lorsque celles-ci sont supposées Gaussiennes non biaisées, et de matrices de variances-covariances respectives  $R$  et  $B$ , le problème d'estimation de  $x_0$  prend la forme du problème d'optimisation suivant [8, 12] :

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \frac{1}{2} \|x - x_b\|_{B^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=0}^N \|\mathcal{H}_j(\mathcal{M}_j(x)) - y_j\|_{R_j^{-1}}^2 \quad (1)$$

où

- $x \equiv x(t_0)$  est la variable de contrôle dans  $\mathbb{R}^n$ ,
- $\mathcal{M}_j$  est l'opérateur de modèle :  $x(t_j) = \mathcal{M}_j(x(t_0))$ ,
- $\mathcal{H}_j$  est l'opérateur d'observation :  $y_j \approx \mathcal{H}_j(x(t_j))$ ,
- les observations  $y_j$  et l'*a priori*  $x_b$  sont bruités,
- $R_j$  et  $B$  sont les matrices de variance-covariance associées à ces bruits Gaussiens de moyenne nulle.

Ce problème est un défi en soi, compte tenu de la dimension de l'espace de recherche où vit la variable  $x$  (plusieurs millions, dizaines ou centaines de millions de degrés de liberté) et de part la non linéarité des opérateurs  $\mathcal{M}$  et  $\mathcal{H}$  intervenant dans la fonction à minimiser. Des stratégies innovantes sont à explorer pour rendre cette minimisation possible dans des temps de calcul qui sont bien inférieurs au temps d'écoulement du phénomène physique observé, comme le réclame l'exercice de prévision. L'utilisation de calculateurs permettant *un parallélisme massif* est alors nécessaire pour des applications de la vie quotidienne telles que la prévision numérique du temps, l'approche la plus répandue reposant sur une *décomposition dans le domaine spatial* ayant pour but une répartition équilibrée des calculs entre les différents processeurs ou coeurs des architectures de calcul.

## 2 Les algorithmes classiques d'optimisation pour l'assimilation des données variationnelle

### 2.1 Les algorithmes variationnels primaux et duaux

Le problème d'optimisation (1) représente un challenge important en soi en raison de la magnitude de  $n$ . Les méthodes traditionnellement employées sont des variantes de la méthode de Gauss-Newton ([27]). Dans ce type de méthode, une approximation de la fonction  $f$  est réalisée autour d'un itéré  $x^{(k)}$  de la méthode par linéarisation des quantités figurant dans la norme  $\|\bullet\|_{R_j^{-1}}^2$ , ce qui conduit à un processus itératif  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \delta x^{(k)}$ , où  $\delta x^{(k)}$  est solution du problème aux moindres carrés *linéaires* noté

$$\min_{\delta x^{(k)} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\delta x^{(k)} - (x_b - x^{(k)})\|_{B^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \left\| H^{(k)} \delta x^{(k)} - d^{(k)} \right\|_{R^{-1}}^2. \quad (2)$$

Une formule explicite  $\delta x^{(k)} = (B^{-1} + H^{(k)T} R^{-1} H^{(k)})^{-1} [H^{(k)T} R^{-1} d^{(k)} + B^{-1}(x_b - x^{(k)})]$  est disponible pour le problème (2), mais cette formule n'est pas utilisable

en pratique car trop coûteuse en ressource de calcul : il s'agirait de résoudre un système linéaire d'ordre  $n$ , avec  $n$  grand, alors que la matrice du système n'est disponible que par l'intermédiaire de son action sur un vecteur dans les applications concernées. Fort heureusement, la théorie des régions de confiance montre qu'il n'est pas nécessaire de résoudre (2) avec précision, mais que la solution approximative réalisant une décroissance de Cauchy [10] permet d'obtenir une convergence du processus non linéaire pour la méthode de Gauss-Newton. C'est cette méthode qui est retenue en pratique, la solution approximative étant obtenue par un algorithme de gradients conjugués, éventuellement accéléré (on parle de préconditionnement) par des techniques issues des approximations quasi-Newton d'une matrice symétrique [50, 30]. Ces stratégies d'accélération sont absolument cruciales pour rendre la méthode utilisable en lui permettant d'atteindre des solutions approchées de qualité en peu d'itérations dans les problèmes de grande taille considérés.

En utilisant par exemple la théorie de la dualité, il est aussi possible de montrer que  $\delta x^{(k)}$  peut aussi être obtenu grâce à l'expression alternative mathématiquement équivalente  $\delta x^{(k)} = BH^{(k)T}(H^{(k)}BH^{(k)T} + R)^{-1}(d^{(k)} - H^{(k)}(x_b - x^{(k)}))$ . L'avantage de cette formule est que le système à résoudre a pour ordre le nombre d'observations et non le nombre  $n$  d'inconnues [1, 2, 12, 14, 32], ce qui présente un avantage certain lorsque le premier est bien inférieur au second. Ce système peut aussi être résolu itérativement, et une décroissance de Cauchy peut être obtenue au prix d'une utilisation d'un produit scalaire adapté dans la méthode des gradients conjugués dans un algorithme connu sous le nom de RPCG [32, 31, 25]. Cette méthode peut aussi être accélérée par des méthodes quasi-Newton [24], ce qui, comme précédemment, est crucial pour la performance de la méthode sur ordinateur.

## 2.2 La prise en compte de l'erreur modèle

Dans le formalisme ci-dessus, le système dynamique est supposé connu sur l'intervalle d'assimilation des mesures  $y_i$  ce qui peut s'avérer être une hypothèse trop forte, qu'il est souhaitable de relaxer. De même, le problème d'optimisation (1) repose crucialement sur la connaissance des quantités  $(x_b, B)$  qui n'est pas toujours disponible avec la précision requise, ce qui invite à réaliser des assimilations longues permettant d'atténuer le rôle de cet *a priori* sur la solution. Ces deux raisons conduisent à considérer que le système dynamique soit à présent décrit par la relation aux différences stochastiques  $x(t_j) = \mathcal{M}_j(x(t_0)) + \epsilon_i$  où  $\epsilon_i$  suit une loi Gaussienne de moyenne nulle et de matrice de variance-covariance  $Q_i$ . Une telle équation provient par exemple de la discrétisation temporelle d'une équation différentielle stochastique [44]. La prise en compte de cette modélisation conduit alors au problème d'optimisation dit à contrainte faibles [48, 49]

$$\min_{x_0, \dots, x_N \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|x_0 - x_b\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=0}^N \|\mathcal{H}_j(x_j) - y_j\|_{\mathbf{R}_j^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \|x_j - \mathcal{M}_j(x_{j-1})\|_{\mathbf{Q}_j^{-1}}^2.$$

Ce type de problème ressemble fortement au problème (1), puisqu'il s'agit à nouveau d'une somme de carrés de normes. Il est toutefois à signaler que l'optimisation a cette fois lieu sur un ensemble de variables bien plus grand ( $N$  vecteurs  $x_i$  plutôt que un seul) que le problème vu dans la section (2.1), ce qui rend encore plus importante l'utilisation de méthodes d'optimisation performantes et de machines de calcul adaptées. La stratégie envisagée pour la résolution repose *in fine* sur une stratégie de Gauss-Newton dans laquelle une linéarisation des termes apparaissant dans les normes est réalisée pour donner lieu à la résolution d'une séquence de problèmes quadratiques [20, 21]

$$\min_{(\delta p, \delta w)} \frac{1}{2} \|\delta p - b\|_{D^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \|\delta w - d\|_{R^{-1}}^2$$

sous la contrainte  $\delta p = L\delta x$  and  $\delta w = H\delta x$ .

Dans cette formulation le premier terme prend en compte l'*a priori* et l'erreur de modèle, tandis que le second terme représente l'erreur d'observation. La matrice  $L$  est constituée d'opérateurs d'intégration des modèles linéarisés sur des sous-fenêtres, c'est à dire,

$$L = \begin{bmatrix} I & & & & & \\ -M_1 & I & & & & \\ & -M_2 & I & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & -M_N & I & \end{bmatrix},$$

où chaque matrice représente une intégration du modèle linéarisé sur un intervalle de temps  $[t_j, t_{j+1}]$ . Le succès de la méthode repose comme précédemment sur la capacité à trouver des techniques efficaces pour résoudre ce problème quadratique. La résolution directe du problème par les techniques de la section 1.2 est possible [25]. Plus de détails concernant la prise en compte de l'erreur modèle dans l'algorithme 4D-Var peuvent être obtenus dans les références [3, 16, 48, 49, 51, 52, 53]. Un point essentiel pour le succès applicatif de ces méthodes est d'introduire un *parallélisme en temps*, rendu possible de part la structure en sous-fenêtres temporelles du problème explicité dans la structure de la matrice  $L$  ci-dessus. Ce parallélisme en temps s'ajoute au parallélisme en espace traditionnellement utilisé, pour donner lieu à des algorithmes adaptés au parallélisme massif.

### 2.3 Parallélisation de l'algorithme 4D-Var à contraintes faibles

Plus récemment, une approche basée sur une méthode de Lagrangian Augmenté [43] a été proposée et permet une parallélisation en temps de l'algorithme 4D-Var (1). En ce qui concerne l'algorithme 4D-Var dit à contraintes faibles, nous présentons ici un point de vue différent sur le problème et qui a récemment

permis d'obtenir des résultats encourageants. En écrivant les conditions d'optimalités de Karush-Kuhn-Tucker, le problème se ramène à un problème de point de selle en grande dimension (voir [21, 20] pour les détails de la dérivation) :

$$\begin{pmatrix} D & 0 & L \\ 0 & R & H \\ L^T & H^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \\ \delta x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ d \\ 0 \end{pmatrix}$$

Une technique d'accélération prometteuse pour la résolution de ce système est basée sur des approximations de l'action de l'opérateur  $L^{-1}$  sur des champs physiques. Il est alors possible de montrer que cette méthode est susceptible d'introduire un degré de parallélisme intéressant ce qui permettrait d'exploiter efficacement les calculateurs parallèles actuels [23]. Il est à noter que l'utilisation de problème de point de selle a été évoquée à l'origine dans [37] comme une manière d'introduire du parallélisme dans le calcul des dérivées en assimilation variationnelle de données.

## 3 Vers une nouvelle génération d'algorithmes pour l'opérationnel

### 3.1 Les approches multi-niveaux

L'application des méthodes d'assimilation variationnelle de données aux fluides géophysiques, notamment dans le contexte de la prévision opérationnelle, a naturellement conduit - et continue toujours de conduire - au développement d'approches multi-niveaux afin de faire face à l'augmentation importante des dimensions des problèmes, résultant de l'augmentation de la résolution des modèles, de leurs couplages et de la masse des observations disponibles. L'idée générale de ces approches est de réaliser une partie des calculs sur des niveaux grossiers, où ils sont moins coûteux, en exploitant des complémentarités entre les niveaux qui garantissent une résolution satisfaisante du problème initial.

Du point de vue de la modélisation, ceci se traduit par le développement de modèles emboîtés, largement utilisés en météorologie et en océanographie. Ils permettent un accroissement local de la résolution, dans les zones où cela semble nécessaire, via l'intégration d'un même modèle sur une hiérarchie de grilles. Il est possible de prendre en compte cette structure multigrille emboîtée dans le processus de minimisation [47], ceci conduisant notamment au développement de modèles adjoints également emboîtés.

Il est également possible d'introduire des approches multi-niveaux dans l'espace des observations en exploitant l'approche duale en assimilation variationnelle de données. Les observations disponibles sur la fenêtre d'assimilation peuvent ainsi conduire à la définition d'une hiérarchie de grilles spatio-temporelles dans l'espace des observations. Il est alors possible d'introduire une sélection des observations au cours du processus de minimisation, basée sur la définition d'un indicateur d'erreur, quantifiant l'influence d'une observation sur la minimisation de la fonction de coût entre deux niveaux de grilles successifs [28]. Il s'agit

alors de réduire le temps de calcul en impliquant graduellement les observations dans le système pour qu’une partie des calculs soient réalisés sur des problèmes d’optimisation moins coûteux.

En gardant à l’esprit l’impératif de réduction des dimensions du problème en se basant sur l’impact des observations sur le système ou sur la quantité d’information qu’il est possible d’en extraire, des stratégies multi-niveaux basées sur une hiérarchie de grilles de l’espace de contrôle ont été proposées, afin d’obtenir une discrétisation optimale de celui-ci [7, 6]. Ceci conduit à résoudre un problème d’optimisation afin d’obtenir cette discrétisation optimale, préalablement à la résolution du problème d’assimilation de données.

Enfin, des stratégies multi-niveaux peuvent être introduites pour accélérer la résolution du problème d’optimisation (1). Ainsi, les méthodes multigrilles, initialement introduites pour accélérer la résolution de systèmes, potentiellement non-linéaires, exploitent la propriété de lissage des méthodes de relaxation appliquées à des problèmes elliptiques : élimination rapide des composantes hautes fréquences de l’erreur, mais lentes réduction des composantes basses fréquences. L’idée est donc d’introduire des étapes de corrections sur des grilles à plus basse résolution pour lesquelles les basses fréquences de l’erreur apparaissent à plus haute résolution. Appliqué à l’optimisation, cela consiste à introduire des étapes de minimisation sur des grilles à plus faible résolution en vue de réduire le nombre d’itérations effectuées lors de la minimisation de la fonction de coût haute résolution [29]. Néanmoins, la convergence de telles approches repose sur des propriétés intrinsèques au problème et aux méthodes et opérateurs utilisés pour le résoudre [34]. Dans le contexte de l’assimilation variationnelle de données, ceci renvoie aux propriétés de la matrice Hessienne de la fonction de coût (1), et aux différents opérateurs qui la constituent [42]. Plutôt que d’envisager l’utilisation de solveurs multigrilles pour lesquels la convergence ne serait pas garantie dans un système d’assimilation déjà implanté, une seconde stratégie multi-niveaux consiste en le développement de préconditionneurs multigrilles [15].

## 3.2 Les approches ensemblistes

Les méthodes d’ensemble apportent la possibilité de modéliser plus facilement des erreurs qui dépendent des écoulements dans les fluides géophysiques. Ces méthodes, qui sont basées sur une adaptation du filtre de Kalman [19], propagent l’information sur les erreurs au delà du cycle d’assimilation, contrairement aux méthodes variationnelles. Elles sont très faciles à paralléliser et sont naturellement adaptées aux architectures massivement parallèles. Ces filtres d’ensembles ont connu un essor important en géophysique, de part leur capacité à traiter des problèmes de grandes dimensions, et leur côté faiblement intrusif - pas ou peu de modification, ni de linéarisation, du modèle n’est requises. Elles souffrent néanmoins des effets des erreurs d’échantillonnage dus à la petite taille de l’ensemble - celui-ci ne peut difficilement dépasser quelques centaines de simulations - et requièrent des techniques d’inflation [36] et de localisation [45] afin de remédier aux biais d’assimilation résultant de l’utilisation d’un ensemble

de trop petite dimension.

Des hybridations entre les méthodes variationnelles et d'ensemble ont naturellement été proposées pour exploiter les avantages de chacune. Les premiers schémas hybrides [35, 40, 9] incorporent dans une approche variationnelle un terme de covariance supplémentaire issu d'un ensemble. Les perturbations ensemblistes sont ajoutées à la variable de contrôle, localisées afin de réduire l'erreur d'échantillonnage et avec préconditionnement pour conserver un nombre d'itérations limité. Cette approche est rapidement étendue en 4D (avec dimension temporelle) par [39, 11]. Le schéma d'assimilation hybride où les covariances propagées habituellement par le modèle linéaire tangent sont remplacées par des covariances ensemblistes, fournissant une alternative au 4D-Var classique.

Une autre stratégie ensembliste consiste à minimiser une fonctionnelle de type 3D- et/ou 4D-Var en approximant, et la matrice de covariance d'erreur d'ébauche  $\mathbf{B}$  et les dérivées de cette fonctionnelle depuis l'ensemble. Ceci conduit au développement de méthodes itératives ensemblistes - filtres ou lisseurs - [54, 46, 4, 5, 41] ou d'algorithmes 4D-Var ensemblistes (4D-EnVar) [18] construits sur des méthodes d'optimisation classiques et qui héritent des filtres de Kalman d'ensemble leur simplicité : le développement et la maintenance, souvent difficiles, du modèle adjoint (opérateur adjoint du modèle "linéarisé") ne sont pas requis, au contraire de l'algorithme 4D-Var. La non-disponibilité des modèles linéaire tangent et adjoint, requis pour le calcul du gradient de la fonction de coût, peut également être compensée par le développement d'algorithmes basés sur les méthodes d'optimisation sans dérivée [26].

## 4 Conclusion

Nous avons présenté une image des algorithmes variationnels pour aborder les problèmes d'assimilation de données en grande dimension. Cette vision est sans doute un peu partielle car elle est centrée sur les techniques d'optimisation qui ont constitué le coeur de nos activités de recherches ces quinze dernières années. Cet exposé serait donc largement incomplet si nous ne faisons pas mention des techniques de Filtrage de Kalman d'ensemble et de filtrage particulière, qui sont à l'étude en particulier dans la communauté des Geosciences et qui apportent des éclairages intéressants notamment concernant la quantification des incertitudes des prévisions. Chacune de ces techniques (variationnelle, ensembliste, particulière) a bien sûr ses forces, et de nombreuses pistes de recherches consistant à hybrider ces algorithmes sont à l'étude, et ont par exemple été récemment présentées au Workshop "Mathematical and Algorithmic Aspects of Data Assimilation in the Geosciences" à Oberwolfach, en Octobre 2016.

Pour finir, il est évident que les attentes sociétales augmentent relativement quant à la capacité à prévoir, et cette évolution se traduit directement par des changements au niveau de la physique et de la finesse des grilles de calcul attendus à l'avenir. C'est le cas par exemple pour la prise en compte de la topographie de l'humidité des sols pour la prévision des brouillards au voisinage des aéroports. De même une meilleure prévision et compréhension des phénomènes

Cevenol nécessite une évolution des grilles de calcul dans le même sens. Il s'avèrera sans doute important à l'avenir d'introduire de nouvelles variables dans les système d'assimilation, telles que la densité de particules, ou la concentration en aérosols, à nouveau en lien avec des problématiques prégnantes en termes de suivi de la qualité de l'air. De telles évolutions vont se traduire par une augmentation du nombre d'équations différentielles constituant le modèle, ce qui se traduira inévitablement par une demande croissante en capacité de calcul, et des exigences croissantes envers les algorithmes mathématiques permettant de rencontrer ces attentes sociétales.

## Références

- [1] Akkraoui AE, Gauthier P. 2010. Convergence properties of the primal and dual forms of variational data assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **136** : 107–115.
- [2] Akkraoui AE, Gauthier P, Pellerin S, Buis S. 2008. Intercomparison of the primal and dual formulations of variational data assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **134** : 1015–1025.
- [3] Amodei L, 1995. Solution approchée pour un problème d'assimilation de données météorologiques avec prise en compte de l'erreur modèle. *C. R. Acad. Sci., Paris*, **321**, 1087–94.
- [4] M. Bocquet and P. Sakov. Combining inflation-free and iterative ensemble Kalman filters for strongly nonlinear systems. *Nonlinear Processes in Geophysics*, 19 :383–399, 2012.
- [5] M. Bocquet and P. Sakov. An iterative ensemble Kalman smoother. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140 :1521–1535, 2014.
- [6] M. Bocquet and L. Wu. Bayesian design of control space for optimal assimilation of observations. Part II : Asymptotic solutions. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 137 :1357–1368, 2011.
- [7] M. Bocquet, L. Wu and F. Chevallier. Bayesian design of control space for optimal assimilation of observations. Part I : Consistent multiscale formalism. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 137 :1340–1356, 2011.
- [8] F. Bouttier and P. Courtier. Data assimilation concepts and methods. Technical report, ECMWF, Reading, England, 1999. ECMWF Meteorological Training Course Lecture Series.
- [9] M. Buehner Ensemble-derived stationary and flow-dependent background error covariances : evaluation in a quasi-operational setting for NWP. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 131 :1013–1044, 2005.
- [10] A. Conn, N. Gould, and Ph. Toint. *Trust-Region Methods*. MPS-SIAM series on optimizations, 2000.
- [11] A.M. Clayton , A.C. Lorenc and D.M. Barker. Operational implementation of a hybrid ensemble/4D-Var global assimilation system at the Met Office. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 139 :1445–1461, 2013.
- [12] P. Courtier. Dual formulation of four-dimensional variational assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 123 :2449–2461, 1997.
- [13] P. Courtier, J.-N. Thépaut, and A. Hollingsworth. A strategy for operational implementation of 4D-Var using an incremental approach. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 120 :1367–1388, 1994.
- [14] Da Silva A, Pfaendtner J, Guo J, Sienkiewicz M, Cohn S. 1995. Assessing the effects of data selection with DAO's Physical-space Statistical Analysis System. *In Proceedings of the second international WMO symposium on assimilation of observations in meteorology and oceanography*, Tokyo, 13 –17 March 1995. WMO/TD 651, 273 – 278.

- [15] L. Debreu, E. Neveu, E. Simon, F.-X. Le Dimet, and A. Vidard. Multigrid solvers and multigrid preconditioners for the solution of variational data assimilation problems. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 142 :515–528, 2016.
- [16] Derber J, 1989. A variational continuous assimilation technique. *Monthly Weather Review*, **117**, 2437–2446.
- [17] G. Desroziers and L. Berre. Accelerating and parallelizing minimization in ensemble and deterministic variational assimilations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 138 :1599–1610, 2012.
- [18] G. Desroziers, J.-T. Camino and L. Berre. 4DVar : link with 4D state formulation of variational assimilation and different possible implementations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140 :2097–2110, 2014.
- [19] G. Evensen. *Data Assimilation. The Ensemble Kalman Filter*. Springer, 2009.
- [20] M. Fisher, S. Gratton, S. Gürol, X. Vasseur, and Y. Trémolet. Low rank updates in preconditioning the saddle point systems arising from data assimilation problems. *Optimization Methods and Software*, 2016.
- [21] M. Fisher and S. Gürol. Parallelisation in the time dimension of four-dimensional variational data assimilation, 2016. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, in press.
- [22] G. H. Golub and C. F. Van Loan. *Matrix Computations*. Johns Hopkins University Press, Baltimore, third edition, 1996.
- [23] S. Gratton, S. Gürol, E. Simon and Ph.L. Toint. Issues in making the weakly-constrained 4DVar formulation computationally efficient. *Mathematical and Algorithmic Aspects of Data Assimilation in Geosciences*. Oberwolfach Reports, 2016. DOI : 10.4171/OWR/2016/47.
- [24] S. Gratton, S. Gürol, and Ph.L. Toint. Preconditioning and globalizing conjugate gradients in dual space for quadratically penalized nonlinear-least squares problems. *Computational Optimization and Applications*, pp. 1–25, 2010.
- [25] S. Gratton, S. Gürol, Ph.L. Toint, J. Tshimanga, and A. Weaver. Krylov methods in the observation space for data assimilation. Oberwolfach Reports, 2012.
- [26] S. Gratton, P. Laloyaux and A. Sartenaer. Derivative-free optimization for large-scale nonlinear data assimilation problems. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140 :943–957, 2014.
- [27] S. Gratton, A. Lawless, and N. K. Nichols. Approximate Gauss-Newton methods for nonlinear least-squares problems. *SIAM Journal on Optimization*, 18 :106–132, 2007.
- [28] S. Gratton, M. Rincon-Camacho, E. Simon and Ph.L. Toint. Observation Thinning in Data Assimilation Computations. *EURO Journal on Computational Optimization*, 3 :31–51, 2015.
- [29] S. Gratton, A. Sartenaer, and Ph.L. Toint, Recursive trust-region methods for multi-scale nonlinear optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 19(1) :414–444, 2008.
- [30] S. Gratton, A. Sartenaer, and J. Tshimanga, On a class of limited memory preconditioners for large scale linear systems with multiple right-hand sides. *SIAM Journal on Optimization*, 21 :912–935, 2011.
- [31] S. Gratton, Ph. L. Toint, and J. Tshimanga. Range-space variants and inexact matrix-vector products in Krylov solvers for linear systems arising from inverse problems. *SIAM Journal on Matrix Analysis*, 32(3) :969–986, 2011.
- [32] S. Gratton and J. Tshimanga. An observation-space formulation of variational assimilation using a restricted preconditioned conjugate-gradient algorithm. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 135 :1573–1585, 2009.
- [33] S. Gürol, A. T. Weaver, A. M. Moore, A. Piacentini, H. G. Arango, and S. Gratton. B-preconditioned minimization algorithms for variational data assimilation with the dual formulation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140(679) :539–556, 2014.

- [34] W. Hackbusch. *Multi-Grid Methods and Applications*. Springer Series in Computational Mathematics, Vol. 4, 2003.
- [35] T.M. Hamill and C. Snyder. A hybrid ensemble Kalman filter-3D variational analysis scheme. *Monthly Weather Review*, 128 :2905–2919, 2000.
- [36] T.M. Hamill, J.S. Whitaker and C. Snyder. Distance-dependent filtering of background error covariance estimates in an ensemble Kalman filter. *Monthly Weather Review*, 128 :2905–2919, 2000.
- [37] Lagarde T, 2000. Nouvelle approche des methodes d’assimilation de données : les algorithmes de point selle. *Ph.D. thesis, Université Paul Sabatier (Toulouse III)*.
- [38] F.-X. Le Dimet and O. Talagrand. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations : theoretical aspects. *Tellus*, 38A :97–110, 1986.
- [39] C. Liu, Q. Xiao and B. Wang. An ensemble-based four-dimensional variational data assimilation scheme, part I : technical formulation and preliminary test. *Monthly Weather Review*, 136 :3363–3373, 2008.
- [40] A.C. Lorenc. Modeling of error covariances by 4D-Var data assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 129 :3167–3182, 2003.
- [41] J. Mandel, E.H. Bergou, S. Gürol, S. Gratton and I. Kusanicky. Levenberg-Marquardt and weak constraint ensemble Kalman smoother method. *Nonlinear Processes in Geophysics*, 23 :59–73, 2016.
- [42] E. Neveu, L. Debreu and F.-X. Le Dimet. Multigrid methods and data assimilation, convergence study and first experiments on non-linear equations. *Rev. Afr. Rech. Inform. Math. Appl. (ARIMA)*, 14 :63–80, 2011.
- [43] Rao V and Sandu A, 2016. A time-parallel approach to strong-constraint four-dimensional variational data assimilation. *Journal of Computational Physics*, **313**, 583–593.
- [44] S. Reich, C. Cotter. *Probabilistic Forecasting and Bayesian Data Assimilation*. Cambridge University Press, 2015.
- [45] P. Sakov and L. Bertino. Relation between two common localisation methods for the EnKF. *Computational Geosciences*, 15(2) :225–237, 2011.
- [46] P. Sakov, D.S. Oliver and L. Bertino. An iterative EnKF for strongly nonlinear systems. *Monthly Weather Review*, 140(6) :1988–2004, 2012.
- [47] E. Simon, L. Debreu and E. Blayo. 4D variational data assimilation for locally nested models : complementary theoretical aspects and application to a 2D shallow water model. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 66 :135–161, 2011.
- [48] Y. Trémolet. Accounting for an imperfect model in 4D-Var. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 132(621) :2483–2504, 2006.
- [49] Y. Trémolet. Model-error estimation in 4D-Var. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 133(626) :1267–1280, 2007.
- [50] J. Tshimanga, S. Gratton, A. Weaver, and A. Sartenaer. Limited-memory preconditioners with application to incremental four-dimensional variational data assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **134**, 751–769, 2008.
- [51] A. Vidard, E. Blayo, F.-X. Le Dimet, and A. Piacentini. 4D Variational Data Analysis with Imperfect Model. *Journal of Flow, Turbulence and Combustion*, **65 (3)**, 489–504, 2000.
- [52] Vidard P.A, Piacentini A, Le Dimet F.X, 2004. Variational data analysis with control of forecast bias. *Tellus*, **51A**, 177–188.
- [53] D. Zupanski. A general weak constraint applicable to operational 4DVAR data assimilation systems. *Monthly Weather Review*, **125**, 2227–2292, 1997.
- [54] M. Zupanski. Maximum Likelihood Ensemble Filter : Therotical Aspects. *Monthly Weather Review*, **133**, 1710–1726, 2005.



---

# L'approche systémique : simuler moins pour modéliser plus en neurosciences

**Frédéric ALEXANDRE**

*Inria Bordeaux Sud-Ouest  
LaBRI, UMR 5800  
Institut des Maladies Neurodégénératives  
F-33076 Bordeaux  
Frederic.Alexandre@inria.fr*

---

*RÉSUMÉ. Le recours à la modélisation et à la simulation permet aujourd'hui des performances considérables pour les prévisions météorologiques ou pour la conception d'objets technologiques très complexes. Il est tentant de poursuivre ces efforts et de les orienter vers d'autres sujets particulièrement complexes comme l'étude du cerveau. Il est cependant très important de bien analyser les principes de la démarche de modélisation et de simulation pour les appliquer au mieux dans un cadre systémique, le plus adapté pour étudier le cerveau, et de se rendre compte ainsi qu'il ne s'agit pas de construire les modèles les plus précis et les plus lourds mais les plus adaptés à la question que l'on se pose.*

*ABSTRACT. The use of modeling and simulation now allows considerable performance for meteorological forecasting or for the design of very complex technological objects. It is tempting to pursue these efforts and direct them to other particularly complex subjects such as the study of the brain. However, it is very important to analyze the principles of the modeling and simulation approach in order to best apply them in a systemic framework, the most adapted to study the brain, and to realize that it is not a question to build the most precise and heaviest models but the most adapted to the question that one asks.*

*MOTS-CLÉS : modélisation, simulation, approche systémique, neurosciences.*

*KEYWORDS: modeling, simulation, systemic approach, neurosciences.*

---

## 1. Introduction

Avec le développement de l'informatique, son ancrage solide dans les mathématiques et les progrès technologiques associés, le recours à la modélisation est devenu une pratique très courante pour rendre compte de phénomènes de plus en plus complexes, et ceci d'autant plus que les moyens de calcul actuels permettent d'exploiter plus facilement ces modèles. En plus de réalisations impressionnantes dans de nombreux domaines de la physique, l'approche modélisatrice s'attaque également à différents domaines du vivant, avec des succès également notables et une notoriété croissante. C'est le cas en particulier pour les neurosciences computationnelles qui ont acquis une popularité importante aujourd'hui pour l'étude du cerveau.

En première analyse, le domaine des neurosciences computationnelles pourrait évoquer un oxymore. D'une part, les neurosciences peuvent être perçues comme des sciences éminemment descriptives qui, par observation, expérimentation et recueil de données, visent à décrire le cerveau (ou plus généralement le système nerveux) dans sa réalité. D'autre part, le computationnel évoque plutôt des sciences normatives qui, à l'aide de modèles et de simulations informatiques, se proposent de représenter un objet d'étude (ici le cerveau) à travers un certain prisme, en suivant des formalismes mathématiques ou informatiques, ce qui semble l'éloigner de sa réalité vivante (humide, diraient les biologistes).

Il est donc légitime de se demander comment des approches issues de sciences dites exactes peuvent être utilisées dans les sciences du vivant, domaines plutôt traditionnellement associés à l'exploitation des données. Nous nous proposons de creuser un peu plus ici les rapports entre ces deux formes d'étude du cerveau, de montrer qu'elles sont au contraire très compatibles et d'observer que cette discussion fait également émerger un certain nombre de recommandations pour leur meilleure association. Cette analyse sera également l'occasion de rappeler les règles et les fondements de la modélisation, ce qui permettra aussi d'aborder un autre sujet important dans ce contexte, le développement de modèles de plus en plus complexes et le recours à des moyens de calcul énormes pour les simuler, avec en filigrane la question de savoir si cette escalade dans la complexité et la puissance des calculs est nécessaire ou si d'autres voies sont possibles, voire préférables.

## 2. Les neurosciences : une approche descriptive ?

John von Neumann faisait déjà remarquer que la vérité est beaucoup trop complexe pour permettre autre chose que des approximations [NEU 47]. Cette remarque s'applique particulièrement bien au cerveau et les biologistes ont toujours été confrontés à la difficulté de l'observer sans biais. On peut bien sûr être admiratif devant l'explosion de la puissance des moyens technologiques développés pour mieux observer le cerveau, de Ramon y Cajal qui travaillait au début du vingtième siècle avec une coloration de Golgi et un simple microscope et dessinait ses observations à la plume et à l'encre, jusqu'aux techniques plus récentes de microscopie biphotonique et d'expres-

sion de protéines fluorescentes (technique Brainbow) ou plus récemment encore la technique Clarity [CHU 13] qui rend les tissus cérébraux transparents pour permettre une encore plus grande précision dans les détails. Mais dans tous les cas, des biais importants subsistent. Les techniques de coloration sont sélectives, les observations concernent des animaux sacrifiés et les tissus sont transformés par la préparation.

Comme le suggère l'évocation de ces limites technologiques, le cerveau est un objet d'étude particulièrement délicat à observer pour de multiples raisons. D'une part, par sa structure, il est fragile, difficile d'accès, multi-structures et multi-échelles. D'autre part, par ses fonctions, il est vivant et difficilement dissociable d'autres entités qui l'hébergent, comme le corps, ou interagissent avec lui, comme son environnement immédiat mais aussi plus largement son histoire ou son contexte social, sans oublier le fait que des considérations éthiques peuvent également limiter son exploration. Enfin, pour le rendre encore plus particulier, on peut aussi noter que le cerveau peut être vu tout aussi bien comme une machine physico-chimique que comme un système de traitement de l'information et de communication.

On peut donc considérer que les neuroscientifiques ont toujours été confrontés à l'intérêt majeur de cet objet d'étude mais aussi aux difficultés, intrinsèques à sa structure et à sa fonction, de l'observer sans y introduire de biais. Ils ont donc dès l'origine dû mener une réflexion élaborée pour développer des expériences (des techniques ou des protocoles) permettant de se rapprocher le plus possible de ce souhait de décrire la réalité du cerveau et, ce faisant, ont emprunté une démarche similaire à celle de la modélisation que l'on évoquera dans la section suivante.

On peut ainsi mentionner la découverte d'animaux modèles, comme par exemple des rongeurs qui semblent développer naturellement des maladies neurodégénératives [ARD 12] et que l'on pourra étudier plus simplement ou plus invasivement que des humains, ainsi que la mise au point de modèles animaux, par exemple relativement à l'observation que l'injection d'une neurotoxine, le MPTP, peut induire chez le singe les symptômes de la maladie de Parkinson [POR 12]. On parlera ici de modèle non parce que le système à étudier est plus simple mais parce qu'il permet un accès facilité à l'étude d'une question, ce qui est tout à fait compatible avec la définition d'un modèle qu'on reprendra ci-dessous.

C'est aussi dans cette même perspective que des procédés expérimentaux ont dû être développés dans les neurosciences, en particulier par électrophysiologie ou par imagerie, pour observer des phénomènes autrement inaccessibles. Mais le développement de ces technologies s'est également accompagné d'un débat sur leurs limites et sur l'interprétation de leurs résultats. Quelles sont par exemple les limites de résolutions spatiales et temporelles en IRM fonctionnelle où le signal BOLD mesuré est relatif au niveau d'oxygénation local des tissus et pas (directement) à l'activité neuronale ? On voit à travers ces exemples que les neurosciences, considérant la complexité de leur objet d'étude, doivent recourir massivement à des médiations entre cet objet et les connaissances qu'elles veulent en extraire, suivant en cela une démarche similaire à la modélisation.

Il est notable en particulier qu'aujourd'hui la plupart des avancées récentes en neurosciences reposent sur des plateformes technologiques de plus en plus impressionnantes mais aussi parfois dont il est de plus en plus difficile de maîtriser les biais potentiels et dont on peut parfois penser, comme on le notera aussi plus bas pour les neurosciences computationnelles, qu'elles sont uniquement élaborées pour le plaisir de complexifier. Inversement, on peut aussi noter que sur certains sujets anatomiques, les dessins plus que centaines de Cajal restent une référence, probablement car, plus qu'une observation, ils incluent l'intuition du Maître sur ce qu'il fallait observer...

### 3. Modélisation et simulation

La théorisation est probablement la plus aboutie des sciences normatives et vise à décrire un objet d'étude en fournissant des explications ou des connaissances, sous forme, par exemple, de relations entre ses variables d'état (comme la loi d'Ohm, par exemple). Cependant, et particulièrement pour un objet complexe, une théorie complète est généralement hors d'atteinte ou nécessite au mieux une mise au point par démarche itérative, en attaquant successivement différents aspects de cet objet, en répondant à des séries de questions. C'est ainsi que l'on peut définir cette autre approche normative qu'est la modélisation, comme une médiation entre expérience et théorie, qui va pouvoir faciliter certains aspects de ce passage, en particulier au niveau de l'expérimentation (par exemple le modèle animal) ou de la formulation (voir les modèles phénoménologiques évoqués plus bas) [VAR 13]. C'est aussi dans cette perspective que d'autres auteurs indiquent qu'un modèle est avant tout fait pour répondre à une question [MIN 65] et qu'il a cette vertu analogique par rapport à l'objet qu'il représente, pour ce qui concerne cette question [THO 72].

Ainsi, selon R. Thom, faire fonctionner un modèle, c'est le questionner sur le sujet pour lequel il a été conçu. On peut voir que ceci s'applique particulièrement bien à un modèle animal. Dans une vision positiviste, où tout peut être expliqué par des phénomènes physico-chimiques et décrit par des équations mathématiques [BUL 99], on pourra aussi construire des modèles dits de connaissance, utilisant souvent l'algèbre et les systèmes dynamiques et ainsi tenter d'expliquer certaines propriétés de l'objet d'étude (c'est le rôle de justification théorique du modèle). Cette approche a connu un essor extraordinaire dans la seconde moitié du XXème siècle, avec le développement de l'informatique et de l'analyse numérique, en particulier pour rendre compte de phénomènes naturels (océans, météorologie) ou pour développer des dispositifs technologiques complexes (aviation, industrie nucléaire).

Dans une vision plus moderne, où l'on est capable de rassembler de grandes collections de données (Big Data) comme traces de fonctionnement d'un phénomène, et de développer des approches statistiques adaptatives (Machine Learning), on parlera plutôt de modèles de représentation ou de modèles phénoménologiques qui, n'étant pas fondés sur une analyse structurelle, n'auront pas de vertu explicative mais plutôt un pouvoir prédictif. On parlera alors de l'efficacité pragmatique d'un modèle. Ce type d'approches a connu un regain d'intérêt spectaculaire récemment, en particulier

grâce au développement de l'Internet permettant un meilleur accès aux données, et des capacités de calcul permettant de calculer des modèles de plus grande taille, au point où dans certains domaines où la théorie est difficile (fortement non-linéaire par exemple), il est plus efficace d'approximer les équations principales par apprentissage à partir de données [BRU 16]. On pourra aussi constater que dans le domaine du traitement du langage naturel, après des décennies de théorisation, les meilleurs systèmes de traduction automatique sont aujourd'hui basés sur des statistiques et sont donc phénoménologiques...

La simulation, qui s'attache à la mise en œuvre numérique de modèles de connaissance, peut, d'un certain point de vue, être également considérée comme un modèle phénoménologique. Alors que l'étape de modélisation proprement dite vise à définir la représentation des connaissances et le formalisme de calcul qui seront les plus adaptés à la question posée, la simulation a pour but de mettre effectivement en œuvre le modèle calculatoire pour répondre à des interrogations de type "Qu'est-ce qui se passe si ... ?" (*What if*), en construisant des scénarios permettant par exemple de considérer l'effet des paramètres choisis. Depuis de nombreuses années, des domaines entiers de l'informatique et des mathématiques ont été développés pour étudier la mise au point de schémas numériques efficaces et pour permettre leur mise en œuvre performante sur des architectures de calcul distribuées, au point que dans certains domaines de l'algèbre linéaire, les progrès de la simulation sont autant dus à l'algorithmique qu'à l'accroissement des puissances de calcul. La simulation peut être effectivement considérée comme un modèle phénoménologique dans la mesure où cette étape de calcul, malgré sa puissance, ne reste qu'un moyen sans vertu explicative et qu'il faut ensuite procéder à une étape d'exploitation des résultats obtenus, le plus souvent par visualisation mais aussi par d'autres moyens d'évaluation ou de mesure.

Comme il a été mentionné plus haut, à terme, l'aboutissement de telles approches de modélisation pourrait être de construire une théorie ou en tout cas de contribuer à son établissement progressif. Ceci se traduit par l'expression de trois étapes principales lors de la réalisation de modèles. Il s'agit premièrement de choisir la question de connaissance à laquelle on souhaite répondre, typiquement une question sur laquelle les théories courantes ne sont pas satisfaisantes, et de construire le modèle qui sera le plus adapté pour y répondre, en choisissant en particulier la structure du système de représentation et son état initial ainsi que le formalisme de calcul le plus adapté pour rendre compte des variables importantes et de leurs relations (il est ainsi superflu d'introduire des aspects de l'objet d'étude qui ne sont pas concernés par ces dimensions). Dans un deuxième temps, si on ne peut pas répondre analytiquement à la question ou si le modèle échappe à la compréhension car il devient trop complexe pour être considéré dans son ensemble, on pourra exécuter une simulation jusqu'à l'étape où les résultats générés peuvent être interprétés pour permettre de répondre à la question et, le cas échéant, de fournir des explications.

Dans un troisième temps, on peut participer à la réfutation du modèle, en suivant la démarche proposée par Karl Popper [POP 34] et en comparant les productions ultérieures du modèle (et de ses simulations) avec la réalité ou en provoquant cette

comparaison, en proposant des prédictions sur des sujets qui n'étaient pas a priori prévus lors de l'établissement du modèle. Une comparaison défavorable va suffire à mettre en cause le modèle (à le réfuter) et conduira à le modifier plus ou moins radicalement pour lui permettre d'intégrer ce nouveau cas alors qu'une comparaison favorable ne permettra de rien conclure d'autre que le fait que le modèle courant reste la meilleure explication à notre disposition (en attendant une prochaine réfutation éventuelle), puisqu'il faudrait pouvoir tester le modèle dans toutes les circonstances pour l'adopter définitivement.

Cette démarche itérative a été utilisée pour le raffinement de nombreux modèles, avec ses bons et ses moins bons aspects. Si elle a permis de construire des modèles complexes en considérant successivement différentes facettes d'une question assez générale, elle a aussi donné lieu à des dérives, en créant des modèles exagérément complexes, constitués d'excroissances et de rustines destinées à rendre compte de cas particuliers ou de questions relativement annexes au problème considéré, alors qu'il ne faut pas oublier que la vocation d'un modèle n'est pas de rendre compte de la réalité d'un objet d'étude sous tous ses aspects, mais seulement de fournir un substrat pour répondre à une question particulière. On évoquera plus bas de tels exemples dans le champ des neurosciences computationnelles. On observera également dans ce cas que le problème principal de mise au point d'un modèle n'est pas tant de réduire progressivement un écart de précision que de savoir y intégrer des connaissances hétérogènes, ce qui reste un des points les plus délicats non abordés ici car relevant souvent plutôt d'un savoir faire : le passage de la question à la forme du modèle le mieux adapté pour y répondre. On évoquera seulement pour conclure la loi de l'instrument proposée par A. Maslow [MAS 66] : "Il est tentant, si le seul outil que vous avez est un marteau, de tout traiter comme si c'était un clou".

#### 4. Les Neurosciences Computationnelles

Les neurosciences computationnelles peuvent être définies comme le domaine scientifique visant à étudier les relations entre les structures et les fonctions du cerveau par le moyen de techniques de traitement de l'information [SCH 90, DAY 01]. Il a été évoqué plus haut la grande efficacité de l'approche modélisatrice pour rendre compte, dans une vision très positiviste, de phénomènes physico-chimiques à l'aide d'équations différentielles. Il est notable à ce propos que l'histoire des neurosciences computationnelles trouve son origine dans une description du fonctionnement d'un neurone sous le couvert des lois physiques de l'électricité. Le premier modèle historique de neurone [BRU 07] et, plus tard, celui sur lequel une grande partie des neurosciences computationnelles s'est construite, le modèle de Hodgkin-Huxley [NEL 95], écrivent l'équation du potentiel de membrane d'un neurone en appliquant simplement les lois d'Ohm et de Kirchoff (lois de l'électricité). De façon intéressante, on notera que le modèle de Hodgkin-Huxley, plus complexe que son ancêtre, ajoute à ce modèle de connaissance d'autres équations phénoménologiques qui ont été déterminées expé-

rimentalement par Hodgkin et Huxley en 1952 sur l'axone de calamar géant, rendant compte de phénomènes comme la probabilité d'ouverture de canaux ioniques.

On pourra donc noter qu'à un certain niveau de description, il n'y a rien à comprendre de ce modèle, sauf qu'il traduit des observations de biologistes, mais il n'en reste pas moins vrai qu'il a connu un succès retentissant (valant en particulier le prix Nobel à ses auteurs), car il pouvait permettre de mimer avec une grande précision le comportement électrique d'un neurone isolé soumis à des créneaux de courant en entrée. Cette précision s'est améliorée ultérieurement en étendant le modèle spatialement mais aussi en descendant progressivement dans les niveaux de description des boîtes phénoménologiques ou en ajoutant d'autres détails, relatifs aux synapses par exemple. Outre les premiers essais pour étudier des assemblages de tels modèles de neurones, parallèlement, des modèles plus intégrés ont été développés [AMA 77, WIL 73], choisissant comme niveau de description l'activité électrique moyenne d'une population de neurones et visant à rendre compte de phénomènes plus globaux de propagation de cette activité électrique [COO 05].

Alors qu'il est important de mentionner que ces modèles élémentaires n'ont été confrontés à la biologie que dans des cas artificiels de petits nombres de neurones soumis à des stimulations externes tout aussi artificielles, et qu'ils étaient essentiellement dédiés à répondre à des questions du type "comment est-ce que les neurones calculent?", ces approches de modélisation, très fructueuses dans leur domaine d'investigation initial, ont également suscité des attentes énormes et ont été réinterprétées dans des approches ascendantes visant à simuler des morceaux importants de cerveau (simuler alors qu'avant on parlait de modélisation). C'est en particulier le cas du Blue Brain Project, ancêtre de l'actuel Human Brain Project.

Le Blue Brain Project, dont on peut aujourd'hui commencer à tirer des bilans [MAR 15], se proposait d'assembler des modèles de neurones très détaillés, en agrégeant des données de neuroanatomie correspondant à trente mille neurones et quarante millions de synapses du cortex sensoriel du rat, sans mécanisme de plasticité cérébrale et sans questionnement sur un éventuel calcul sous-jacent. Comme ses modèles ancêtres, il inclut également des parties phénoménologiques, par exemple concernant l'activité électrique des neurones, extraite par observation statistique, à côté d'autres aspects très détaillés, plutôt basés sur des connaissances. Ce processus de rétro-ingénierie consistant à assembler un grand nombre de briques élémentaires pour mieux comprendre l'objet global a pu faire évoquer de la complexité pour le plaisir de la complexité [CHI 16] et en tout cas a conduit à se demander si ce type de projet ascendant est suffisamment contraint pour permettre de passer ainsi de niveaux sub-neuronaux à des niveaux à bien plus large échelle tout en retrouvant, juste par agrégation de données, les propriétés des niveaux macroscopiques [FR 14]. Parmi ces propriétés que l'on voudrait voir ainsi émerger, il y a en particulier des aspects cognitifs, car c'est ce qui est évidemment une justification majeure d'une telle démarche intégratrice, pour ne pas mentionner l'Human Brain Project qui, lui, vise le cerveau humain dans son ensemble, c'est-à-dire un réseau d'une taille deux millions de fois supérieure au modèle précédent.

Même si c'est également un aspect très important de ces projets et si cet aspect a généré des questions scientifiques très intéressantes, nous ne discuterons pas ici en détails les travaux relatifs à l'implantation matérielle et à la réalisation concrète de tous les calculs sous-jacents. On donnera seulement des ordres de grandeurs en indiquant que calculer de tels modèles peut impliquer des milliers de processeurs et des dizaines voire des centaines de téraflops (milliers de milliards d'opérations par seconde). Toujours pour rester dans les ordres de grandeur, on remarquera que de tels calculs peuvent générer une consommation électrique de l'ordre du Méga Watt, à comparer avec les vingt Watts consommés par notre cerveau.

Les neurosciences computationnelles semblent donc proposer des modèles intéressants lorsque l'on considère des petits systèmes de neurones, vus comme des machines physico-chimiques stimulées artificiellement. Ceci peut être précieux pour répondre à des questions et faire des prédictions dans un certain nombre de situations relatives par exemple aux modes de fonctionnement ou d'apprentissage de neurones isolés, mais semble plus difficile à transposer au cerveau dans son ensemble ou à des fonctions cognitives complexes. Nous pensons que cette difficulté est due à plusieurs raisons que nous résumons brièvement ici. Tout d'abord, le cerveau est un système ouvert, la cognition est incarnée dans un corps et le cerveau se construit et fonctionne en interaction avec l'environnement. Ensuite, le cerveau est un système adaptatif et changeant. La cognition résulte de différentes formes d'apprentissage et d'interaction entre différentes formes de mémoires et s'élabore de façon plus ou moins autonome tout au long de la vie. Enfin, le cerveau est un système multimodal et multi-niveaux et l'on pourra donc poser des questions totalement différentes selon que l'on considère des sensations élémentaires comme plaisir et douleur ou des perceptions beaucoup plus structurées comme la vision et l'audition et selon que l'on s'intéresse au rôle des hormones ou à celui du langage dans le fonctionnement du cerveau. Il n'est donc pas évident que l'on puisse s'attaquer à tous et à chacun de ces sujets en agrégeant simplement des modèles de neurones à l'aide d'un simple plan de connexion, en suivant un simple processus de rétroingénierie. Ce tableau du cerveau, vu comme un système complexe, dépendant potentiellement d'un nombre astronomique de variables et de paramètres, impliqué dans des boucles d'interaction avec son environnement incluant le corps et dépendant de son histoire récente et ancienne semble donc disqualifier la méthode de modélisation traditionnellement utilisée pour d'autres objets complexes comme un avion ou un océan, quand il s'agit d'aborder des affirmations telles que celle formulée par P. Cabanis au XVIII<sup>ème</sup> siècle : "Le cerveau sécrète la pensée comme le foie sécrète la bile" ...

D'autres chercheurs, intéressés par mettre les neurosciences computationnelles au service de l'exploration de fonctions cognitives, ont fait ce constat. Ils ont également bien compris que faire des modèles, si précis soient-ils, n'est pas simuler la réalité ni tout en expliquer, qu'il reste des approximations et des aspects purement phénoménologiques et que faire un modèle, c'est construire un cadre, éventuellement simplifié et comportant des a priori, dans le but d'explorer une question précise. C'est dans cette perspective que, pour modéliser le cerveau et ses fonctions cognitives, des formalismes de calcul ont été proposés [ROU 12, O'R 00, STE 11], adaptés aux questions

que ces chercheurs se posent, et qui permettent d'explorer ensuite certaines fonctions cognitives comme les phénomènes attentionnels [FIX 11], la décision [O'R 06] ou la coordination sensorimotrice pour manipuler de différentes façons des séquences perceptives [ELI 12]. Ces modèles ne sont pas purement ascendants mais introduisent également des a priori et des hypothèses concernant des niveaux de description intermédiaires ou même parfois, de façon descendante, des cadres conceptuels. Il ne s'agit donc pas de comparer ou d'évaluer ces modèles en fonction de la quantité de détails qu'ils ont pu agréger, mais plutôt de se demander s'ils reposent effectivement sur des a priori ou des hypothèses cohérentes par rapport à ce que l'on sait aujourd'hui du cerveau, s'ils arrivent effectivement à apporter des éléments de réponse pertinents par rapport aux questions qui avaient été choisies, si les méthodes d'évaluation sont solides et éventuellement s'ils proposent des prédictions qui pourraient permettre de les réfuter ou de les faire évoluer.

Dans le cadre d'une démarche de modélisation de fonctions cognitives, ajouter la contrainte de la prise en compte du substrat neuronal peut également avoir des effets bénéfiques tout au long de la démarche, pour aider à formuler la question, construire le cadre et le formalisme et évaluer le modèle dans un contexte plus connu, plus classique à décrire et plus facile à expérimenter. Si l'on considère par exemple la compréhension du conditionnement répondant, une série de modèles purement comportementaux ont été proposés [LEP 04], chaque modèle se traduisant par la complexification du précédent en ajoutant un terme dans une équation phénoménologique pour rendre compte de résultats nouveaux ayant réfuté le précédent. De façon contrastée, considérer ce même paradigme de conditionnement en le faisant reposer sur son implantation neuronale décrite dans le lobe temporal médial [CAR 15] permet de proposer une solution plus simple où les comportements complexes reposent simplement sur une compétition entre plusieurs voies neuronales élémentaires. Une telle approche de modélisation cognitive par les neurosciences computationnelles permet de plus de générer des prédictions pouvant être vérifiées expérimentalement à des niveaux différents, par exemple pharmacologiques [CAL 06].

## 5. Discussion

Dans ce chapitre, nous avons tout d'abord rappelé le recours croissant à l'utilisation de modèles dans de nombreux domaines de la physique et dans l'industrie. Ces modèles rendent compte de phénomènes trop complexes pour être directement décrits par une théorie mais pour lesquels la connaissance de leurs mécanismes élémentaires par la théorie ou l'observation phénoménologique permet de construire un modèle et de l'utiliser ensuite lors de campagnes de simulation. Le succès de telles entreprises est dû aux progrès considérables réalisés dernièrement en mathématiques et en informatique pour construire ces modèles et pour les calculer efficacement. Mais il repose également sur une utilisation réfléchie et maîtrisée de ces outils très puissants. Nous avons identifié deux types de risques associés à une mauvaise compréhension et à un mauvais usage des modèles et des simulations.

Frédéric Alexandre

De façon générale, il est important de se rappeler qu'un modèle n'est pas une description de la réalité qu'il conviendrait de rendre de plus en plus précise mais un outil de médiation construit entre l'expérience et la théorie pour répondre à une question particulière. Si nous avons insisté sur cette définition de la modélisation, c'est pour rappeler que la qualité première d'un modèle n'est pas, dans l'absolu, la finesse du niveau de description utilisé mais sa capacité à répondre à la question qui était posée. Il y a de toutes façons le plus souvent des aspects phénoménologiques inclus dans les modèles qui empêchent de descendre dans la finesse du niveau d'explication et le plus important est donc de vérifier que les hypothèses retenues sont cohérentes avec le cadre choisi et donc la question à traiter. Modéliser plus finement et donc devoir simuler plus n'est pas un but en soi.

De façon plus particulière, concernant les neurosciences (ou d'autres sciences étudiant des systèmes complexes), nous avons mis en garde contre l'extension de la seule vision positiviste dans un contexte systémique. Il n'est pas satisfaisant de décrire le cerveau comme une simple machine physico-chimique à modéliser de façon ascendante mais il convient plutôt de le remettre dans un cadre systémique en considérant des boucles d'interaction avec son corps, son environnement, ses niveaux d'échelle ou encore son histoire à différentes constantes de temps. La complexité de cette description est une raison de plus pour disqualifier une modélisation reposant trop sur l'affinement du niveau de description mais va plutôt inciter à réfléchir finement aux questions à poser et aux hypothèses et aux formalismes à retenir. Pour ces raisons, le choix d'un cadre général bio-inspiré et d'hypothèses reposant sur des niveaux de description intermédiaires est une voie intéressante pour tenter de rejoindre expériences et théories. Pour autant, considérant la complexité de l'objet d'étude et les effets d'émergence associés à ces boucles et à ces niveaux d'échelle et de temps, le recours à la simulation reste un outil important pour explorer ce cadre de modélisation.

## 6. Bibliographie

- [AMA 77] AMARI S., « Dynamics of pattern formation in lateral-inhibition type neural fields », *Biological Cybernetics*, vol. 27, n° 2, 1977, p. 77–87.
- [ARD 12] ARDILES A. O., TAPIA-ROJAS C. C., MANDAL M., ALEXANDRE F., KIRKWOOD A., INESTROSA N. C., PALACIOS A. G., « Postsynaptic dysfunction is associated with spatial and object recognition memory loss in a natural model of Alzheimer's disease. », *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 109, n° 34, 2012, p. 13835-40, National Academy of Science.
- [BRU 07] BRUNEL N., VAN ROSSUM M. C. W., « Lapicque's 1907 paper : from frogs to integrate-and-fire », *Biological Cybernetics*, vol. 97, n° 5, 2007, p. 337–339.
- [BRU 16] BRUNTON S. L., PROCTOR J. L., KUTZ J. N., « Discovering governing equations from data by sparse identification of nonlinear dynamical systems », *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 113, n° 15, 2016, p. 3932–3937, National Academy of Sciences.
- [BUL 99] BULLOCK A., TROMBLEY S., *The Fontana Dictionary of Modern Thought*, London : Harper-Collins, 1999.

- [CAL 06] CALANDREAU L., TRIFILIEFF P., MONS N., COSTES L., MARIEN M., MARI-GHETTO A., MICHEAU J., JAFFARD R., DESMEDT A., « Extracellular hippocampal acetylcholine level controls amygdala function and promotes adaptive conditioned emotional response. », *The Journal of neuroscience : the official journal of the Society for Neuroscience*, vol. 26, n° 52, 2006, p. 13556–13566.
- [CAR 15] CARRERE M., ALEXANDRE F., « A pavlovian model of the amygdala and its influence within the medial temporal lobe », *Frontiers in Systems Neuroscience*, vol. 9, n° 41, 2015.
- [CHI 16] CHI K. R., « Neural modelling : Abstractions of the mind », *Nature*, vol. 531, n° 7592, 2016, p. S16–17.
- [CHU 13] CHUNG K., DEISSEROTH K., « CLARITY for mapping the nervous system », *Nat. Methods*, vol. 10, n° 6, 2013, p. 508–513.
- [COO 05] COOMBES S., « Waves, bumps and patterns in neural field theories », *Biol. Cybern.*, vol. 93, 2005, p. 91–108.
- [DAY 01] DAYAN P., ABBOTT L. F., *Theoretical neuroscience : computational and mathematical modeling of neural systems*, Cambridge, MA : MIT Press, 2001.
- [ELI 12] ELIASMITH C., STEWART T. C., CHOO X., BEKOLAY T., DEWOLF T., TANG Y., TANG C., RASMUSSEN D., « A large-scale model of the functioning brain. », *Science (New York, N.Y.)*, vol. 338, n° 6111, 2012, p. 1202–1205, American Association for the Advancement of Science.
- [FIX 11] FIX J., ROUGIER N. P., ALEXANDRE F., « A Dynamic Neural Field Approach to the Covert and Overt Deployment of Spatial Attention », *Cognitive Computation*, vol. 3, 2011, p. 279–293.
- [FRÍ4] FRÉGNAC Y., LAURENT G., « Where is the brain in the Human Brain Project? », *Nature*, vol. 513, 2014.
- [LEP 04] LE PELLEY M. E., « The role of associative history in models of associative learning : a selective review and a hybrid model. », *The Quarterly Journal of Experimental Psychology*, vol. 57, n° 3, 2004, p. 193–243.
- [MAR 15] MARKRAM H., MULLER E., RAMASWAMY S., REIMANN M. W., ABDELLAH M., SANCHEZ C. A., AILAMAKI A., ALONSO-NANCLARES L., ANTILLE N., ARSEVER S., KAHOU G. A., BERGER T. K., BILGILI A., BUNCIC N., CHALIMOURDA A., CHINDEMI G., COURCOL J.-D., DELALONDRE F., DELATTRE V., DRUCKMANN S., DUMUSC R., DYNES J., EILEMANN S., GAL E., GEVAERT M. E., GHOBIL J.-P., GIDON A., GRAHAM J. W., GUPTA A., HAENEL V., HAY E., HEINIS T., HERNANDO J. B., HINES M., KANARI L., KELLER D., KENYON J., KHAZEN G., KIM Y., KING J. G., KISVARDAY Z., KUMBHAR P., LASSERRE S., LE BÉ J.-V., MAGALHÃES B. R. C., MERCHÁN-PÉREZ A., MEYSTRE J., MORRICE B. R., MULLER J., MUÑOZ CÉSPEDES A., MURALIDHAR S., MUTHURASA K., NACHBAUR D., NEWTON T. H., NOLTE M., OVCHARENKO A., PALACIOS J., PASTOR L., PERIN R., RANJAN R., RIACHI I., RODRÍGUEZ J.-R., RIQUELME J. L., RÖSSERT C., SFYRAKIS K., SHI Y., SHILLCOCK J. C., SILBERBERG G., SILVA R., TAUHEED F., TELEFONT M., TOLEDO-RODRIGUEZ M., TRÄNKLER T., VAN GEIT W., DÍAZ J. V., WALKER R., WANG Y., ZANINETTA S. M., DEFELIPE J., HILL S. L., SEGEV I., SCHÜRMAN F., « Reconstruction and Simulation of Neocortical Microcircuitry », *Cell*, vol. 163, n° 2, 2015, p. 456–492, Elsevier.
- [MAS 66] MASLOW A., *The Psychology of Science*, New York : Harper and Row, 1966.

Frédéric Alexandre

- [MIN 65] MINSKY M., « Matter, Mind and Models », *Proc. International Federation of Information Processing Congress*, 1965, p. 45-49.
- [NEL 95] NELSON M., RINZEL J., « *The Hodgkin-Huxley model.* », chapitre 4, p. 27-51, Bower and Beeman. *The book of Genesis*, Springer, New York, 1995.
- [NEU 47] VON NEUMANN J., « The Mathematician », HEYWOOD R., Ed., *The works of the mind*, University of Chicago Press, 1947.
- [O'R 00] O'REILLY R., MUNAKATA Y., *Computational Explorations in Cognitive Neuroscience : Understanding the Mind by Simulating the Brain*, MIT Press, Cambridge, MA, USA, 2000.
- [O'R 06] O'REILLY R. C., FRANK M. J., « Making Working Memory Work : A Computational Model of Learning in the Prefrontal Cortex and Basal Ganglia », *Neural Computation*, vol. 18, n° 2, 2006, p. 283-328.
- [POP 34] POPPER K., *The Logic of Scientific Discovery*, Routledge, Edition 2002, 1934.
- [POR 12] PORRAS G., LI Q., BEZARD E., « Modeling Parkinson's disease in primates : The MPTP model », *Cold Spring Harb Perspect Med*, vol. 2, n° 3, 2012, page a009308.
- [ROU 12] ROUGIER N. P., FIX J., « DANA : Distributed numerical and adaptive modelling framework », *Network : Computation in Neural Systems*, vol. 23, n° 4, 2012, p. 237-253.
- [SCH 90] SCHWARTZ E. L., *Computational Neuroscience*, MIT Press, Cambridge, MA, USA, 1990.
- [STE 11] STEWART T. C., BEKOLAY T., ELIASMITH C., « Neural representations of compositional structures : representing and manipulating vector spaces with spiking neurons », *Connection Science*, vol. 23, n° 2, 2011, p. 145-153, Taylor and Francis, Inc.
- [THO 72] THOM R., *Stabilité structurelle et morphogénèse : essai d'une théorie générale des modèles*, W. A. Benjamin Reading, Mass, 1972.
- [VAR 13] VARENNE F., « Modèles et simulations dans l'enquête scientifique : variétés traditionnelles et mutations contemporaines », VARENNE F., SILBERSTEIN M., Eds., *Modéliser et simuler. Epistémologies et pratiques de la modélisation et de la simulation*, p. 11-49, Editions Matériologiques, 2013.
- [WIL 73] WILSON H., COWAN J., « A mathematical theory of the functional dynamics of cortical and thalamic nervous tissue », *Kybernetik*, vol. 13, 1973, p. 55-80.

---

# Les défis scientifiques pour mener les simulations numériques de demain

**Christophe DENIS**

*EDF R&D - 7, boulevard Gaspard Monge, F-91120 Palaiseau*

*Centre de Mathématiques et de Leurs Applications - ENS Paris-Saclay 61, avenue du Président Wilson, F-94230 Cachan*

*Christophe.Denis@{edf.fr;cmla.ens-cachan.fr}*

---

*RÉSUMÉ. Les simulations numériques ont besoin d'une puissance de calcul effrénée pour espérer par exemple être toujours plus proches des phénomènes physiques étudiés. Cependant, on assiste à une stagnation de la vitesse des processeurs en raison notamment du problème de réduction de la finesse de gravure et de la dissipation thermique. Pour continuer à délivrer une puissance de calcul toujours croissante, les architectures de calcul doivent être plus complexes, hétérogènes et posséder un nombre très élevé de processeurs. Cet article présente les défis scientifiques à surmonter pour mener les simulations numériques de demain sur de telles architectures de calcul. Ceci nécessitera notamment de revisiter les paradigmes de modélisation et de programmation utilisés depuis des décennies.*

*ABSTRACT. Numerical simulation requires an increasing computing power in the hope for example to produce results always closer to the studied physical phenomenon. However, there is a stagnation of the processor speed mainly due to the technical difficulty to decrease both its engraving and its thermal dissipation. In order to still deliver an increasing computing power, the architecture of super-computers has to be more complex, heterogeneous and fitted with a huge number of processors. From the application point of view, using efficiently these super-computers is definitively not straightforward as done in the past. This paper deals with some scientific challenges to be solved in order to run efficiently the future numerical simulation of these supercomputers. It will require to reconsider the HPC programming models used in the past.*

*MOTS-CLÉS : Calcul haute performance, simulation à large échelle, défis du calcul exaflopique.*

*KEYWORDS: High Performance Computing, large scale simulation, exascale challenges.*

---

## 1. Introduction : enjeux et besoins autour du calcul haute performance

Les simulations numériques ont besoin d'une puissance de calcul effrénée pour par exemple espérer être toujours plus proches des phénomènes physiques étudiés. Ces simulations sont largement utilisées par la communauté scientifique pour aider la compréhension des phénomènes complexes. Elles sont également utilisées par les entreprises pour face à la diversité des enjeux techniques, environnementaux, financiers et concurrentiels auxquelles elles sont soumis. A titre d'illustration, la simulation numérique est notamment utilisée au sein du groupe EDF pour [CAR 15] :

- mener des études de sûreté des centrales de production électrique ;
- définir la localisation optimale de parcs de production électrique renouvelable (parcs d'éoliennes ou d'hydroliennes) ;
- mener des études environnementales (sur la qualité de l'eau ou de l'air) ;
- produire des prévisions météorologiques et climatiques ;
- exploiter des données de consommation des clients pour adapter au mieux l'offre commerciale ;
- gérer stratégiquement la consommation énergétique de centres urbains.

Une puissance de calcul toujours croissante est alors nécessaire pour :

- étudier précisément des phénomènes physiques locaux ;
- utiliser une approche probabiliste pour prendre en compte la manque de connaissance et les différentes sources d'incertitude d'un modèle déterministe ;
- vérifier la mise en place de nouvelles méthodologies alternatives en utilisant par exemple des méthodes de réduction de modèles ;
- combler le manque d'efficacité des codes de calcul : la majorité des codes n'utilisant qu'une faible partie des ressources allouées (l'optimisation fine de la performance des codes n'ayant pas été jusqu'à présent jugée rentable économiquement).

### 1.1. La simulation numérique pour le groupe EDF

La simulation numérique est présente dans de nombreuses activités du Groupe EDF. Indépendamment du domaine d'application, la simulation numérique répond aux trois finalités suivantes :

1) *Simuler pour comprendre* : la simulation numérique permet de mieux appréhender les phénomènes physiques généralement complexes et couplés. Cette meilleure compréhension permet au Groupe EDF de saisir de nouvelles opportunités d'optimisation et de gérer efficacement les évolutions de contraintes réglementaires.

2) *Simuler pour décider* : la simulation numérique est également utilisée pour prédire la fiabilité des systèmes complexes. La prise de décision concerne l'amélioration de la fiabilité et de la performance de fonctionnement des équipements de production électrique.

3) *Simuler pour innover* : la simulation numérique est enfin un puissant vecteur d'innovation puisque permettant d'obtenir des informations de plus en plus précises pour améliorer les méthodes et les outils utilisés dans l'ingénierie. Elle permet de faciliter l'exploration de nouveaux domaines, le développement de nouveaux outils et la commercialisation de nouveaux services.

Le besoin en puissance de calcul dépend du contexte d'utilisation des études. Par exemple, la puissance de calcul nécessaire pour mener une simulation en mécanique des fluides autour d'une grille de mélange d'un assemblage d'une cuve REP (réacteur à eau pressurisée) d'une centrale de production nucléaire est différente si celle-ci est destinée :

- pour des études d'ingénierie au quotidien (typiquement le domaine de la simulation contient 100 millions de mailles) ;
- pour préparer les études de demain (typiquement le domaine de la simulation contient un milliard de mailles) ;
- pour explorer de nouvelles frontières et lever des verrous scientifiques (typiquement le domaine de la simulation contient 100 milliards de mailles).

Il existe une demande toujours croissante de puissance de calcul pour mener des études plus précises (en augmentant la finesse du maillage) et plus fiables (en prenant en compte les sources d'incertitudes).

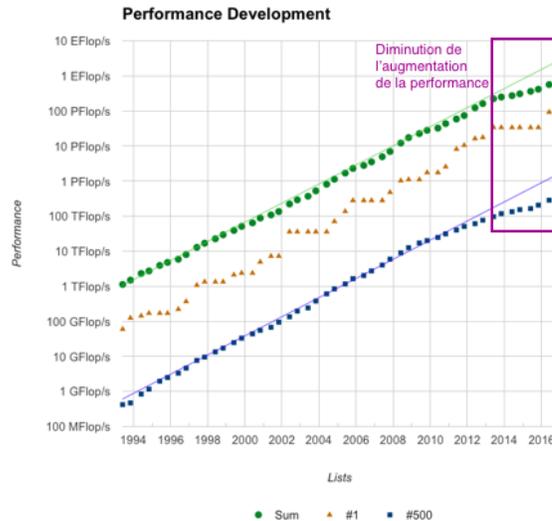
## 2. La fin de la période “Free Lunch”

Deux phases sont alternativement utilisées par un fabricant d'architecture de calcul pour délivrer une puissance de calcul toujours croissante aux utilisateurs. Ce cycle de développement est nommé “tick-tock” par la société Intel et entrelace :

- la phase d'augmentation de la performance intrinsèque des processeurs (phase “tick” en raison de l'augmentation de la vitesse d'horloge des processeurs) ;
- la phase de modification architecturale pour augmenter le nombre de processeurs (phase “tock”) sans augmenter la finesse de gravure de la phase précédente “tick”.

Ce cycle de développement a permis de fournir jusqu'au début des années 2000 une puissance de calcul toujours croissante. La figure 1 présente au fil des années l'évolution des 500 plus puissants supercalculateurs au monde. La diminution régulière de la finesse de gravure est principalement à l'origine de cette croissance en puissance de calcul sans profonde modification architecturale. Cette augmentation continue de puissance de calcul a été qualifiée rétroactivement de “Free Lunch” puisque les codes de calcul ont généralement bénéficié de cette augmentation de performance avec relativement peu de développement logiciel.

En 2005, Herb Sutter sonne le glas de la course à la performance bon marché dans [SUT 15]. En effet, on assiste depuis les années 2000 à une diminution plus complexe de la finesse de gravure freinant l'accélération de la performance, comme le montre



**Figure 1.** Evolution de la performance des super-calculateurs (fournie par [www.top500.org](http://www.top500.org)) : on constate un ralentissement de l'augmentation depuis le début des années 2000. La somme des puissances de calcul des 500 supercalculateurs les plus performants est représentée par un cercle vert, la puissance de calcul du supercalculateur classé premier (resp. dernier) est représentée par un triangle orange (resp. par un carré bleu).

la figure 1. La période de la phase “tick-tock” s’allonge. De plus, la consommation électrique de centres de calcul devient de plus en plus dimensionnant en terme de coût.

### 3. Modification profonde des architectures de calcul

Une solution pour continuer à délivrer une puissance de calcul croissante est d’intensifier la phase de modification de l’architecture des supercalculateurs en multipliant le nombre de processeurs et d’accélérateurs de calcul. Par exemple, les futures machines exaflopiques délivrant une puissance crête d’un milliard de milliards d’opérations par seconde sont attendues pour 2020. Le développement de telles machines représente un sérieux défi technique. L’utilisation efficace par les codes de calcul de telles machines nécessite un effort encore plus considérable de la communauté scientifique comme le mentionne I. S. Duff dans [DUF 11] : « *Although we do not know the detail of the hardware that will be available, we can be certain that the level of parallelism will increase significantly, that machines will be more complex and heterogeneous [...]. Thus, in common with our colleagues in the US and Japan, we recognize that considerably more effort and manpower will be required to even begin to address*

*this complexity [...]* ». La section suivante présente quelques défis scientifiques à relever qui bénéficieront naturellement aux architectures de calcul moins puissantes, par exemple petaflopiques.

#### **4. Quelques défis scientifiques à surmonter**

Il est nécessaire de surmonter les défis scientifiques présentés dans cette section pour que les simulations à large échelle puissent bénéficier de la puissance mise à disposition par les nouvelles architectures de calcul. Cet effort se justifie par l'opportunité d'exploration de nouvelles frontières scientifiques et de nouvelles innovations industrielles. Le coût de l'adaptation d'un code de calcul peut être plus important qu'une ré-écriture totale de calcul. Adapter ou ré-écrire : il s'agit donc d'une décision propre à chaque code en fonction de la complexité des modifications et de leurs coûts économiques. L'adaptation d'un code est toutefois facilitée si celui-ci est modulaire et utilise des bibliothèques de calcul puisque pouvant être remplacées par celles dédiées pour les nouvelles architectures [ENE 12].

##### **4.1. Limitation de la consommation électrique**

Il est crucial d'obtenir une réduction d'énergie dans les centres de calcul afin que la puissance électrique de ceux-ci n'augmente pas dans les mêmes proportions que leurs puissances de calcul. I. S Duff propose une estimation des coûts en énergie électrique dans [DUF 11] : « *The hardware costs for this forthcoming generation of high performance computers are estimated to be in the order of \$200 million with probably at least \$20 million a year in electricity costs to run them.* ». Le transfert de données constitue la partie la plus importante de la consommation électrique d'une simulation. Plusieurs pistes existent pour réduire la consommation électrique des simulations et en conséquence des centres de calcul :

- 1) modification des algorithmes de parallélisation pour privilégier la localisation des données avec la possibilité de les calculer à nouveau pour éviter leurs transferts ;
- 2) utilisation d'accélérateurs de calcul plus économes en énergie ;
- 3) réduction de la précision de variables de calcul sans affecter la précision des résultats des grandeurs d'intérêt ;
- 4) utilisation d'algorithmes en précision mixte, calcul de la partie la plus intensive en précision réduite puis calcul d'un algorithme de point fixe en précision courante [BAB 09].

##### **4.2. Gestion efficace de la tolérance aux fautes**

Les architectures vont disposer d'un nombre très important de composants. Par exemple, les futures machines exaflopiques vont contenir plus d'un million de cœurs

de calcul. Les pannes qui faisant figure d'exception sur des architectures de calcul de petite taille vont devenir récurrentes sur ces nouvelles architectures. En effet, des études statistiques ont montré que le temps moyen de fonctionnement avant panne est inversement proportionnel au nombre de processeurs utilisés. Il convient de gérer efficacement la tolérance aux fautes d'une application puisque le temps moyen de fonctionnement avant panne devient un indicateur de performance aussi important que l'accélération d'un code de calcul. Le défi est de mettre place des techniques de gestion de la tolérance aux fautes et de reprise de calcul avec un surcoût limité en termes de temps de calcul, de consommation énergétique et de mémoire.

### **4.3. *Evaluation et optimisation de la performance***

Le paradigme de programmation parallèle traditionnellement utilisé vise à diminuer les volumes de calcul au détriment de la localité des données. Le besoin crucial de réduction de la consommation électrique des futurs supercalculateurs bouleverse ce paradigme. Il est en effet nécessaire de privilégier la localité des données pour limiter le transfert énergivore de données. L'hétérogénéité des composants constituant le supercalculateur motive l'utilisation de bibliothèques de calcul dédiées. Enfin, l'évaluation de la performance d'un code de calcul est de moins en moins intuitif pour un développeur en raison de la complexité croissante des architectures de calcul. Il existe donc un besoin de méthodologies et d'outils pour effectuer analyser finement la perte de performance de son application. Augmenter les performances d'un code devient en effet rentable économiquement contrairement à la période révolue du "Free Lunch".

### **4.4. *Quantification des incertitudes***

La quantification des incertitudes est une préoccupation de plus en plus présente dans le domaine de la simulation numérique. Obtenir un résultat numérique déterministe d'une simulation ne suffit plus toujours pour étayer une prise de décision d'une étude de conception, de sûreté ou de prévision. La prise en compte de toutes les incertitudes commises durant une simulation permet en effet d'améliorer son interprétation. Les incertitudes peuvent se classer ainsi :

- incertitudes épistémiques (par exemple portant sur le manque de connaissance d'un phénomène physique) ;
- incertitudes stochastiques (par exemple portant sur des paramètres physiques) ;
- incertitudes numériques (par exemple durant la résolution numérique des modèles).

Un calcul déterministe ne peut pas être utilisé seul pour caractériser ces incertitudes. Il est requis de mettre en œuvre des approches probabilistes nécessitant d'exécuter puis d'exploiter des calculs indépendants (par exemple une centaine). Le volume de calcul nécessaire est donc plus important qu'un seul calcul déterministe. Toutefois, l'analyse des incertitudes des paramètres d'entrée du calcul à l'aide d'un plan d'expé-

rience permet de mettre en place des modèles réduits plus économes en puissance de calcul, en mémoire et en consommation électrique.

#### 4.5. Vérification numérique

Les calculs effectués sur un supercalculateur utilisent dans la grande majorité des cas une arithmétique à virgule flottante. Cette arithmétique est la source d'erreurs de représentation des nombres flottants et de perte de précision en raison de la propagation des erreurs d'arrondi [MUL 10] [CHA 96]. Elle perd aussi par rapport à l'arithmétique exacte quelques propriétés, par exemple l'associativité de la somme. En conséquence, des résultats différents peuvent être obtenus pour une même simulation numérique en fonction par exemple de la charge du supercalculateur : on parle alors de reproductibilité numérique. Ce phénomène sera amplifié dans un contexte de calcul exaflopique en raison du nombre très important d'opérations arithmétiques flottantes effectuées par seconde. Il existe donc un besoin de méthodologies et d'outils logiciels pour déterminer des statistiques sur la précision numérique des résultats de calcul. Au delà de la vérification numérique, ces statistiques permettent également d'établir judicieusement un compromis entre la performance et la précision numérique tout en limitant la consommation électrique requise. Il est enfin possible de mettre en place des stratégies pour qu'un code de calcul soit reproductible numériquement pour faciliter son débogage. Il convient toutefois de noter que l'assurance de reproductibilité d'un code ne garantit pas que les résultats obtenus soient précis comme le montre la figure 2.



**Figure 2.** Variations d'un résultat de calcul, à gauche, précision et reproductibilité élevées et à droite, précision basse et reproductibilité élevée

## 5. Conclusion

Les simulations numériques ont besoin d'une puissance de calcul effrénée pour par exemple espérer être toujours plus proches des phénomènes physiques étudiés. Cependant, on assiste à une stagnation de la vitesse des processeurs en raison notamment du problème de réduction de la finesse de gravure et de la dissipation thermique. Une solution pour continuer à délivrer une puissance de calcul croissante est d'intensifier la phase de modification de l'architecture des supercalculateurs en multipliant le nombre de processeurs et d'accélérateurs de calcul. L'utilisation efficace par les

Christophe Denis

codes de calcul de telles machines nécessitent un effort considérable de la communauté scientifique. Cet article a illustré certains défis : limitation de la consommation électrique, gestion efficace de la tolérance aux fautes, évaluation et optimisation de la performance, quantification des incertitudes et vérification numérique.

Au delà des défis scientifiques présentés dans cet article, une rupture scientifique majeure dans le domaine de la simulation numérique peut surgir. Il existe en effet un énorme potentiel autour de l'informatique quantique. Les architectures actuelles effectuent des traitements sur des données binaires valant exclusivement 0 ou 1. L'informatique quantique manipule des données pouvant posséder plusieurs valeurs simultanément. L'exploitation de cette propriété introduit un parallélisme intrinsèque permettant de réduire drastiquement le temps de calculs avec une très bonne efficacité énergétique. Il serait possible de résoudre sur des futurs calculateurs quantiques des algorithmes dont le temps de résolution est actuellement trop long voir prohibitif (par exemple dans le domaine de la combinatoire ou de la cryptographie). Toutefois, la technologie de ce type d'ordinateur est encore loin d'être mature. Il existe encore des verrous scientifiques à lever comme le problème crucial de la persistance des données quantiques.

## 6. Bibliographie

- [BAB 09] BABOULIN M., BUTTARI A., DONGARRA J., KURZAK J., LANGOU J., LANGOU J., LUSZCZEK P., TOMOV S., « Accelerating scientific computations with mixed precision algorithms », *Computer Physics Communications*, vol. 180, n° 12, 2009, p. 2526–2533.
- [CAR 15] CARUSO A., MAYADOUX Y., DU W., « HPC Simulation at EDF Enabling Energy Challenges », *PRACEdays15, Dublin, 26 May 2015*, 2015.
- [CHA 96] CHAITIN-CHATELIN F., FRAYSSÉ V., *Lectures on Finite Precision Computations*, SIAM, Philadelphia, 1996.
- [DUF 11] DUFF I. S., « European Exascale Software Initiative : Numerical Libraries, Solvers And Algorithms », rapport n° TR/PA/11/118, 2011, CERFACS.
- [ENE 12] OF ENERGY U. D., *Report on the Workshop on Extreme-Scale Solvers : Transition to Future Architectures*, U.S. Department of Energy, 2012.
- [MUL 10] MULLER J.-M., BRISEBARRE N., DE DINECHIN F., JEANNEROD C.-P., LEFÈVRE V., MELQUIOND G., REVOL N., STEHLÉ D., TORRES S., *Handbook of floating-point arithmetic*, Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 2010.
- [SUT 15] SUTTER H., « The Free Lunch Is Over : A Fundamental Turn Toward Concurrency in Software », *Dr. Dobbs's Journal*, , 2015.

## Remerciements

L'auteur remercie Jean-Paul Chabard, Directeur Scientifique d'EDF R&D, et Ange Caruso, Responsable Programme Technologies de l'Information d'EDF R&D, pour la relecture de cet article. La prise en compte de leurs remarques ont permis d'améliorer la qualité de cet article.

# Du bon usage des ordinateurs et du cerveau des chercheurs

Michaël Beuve<sup>1</sup>

## 1. Introduction : Faut-il plus de puissance de calcul pour améliorer la modélisation numérique ?

Les progrès considérables que les développements informatiques ont pu apporter à la modélisation et les possibilités qui sont aujourd'hui offertes en matière de prédiction et de simulation, apportent indéniablement des arguments en faveur d'une réponse affirmative à cette question. Mais devant cet incontestable constat, il me paraît néanmoins nécessaire d'apporter quelques nuances et mises en garde quant à l'utilisation de ces ressources. L'usage de ces moyens informatiques n'est évidemment pas sans coût. Les coûts qui viennent à l'esprit sont bien sûr les coûts financiers, énergétiques, écologique et en matière premières pour construire, entretenir, faire tourner puis retraiter, du moins se débarrasser de ces machines. Dans le cas où les ressources informatiques sont intelligemment mises à profit, il est nul doute que la modélisation et simulation s'avèrent, pour un même niveau de développement technique et scientifique, des plus efficaces car elles évitent souvent bien des essais infructueux de réalisations « physiques » et permet de converger plus rapidement vers, par exemple, un design optimal d'un appareil, d'une machine, d'une installation... La question réside alors dans le bon usage des moyens et dans ce cadre le « toujours plus » n'est pas forcément la meilleure solution du problème.

---

<sup>1</sup> IPNL, UMR 5822, Université de Lyon, Université Lyon 1, CNRS/IN2P3, 4 rue E. Fermi 69622 Villeurbanne

Michaël Beuve

J'ai pu constater à travers ma propre expérience de recherche et d'enseignement, qu'à s'engouffrer, sans réflexion préalable dans l'orgie computationnelle, on pouvait y perdre son temps et peut-être même s'y perdre. Ce « coût » moins définissable, moins palpable est donc difficile à estimer et à maîtriser.

Inversement, le contexte sociétal est très favorable à ce geste quasi-reflexe d'appel à des moyens calculatoires de masse. L'élan du « *cloud computing* » ou encore la pression de la rentabilité poussent assez facilement l'humain dans l'action et non à la réflexion : « Se dépenser plutôt que de penser ». Face à un problème à résoudre, la tentation est légitime, par exemple, coder un algorithme qui semble sans difficultés majeures ou chercher à formaliser mathématiquement le problème et y chercher des solutions analytiques approchées. La première solution est rassurante car l'issue est visible, palpable. La seconde est plus incertaine car peu d'éléments vous indiquent que la démarche entreprise va aboutir malgré un labeur soutenu. Au contraire, mille exemples vous chuchotent que l'entreprise n'aboutit que rarement. La démarche devient alors presque angoissante dans un contexte de pression au résultat. Alors même ceux qui sont les plus conscients du potentiel révolutionnaire qu'un travail amont de formalisation pourrait apporter, peuvent céder à cette facilité. Mais l'usage de ces ressources de masse est lourd. Lourd dans la gestion des jobs que l'on lance avec espérance, lourd dans la gestion et l'analyse des données.

Pour alléger la facture de ces coûts, et sans forcément tomber dans l'obsession d'une résolution analytique complète du problème par un formalisme mathématique aussi efficace qu'élégant, on peut au moins oser quelques réflexions sur les algorithmes et codes qui réalisent notre modélisation.

Ce qui suit offre des pistes de réflexions allant de stratégies concrètes aux tentatives de prise de recul et de reconsidération de la modélisation. L'ensemble est parsemé d'exemples, souvent triviaux mais qui malheureusement, de mon constat personnel ne constituent pas un réflexe unanime. Puis ce texte se termine par une réflexion plus générale, sur des orientations qui me semblent indispensables si on souhaite lever des verrous à l'élaboration de modélisations et simulations majeures.

## **2. A la recherche du temps perdu**

Des lors que le temps de calcul devient un obstacle, la recherche des coûts d'utilisation du processeur (ou de la carte graphique) devient une évidence, d'autant que le modèle ou la simulation seront fréquemment utilisés. Pour cela, l'usage d'un outil réalisant un profil du code permet de rapidement isoler les parties qui consomment le plus de ressources. Le profil consiste, par exemple, en une évaluation du nombre d'appels d'une fonction ou procédure et le temps d'utilisation du processeur (CPU). Le diagnostic sera d'autant plus aisé que le code sera structuré en routines. Le classement des routines selon ces critères permet de pointer le doigt sur les parties du code qui sont à améliorer en priorité.

Les sections suivantes donnent quelques-unes des actions qui peuvent être menées à cette fin.

### ***2.1. Ne pas abuser de la précision numérique***

Pour éviter la cumulation néfaste des arrondis de calculs et dégrader la qualité de ses simulations par de la pollution numérique, la pratique la plus usuelle consiste à travailler en double précision, garantissant la précision numérique des opérations avec une quinzaine de chiffres. Le coût calculatoire est évidemment fortement lié à la précision numérique. Il en va de même pour le stockage des données et de leur occupation dans la mémoire vive de l'ordinateur. Cette précision n'est pas forcément nécessaire ou au moins nécessaire partout et après une analyse des coûts, on peut isoler des parties du code qui gagnerait à être optimiser avec un impact acceptable sur la précision globale des calculs. Certes il y a des cas de figure où la précision permet de garantir un certain niveau de cohérence (conservation de la norme pour des isométries, cohérence de phase pour des problèmes de propagation ou d'interférences...), mais dans de nombreux cas de figure, la précision intrinsèque du modèle est plus souvent limitée par le manque de connaissances ou de données.

Cette question de la précision est explicite quand par exemple le modélisateur construit son propre algorithme et fixe la précision qui termine la série ou la boucle de calculs, mais beaucoup moins explicite quand il s'agit simplement d'appeler une fonction d'une bibliothèque standard. Une solution simple est de repasser en simple précision quand cela devient pertinent. Une autre consiste à tabuler ou approcher la fonction plus économe en ressources. Mais, il serait souhaitable que le développement et l'utilisation de bibliothèques de fonctions standards à précision contrôlées soient vivement encouragés et que la réflexion sur la précision soit un réflexe des modélisateurs.

### ***2.2. A la recherche du meilleur algorithme***

Ici encore, cette recommandation peut apparaître évidente. Cependant, ce n'est pas un réflexe pour tous les modélisateurs ou simulateurs d'ouvrir un ouvrage de référence (tel que le Numerical recipes) qui propose divers algorithmes pour résoudre un problème numérique et surtout discute de sa complexité, sa stabilité et sa convergence numérique. Il n'y a pas en général un bon algorithme mais plutôt un bon algorithme pour un problème donné. L'art du modélisateur sera alors de bien situer son problème numérique, de faire le bon choix voire de construire un algorithme plus spécifique du problème qu'il a à résoudre et de l'architecture et capacité des moyens informatiques qu'il a à sa disposition.

Néanmoins, être averti de cette pratique ne prive pas d'être piégé par la réalité du système que l'on cherche à modéliser. En effet, bien imprégné de la conception que l'on se fait du système à modéliser, on construit son algorithme en le calquant très souvent sur cette représentation. Pourtant construire un modèle et le réaliser numériquement sont deux entreprises différentes.

Prenons l'exemple de la dynamique moléculaire classique à pseudo potentiel. Cette méthode consiste à simuler la dynamique d'un système de particules (par exemples des molécules, des atomes...) en interaction dans le cadre de la théorie Newtonienne.

Michaël Beuve

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}$$

Où  $m$  est la masse de la particule,  $\vec{v}$  sa vitesse et  $\vec{F}$  la force que subit cette particule.

Cette théorie invite à estimer de manière explicite les positions  $r_i$  et les vitesses  $v_i$  des particules pour une suite d'instants  $t_i$  séparés par un pas de temps  $\Delta t$ , de manière récursive selon :

$$\begin{cases} v_{i+1} = \frac{F\Delta t}{m} + v_i \\ r_{i+1} = v\Delta t + r_i \end{cases}$$

Pourtant, cette algorithm est loin d'être me meilleur par sa précision et stabilité. On lui préférera souvent une des méthodes implicites. Ainsi des équipes cherchant à modéliser la dynamique des atomes d'un solide formé d'atomes sous l'impact d'ions de haute énergie ont choisi l'algorithme de Verlet en vitesse. Ce choix tout à fait opportun n'empêcha pas ces auteurs d'être piégé par leur intuition du système physique. En effet, pour choisir leur pas de temps d'intégration, ils considèrent un temps petit par rapport à la période de vibration des atomes. Certes leur simulation devait être à minima capable de reproduire ces oscillations, mais le choix du pas de temps est aussi lié à l'algorithme employé. Par exemple, dans le cas où l'algorithme donne une solution exacte (gradient de force nul), le pas de temps peut-être choisi aussi grand que souhaité. En estimant l'erreur par rapport à la solution exacte dans le cas d'un champ de force à gradient uniforme, nous avons pu construire un critère non plus basé sur la période de vibration mais sur l'estimation du gradient, gagnant un facteur 5 sur les temps de calculs et sur le contrôle du système. Ce gain appréciable, m'avait permis au prix d'une heure de réflexion et une journée d'implémentation et de test de réaliser mes simulations en quelques mois gagnant un an de calculs [BEU 2003].

### 2.3. Repenser le problème

Si les démarches précédentes ne suffisent pas à résoudre le problème du temps de calcul, alors il est peut-être nécessaire de repenser le problème, partiellement ou complètement. Cette stratégie requiert une prise de recul, d'autant que dans certains cas il est nécessaire de se libérer de certaines contraintes ou carcans.

Pour sensibiliser des étudiants en informatique à cette question, je profitais de l'introduction au formalisme des distributions continues de charges abordé dans un de mes cours de base physique de l'informatique pour soulever la question suivante : quel est le temps de calcul nécessaire pour calculer le champ électrique à quelques centimètres d'une sphère de 1cm de rayon chargée en surface par un courant de 1 ampère pendant une minute. Ce problème était volontairement choisi simple pour lui donner un caractère banal. Après écriture de l'algorithme et estimation grossière du temps de calcul en unité de coup d'horloge, les étudiants constataient que le temps de calcul se chiffrait en siècles avec un ordinateur standard. Dans le débat qui suivait, la solution qui émergeait de l'amphithéâtre,

chaque année, était l'utilisation de gros moyen de calcul, une solution qui s'avérait déraisonnable en pratique. Déraisonnable pour un système très banal dans ses ordres de grandeur.

Une manière de résoudre très efficacement ce problème, très banal, est de faire appel à l'approximation des distributions continues de charges, qui remplace la distribution de charges ponctuelles par une distribution continue. Certes il faut accepter de ne calculer qu'un champ moyen exempt de toutes fluctuations spatiales liées au caractère discret de la distribution réelle, mais dans beaucoup d'applications, seul le champ moyen est intéressant. Ce formalisme rend alors raisonnables, la résolution de nombreux problèmes, et dans certains cas par des calculs analytiques, tels que justement la sphère chargée. Les étudiants devaient retenir de cet exemple l'importance d'estimer le coût calculatoire, même grossièrement, d'une part et de ne pas se jeter toute de suite dans la solution des moyens de calculs hautes performances sans prendre le temps de réfléchir à d'autres alternatives.

### **3. Exemples concrets tirés de mes recherches**

Ces questionnements sur le bon usage des ressources informatiques a toujours été présent dans mon esprit et nous a permis d'aborder des problèmes, des questions scientifiques... pour lesquels l'application simple et directe aurait conduit à une quantité considérable de ressources. En écrivant ce texte, relisant de ce fait mon parcours avec ce regard singulier, je réalise qu'inconsciemment, je devais avoir une attirance pour ces défis à la fois de modélisations complexes et de casse-têtes numériques.

Dans le choix des exemples, je me focaliserai sur l'interaction des rayonnements avec le vivant dans le cadre du développement des radiothérapies dites innovantes. Cette thématique de recherche représente en effet la part dominante de mes activités de recherche. De plus, elle permet d'apporter des illustrations dans différents domaines de recherches très pluridisciplinaires. Enfin, c'est aussi l'occasion de dédier une section à l'approche multi-échelle, incontournable dans ce domaine.

#### ***3.1. Approches multi-échelles***

L'approche basée sur la modélisation multi-échelle est indispensable lorsque l'on s'intéresse à la modélisation biophysique des effets d'un traitement d'une tumeur cancéreuse par hadronthérapie. Cette thérapie consiste à irradier une tumeur avec un faisceau d'ions de très haute énergie, permettant de conformer un maximum de dose d'irradiation dans le volume tumoral et aussi de bénéficier d'un boost d'effets biologiques contre les cellules tumorales résistantes. Ce qui est remarquable c'est que les effets biologiques, qui offrent un bon contrôle de la tumeur, sont dus à une concentration d'effets physiques et chimiques induits par l'impact des ions à l'échelle nanométrique. Aussi, d'un côté, il est indispensable de prendre en compte

Michaël Beuve

des effets quantiques, et, de l'autre, de simuler le comportement d'un tissu, avec un objectif de précision indispensable à l'optimisation clinique des soins.

Nous avons donc et continuons à travailler sur les différentes échelles de description. Cette modélisation commence par la description des processus élémentaires d'interaction de particules (photons, ions, électrons) avec des atomes et molécules ( $\Delta x \ll \text{nm}$  et  $t \ll 10^{-15}\text{s}$ ) [GAL 2005]. Puis, elle consiste en leurs intégrations dans des simulations Monte-Carlo pour d'écrire les cascades d'ionisation et d'excitations qui en résultent ( $x < \text{mm}$  et  $t < 10^{-15}\text{s}$ ) [BEU 2009 a]. Cette phase physique est suivit de processus de relaxation de la matière et de réactions chimiques marqués par une forte hétérogénéité ( $t < 10^{-5}\text{s}$ ) [COL 2016]. Ces processus physiques et chimiques induisent une réponse cellulaire conduisant potentiellement à la mort cellulaire ( $t \sim \text{jours}$ ) [CUN 2017]. Cette mort cellulaire réduit la progression de la tumeur et conduit à son éradication [CHA 2014].

### ***3.2. Propagation des rayonnements et dosimétrie physique***

Cette première illustration de réflexions concerne l'utilisation des simulations Monte-Carlo pour simuler la propagation de particules, telles que des ions ou des électrons, dans un milieu de type gaz, liquide ou solide. La simulation Monte-Carlo s'appuie sur le tirage de nombre aléatoires, qui dans cette application, permet de représenter les interactions des particules en mouvement avec les électrons et les ions du milieu, en utilisant une description de type collisionnelle et en calculant les lois de probabilités d'interaction via le formalisme de la mécanique quantique. L'usage de cette simulation est très intuitif car son algorithme reflète l'image de particules qui subissent des collisions lors de leurs propagations. Cependant, cette méthode ne converge pas très vite puisque l'incertitude statistique suit une loi en  $1/\sqrt{N}$  du nombre  $N$  de simulations. De plus, si elle est adaptée pour simuler les événements les plus fréquents, les événements rares peuvent induire une explosion du temps de calculs. Dans mon travail de thèse, j'avais justement à confronter mes simulations à des données expérimentales correspondant à des événements rares : précisément des spectres doublement différentiels en énergie et en angle d'émission d'électrons de haute énergie éjectée par des ions rapides. Ce temps de calculs était un verrou technique et aucun spectre ainsi calculés n'avait été publié. Si ce type de simulation est particulièrement adapté à la stratégie de distribution du calcul sur un grand nombre de machine, cette solution n'était pas courante dans les années 90. J'ai donc dû trouver une alternative. D'abord en réalisant que la simulation pouvait être vue comme une méthode de résolution numérique d'une équation maîtresse, dont nous avons pu démontrer la forme [BEU 2000] [BEU 2002]. Cette considération était très importante car cela ramenait la simulation à un algorithme et non à un modèle phénoménologique de la réalité. Autrement dit, la modélisation était dans l'équation maîtresse et la simulation n'était qu'un algorithme parmi d'autres, potentiellement plus efficace. Ensuite, j'ai construit un algorithme définissant des poids statistiques aux événements et aux particules suivies permettant de biaiser la simulation tout en respectant l'équation maîtresse. J'ai aussi constaté que l'art du biaisage des simulations Monte-Carlo n'est pas aisé, mais qu'il nous a permis de

résoudre notre obstacle technique. Ainsi, il ne fallait qu'une heure de calcul contre 50 jours pour produire un spectre doublement différentiel avec une statistique suffisante. Nous avons pu également simuler d'autres données expérimentales associées à des événements rares telles que l'émission d'électrons Auger induites par des doubles ionisations dans les couches atomiques profondes [GER 2003] [CAR 2006]

### ***3.3. Production de radicaux libres et cinétique chimique hétérogène***

Un second exemple de problème illustrant le gain que peut apporter la réflexion concerne la simulation de la production de radicaux libres induite par l'impact d'ions de haute vitesse dans l'eau. Ce système est numériquement coûteux à simuler car il n'est pas possible d'utiliser les équations différentielles standards de cinétiques chimiques car la production de radicaux libres initiale par les ions est extrêmement hétérogène. Il existe quelques variantes pour simuler un tel système, mais globalement, il s'agit de simuler la diffusion pas à pas des espèces chimiques et de traiter leur interaction paire à paire. La complexité algorithmique est donc en  $N^2$  et les méthodes d'optimisation utilisées en dynamiques moléculaires sont délicates à appliquer car la diffusion des espèces est très importante. Le pas de temps de simulation est au moins au départ de la simulation très petit car la distance entre espèces peut être sub-nanométrique. Le nombre d'espèces à simuler se chiffre en centaines de milliers voire de millions. La simulation est donc déjà coûteuse par essence, mais au prix de bon nombre d'optimisation, il est raisonnable de réaliser des simulations dépassant la dizaine voire la centaine de microsecondes. Les choses se compliquent dès lors que l'on souhaite ajouter un soluté dans l'eau. Par exemple nous avons voulu ajouter une concentration d'oxygène ou d'antioxydant [COL 2016] pour se rapprocher des conditions d'irradiation d'un milieu biologique et ainsi mieux comprendre l'impact des radiations sur le vivant. Une estimation des ressources nécessaire portait le temps de calcul pour une seule simulation en siècles et la mémoire RAM en unité déraisonnable. Pour néanmoins réaliser ces simulations, il a simplement fallu réaliser que si la distribution initiales d'espèces réactives, et donc toutes les réactions avec le soluté étaient fortement hétérogène, on pouvait mettre à profit le fait que la concentration initiale en soluté était homogène et que la quantité énorme de molécules de ce soluté, cause du problème pouvait devenir un avantage. Suivant les développements analytiques de Green et al. Publiés dans les années 80-90 [GRE 1984][PIM 1994] (à une époque où les ressources informatiques étaient non exhaustives), nous avons traité cette concentration en soluté comme un réservoir inépuisable d'espèces [COL 2016]. Cette approximation bien qu'en contenant certains, ignore des effets de corrélation spatiale. Nous avons donc intégré cette approximation à notre simulation est l'avons validée en réalisant une simulation exacte dans le cas d'un système modèle à la fois proche de conditions réelles, défavorable à l'approximation et assez petit pour permettre une simulation en un temps raisonnable (1 mois de calcul seulement). Finalement, le coût de calcul et en mémoire pour prendre en compte un soluté était seulement le double d'une modélisation sans soluté, rendant possible notre étude.

### ***3.4. Modélisation de la mort cellulaire***

Transformer les effets physiques et chimiques précoces induits par une irradiation en probabilité de mort cellulaire nécessaire à la prédiction du contrôle tumoral ou au moins pour l'optimisation des traitements, est un enjeu autant scientifique que technique. Il s'agit en effet de transformer en modèle phénoménologique simple, un ensemble de connaissances et données physiques, chimiques et biologiques sévèrement incomplet et entaché d'incertitudes et de variabilité expérimentales. A cela s'ajoute l'effort numérique qui se mesure par l'évaluation de quelques ordres de grandeur.

Rappelons que l'efficacité biologique de l'hadronthérapie est due à des phénomènes qu'il faut décrire à l'échelle nanoscopique, mais que l'observable finale est bien macroscopique. Si l'on considère des conditions d'irradiation cliniques réalistes, alors le destin d'une seule cellule est défini par l'impact de million d'ions, que pour rendre compte de ces impacts il est nécessaire de simuler pour chaque impact des centaines de milliers d'événements physiques et chimiques décrits précédemment. Il faut aussi ajouter que si un modèle permettait de transformer les effets précoces en taux de mort cellulaire, les paramètres de ce modèle dépendent de manière indirecte du type de cellules vivantes et que ces paramètres ne sont pas connus. Autrement dit, au problème direct déjà complexe, il faut ajouter un problème inverse pour déterminer les valeurs de ces paramètres. Cette détermination est réalisée en comparant les résultats prédits et moyennés sur des millions de configurations d'irradiations aux données expérimentales de taux de mort cellulaire. Pour achever de poser le problème, il faut ajouter la contrainte d'application clinique, qui exige une vitesse d'exécution offrant une interactivité suffisante en utilisant un serveur de calcul assez standard.

Ce problème a été abordé en réalisant des approximations. Notamment, le modèle LEM, utilisé en clinique dans les centres européens d'hadronthérapie, représente les centaines de millions d'événements physique créés par chaque impact par une fonction analytique représentant une dose locale moyenne définie à l'échelle nanoscopique. Combiné à d'autres approximations l'introduction de ce concept de dose locale réduit considérablement la complexité du problème. Cependant, nous avons montré que cette approximation n'était pas tenable sur le plan physique car elle violait les propriétés aléatoires incontournables des rayonnements ionisants à l'échelle micro et nanoscopique.

Nous avons proposé récemment un modèle alternatif, le modèle NanOx, qui ne réduit pas la structure des dépôts d'énergie à une dose locale moyennée. S'il n'est pas possible d'expliquer en quelques lignes les principes de ce modèle, on peut préciser que sa construction s'est appuyée sur un gros travail de réflexion et de formalisation rigoureuse. La réalisation numérique a nécessité autant de réflexions pour construire des algorithmes optimisés et choisir des approximations à la fois profitables et acceptables au moins sur le plan des concepts physiques. Ces approximations s'appuient pour la plupart sur les connaissances fondamentales et profondes acquises sur l'interaction des ions avec la matière. Le besoin en ressources informatiques reste à ce jour plus important que pour le modèle LEM,

mais il demeure une marge de progression, que nous mettrons en œuvre dans l'hypothèse et le cadre d'un transfert vers l'application clinique. Notre objectif actuel étant d'évaluer et d'améliorer les capacités prédictives du modèle.

### ***3.5. Dosimétrie et imagerie à l'échelle du patient***

Un autre carcan que je m'attache à lever concerne le dogme du pixel dans le domaine de l'image, et plus précisément du voxel en imagerie médicale notamment pour le traitement du cancer par radiothérapie. Que cela soit pour le diagnostic d'un cancer ou la planification des traitements, l'imagerie médicale est un outil indispensable. Ainsi l'anatomie est représentée par des images issues de scanner ou d'IRM. Ces images correspondent à un ensemble de pixels (en 3D voxels) dont la couleur ou le niveau de gris portent une information. Cependant, cet ensemble de pixels ne forme à mon sens qu'une représentation de la réalité qui émane de la technologie de visualisation. Il me semble intéressant de réfléchir à d'autres représentations plus adaptées au problème à traiter. Aussi, prenant inspiration de l'approche introduite par la mécanique des milieux continus, il m'a semblé intéressant de généraliser la description de l'image par des éléments finis et en particulier des tétraèdres. L'avantage d'une telle représentation est multiple.

L'expression de la loi de conservation de la matière y est très naturelle. Le respect de cette loi est très important dans le contexte de la radiothérapie ou l'imagerie basée sur les rayonnements (scanner, imagerie TEP), car la pénétration du rayonnement est principalement gouvernée par la quantité de matière traversée.

- i. La représentation par une grille de pixels ou de voxels n'est pas la plus adaptée au suivi du mouvement ou de la déformation des objets. La déformation détruit la topologie d'une grille de voxels et il n'existe pas de relation bijective exacte entre les pixels d'une image et ceux d'une image à un autre instant. Ainsi, le problème du suivi par exemple d'une tumeur pulmonaire est par essence mal posé et nécessite de mettre au point des méthodes de recalage (dite non-rigide) pour tenter d'établir un lien entre les images. Au contraire, un maillage de tétraèdres déformé reste un maillage tétraédrique. S'il n'y a pas de rupture dans la continuité, une tumeur ou un organe sera formé du même ensemble de tétraèdres.
- ii. Avec l'idée de réduire le besoin informatique, tant d'un point de vue de la mémoire que du processeur, il est possible de construire des maillages tétraédriques multi résolutions adaptés à l'observable que l'on décrit ou à l'usage que l'on en fait.
- iii. Grâce à l'approximation « continue », il est facile de passer d'une représentation à une autre. Par exemple, d'un maillage décrivant la densité de matière, à un maillage permettant de simuler la propagation du rayonnement, puis à un maillage visant à stocker l'énergie déposée dans la matière pour la cartographie de dose, ces maillages étant construits selon leur critères propres.

Michaël Beuve

Nous avons pu montrer la faisabilité de l'application d'une telle méthode pour l'imagerie scanner [MAN 2012], les cartographies de dose [MAN 2014] et l'imagerie de diagnostic [MAN 2015]. Nous sommes maintenant dans une phase d'optimisation pour estimer le gain en temps de calcul pour la réalisation des cartes de dose.

#### 4. Qualité plutôt que quantité

Les sections précédentes ont soulevé la question de la meilleure utilisation des ressources informatiques existantes. Elles expliquent qu'adapter les algorithmes de calculs à l'architecture peut grandement améliorer les performances d'une simulation numériques ou d'un calcul. On peut cependant considérer aussi, à l'inverse, qu'il y a une marge de progression en envisageant un design des architectures orientées par la structure et le fonctionnement des algorithmes. Cette idée n'est pas nouvelle et on peut citer le développement des coprocesseurs dédiés aux calculs à virgules flottantes ou encore le succès des cartes graphiques, dédiées initialement à soulager le processeur principal d'opérations liées à l'affichage graphique fondamental notamment pour le marché des jeux vidéo mais qui a su trouver d'autres applications pour lesquelles une partie significatives des opérations peut être exécutée de manière efficace sur ces cartes (via des bibliothèques conviviales).

De manière analogue, le décryptage de codes de sécurité basé sur la factorisation de polynômes ou la résolution de problèmes quantiques pourraient avantageusement profiter de la mise au point d'un ordinateur quantique.

Inversement, entreprendre, par exemple, la conception d'un cerveau artificiel depuis la description des neurones en s'appuyant sur les architectures existantes impliquera nécessairement des ressources informatiques colossales. Une des raisons est liées au fait que le fonctionnement d'un neurone diffère du fonctionnement d'une porte logique élémentaire ou d'un assemblage codé en dur dans un processeur actuel.

De manière générale, concevoir des architectures permettant de résoudre des étapes clés d'un algorithme, étapes fortement gourmande en ressources informatiques standard, permettrait dans certains cas de faire des bonds en performance sans démultiplier le nombre de machines ou de processeurs. La limite à cette stratégie est le coût de développement et de fabrication de ces architectures à comparer au retour sur investissement. On comprend alors le succès et la réduction du coût des cartes graphiques, mais aussi le faible nombre de domaine où cette stratégie s'est développée.

Néanmoins, à l'échelle d'un organisme de recherche, d'une nation ou d'un ensemble de nations, ne faudrait-il pas faire un état des besoins et enjeux stratégiques, définir des priorités et entreprendre au moins certains de ces développements.

## 5. Conclusion

J'ai rédigé ces quelques pages en m'adressant aux modélisateurs, et en particulier aux débutants pour que s'imprime chez-eux un réflexe de réflexions, très concrètes ou plus globales, triviales ou plus subtiles. Les pistes ainsi présentées, tirées de ma propre expérience de recherche en modélisation et simulation sont non exhaustives. Dresser un catalogue serait probablement lassant et de toute manière cette liste est bornée par ma propre expérience et mes connaissances, jamais suffisantes. Mais j'espère que la graine ainsi semée amènera certains à développer une attention particulière à ces questions et à enrichir leurs compétences et expériences d'outils et de démarches pour améliorer leurs modélisations.

Je termine en osant quelques recommandations plus générales. D'abord la mise en place et la promotion d'écoles d'été pour former les chercheurs, jeunes chercheurs, académiques ou industriels aux bonnes pratiques de programmations pour la modélisation. Je conseillerais aussi de mettre en place des unités nationales de conseils pour l'amélioration des performances des codes de modélisation au service des chercheurs académiques et industriels. Plus spécifiquement, j'encouragerais le développement et la promotion de bibliothèques de fonctions à précision contrôlée. Enfin, pour un effet à plus long terme, il me semble intéressant de bâtir une stratégie scientifique et industrielle pour le développement d'architecture nouvelles et complètement adapté aux enjeux majeur de la modélisation, peut-être en réunissant les experts des différents domaines.

## 6. Références

[BEU 2000] BEUVE M., GERVAIS B., LAMOURE E., ROZET J.P., VERNHET D., DUBE L.J. "On stochastic dynamics of hydrogenic ion transport through solids" *Physics Letters - Section A* - 2000 - volume 274 - issue 1- 2 - page 37 – 46

[ BEU 2002] BEUVE M, CARON M, FAINSTEIN PD, GALASSI M, GERVAIS B, RIVAROLA RD, ROTHARD H. "Monte Carlo simulation of electron emission induced by swift highly charged ions: beyond the linear response approximation " *European Physical Journal D* Nov 2002, 21 (2) : 125-135

[BEU 2003] M. BEUVE, N. STOLTERFOHT, M. TOULEMONDE, C. TRAUTMANN, H. M. URBASSEK. "Influence of the spatial and temporal structure of the deposited-energy distribution in swift-ion-induced sputtering", *PHYSICAL REVIEW B* 68, 125423 (2003)

[BEU 2009a] M. BEUVE, A. COLLIAUX, D. DABLI, D. DAUVERGNE, B. GERVAIS, G. MONTAROU, and E. TESTA. "Statistical effects of dose deposition in track-structure modelling of radiobiology efficiency." *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B* 267(6) 983-988 (2009).

[BEU 2009b] M. BEUVE. "Formalization and theoretical analysis of the Local Effect Model." *Radiation Research* 172(3) 394-402 (2009).

[CAR 2006] M. CARON, H. ROTHARD, M. TOULEMONDE, B. GERVAIS, M. BEUVE. "Theoretical and experimental study of electronic temperatures in heavy ion tracks from

Michaël Beuve

Auger electron spectra and thermal spike calculations", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, Vol. 245, Issue 1, Proceedings of the Sixth International Symposium on Swift Heavy Ions in Matter (SHIM 2005), April (2006), Pages 36-40.

[CHA 2014] CHANRION M.-A., SAUERWEIN W., JELEN U., WITTIG A., ENGENHART-CABILIC R. et BEUVE M. "The influence of the local effect model parameters on the prediction of the tumor control probability for prostate cancer". Phys. Med. Biol. 59 (2014). 1-22

[COL 2016] A. COLLIAUX, B. GERVAIS, C. RODRIGUEZ-LAFRASSEE, M. BEUVE. "Simulation of ion-induced water radiolysis in different conditions of oxygenation". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, (2015), 365, pp.596-605

[CUN 2017] Micaela CUNHA, Caterina MONINI, Etienne TESTA, Michael BEUVE. "NanOx, a new model to predict cell survival in the context of particle therapy", Physics in Medicine and Biology, IOP Publishing, (2017), 62 (4), pp.1248-1268.

[GAL 2005] R. D. RIVAROLA, M. P. GAIGEOT, B. GERVAIS, M. BEUVE, R. VUILLEUMIER, P. D. FAINSTEIN, C. STIA and M. F. POLITIS. "Multiple ionization processes related to irradiation of biological tissue" M. E. Galassi, Proceedings of the XXIV International Conference PHOTONIC, ELECTRONIC AND ATOMIC COLLISIONS, Rosario, Argentina, July (2005).

[GER 2003] B. GERVAIS, M. BEUVE, M. CARON and H. ROTHARD. "Saturation effects in highly charged ion interaction with thin carbon foils". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, Volume 205, May 2003, Pages 835-840

[GRE 1984] GREEN NJB. "Reaction Probability and diffusion-controlled rate constants for ionic reactions in solvents of high permittivity". Chem. Phys. Lett. 1984; 107:485-8.

[MAN 2012] MANESCU, J. AZENCOT, M. BEUVE, H. LADJAL, J. SAADE, JM. MOREAU, P. GIRAUD, B. SHARIAT. "Material density mapping on deformable 3D models of human organs", P.M International Conference on Biomechanics and Biomedical Engineering, Copenhagen, Denmark. (2012)

[MAN 2014] P.S MANESCU, H. LADJAL, J. AZENCOT, M. BEUVE, E. TESTA, B. SHARIAT. 4D radiotherapeutic dose calculation using biomechanical respiratory motion description". International journal of computer assisted radiology and surgery. pp. 449-457, Springer Berlin Heidelberg, ISSN 1861-6410(2014).

[MAN 2015] P. MANESCU, H. LADJAL, J. AZENCOT, M. BEUVE, B. SHARIAT, "Motion compensation for PET image reconstruction using deformable tetrahedral meshes. Journal of Physics in Medicine and Biology, pp.PMB-102722.R1 (2015)

[PIM 1994] PIMBLOTT SM., LAVERNE JA. "Models for the radiation chemistry of aqueous solutions" Radiat. Prot. Dosimetry. 1994; 52:183 -188.

---

# Modélisation : complexifier ou simplifier ?

**Réflexions sur la deuxième session du colloque « Modélisation : succès et limites » organisé par le CNRS & l'Académie des Technologies (Paris, 6 décembre 2016)**

**Hubert Charles**

*Univ Lyon, INSA-Lyon, INRA, BF2I, UMR0203,  
Bât. Pasteur - 11, av. Capelle  
F-69621, Villeurbanne, France  
hubert.charles@insa-lyon.fr*

---

*RÉSUMÉ : Le choix entre petits et grands modèles est un problème récurrent, guidé par des raisons méthodologiques et par des considérations pratiques. Soit on part d'un petit modèle qu'on élargit et complexifie autant qu'il en est besoin, soit on élabore un modèle le plus exhaustif possible, qu'on simplifie si nécessaire. Le choix de la démarche dépend d'une part de la confrontation avec l'expérience, d'autre part des objectifs de la modélisation, mais aussi de la prise en compte de la capacité heuristique des modèles, c'est-à-dire du rôle qu'ils jouent dans la conception de procédés nouveaux.*

*MOTS CLES : modélisation, simulation numérique, modèles KISS et KIDS*

---

## **1. Une diversité de modèles pour une diversité d'objectifs**

La diversité actuelle des modèles est très importante. Comme le dit Frank Varenne [VAR 2016] [VAR 2014], cette diversité a augmenté au fil des années en suivant les différentes révolutions scientifiques, notamment mathématiques, statistiques puis numériques. Mais la typologie des modèles n'est cependant pas infinie et peut être étudiée. Une classification très basique permet de distinguer les modèles de structures de données, les modèles mathématiques et les modèles numériques (pour une analyse plus fine, voir [PAV 2012]).

Hubert Charles

Ces modèles empruntent des formalismes particuliers comme les mathématiques, la logique, la simulation numérique, les bases de données relationnelles, la théorie des graphes pour les modèles de réseaux, ou l'informatique, par exemple, pour les modèles individus centrés.

Les objets modélisés sont également de nature très différente : biologique, physique, sociale ou économique. Tous ces objets ont en commun de pouvoir être analysés soit de façon ponctuelle, soit selon un suivi temporel ou encore selon une certaine distribution géographique entraînant alors une structure de corrélation interne des données et des paramètres qu'il est nécessaire d'intégrer dans le formalisme de la modélisation.

On peut souhaiter modéliser ces objets à différentes échelles allant du niveau atomique au moléculaire (*p. ex.*, pour les modèles de repliement tridimensionnel des protéines), de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique (*p. ex.*, de la cellule à la physiologie humaine). Certains modèles cherchent à atteindre des échelles beaucoup plus grandes, notamment en écologie ou en météorologie où l'écosystème planétaire est modélisé globalement. Même si la physique des particules pour la compréhension de l'univers n'a pas été évoquée ici (de l'infiniment petit à l'infiniment grand), cette intégration des différentes échelles reste encore aujourd'hui un problème très ardu et nous verrons qu'il peut être abordé soit par une complexification, soit par une simplification extrême des modèles selon les objectifs recherchés.

En effet, les modèles sont développés pour une certaine finalité. On peut distinguer ainsi les modèles descriptifs utilisés pour la compréhension d'un phénomène, le diagnostic ou les études rétrospectives. Ces approches privilégient des modèles mécanistes déterministes incorporant parfois des composantes stochastiques qui permettent d'intégrer une part de variabilité issue des objets ou des processus modélisés.

D'autres modèles sont développés dans une optique de prédiction ou d'anticipation. Ces modèles parfois mécanistes ou bien purement statistiques privilégient la composante stochastique. Ils nécessitent une étape de validation sur des données observées qui sont un prérequis important de leur capacité prédictive.

Des modèles permettent encore d'explorer des hypothèses. Dans une démarche où l'expérience est guidée par le modèle, l'expérimentateur va alors réaliser un cercle vertueux de raffinements successifs de son modèle et de ses hypothèses.

Enfin, les modèles peuvent servir pour communiquer, voire pour négocier. Cette dernière finalité de la modélisation a fait l'objet de la troisième session du colloque « La modélisation : vecteur de dialogue entre recherche académique et industrie. »

## **2. Complexifier ou simplifier, mais à quel prix ?**

L'évolution des capacités de calcul des ordinateurs a formidablement augmenté les possibilités de formalisation des modèles. On peut citer comme exemple phare la

résolution numérique des systèmes d'équations différentielles qui en physique a permis notamment l'essor des simulations par la méthode des éléments finis et en biologie le développement des modèles à compartiments associés à l'écologie, à l'épidémiologie ou à la pharmacologie.

Ainsi, les modélisateurs sont maintenant confrontés à un compromis entre simplicité et complexité de leurs modèles (axe horizontal de la Figure 1). Il s'agit en effet de choisir entre l'élaboration de modèles complexes intégrant de nombreux paramètres en interaction pour modéliser les phénomènes au plus près du réalisme physique des objets avec le risque de perdre la maîtrise du comportement du modèle, ou au contraire, d'élaborer des modèles simples pour contrôler le fonctionnement global du système et en étudier ses propriétés émergentes au risque de perdre le réalisme physique des objets modélisés. Ce compromis entre les modèles KIDS (keep it descriptive, stupid, 4) et KISS (keep it simple, stupid, 5) a été relevé par de nombreux orateurs du colloque.

Léna Sanders [SAN 2017] propose un autre axe de différenciation supplémentaire des modèles en fonction de leurs propriétés génériques ou au contraire spécifiques qui augmente encore la difficulté du compromis que doit affronter le modélisateur (axe verticale de la Figure 1).

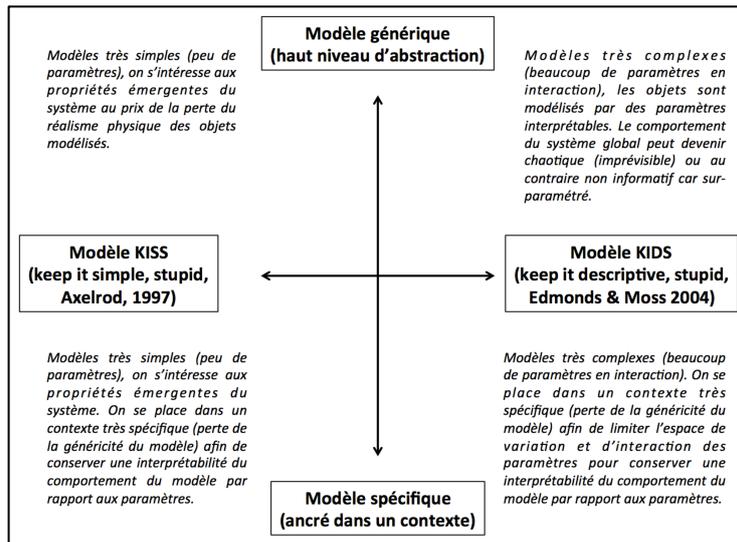


Figure 1. Carte de compromis pour le choix d'un modèle sur les axes simplicité / complexité et généricité / spécificité, figure adaptée de l'exposé de Léna Sanders [SAN 2017].

Hubert Charles

Mais alors, pourquoi simplifier ou complexifier un modèle ? Frank Varenne nous rappelle les raisons de la simplification [VAR 2016]. D'abord ontologique, la nature est économe (principe de sélection naturelle) et il n'est pas nécessaire de multiplier les paramètres sans raison, car il doit exister des mécanismes majoritaires : c'est le principe de parcimonie. D'autres raisons sont de nature épistémique, car on doit pouvoir continuer à comprendre ce que fait le modèle (éviter le piège de la boîte noire). De plus, un modèle trop complexe et devenu inintelligible ne permet plus de servir de preuve ou de réfutation d'une hypothèse. Enfin, il existe encore des raisons techniques à la simplification. En effet, des modèles trop paramétrés vont mécaniquement s'ajuster aux données (problème du surajustement) et les valeurs corrélées des paramètres n'auront alors plus aucun réalisme. De même, il est souhaitable de conserver la maîtrise du comportement d'un modèle dans l'espace de fluctuation de ses paramètres (contrôle des émergences et des bifurcations), et ceci peut devenir impossible avec un modèle trop complexe.

A l'inverse, il existe des raisons qui poussent à complexifier les modèles. Du point de vue épistémique, il s'agit d'augmenter le réalisme physique des objets modélisés (hétérogénéité du terrain) au risque de perdre la reproductibilité mathématique du modèle. Les modèles de fonctionnement des écosystèmes pour le suivi et la prédiction de l'évolution de la biodiversité présentés par Michel Loreau [LOR 2017] sont tout à fait dans ce paradigme et montrent qu'il est parfois nécessaire d'intégrer une grande diversité de mécanismes pour comprendre et prédire l'évolution d'un seul processus. Du point de vue technique, la simulation numérique peut apporter certaines solutions comme de simuler un environnement avec un maximum d'hétérogénéité, puis d'utiliser ces simulations dans des modèles remathématisés dans une approche par briques (Légo) qui ne permet plus d'analyser les phénomènes d'émergence ou d'interactions non linéaires entre les briques, mais qui permet de conserver une maîtrise du modèle à l'intérieur de chaque brique.

### 3. Quelques exemples

La table ronde animée par Philippe Davy [DAV 2017] a permis de montrer d'une part l'existence de deux communautés de modélisateurs tournées l'une vers la complexité, l'autre vers la simplification avec parfois peu de communication entre les deux.

Par ailleurs, il semble que c'est globalement la finalité de la modélisation qui dicte l'approche simplifiée ou complexe de la modélisation et non les objets physiques eux-mêmes qui peuvent toujours être appréhendés comme un tout ou comme une somme de parties en interaction.

Enfin, les participants ont tous insisté sur la nécessité de procéder à des aller-retour (ou d'avancer par raffinements successifs) entre les modèles et les données avec des étapes de validation des modèles.

Michel Loreau [LOR 2017] dans son exposé sur les potentialités et les écueils de la modélisation prédictive en écologie nous présente la nécessité de construire des modèles très complexes capable de traduire une hétérogénéité du terrain à l'échelle planétaire. Ces modèles qui nécessitent d'intégrer notamment le changement climatique global associé à l'évolution des activités humaines avec le fonctionnement des écosystèmes pour prédire l'évolution de la biodiversité représentent un formidable challenge pluridisciplinaire [LOR 2010]. Mais il montre aussi les limitations de ces modèles et leur très faible pouvoir prédictif sur de grandes échelles de temps. Il distingue également les prédictions explicatives (dépendantes d'un corpus d'hypothèses) qui peuvent servir comme outil de compréhension d'un système, des prédictions anticipatives (associées à des scénarios plus ou moins probables) qui peuvent servir d'outil de décision. Il montre alors sur un exemple célèbre de préservation de l'habitat de la chouette tachetée en Amérique du Nord qu'une approche purement statistique et extrêmement simple peut être beaucoup plus efficace qu'une approche mécaniste complexe lorsqu'il s'agit de déterminer un seul paramètre (ici le pourcentage d'habitat à conserver) dans le but précis de la préservation de l'espèce. Aurélie Méjean (10) spécialiste en modélisation économique confirme que l'évolution des systèmes économiques associée au comportement humain est imprédictible et que seule une approche par scénarios est envisageable [MEJ 2017].

Léna Sanders présente des modèles de croissance de villes intégrant des informations spatiales, économiques, sociales et historiques [SAN 2017]. Ces modèles se veulent à la fois réalistes (on cherche à comprendre pourquoi une ville se développe plus qu'une autre) et très complexes (de très nombreux paramètres hétérogènes influencent la croissance d'une ville) : le compromis de modélisation sur la carte KISS-KIDS / générique-spécifique (Figure 1) est donc exacerbé ici. L'auteur propose alors une démarche (une trajectoire) consistant à partir d'un modèle spécifique complexe pour aller vers une généralisation du modèle avant la simplification permettant de comprendre les mécanismes principaux.

François Képès présente les potentialités offertes actuellement aux biologistes par la biologie de synthèse qui œuvre dans une spirale d'amélioration entre modélisation mathématique, analyse numérique, construction génétique et tests phénotypiques permettant une véritable ingénierie des systèmes vivants [KEP 2017]. Dans ce type d'approche, il est possible de simplifier le modèle en compressant ou en ignorant certains niveaux d'organisation : le cas du répressilateur d'*Escherichia coli* [ELO 2000] est présenté. Mais on pourra limiter la variabilité des oscillations en complexifiant le modèle et en intégrant plus de boucles de rétroaction. De même, la description d'un processus biologique, comme le repliement tridimensionnel d'une protéine, peut se faire en première approximation par des approches combinatoire à partir de sa séquence linéaire d'acides aminés. Face aux milliards de combinaisons possibles, des heuristiques doivent être développées pour n'analyser que quelques milliers de combinaisons. Mais là encore, Daniel Borgis [BOR 2017] évoque les progrès de la simulation moléculaire en chimie physique qui, partant de l'équation

Hubert Charles

de Schrödinger, permettait à ces débuts de modéliser le comportement d'un corps pur et s'est ensuite attachée à décrire les transitions de phase, puis les liquides moléculaires et parvient maintenant, avec des ressources de calcul très importantes, à modéliser des protéines [BOR 2017].

Gilles Bernod, spécialiste des réseaux biologiques, évoque au contraire une possibilité de modélisation en biologie qu'il qualifie de jetable (« kleenex ») [BER 2017]. Une modélisation très spécifique du problème donné et complètement dirigée par les hypothèses du chercheur dans un formalisme logique : l'expérimentateur exprime une hypothèse qui est directement transcrite informatiquement. Une expérience de validation est réalisée et les résultats permettent de reformuler l'hypothèse, puis le modèle afin de refaire une nouvelle expérience de validation. L'idée est de faire converger le modèle vers une preuve (ou une réfutation) de l'hypothèse reformulée. Cette approche se situe dans le quadrant bas et gauche de la figure 1. La qualité de l'expérimentation et de la récolte des données est ici cruciale.

#### **4. De la nécessité de développer des formations pluridisciplinaires en modélisation**

La modélisation est par essence pluridisciplinaire puisqu'elle interroge des objets (physiques, biologiques, sociaux, économiques) en utilisant un formalisme mathématique et/ou informatique. Elle est de plus omniprésente et nécessaire pour la compréhension des enjeux majeurs de notre société, comme les problématiques du réchauffement climatique, de la préservation des ressources énergétiques et de la biodiversité. Des formations alliant notamment les sciences du vivant avec l'informatique et les mathématiques sont donc absolument nécessaires pour former les cadres en entreprise et les chercheurs de demain. C'est ainsi que depuis les années 2000, de nombreuses formations se sont développées à ces interfaces disciplinaires, sous les termes de « bioinformatique » pour les sciences du vivant ou « d'analyse des systèmes complexes » pour les sciences physiques. Mais il faut en convenir, avec assez peu de succès par rapport aux enjeux et à la demande d'emplois du secteur : le pluridisciplinaire fait peur aux étudiants !

Aussi voit-on maintenant fleurir de multiples formations disciplinaires qui partant d'une spécialisation en mathématique, en informatique, en physique ou en biologie s'ouvrent à une autre discipline sous la forme de masters ou de spécialisation en dernière année d'école d'ingénieur. Cette organisation rassure les étudiants, qui se sentent spécialistes d'un domaine, et sans doute aussi, quelques employeurs. Elle est vraisemblablement responsable du cloisonnement encore très marqué entre les différentes communautés de modélisateurs mentionnées durant ce colloque.

Pour répondre à ce besoin de pluridisciplinarité, une formation en bioinformatique et modélisation (BIM) a été créée en 2000 à l'INSA de Lyon sous

l'impulsion des professeurs Jean-Michel Fayard, Christian Gautier et Alain Pavé dans la lignée de l'école de modélisation lyonnaise portée par Jean-Marie Legay. Cette formation d'ingénieur du département Biosciences est volontairement non spécialisée en donnant une part équivalente à l'enseignement de la biologie, des mathématiques et de l'informatique [BIO 2017]. Les 26 ingénieurs formés chaque année se placent dans les secteurs de la santé et du médicament, de l'environnement ou de l'agroalimentaire. Même s'ils s'insèrent sans aucune difficulté sur le marché du travail y compris à l'international, ils se heurtent encore à quelques difficultés lors des entretiens d'embauches : « êtes-vous biologistes, informaticiens ou mathématiciens, demandent les recruteurs ? » Le chemin vers l'interdisciplinarité est encore long.

## 7. Références

- [AXE 2014] AXELROD R., "Handbook of Research on Nature Inspired Computing for Economy and Management", Eds. Jean-Philippe Rennard, Hersey, 2005.
- [BER 2017] BERNOT G., "Participant à la table ronde Modélisation : complexifier ou simplifier", Colloque Modélisation : succès et limites, CNRS & Académie des Technologies, Paris, 6 décembre 2016.
- [BIO 2017] <http://biosciences.insa-lyon.fr/>
- [BOR 2017] BORGIS D., "Participant à la table ronde Modélisation : complexifier ou simplifier", Colloque Modélisation : succès et limites, CNRS & Académie des Technologies, Paris, 6 décembre 2016.
- [DAV 2017] DAVY P., "Animateur de la table ronde Modélisation : complexifier ou simplifier", Colloque Modélisation : succès et limites, CNRS & Académie des Technologies, Paris, 6 décembre 2016.
- [EDM 2004] Edmonds B., Moss S. "From KISS to KIDS – an anti-simplistic modelling approach", in Multi-Agent and Multi-Agent-Based Simulation, Eds. Paul Davidsson, Brian Logan, Keiki Takadama (dir.), Springer, 2004.
- [ELO 2000] ELWITZ M., LEIBLER S. "A synthetic oscillatory network of transcriptional regulators", Nature, 403:335-338, 2000.
- [KEP 2017] KÉPÈS F., "Modélisation pour la biologie de synthèse", Colloque Modélisation : succès et limites, CNRS & Académie des Technologies, Paris, 6 décembre 2016.
- [LOR 2010] LOREAU M. "The challenges of biodiversity science. Excell. Ecol., 17:1–151, 2010.
- [LOR 2017] LOREAU M., "Potentialités et écueils de la modélisation prédictive en écologie", Colloque Modélisation : succès et limites, CNRS & Académie des Technologies, Paris, 6 décembre 2016.

8 Hubert Charles

- [MEJ 2017] MEJEAN A., “*Participant à la table ronde Modélisation : complexifier ou simplifier*”, Colloque Modélisation : succès et limites, CNRS & Académie des Technologies, Paris, 6 décembre 2016
- [PAV 2012] PAVÉ, A., “Modélisation des systèmes vivants”, Eds. Lavoisier (Hermes Science Publications), 633p., 2012.
- [SAN 2017] SANDERS L., “*Représentation stylisée versus réaliste de l’espace géographique dans la modélisation des phénomènes socio-spatiaux*”, Colloque Modélisation : succès et limites, CNRS & Académie des Technologies, Paris, 6 décembre 2016.
- [VAR 2014] VARENNE F., SILBERSTEIN M., DUTREUIL S., HUNEMAN P., “Modéliser & simuler, Epistémologies et pratiques de la modélisation et de la simulation”, Eds. Paris, Matériologiques, Tome 1, 980p., 2013, Tome 2, 770p., 2014.
- [VAR 2016] VARENNE F., “*Histoire de la modélisation : quelques jalons*”, Colloque Modélisation : succès et limites, CNRS & Académie des Technologies, Paris, 6 décembre 2016.

---

## Potentialités et écueils de la modélisation prédictive en écologie

**Michel Loreau**

*Centre de Théorie et Modélisation de la Biodiversité  
Station d'Ecologie Théorique et Expérimentale  
UMR 5321, CNRS et Université Paul Sabatier  
09200 Moulis  
France  
michel.loreau@cnrs.fr*

---

*RESUME: La modélisation prédictive de la biodiversité est en plein essor aujourd'hui suite à une forte demande sociétale d'anticipation des changements à venir. Cet essor marque une transition de l'écologie vers une science plus mûre, plus intégrée, plus opérationnelle ; il constitue aussi une occasion unique pour l'écologie de jouer un rôle moteur dans la transition des sociétés humaines vers un modèle plus durable. Mais les projections actuelles des changements à venir sont obtenues à l'aide de modèles dont la complexité apparente masque des fondements théoriques simples, voire simplistes. Le développement d'un corpus théorique robuste et cohérent est donc essentiel pour améliorer notre capacité à comprendre et prédire les changements à venir.*

*MOTS-CLES: Ecologie, biodiversité, écosystème, théorie, modélisation, prédiction*

---

## 1. Les défis de l'érosion de la biodiversité

La Terre abrite une extraordinaire diversité biologique, qui inclut non seulement les millions d'espèces d'animaux, de plantes et de micro-organismes connus ou inconnus, mais aussi une palette quasi-infinie de gènes, de molécules, de physiologies, de comportements, d'interactions écologiques et d'écosystèmes. Cette biodiversité, fruit de plus de trois milliards d'années d'évolution, est aujourd'hui très sérieusement menacée par l'extension rapide de l'impact des activités humaines sur notre planète. L'érosion de la biodiversité constitue, avec le changement climatique, un des plus grands défis auxquels doit faire face l'humanité aujourd'hui et dans les siècles à venir (Loreau 2010).

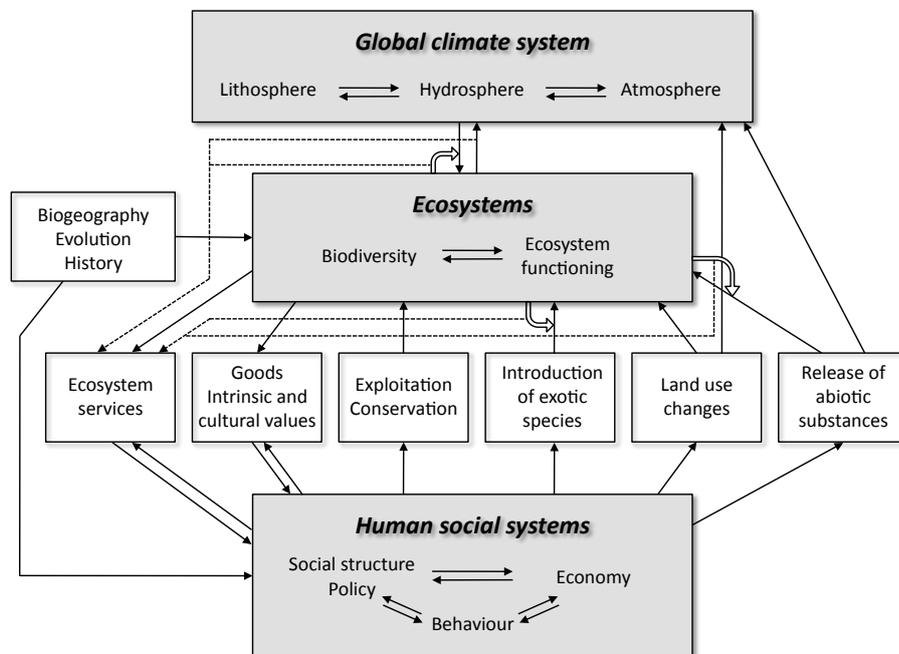
Tout indique que nous entrons dans une sixième grande crise d'extinction comme la Terre en a déjà connu cinq au cours de son histoire géologique (Barnosky et al. 2011). Au cours des derniers siècles, les espèces ont disparu à un rythme cent à mille fois plus rapide que le rythme naturel moyen (Pimm et al. 2014). Loin de s'inverser, cette tendance est en train de s'accroître malgré tous les efforts consentis récemment en matière de conservation de la biodiversité. Les projections pour le 21<sup>e</sup> siècle font état de taux d'extinction environ dix mille fois supérieurs aux taux naturels moyens.

En effet, les forces qui poussent à l'érosion de la biodiversité sont bien plus puissantes que les maigres efforts de conservation à l'échelle planétaire. La destruction des habitats naturels (en particulier dans les forêts tropicales, les eaux continentales et les régions côtières), l'introduction intentionnelle ou accidentelle d'espèces exotiques, la surexploitation des ressources biologiques (comme la surpêche dans les océans), la pollution et, de façon de plus en plus perceptible, le changement climatique, représentent les principales menaces pour la biodiversité (Loreau 2010). Or, ces menaces progressent sans relâche sous l'effet de la croissance de la population humaine, de la production, de la consommation et du commerce mondiaux. Quelque 13% des espèces d'oiseaux, 23% des espèces de mammifères et 41% des espèces d'amphibiens sont actuellement menacées d'extinction (Pimm et al. 2014).

Le déclin de la biodiversité ne représente pas seulement un appauvrissement général de notre cadre de vie ; il met aussi en péril un large éventail de « services » écologiques qui conditionnent, souvent de manière invisible, la survie et les activités économiques des sociétés humaines (Cardinale et al. 2012). Qu'il s'agisse de la production de ressources alimentaires, de la découverte de nouvelles substances pharmaceutiques, de la pollinisation des cultures par les insectes, du maintien de la qualité de l'eau et de la fertilité des sols par la flore et la faune, de la séquestration de carbone dans le bois et dans les sols ou du recyclage des nutriments par les animaux et les bactéries, les services rendus par les écosystèmes aux sociétés humaines sont innombrables et possèdent une valeur considérable (Costanza et al.

1997). Or, deux tiers de ces services sont utilisés de façon non durable ou en voie de dégradation (Millennium Ecosystem Assessment 2005).

Si l'on connaît les grandes causes globales de l'érosion de la biodiversité, l'extinction des espèces est un processus long et complexe qui résulte de l'interaction de multiples facteurs sociaux, écologiques et évolutifs. Dès lors, notre capacité à anticiper les changements à venir de la biodiversité et leurs conséquences pour les sociétés humaines reste limitée. Aussi l'un des grands défis de l'écologie scientifique actuelle est-il de développer des modèles prédictifs qui intègrent les dynamiques sociales, écologiques et évolutives afin de prédire les changements de biodiversité et leurs conséquences écologiques et sociétales (Figure 1).



**Figure 1.** Diagramme conceptuel d'un modèle prédictif intégratif des changements de biodiversité qui reste à construire (Loreau 2010). Les flèches en trait plein indiquent des effets ; les flèches blanches incurvées, des rétroactions de la biodiversité régulant les impacts des autres sous-systèmes ; les flèches en trait pointillé, des services écologiques engendrés par ces rétroactions.

## 2. Les projections des changements de biodiversité, une industrie florissante

De nombreuses approches ont été développées pour tenter de prédire l'avenir de la biodiversité face aux pressions anthropiques croissantes auxquelles elle est exposée. La plus ancienne utilise les relations aire–espèces qui lient le nombre d'espèces recensées à l'aire échantillonnée. En général, le nombre d'espèces augmente avec l'aire échantillonnée selon une loi de puissance simple, de la forme  $S = cA^z$ . Il s'ensuit que, si l'aire d'un écosystème est réduite d'une faible proportion  $\Delta A$ , le nombre d'espèces devrait être réduit approximativement d'une proportion  $\Delta S = z\Delta A$  (May et al. 1995). De nombreux auteurs ont utilisé cette relation empirique pour estimer le nombre d'espèces condamnées à l'extinction suite à la destruction de leur habitat, en particulier dans le cas de la déforestation en milieu tropical. Comme les forêts tropicales sont détruites à un taux d'environ 0,8 à 2 % par an et que le coefficient  $z$  de la relation aire–espèces tourne empiriquement autour d'une moyenne de 0,25 (quoiqu'avec de fortes variations selon l'échelle spatiale et le degré d'isolement géographique des systèmes considérés), cette approche mène à des taux d'extinction de l'ordre de 0,2 à 0,5 % par an, soit à des taux de 8 à 20.000 fois supérieurs aux taux naturels moyens.

Quoiqu'imprécises, ces estimations donnent néanmoins un ordre de grandeur précieux des taux d'extinction à venir. D'autres approches mènent d'ailleurs à des estimations très semblables. A titre d'exemple, une approche indépendante qui utilise l'évolution temporelle d'indices basés sur les listes rouges des espèces menacées de l'Union Internationale pour la Conservation de la Nature aboutit également à des taux d'extinction de 10 à 20.000 fois supérieurs aux taux naturels moyens (May et al. 1995).

Il est toutefois essentiel de garder à l'esprit la signification et les limites de ces estimations, chose que certains auteurs ont parfois omis de faire, entraînant quelques confusions dans la communication des scientifiques vers le monde politique et le grand public. En particulier, les relations aire–espèces sont des patrons empiriques qui décrivent les relations observées aujourd'hui entre le nombre d'espèces et l'aire échantillonnée. Mais elles ne disent rien, ni sur les processus écologiques qui en sont responsables, ni sur le temps requis pour que le nombre d'espèces s'ajuste à l'aire selon la relation observée. Par conséquent, les relations aire–espèces ne peuvent prédire des taux actuels d'extinction, mais bien plutôt des taux potentiels d'extinction, dont la réalisation effective est reportée à un futur indéterminé. Elles nous informent sur le taux auquel les espèces sont condamnées aujourd'hui à s'éteindre demain, d'où le concept important de *dette d'extinction* que les générations actuelles transmettent aux générations futures (Tilman et al. 1994).

Depuis ces approches pionnières d'il y a vingt ou trente ans, les projections des changements de biodiversité ont connu une évolution spectaculaire et font aujourd'hui l'objet d'une industrie florissante et de très nombreuses publications. Les approches actuelles diffèrent des précédentes essentiellement sur deux points : d'une part, elles s'appuient sur des scénarios de développement socio-économique

pour créer des scénarios plus réalistes d'évolution des pressions anthropiques et, d'autre part, les projections sont plus fines en ce sens qu'elles descendent souvent au niveau de l'espèce et à des échelles spatiales plus petites (Pereira et al. 2010). Cette évolution vers une plus grande finesse des projections s'est par ailleurs accompagnée d'une évolution correspondante dans leur présentation formelle, qui se fait généralement aujourd'hui sous la forme illustrée de cartes géographiques. L'effet d'entraînement des modèles climatiques a joué un rôle important dans cette évolution. En effet, c'est dans le domaine des projections des changements de biodiversité causés par les changements de climat (Bellard et al. 2012) qu'elle a été la plus manifeste. Les projections de changements de biodiversité peuvent ensuite être couplées à des projections des changements de services écologiques associés. Un exemple de cette approche est fourni par la projection des impacts du réchauffement climatique sur le potentiel des océans à l'échelle globale (Cheung et al. 2010). Des scénarios de changement climatique sont d'abord utilisés pour prédire les changements de distribution spatiale des différentes espèces à l'aide d'un modèle d'enveloppe bioclimatique ; les projections des changements de distribution spatiale des espèces sont ensuite combinées pour prédire les changements du potentiel de pêche en chaque point du globe.

Malgré l'augmentation de la résolution des projections et l'engouement pour la production de cartes géographiques qui ont caractérisé cette évolution récente, force est de constater que les bases conceptuelles et théoriques de ces nouvelles approches restent aussi étroites que les précédentes. Les relations empiriques aire-espèces ont laissé la place à d'autres relations empiriques entre la distribution géographique des espèces et celle de variables climatiques ou autres. Mais la plupart des processus qui constituent le cœur de l'écologie fondamentale et qui font l'objet de théories bien établies ne sont pas pris en compte. En particulier, la plupart des modèles de projection des impacts des changements climatiques sur la biodiversité ignorent une série de processus qui influent de toute évidence sur la réponse des espèces aux changements climatiques, tels que la physiologie, la démographie, l'histoire de vie et la phénologie des espèces, les multiples interactions qui lient ces espèces (compétition, prédation, mutualisme, etc.), leur potentiel d'évolution, leur dynamique spatiale et leurs réponses aux variations des autres facteurs environnementaux (Urban et al. 2016).

Une autre approche, qui se développe également mais qui jouit d'une moins grande visibilité, consiste à construire des modèles mécanistes qui incorporent des processus écologiques connus pour prédire, soit des changements de biodiversité, soit les conséquences de ces changements pour le fonctionnement des écosystèmes ou les services qu'ils rendent aux sociétés (Cardinale et al. 2012). Les modèles mécanistes possèdent d'autres limites, liées notamment au fait qu'ils adoptent souvent une approche « bottom-up » construite sur des processus opérant à petites échelles spatiales. L'un des grands défis de la modélisation prédictive de la biodiversité dans la période à venir sera de jeter des ponts entre approches phénoménologiques et mécanistes et entre petites et grandes échelles spatiales.

### 3. L'écologie doit-elle devenir prédictive ?

Le succès des modèles climatiques et l'essor des projections des changements de biodiversité semblent militer pour la transformation de l'écologie en une science prédictive (Evans et al. 2013, Mouquet et al. 2015). L'intérêt scientifique et sociétal d'une modélisation prédictive intégrative de la biodiversité et des écosystèmes fait peu de doute. Au plan scientifique, l'élaboration de tels modèles permet d'intégrer les connaissances acquises en un tout cohérent et de les confronter aux données, stimulant ainsi un progrès rapide de ces connaissances. Au plan sociétal, les projections qu'ils fournissent peuvent constituer un outil puissant d'aide à la décision.

Il est essentiel toutefois de garder à l'esprit les contours et les limites d'une telle entreprise dans le cadre du développement historique de l'écologie comme discipline scientifique. D'une part, contrairement à ce que suggèrent certains auteurs, la prédiction n'est pas nouvelle en écologie. Dès 1862, Darwin prédit l'existence à Madagascar d'une espèce de papillon possédant une trompe longue de 20 à 35 cm sur base de l'observation d'une espèce d'orchidée possédant un éperon floral nectarifère de cette taille. Longtemps tournée en dérision, sa prédiction fut vérifiée 41 ans plus tard avec la découverte, en 1903, de la sous-espèce de papillon *Xanthopan morgani praedicta*, dont le nom de sous-espèce (*praedicta*) rend honneur à la prédiction faite par Darwin (Mouquet et al. 2015). Et, depuis ses origines en tant que science distincte au début du vingtième siècle, l'écologie n'a cessé de faire des prédictions. Certes, ces prédictions étaient souvent de nature qualitative, mais elles n'en constituaient pas moins des prédictions et elles ont joué un rôle essentiel dans le progrès des connaissances comme dans la gestion des écosystèmes. A titre d'exemple, la théorie des cascades trophiques a débuté par une prédiction qualitative très générale faite par Hairston et al. (1960) sur le rôle de la prédation dans les écosystèmes. Cette prédiction a ensuite été vérifiée par des expériences de laboratoire et de terrain puis a fourni la base de pratiques courantes de biomanipulation dans la gestion des lacs eutrophisés.

D'autre part, il est utile de distinguer différents types de prédictions selon leur objectif. « Prédire » signifie « dire avant », mais ce « dire avant » ne se rapporte pas nécessairement à un futur non encore réalisé. On peut également prédire le résultat d'une observation relative à un événement ou à un objet du présent ou du passé, comme le montre l'exemple de l'espèce de papillon prédite par Darwin, qui préexistait à sa prédiction. Il est donc utile de distinguer au moins deux types de prédictions : les prédictions « explicatives » et les prédictions « anticipatives » (Mouquet et al. 2015). Une prédiction explicative cherche à formuler ce qui est attendu sous les hypothèses d'un modèle ou d'une théorie. Cette prédiction peut ensuite être confrontée à des données anciennes ou nouvelles — la temporalité de l'événement ou de l'observation importe peu dans ce cas. Il s'agit essentiellement d'un outil de compréhension. Par contre, une prédiction anticipative vise à la projection d'un état futur possible ou probable d'un système sur base de scénarios

d'évolution des contraintes auxquelles ce système est soumis. Il s'agit essentiellement d'un outil d'aide à la décision. Il est intéressant de noter à ce propos que la prédiction anticipative ne peut pas non plus prétendre prédire le futur tel qu'il se réalisera. En effet, en tant qu'outil d'aide à la décision, la prédiction anticipative participe de la construction de ce futur. En écologie, les prédictions anticipatives servent d'ailleurs encore bien souvent à prévenir des dangers liés à des trajectoires non souhaitables, dont on espère qu'elles ne se réaliseront pas.

Cette distinction entre prédictions explicatives et anticipatives pourrait contribuer à remettre ces dernières à leur juste place dans le développement de l'écologie comme des autres sciences. La frénésie récente de prédictions anticipatives en réponse à des problèmes environnementaux et à des demandes sociétales bien réels ne doit pas occulter le fait que, comme toute prédiction, ces prédictions reposent sur un ensemble d'hypothèses et donc sur un cadre théorique, que celui-ci soit explicite ou implicite. En dernière instance, c'est la théorie qui fournit le socle de toutes les prédictions, et la solidité de ce socle est seule garante de la pertinence des prédictions qui en sont tirées. Il ne peut donc y avoir de prédiction anticipative sans prédictions explicatives participant de l'élaboration d'un cadre théorique cohérent.

L'une des conséquences de ce constat est que les modèles les plus complexes bâtis spécifiquement pour fournir des projections précises des états futurs de la biodiversité ou des écosystèmes ne sont pas toujours l'unique ni même la meilleure option possible. Dans certains cas, les prédictions explicatives les plus simples se sont avérées les plus utiles du fait qu'elles reposaient directement sur un socle théorique solide. L'exemple de la conservation de la chouette tachetée du Nord, qui a fait l'objet de l'une des plus grandes batailles juridiques de l'histoire de la conservation de la biodiversité aux Etats-Unis, est très parlant à cet égard. Cette espèce s'est trouvée menacée par la diminution graduelle de la surface occupée par les forêts anciennes qui constituent son habitat, menant à un conflit de grande envergure entre des organisations de conservation de la nature et les entreprises d'exploitation du bois. Le gouvernement américain établit une commission scientifique fédérale pour estimer la surface de forêt ancienne nécessaire à la conservation de l'espèce. A l'issue de longs travaux faisant appel à des modèles spatialement explicites complexes et des données biologiques détaillées, la commission conclut qu'il fallait maintenir environ 21 % de forêts anciennes à l'échelle du paysage pour assurer la persistance de la chouette tachetée du Nord. Or, la théorie analytique de l'écologie des métapopulations et de l'épidémiologie permettait de prédire un seuil de persistance de  $21 \pm 2$  % à l'aide des données préalablement disponibles sur la proportion d'habitat inoccupé par l'espèce (Lawton et al. 1994). Non seulement son application aurait permis de faire l'économie de travaux longs et coûteux, mais cette théorie fournissait même un intervalle de confiance associé à sa prédiction et un cadre assez robuste pour évaluer les effets d'une violation de certaines de ses hypothèses.

Dans certains domaines, les prédictions anticipatives ne sont même pas envisageables car le socle théorique fondamental permettant de faire des prédictions est tout simplement inexistant. C'est le cas en particulier des interactions entre les sociétés humaines et la biosphère, qui jouent pourtant un rôle de plus en plus crucial dans les changements de biodiversité et dans leurs rétroactions sur les sociétés (Figure 1). Seuls quelques économistes écologiques pionniers ont commencé à élaborer un cadre théorique formel permettant d'évaluer la durabilité des systèmes couplés homme-nature (Reuveny 2012), mais leurs efforts restent largement insuffisants face à l'ampleur et à la multiplicité des défis posés par cette question. L'écologie théorique devrait d'ailleurs, à mes yeux, porter un intérêt beaucoup plus grand au problème de la durabilité des systèmes couplés homme-nature car elle est à même d'apporter un éclairage original sur la place de l'homme dans le fonctionnement des écosystèmes et de la biosphère (Isbell and Loreau 2014). Développer la théorie en connexion avec les données empiriques devrait donc demeurer la première priorité de l'écologie pour lui permettre de renforcer son caractère prédictif.

#### 4. Conclusion

L'écologie dite « prédictive » et la modélisation de la biodiversité sont en plein essor aujourd'hui suite à une forte demande sociétale d'anticipation des changements à venir de la biodiversité, du fonctionnement des écosystèmes et de leurs effets en retour sur les sociétés. Cet essor marque sans doute une transition de l'écologie vers une science plus mûre, plus intégrée, plus opérationnelle ; il constitue aussi une occasion unique pour l'écologie de jouer un rôle moteur dans la transition des sociétés humaines vers un modèle plus durable. Mais les projections actuelles des changements à venir sont obtenues à l'aide de modèles dont la complexité apparente masque des fondements théoriques simples, voire simplistes. Le développement d'un corpus théorique robuste et cohérent est donc essentiel pour améliorer notre capacité à comprendre et prédire les changements à venir. De façon plus générale, les scientifiques devraient apprendre à relativiser leur rôle social et garder à l'esprit le fait que la clarté théorique et l'action pratique sont plus importantes que le détail des prédictions anticipatives qu'ils peuvent fournir.

#### 5. Références

- Barnosky, A. D., N. Matzke, S. Tomiya, G. O. U. Wogan, B. Swartz, T. B. Quental, C. Marshall, J. L. McGuire, E. L. Lindsey, K. C. Maguire, B. Mersey, and E. A. Ferrer. 2011. Has the Earth's sixth mass extinction already arrived? *Nature* **471**:51-57.

- Bellard, C., C. Bertelsmeier, P. Leadley, W. Thuiller, and F. Courchamp. 2012. Impacts of climate change on the future of biodiversity. *Ecology Letters* **15**:365-377.
- Cardinale, B. J., J. E. Duffy, A. Gonzalez, D. U. Hooper, C. Perrings, P. Venail, A. Narwani, G. M. Mace, D. Tilman, D. A. Wardle, A. P. Kinzig, G. C. Daily, M. Loreau, J. B. Grace, A. Larigauderie, D. S. Srivastava, and S. Naeem. 2012. Biodiversity loss and its impact on humanity. *Nature* **486**:59-67.
- Cheung, W. W. L., V. W. Y. Lam, J. L. Sarmiento, K. Kearney, R. Watson, D. Zeller, and D. Pauly. 2010. Large-scale redistribution of maximum fisheries catch potential in the global ocean under climate change. *Global Change Biology* **16**:24-35.
- Costanza, R., R. d'Arge, R. De Groot, S. Farber, M. Grasso, B. Hannon, K. Limburg, S. Naeem, R. V. O'Neill, J. Paruelo, R. G. Raskin, P. Sutton, and M. van den Belt. 1997. The value of the world's ecosystem services and natural capital. *Nature* **387**:253-260.
- Evans, M. R., M. Bithell, S. J. Cornell, S. R. X. Dall, S. Diaz, S. Emmott, B. Ernande, V. Grimm, D. J. Hodgson, S. L. Lewis, G. M. Mace, M. Morecroft, A. Moustakas, E. Murphy, T. Newbold, K. J. Norris, O. Petchey, M. Smith, J. M. J. Travis, and T. G. Benton. 2013. Predictive systems ecology. *Proceedings of the Royal Society B-Biological Sciences* **280**:20131452.
- Hairston, N. G., Jr., F. E. Smith, and L. B. Slobodkin. 1960. Community structure, population control, and competition. *American Naturalist* **94**:421-425.
- Isbell, F., and M. Loreau. 2014. Sustainability of human ecological niche construction. *Ecology and Society* **19**:45.
- Lawton, J. H., S. Nee, A. J. Letcher, and P. H. Harvey. 1994. Animal distributions: patterns and processes. Pages 41-58 *in* P. J. Edwards, R. M. May, and N. R. Webb, editors. *Large-scale ecology and conservation biology*. Blackwell Scientific Publications, Oxford.
- Loreau, M. 2010. The challenges of biodiversity science. International Ecology Institute, Oldendorf/Luhe.
- May, R. M., J. H. Lawton, and N. E. Stork. 1995. Assessing extinction rates. Pages 1-24 *in* J. H. Lawton and R. M. May, editors. *Extinction rates*. Oxford University Press, Oxford.
- Millennium Ecosystem Assessment. 2005. *Ecosystems and human well-being: synthesis*. Island Press, Washington, D.C.
- Mouquet, N., Y. Lagadeuc, V. Devictor, L. Doyen, A. Duputie, D. Eveillard, D. Faure, E. Garnier, O. Gimenez, P. Huneman, F. Jabot, P. Jarne, D. Joly, R. Julliard, S. Kefi, G. J. Kergoat, S. Lavorel, L. Le Gall, L. Meslin, S. Morand, X. Morin, H. Morlon, G. Pinay, R. Pradel, F. M. Schurr, W. Thuiller, and M. Loreau. 2015. Predictive ecology in a changing world. *Journal of Applied Ecology* **52**:1293-1310.
- Pereira, H. M., P. W. Leadley, V. Proença, R. Alkemade, J. P. W. Scharlemann, J. F. Fernandez-Manjarrés, M. B. Araujo, P. Balvanera, R. Biggs, W. W. L. Cheung, L. Chini, H. D. Cooper, E. L. Gilman, S. Guénette, G. C. Hurtt, H.

## Potentialités et Ecueils de la Modélisation Prédictive en Ecologie

- P. Huntington, G. M. Mace, T. Oberdorff, C. Revenga, P. Rodrigues, R. J. Scholes, U. R. Sumaila, and M. Walpole. 2010. Scenarios for global biodiversity in the 21st century. *Science* **330**:1496-1501.
- Pimm, S. L., C. N. Jenkins, R. Abell, T. M. Brooks, J. L. Gittleman, L. N. Joppa, P. H. Raven, C. M. Roberts, and J. O. Sexton. 2014. The biodiversity of species and their rates of extinction, distribution, and protection. *Science* **344**:1246752.
- Reuveny, R. 2012. Taking stock of Malthus: modeling the collapse of historical civilizations. *Annual Review of Resource Economics* **4**:303-329.
- Tilman, D., R. M. May, C. Lehman, and M. A. Nowak. 1994. Habitat destruction and the extinction debt. *Nature* **371**:65-66.
- Urban, M. C., G. Bocedi, A. P. Hendry, J.-B. Mihoub, G. Pe'er, A. Singer, J. R. Bridle, L. G. Crozier, L. D. Meester, W. Godsoe, A. Gonzalez, J. J. Hellmann, R. D. Holt, A. Huth, K. Johst, C. B. Krug, P. W. Leadley, S. C. F. Palmer, J. H. Pantel, A. Schmitz, P. A. Zollner, and J. M. J. Travis. 2016. Improving the forecast for biodiversity under climate change. *Science* **353**:aad8466.

---

# Analyse spatiale de phénomènes sociaux : modèles simples *versus* complexes

Lena Sanders\*

*\*UMR Géographie-cités  
Université Paris 1 – CNRS – Université Paris Diderot  
13 rue du Four 75006 Paris  
lena.sanders@parisgeo.cnrs.fr*

---

*RÉSUMÉ: Les modèles utilisés dans les sciences humaines et sociales (SHS) pour comprendre et expliquer les phénomènes sociaux sont d'une grande variété, certains plus simples et parcimonieux, d'autres plus complexes et intégrant de nombreux éléments. Après avoir discuté globalement des registres de l'explication en SHS, le niveau d'abstraction du phénomène à expliquer est abordé à partir de la nature des objets en jeu et de la forme plus ou moins stylisée de la représentation de l'espace. Une réflexion sur les niveaux de généralité des explications est conduite en parallèle. La nature simple ou complexe des modèles est ensuite traitée en suivant la terminologie des modèles KISS versus KIDS qui est employée dans le domaine de la modélisation à base d'agents. Enfin, l'intérêt de positionner les modèles dans le plan formé par ces deux axes, le degré de généralité du phénomène à expliquer d'un côté et le niveau de simplicité du modèle mobilisé de l'autre, est argumenté. Un tel croisement permet de discuter des pratiques de modélisation en SHS. Sans entrer dans le détail des modèles correspondants, deux objets de recherche correspondant à deux échelles différentes seront mobilisés, les villes et les systèmes de villes.*

*KEYWORDS: explication, géographie, système de villes, simulation, modèles KISS/KIDS*

---

## 1. Introduction

Dans le domaine des sciences humaines et sociales (SHS), comme dans celui des sciences de la nature, les pratiques de modélisation sont variées, impliquant des modèles simples et des modèles complexes, autour d'une grande variété d'objets et de problématiques. La majorité des présentations du colloque émanant des sciences dites « dures », j'explicitierai quelques objets et questionnements relatifs aux sciences sociales, en particulier dans le cadre d'analyses privilégiant la dimension spatiale du phénomène étudié. L'analyse spatiale consiste en « l'analyse formalisée de la configuration et des propriétés de l'espace géographique, tel qu'il est produit et

Lena Sanders

vécu par les sociétés humaines » [PUM 2010]. L'espace géographique, que nous pratiquons tous au quotidien, est composé d'objets relevant d'échelles variées, des individus, des logements, des commerces au niveau micro-géographique, des quartiers, des régions, des villes, à un niveau méso-géographique et des pays ou des ensembles régionaux au niveau macro-géographique. L'ensemble de ces éléments interagissent, fonctionnent ensemble et « font système ». Le chercheur de ce domaine cherche à décrire ces systèmes, à identifier les processus qui sous-tendent leur évolution et à comprendre leurs dynamiques, tant dans leurs phases de reproduction que de rupture. Sans entrer dans le détail des modèles correspondants, je prendrai appui tout au long du chapitre sur deux objets de recherche inter-reliés mais correspondant à deux échelles différentes, les villes et les systèmes de villes.

Dans un premier temps j'aborderai la question de l'explication d'un point de vue thématique et épistémologique : quel est l'*explanandum* ? Que cherche-t-on à expliquer ? Comment ? Il peut s'agir d'un phénomène général (pourquoi existe-t-il des villes ? Pourquoi l'espace des villes est-il ségrégué ?) ou d'un phénomène particulier (pourquoi les villes de telles régions sont-elles en déclin ?). Le niveau d'abstraction du phénomène à expliquer est ensuite discuté à partir des objets en jeu et de la forme plus ou moins stylisée de la représentation de l'espace. Une réflexion sur les niveaux de généralité des explications sera conduite en parallèle. Les modèles utilisés dans les SHS pour comprendre et expliquer ces phénomènes sont d'une grande variété, certains plus simples et parcimonieux, d'autres plus complexes et intégrant de nombreux éléments. Cette opposition sera abordée en suivant la terminologie des modèles KISS *versus* KIDS qui est employée dans le domaine de la modélisation à base d'agents. Je terminerai en exposant un travail mené avec Arnaud Banos, consistant à positionner les modèles dans le plan formé par ces deux axes, le degré de généralité du phénomène à expliquer et le niveau de simplicité du modèle mobilisé. Le croisement de ces deux dimensions permet en effet de discuter des pratiques de modélisation en SHS.

## 2. Les registres de l'explication en SHS

Expliquer est un objectif commun pour le chercheur, qu'il émane des sciences de la nature ou des sciences sociales. Ce terme renvoie cependant à différents modèles épistémologiques et une question qui revient souvent concerne l'existence ou non d'une rupture dans la façon de faire de la science dans les sciences de la nature et dans les sciences sociales. L'ouvrage édité par Thierry Martin (2011) montre qu'il n'y a pas de consensus sur cette question et surtout qu'il n'y a pas de correspondance simple entre les champs scientifiques et les approches épistémologiques et méthodologiques adoptées, les différences étant aussi marquées au sein de chacun de ces deux champs d'activité scientifique qu'entre eux.

Des débats anciens portant sur l'opposition entre les approches de Hempel (1963) et de Dray (2000) dans le domaine de l'explication historique sont toujours d'actualité (Nadeau 2007), et offrent un bon point de départ dans la réflexion sur l'explication scientifique en sciences humaines. Le modèle explicatif de Hempel est proche de celui traditionnellement utilisé dans les sciences de la nature et postule que toute explication scientifique est de nature nomologique, qu'elle soit déductive (avec une référence à des lois universelles) ou inductive (référence à des lois statistiques). Il s'agit de l'explication par une « loi de couverture » : le fait à expliquer (*explanandum*) se déduit d'un jeu de prémisses (*explanans*) constitué d'un ensemble de conditions initiales et de lois générales (universelles ou statistiques). Dray répond que l'explication en histoire ne relève pas de lois et que pour comprendre les événements qui se sont produits au cours de l'histoire, le rôle de l'historien est de se concentrer sur les acteurs significatifs et de rendre compte de leurs actions, en recherchant les causes de ces actions, i.e. en mettant en évidence les raisons qui ont conduit ces acteurs à faire les choix qu'ils ont faits dans le contexte où ils se trouvaient. Il s'agit d'identifier l'enchaînement spécifique de raisons qui a conduit des acteurs à prendre telles décisions dans tel contexte. Dans l'approche de Hempel l'explication et loi apparaissent comme synonymes alors que ces notions sont clairement disjointes dans celle de Dray (Lenclud 2011).

Quelques exemples permettent d'illustrer comment ces deux points de vue peuvent être utilisés de manière complémentaire dans une pratique de recherche en SHS. Quand on s'intéresse aux villes, quelques exemples d'*explanandum* sont : Pourquoi y a-t-il des villes ? Pourquoi la naissance d'une ville ? Pourquoi y a-t-il une ville ici et pas là ?

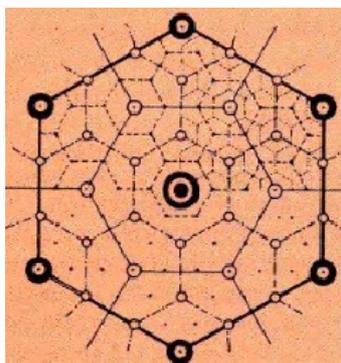
Le modèle de Christaller (1933) est un des plus classiques dans le domaine de l'analyse spatiale. Il décrit l'organisation régulière des villes (« lieux centraux ») dans l'espace en fonction de leur niveau de fonction (figure 1). Cette régularité spatiale correspond à la localisation optimale des lieux centraux dans l'hypothèse où les individus ont des comportements rationnels et choisissent le lieu le plus proche pour répondre à leurs besoins en biens et en services. Plaçons-nous maintenant dans un cas empirique et supposons que l'on est face à la trame urbaine représentée sur la figure 2a et qu'une nouvelle ville est créée dans ce contexte. Deux cas sont illustrés :

- Cas 1 (figure 2b) : la nouvelle ville est créée dans un espace relativement vide, assez loin des villes préexistantes, et en ce sens elle remplit un vide relativement à un réseau de type christallérien. Tel est typiquement le cas de Montpellier au 10<sup>e</sup> siècle (Favory *et al.*, 1998) : en 985 il y a en ce lieu (une colline assez basse) une simple exploitation agricole alors qu'une famille aristocratique (les Guilhem) s'y établit. Il s'agit là de la décision d'un acteur qui devait avoir ses raisons propres. L'avenir a donné raison à ce choix, Montpellier s'est développée rapidement et est devenue une des principales agglomérations du pourtour méditerranéen. Ce choix

Lena Sanders

était « conforme » au modèle de Christaller, la création de la ville remplit un vide et rend le réseau urbain local plus régulier.

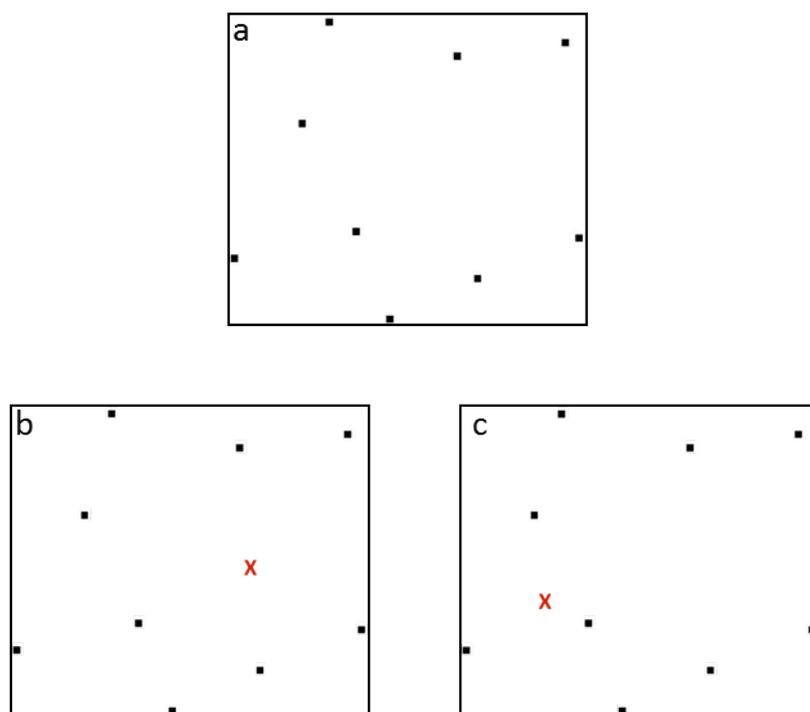
- Cas 2 (figure 2c) : la nouvelle ville est créée non loin d'autres villes. Tel est le cas de la ville de Richelieu, créée par le Cardinal Richelieu en 1631. Le ministre de Louis XIII a souhaité la création d'une ville nouvelle en prolongement de son château. L'architecture et le plan d'urbanisme sont ambitieux, la ville est conçue par l'architecte Jacques Lemercier qui a conçu la Sorbonne et le Palais Royal. Les bâtiments de la ville sont construits par des particuliers suivant des normes architecturales précises, le terrain étant offert par le Cardinal. Aujourd'hui le château a disparu, les bâtiments de la « ville » sont toujours là mais il s'agit plutôt d'un village et l'observateur est saisi par le décalage entre l'ampleur des bâtiments et la fonction de petit bourg de cette commune de moins de 2000 habitants. Les raisons de Cardinal allaient, dans ce cas, à l'encontre du modèle de Christaller et la ville ne lui a pas survécu.



**Figure 1.** Le modèle de Christaller (la taille de chaque point est proportionnelle au niveau de fonction du « lieu central » (Source : Adam et Guermond, 1989).

Ces deux exemples illustrent la complémentarité des registres explicatifs de Hempel et Dray. Si la question est : « Pourquoi une ville a-t-elle été créée ici ? » les raisons l'emportent dans les deux cas, celles de la famille Guilhem qui l'ont amené à choisir cette colline plutôt qu'une autre et celles du Cardinal désirant une vraie ville aux abords de son château. Si la question est : « Pourquoi cette ville a-t-elle perduré sur le temps long ? », l'explication est à chercher dans les lois spatiales. Enfin, si la question est : « Pourquoi y a-t-il une ville ici aujourd'hui ? », il est nécessaire de mobiliser les deux registres explicatifs, d'abord les raisons, puis les lois.

## Analyse spatiale de phénomènes sociaux



**Figure 2.** Deux cas de création d'une ville nouvelle (représentée par une croix) dans un semis urbain initial.

Le modèle nomothétique implique que l'explication et la prédiction résultent du même processus : connaissant les prémisses et la loi à appliquer, le résultat prend la forme d'une explication si le phénomène s'est déjà produit et celle d'une prédiction s'il se situe dans l'avenir. Lors du colloque « Modélisation: succès et limites », la prédiction a plusieurs fois été énoncée comme faisant partie intégrante de la démarche scientifique. La pratique en sciences sociales, et notamment en géographie, est de développer des modèles qui permettent d'explorer les effets de différents scénarios mais sans que l'objectif soit celui d'une réelle prédiction. Les résultats des scénarios peuvent ainsi servir de support à une réflexion théorique ou opérationnelle sans qu'il y ait de visée prédictive. Les modèles des sciences sociales y sont en général peu adaptés.

### 3. Niveau d'abstraction du phénomène à expliquer

Ce cadre très général de l'explication nomologique ou par les raisons étant posé, il est intéressant de se pencher sur les questions que se posent les thématiciens. Que cherchent-ils à expliquer ? Pour reprendre l'exemple sur la localisation des villes développé plus haut, le thématicien s'intéressant aux villes peut formuler son questionnement à différents niveaux d'abstraction. « Pourquoi y a-t-il des villes ? », « Pourquoi y a-t-il des différentiels de croissance entre les villes ? » sont des questions générales, quasi-universelles, ne référant ni à une époque donnée ni à un lieu précis. Il s'agit de phénomènes-types, que l'on peut observer de manière répétée dans le temps et l'espace. A l'opposé, les questions sur Richelieu et sur Montpellier relèvent du cas particulier, elles réfèrent à des phénomènes qui ont été observés en un lieu donné à un moment donné. Notons cependant que dans ces derniers cas, les mécanismes mobilisés pour expliquer la capacité de ces villes à perdurer, fondés sur des mécanismes de compétition interurbaine, sont généraux.

Le niveau d'abstraction du phénomène empirique que l'on cherche à expliquer peut être abordé sous deux angles, celui de la nature des « objets » que l'on étudie et celui de la représentation de l'espace dans lequel s'inscrit le phénomène d'intérêt. Dans les deux cas je discuterai le caractère générique ou particulier des explications proposées. Comme l'illustrent les cas de Richelieu et Montpellier, il n'y a en effet pas de relation simple entre le niveau d'abstraction de l'objet considéré et celui de l'explication proposée.

#### 3.1. Nature des objets: de la ville au système de villes

Les objets que l'on étudie peuvent avoir, intrinsèquement, un caractère plus ou moins abstrait. En ontologie on distingue ainsi les objets *bona fide* et les objets *fiat* (Smith et Varzi 2000). Les premiers renvoient au « bon sens », il s'agit par exemple d'une île, d'un lac, ou encore d'un individu ou d'un bâtiment, objets sur l'existence desquels il y a consensus. Les seconds sont des construits résultant soit d'un principe administratif ou politique (un département, un pays) soit d'une construction scientifique. Ceci est typiquement le cas d'un système de villes. Si chacun a une représentation de ce qu'est une ville (même si la délimitation de celle-ci pose des problèmes méthodologiques), le système de villes n'est pas un objet « visible » par n'importe quel observateur, il relève d'un niveau d'organisation plus élevé et a un caractère plus abstrait.

L'ensemble des villes d'un territoire (un pays, un continent, le monde pris dans son ensemble) peut être formalisé comme un système dans le sens où les villes sont en interaction et que le jeu de ces interactions constitue le moteur du système. Il est ainsi difficile d'expliquer ce qui se passe dans une ville donnée sans faire référence à sa place relative dans le système de villes dont elle fait partie et aux interactions

## Analyse spatiale de phénomènes sociaux

qu'elle entretient avec les autres villes de ce système. Cet objet a été conceptualisé dans différentes disciplines qui se sont intéressées aux villes à des périodes et dans des espaces variés, géographes, économistes et archéologues.

Les chercheurs de ces différentes disciplines se sont en particulier intéressés à la structure hiérarchique des systèmes de villes en prenant appui sur le modèle de Zipf (1949). Ce modèle s'écrit :

$P = k r^{-a}$  où  $P$  désigne la population,  $r$  le rang,  $k$  une constante et  $a$  est un paramètre exprimant le degré d'organisation hiérarchique du système. On parle de « loi de Zipf » quand  $a=1$  (cas où la ville de rang 1 est deux fois plus grande que la suivante qui à son tour est deux fois plus grande que la troisième etc.).

Les travaux empiriques dans ce domaine sont nombreux, à la fois sur des sociétés passées et contemporaines. L'observateur est face à une forte régularité empirique, la loi étant vérifiée dans des contextes spatiaux et temporels très variés. En revanche les chercheurs n'ont pas su construire de cadre théorique qui permette d'expliquer cette régularité, ce qui les laisse perplexes. Le titre de l'article de Krugman (1996), « *Confronting the Mystery of Urban Hierarchy* », est symptomatique. L'économiste y exprime « *the frustrating position of having a striking empirical regularity with no good theory to account for it* ». En fait, les modèles qui permettent de reproduire au plus près une distribution rang-taille de type Zipf reposent sur l'hypothèse que le taux de croissance des villes est indépendant de leur taille. Or la théorie micro-économique stipule que la croissance dépend justement de la taille des villes (principe de « *increasing returns* », Fujita *et al.*, 2001) et les théories de la géographie urbaine qu'elle dépend des interactions interurbaines (Sheppard, 1982). La loi empirique questionne ainsi les théories à la fois des économistes et des géographes.

Face à l'observation de l'organisation hiérarchique de différents systèmes de villes, obéissant à ou s'écartant de la loi de Zipf, la littérature met d'ailleurs en évidence différents niveaux de généralité lors de l'explication du cas empirique étudié (Sanders 2012). Souhaitant comparer un même système de villes à deux ou plusieurs dates, certains chercheurs cherchent à mettre en relation un changement dans la forme de la distribution rang-taille du système étudié avec un changement du contexte local. L'évolution vers une distribution log-normale refléterait par exemple, en archéologie, une société qui devient plus stratifiée, alors que face à un même changement, des travaux en économie évoquent le rôle de l'amélioration des infrastructures de transport. De nombreux chercheurs, issus de l'ensemble des disciplines concernées, convergent pour conclure que ces explications contextuelles traduisent simplement qu'une multitude de causes peuvent mener à un même changement dans la distribution rang-taille du peuplement (Berry 1961, Shepard 1982, Dittmar 2010). Certains interprètent la distribution rang-taille comme un indicateur du niveau d'intégration du système de peuplement, ce dernier étant mesuré par la fréquence et l'intensité des échanges entre les unités de peuplement.

Qu'il s'agisse de flux de personnes ou d'information, ces échanges favorisent en effet la circulation des innovations, sociales, économiques, culturelles, produisant des taux de croissance indépendants de la taille des villes et non autocorrélés. Ce type d'explication systémique réfère à un niveau de généralité plus élevé que les précédentes. D'autres chercheurs enfin préconisent des explications plus génériques encore reposant sur les systèmes complexes. Denise Pumain (2006) préconise ainsi de rechercher une cause plus générale pour expliquer la récurrence de la loi puissance dans la distribution des tailles de différents types de populations, qu'elles émanent des sciences de la nature ou des sciences sociales.

Face à un même objet relativement abstrait, le système de villes, les explications mobilisées par les chercheurs relèvent ainsi de niveaux de généralité divers. Ceux cherchant à produire des connaissances sur un système de peuplement précis accordent de l'importance au contexte spatio-temporel dans lequel s'inscrit ce système et le modèle joue dans ce cas un rôle de « filtre » pour mettre en évidence un changement ou un écart au modèle et donner sens à cet écart. En forçant le trait, le chercheur a alors une démarche s'apparentant à la recherche des « raisons » de Dray. A l'autre extrême, l'objet s'efface quasiment devant la généralité de la loi puissance pour décrire des hiérarchies de natures variées.

### ***3.2. Représentation de l'espace : un espace stylisé ou une géographie réaliste***

Si on choisit de porter l'attention sur la dimension spatiale du phénomène étudié, il s'agit de réfléchir au niveau d'abstraction adéquat pour représenter celle-ci. Le cas de la ségrégation socio-spatiale dans l'espace urbain permet d'illustrer la variété des positionnements :

- Lorsque Schelling (1971) développe son modèle sur l'émergence de configurations spatiales ségréguées, modèle qui a donné lieu à une riche littérature, il part du constat empirique que dans toutes les villes américaines on observe de la ségrégation. Il ne s'intéresse nullement à la configuration de cette ségrégation mais plutôt à son caractère répétitif d'une ville à l'autre. Ce positionnement l'amène à développer un modèle où l'espace correspond à une grille homogène et isotrope dans laquelle sont placés des agents munis de règles de comportement<sup>1</sup> et il s'intéresse aux conditions menant à l'émergence d'une configuration ségréguée.

- Nombreux géographes s'intéressent en revanche à des espaces ségrégués précis, cherchant à comprendre et expliquer une situation observée et questionnant les facteurs ayant mené à cette ségrégation. Dans un tel cas, un des enjeux est de

---

<sup>1</sup> Le modèle de Schelling simule l'émergence d'une ségrégation spatiale non voulue a priori par les agents. Ces derniers sont de deux types (riches et pauvres, noirs et blancs par exemple) et ils choisissent de changer de localisation si les agents de même profil qu'eux-mêmes sont « trop » (seuil défini par un paramètre) minoritaires dans leur voisinage.

repérer les effets de contexte et d'identifier le rôle d'une organisation spatiale sur les dynamiques du système étudié. Etudiant l'hétérogénéité sociale de l'espace scolaire en Ile-de-France, François *et al.* (2015) posent comme premier facteur explicatif l'hétérogénéité sociale de l'espace résidentiel sous-jacent. Un modèle statistique permet aisément de confirmer cette hypothèse, mais surtout l'analyse des résidus révèle qu'il reste une part non expliquée, mettant en évidence les comportements d'évitement des familles.

Dans le premier cas l'espace est appréhendé comme un simple support de l'activité sociale et l'on s'intéresse aux effets de mécanismes opérant au niveau des agents et traduisant leur décision de migrer en fonction de la composition de leur voisinage. Dans le deuxième cas, la configuration spatiale est centrale dans l'explication, l'espace y apparaît comme un véritable "acteur". Il s'agit de comprendre comment la structuration de l'espace influe sur les comportements des individus et amène cette configuration à évoluer. Dans chacun des cas les questionnements sont différents, le premier plus générique, le second portant l'attention sur les effets de contexte dans le cas d'une configuration spatiale particulière. Une voie intermédiaire consiste à considérer un espace fictif mais structuré, avec par exemple un centre et une périphérie socialement sectorisée et de développer un modèle sur cette organisation spatiale (François *et al.*, 2014). L'important est de mettre en adéquation la question et le niveau d'abstraction de la représentation de l'espace, espace homogène et isotrope, espace-type, ou espace empirique.

#### 4. Expliquer avec des modèles : modèles « KISS » et modèles « KIDS »

La définition, large, de Minsky (1965) ouvre sur de nombreuses possibilités : « *To an observer B, an object A\* is a model of an object A to the extent that B can use A\* to answer questions that interest him about A* ». Commençons par distinguer deux familles de modèles prenant appui sur des philosophies et des méthodes très différentes et correspondant à des visions différentes de l'explication:

- les modèles reposant sur l'analyse de données et fournissant une « explication » statistique du phénomène étudié: la terminologie statistique fait état de variables « explicatives », de « prédicteurs » pour qualifier les variables indépendantes dans un modèle de type régression. L'explication repose alors sur un ensemble de corrélations indiquant que les phénomènes considérés varient ensemble (que les individus statistiques soient des ménages, des villes ou des pays). Ces corrélations seules n'expliquent rien en termes de causalité. En revanche, associées à une conceptualisation sagittale des relations causales supposées entre les phénomènes étudiés, l'ensemble (équations statistiques et graphe) produit un modèle causal (Russo, 2007).

Lena Sanders

- les modèles de simulation fournissant une explication par les mécanismes ou une explication dite « générative » (Manzo 2005). Une telle approche privilégie les processus en jeu dans l'évolution d'un système. Les systèmes multi-agents (SMA), par exemple, représentent un outil apprécié en sciences sociales et les chercheurs de ce domaine (à l'exception des économistes) les utilisent davantage que les modèles mathématiques. L'attrait principal consiste sans doute dans le passage relativement direct entre le cadre conceptuel élaboré par les chercheurs spécialistes de la thématique et le cadre formel d'implémentation du modèle informatique. Ces modèles reposent en effet sur un ensemble de règles pour formaliser les interactions entre des entités élémentaires (des villes par exemple). En sortie de simulation, on s'intéresse aux structures qui ont émergé à un niveau d'organisation supérieur (le système de villes dans ce cas). Cependant, comme le soulignent Marchionni *et al.* (2013), simuler l'émergence d'une certaine configuration fournit une « preuve de possibilité » mais non une explication. Il s'agit d'analyser également dans quelle mesure et comment les sorties du modèle dépendent des hypothèses du modèle.

Dans le premier cas la démarche consiste à partir de ce qui est observable (recensement, enquêtes, analyses génétiques, fossiles, données GPS) et à reproduire, analyser, ce qui existe ou a existé « dans la réalité ». Dans le deuxième cas, la démarche correspond plutôt à une « expérience de pensée », et le raisonnement est guidé par la question : « qu'arriverait-il si? ». Le chercheur construit un monde artificiel qui lui permet d'explorer des « histoires alternatives » à partir de différents scénarios (Lake 2014). Ces deux approches sont complémentaires et s'inspirent l'une l'autre : les résultats de l'analyse des données permettent de construire des hypothèses sur les processus sous-jacents aux structures observées ; les simulations peuvent faire ressortir de nouvelles questions qui amèneront à récolter de nouvelles données.

En nous concentrant sur les seuls modèles de simulation, une autre distinction a donné lieu à de nombreuses discussions entre les chercheurs (Banos *et al.*, 2013, Livet *et al.*, 2014):

- Les modèles dits « KISS », correspondant à l'injonction militaire “Keep it Simple, Stupid ! », préconisés par Axelrod (1997): il s'agit, pour reprendre la terminologie du colloque, de modèles simples et parcimonieux, que l'on peut analyser, au moins partiellement, de manière analytique. Tel est par exemple le cas du modèle de Schelling. La philosophie de Axelrod est que « la complexité d'un modèle à base d'agents doit résider dans les résultats issus de sa simulation, non dans ses hypothèses ».

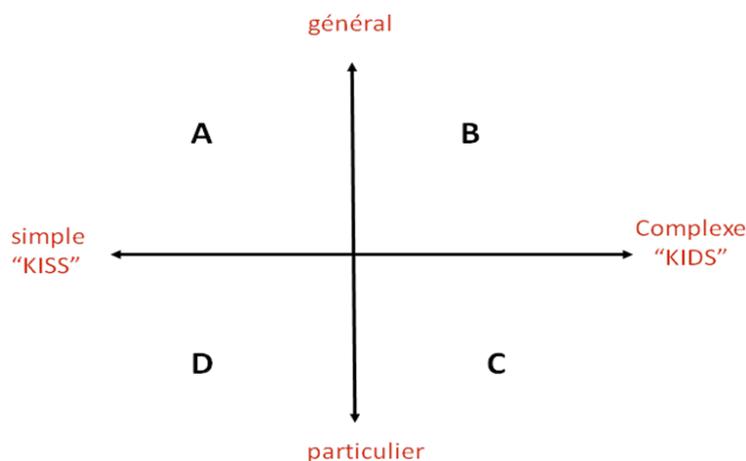
- Les modèles dits « KIDS », correspondant à “Keep It Descriptive, Stupid !”, défendus par Edmonds et Moss (2005) : ils préconisent de prendre en compte tous les éléments qui interviennent dans le phénomène d'intérêt. Cette catégorie relève des modèles que l'on peut qualifier de complexes pour reprendre la terminologie du colloque. La philosophie de ces chercheurs est de « conserver une approche

explicative en prenant en compte tous les mécanismes a priori nécessaires, puis simplifier progressivement ».

La différence entre le modèle simple et le modèle complexe peut résider dans le nombre et la complexité des mécanismes pris en compte, ou dans la représentation de l'espace, homogène et isotrope dans un cas ou correspondant à une géographie réaliste, stylisée ou empirique, dans l'autre cas. Ces deux sources de complexité sont d'ailleurs liées, la prise en compte d'une géographie réaliste impliquant de formaliser des hypothèses sur les effets de contexte.

### 5. Croiser le niveau d'abstraction du phénomène à expliquer et le degré de simplicité/complexité du modèle

Les paragraphes qui précèdent abordent d'une part le niveau d'abstraction du phénomène auquel on s'intéresse et d'autre part la nature simple (KISS) ou complexe (KIDS) du modèle mobilisé. La figure 3 représente le croisement de ces deux entrées qui produit quatre quadrants bien distincts (Banos *et al.*, 2013). Le positionnement des modèles dans ce plan d'axes permet de mettre en évidence les héritages entre différents modèles et de réfléchir aux stratégies de simplification ou de complexification progressive mises en œuvre par les chercheurs. Différents exemples permettent de l'illustrer.



**Figure 3.** Combinaison des 2 dimensions (Source : d'après Banos et Sanders, 2013)

Un modèle classique de dynamique de population est le modèle de Verhulst reposant sur la fonction logistique. Ce modèle a été utilisé dans des domaines très divers pour décrire la croissance d'une population dans un contexte de limitation des ressources, qu'il s'agisse de particules, d'animaux ou d'êtres

humains. Ce modèle s'inscrit dans le quadrant A de la figure 3, avec une formulation simple d'un phénomène stylisé (croissance d'une population dans un espace avec contrainte). Le facteur limitant est représenté par une constante qui désigne le potentiel de croissance (capacité maximale) de l'espace représenté. Dans le cas où l'on s'intéresse à la dynamique des villes, ce facteur évolue au cours du temps en fonction de facteurs comme l'attractivité des villes et leur capacité d'innovation. Le modèle urbain de Peter Allen (1997) a ainsi la forme générale de la fonction logistique, avec un facteur limitant complexe, traduisant des hypothèses sur l'évolution des villes insérées dans un système urbain. L'équation différentielle qui en résulte traduit la richesse des hypothèses du thématicien (combinant des facteurs endogènes avec des facteurs portant sur les interactions avec les autres villes) mais elle n'a pas de solution analytique. Ce modèle se situe dans le quadrant B : il porte sur un phénomène stylisé, la croissance des villes au sein d'un semis urbain fictif, avec la prise en compte de plusieurs facteurs qui sont supposés être à l'origine des différentiels de croissance entre les villes. L'application de ce modèle à un ensemble de villes empiriques placées dans un contexte géographique défini (par exemple les villes françaises, les villes du pourtour méditerranéen), amène un placement du modèle dans le quadrant C.

Le cas du « voter model » (Fieldhouse *et al.*, 2016) est intéressant à évoquer car l'équipe a parcouru l'axe KIDS vers KISS de manière systématique, en trois étapes. La première a consisté à développer un modèle complexe sur la participation des citoyens aux votes. Ce modèle se positionne du côté générique de la figure 3 car il n'est pas ancré dans des élections particulières ou un pays ou une époque précis. L'objectif est de comprendre comme évolue le taux de participation en fonction de relations d'influence entre les agents. Ce premier modèle intègre un large ensemble de facteurs que les chercheurs en sciences politiques considèrent comme fondamentaux et est positionné dans le quadrant B. L'hypothèse centrale est que le comportement de chaque individu dépend de son engagement civique qui dépend de l'influence des autres agents avec lesquels il interagit. Un agent fortement engagé a une probabilité plus forte d'échanger et donc influencer d'autres agents. Le modèle est fondé sur une telle boucle de rétroaction. Un SMA est utilisé pour construire un monde artificiel complexe où sont gérés tous les facteurs intervenant dans la vie de l'individu, aussi bien démographiques que comportementaux.

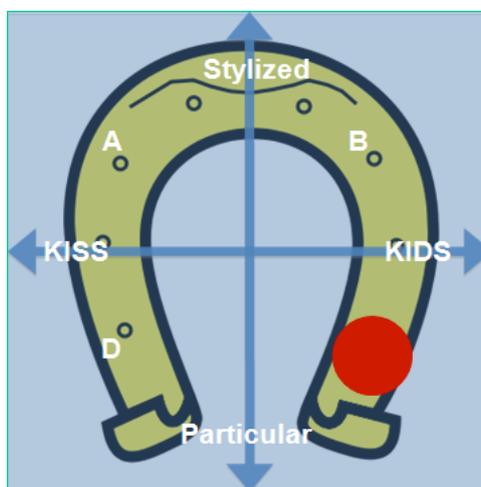
Le deuxième modèle (Lafuerza *et al.*, 2016) est une simplification du premier :- la démographie a été simplifiée en remplaçant la modélisation des enfants et de leur vieillissement par la création d'un flux entrant de nouveaux agents en âge de voter ; - les comportements ont été simplifiés en remplaçant certains mécanismes rationnels conduisant à ne pas voter par un simple tirage aléatoire ; - les réseaux sociaux construits à partir du lieu de travail, de

résidence et des écoles, ont été remplacés par une probabilité d'échange avec chaque autre agents. Les modèles sont comparés à travers la relation entre les valeurs du principal paramètre, le « taux d'influence », et leurs résultats en termes de taux de participation. Le modèle simplifié « tourne » beaucoup plus vite, permettant un nombre élevé de simulations, ce qui a permis de montrer l'existence de deux régimes, l'un correspondant à un taux de participation élevé et l'autre faible, et d'étudier la transition de l'un à l'autre en fonction des valeurs du principal paramètre. Plusieurs variantes sont testées et aboutissent à toute une famille de modèles simplifiés, qui ensemble produisent de la connaissance sur le modèle complexe. L'ensemble de ces modèles simplifiés se trouvent entre les positions B et A de la figure 3. Les auteurs indiquent que cette méthode leur permet de combiner la pertinence thématique qu'offre le modèle complexe avec les avantages des modèles simples (simulations plus rapides, évaluation du modèle plus facile). Lors d'une troisième étape, les auteurs proposent une version simplifiée qui permet une approche analytique (Lafuerza *et al.*, 2015) et qui complète la chaîne de modèles. Cette version simplifiée se trouve dans le quadrant A de la figure 3.

Un troisième exemple est celui de la famille des modèles SimPop (Sanders *et al.*, 1997, Pumain *et al.*, 2013, Schmitt *et al.*, 2015) qui modélisent l'émergence d'un système de villes hiérarchisé à partir d'une situation initiale où le peuplement est composé d'un ensemble de villages aux seules fonctions agricoles et fonctionnant en autonomie. Chaque village est représenté par un agent au sein d'un SMA. Le dégagement d'un surplus supérieur à un certain seuil amène cet agent à acquérir le statut de ville qui lui donne l'opportunité d'interagir avec les autres agents et de commercialiser les biens et services correspondant à son statut de ville. Le modèle est fondé sur les interactions entre les villes qui acquièrent au fur et à mesure des niveaux de fonction plus élevés, associés à des capacités d'interaction de portées de plus en plus étendues. Ce modèle relève du quadrant B tout comme le modèle de Peter Allen évoqué plus haut et dont il partage certaines hypothèses (Pumain, Sanders 2013). Il n'existe pas de version KISS de ce modèle. En revanche il a été utilisé pour explorer l'évolution des villes européennes entre 1950 et 2050 en fonction de différents scénarios sur l'ouverture des frontières européennes aux migrants venant de l'extérieur de l'Europe et sur l'existence ou non de frontières économiques à l'intérieur de l'Europe, réduisant les échanges commerciaux entre certains couples de villes (Sanders, Mathian, 2008). Le cœur du modèle EuroSim est constitué d'un marché d'échanges entre les villes reposant sur des réseaux correspondant à trois critères : 1) la proximité, ce qui est classique pour les modèles urbains (et le propre du modèle de Christaller évoqué plus haut) ; 2) le principe administratif privilégiant les échanges entre les villes d'un même pays ; 3) l'appartenance à un réseau d'échanges commerciaux, ce qui est l'élément déterminant pour différencier les potentiels

de croissance des villes. Ces réseaux d'échanges reposent sur des principes de complémentarité entre les spécialités fonctionnelles des villes et ils sont évolutifs. Ce modèle relève clairement du quadrant C de par son ancrage dans la géographie des villes européennes. En 1950 les villes européennes sont déjà bien développées et il est nécessaire de prendre en compte les différentiels hérités (concept de « path dependency ») et les effets de contexte. Contrairement au cas précédent, ce modèle plus complexe a été développé après le modèle SimPop, plus simple, en complexifiant progressivement le fonction du réseau d'échanges.

La figure 4 représente, sous la forme d'un fer à cheval inscrit dans les quatre quadrants décrits ci-dessus, un cheminement conceptuel permettant de passer d'un quadrant à l'autre (Banos, Sanders, 2013). Tous les passages ne se valent pas, et notre expérience tend à exclure un passage entre les quadrants D et C, ou l'inverse, comme pertinent. Afin de l'illustrer, considérons le modèle de Schelling décrit plus haut, qui s'inscrit dans le quadrant A. L'injection des proportions respectives de riches et de pauvres dans le cas d'une ville donnée placerait le modèle en D. Le passage d'une grille homogène à un espace urbain particulier, qui conduirait le modèle en C, ne peut cependant être fait correctement sans définir les règles qui expliciteraient la combinaison des effets du contexte morphologique et ceux du voisinage sur les décisions migratoires des agents. La construction d'un tel modèle nécessite de repartir de A, d'enrichir les règles par la prise en compte du contexte spatial en B, et enfin de produire une application à une ville empirique en C.



**Figure 4.** Le fer à cheval pour guider l'analyse et la construction de modèles : entre C et D, le meilleur « chemin » conceptuel suit le fer à cheval (Source: Banos, Sanders, 2013)

## 6. Conclusions

Il est certes difficile de trouver le juste équilibre entre un modèle (trop) simple, qui a effectivement une solution analytique mais qui n'apporte pas de connaissances sur le plan thématique car trop global, et en conséquence trop banal, et un modèle (trop) complexe où l'ensemble des mécanismes considérés comme pertinents sur le plan thématique sont pris en compte mais dont les propriétés sont difficiles à appréhender. La stratégie mise en place par les chercheurs ayant modélisé le taux de participation électorale, consistant à élaborer toute une famille de modèles, semble une voie féconde. Les auteurs soulignent cependant le caractère chronophage d'une telle entreprise. Notons également qu'un seul des auteurs est présent sur les trois articles, B. Edmonds (un auteur qui a toujours défendu la position consistant à démarrer un processus de modélisation par une approche KIDS). Ce fait souligne la nécessité d'une collaboration interdisciplinaire pour développer une telle stratégie, afin de réunir au sein d'une même équipe, le goût et les compétences pour une approche thématiquement pertinente, et les savoir-faire pour construire un modèle d'une forme telle que l'on peut analyser de manière rigoureuse ses propriétés.

## 7. References

- [ADA 1989] Adam, S., Guermond, Y. , « Des hexagones dans l'Hexagone », *Mappemonde*, 4, pp. 8-11, 1989.
- [ALL 1997] Allen P. M., *Cities and Regions as Self-organizing Systems: Models of Complexity*, Gordon and Breach, Amsterdam, 1997.
- [AXE 1997] Axelrod R., *The complexity of cooperation : agent-based models of competition and collaboration*, Princeton Studies in Complexity, Princeton, New Jersey, 232 p., 1997.
- [BAN 2013] Banos A., Sanders L., « Modéliser et simuler les systèmes spatiaux en géographie », in Varenne F., Silberstein M. (eds), *Modéliser et Simuler - Epistémologies et pratiques des modèles et des simulations*, Ebook des éditions Matériologiques, tome 1, chapitre 31, pp. 833-863, 2013.
- [BER 1961] Berry B.J.L., 1961, "City Size Distribution and Economic Development", *Economic Development and Cultural Change*, 9, 4, Part 1, pp. 573-588, 1961.
- [BOU 2011] Bouvier, A., « Connaissance de l'individuel et science du général », in T. Martin (Éd.), *Les sciences humaines sont-elles des sciences*, pp. 35-52, 2011.
- [CHR 1933] Christaller W., *Die Zentralen Orte in Suddeutschland*, Jena, Translated by Baskin, CC (1966), *Central Places in Southern Germany* New Jersey: Prentice-Hall, 1933.
- [DIT 2010] Dittmar J., *Cities, Institutions, and Growth: The Emergence of Zipf's Law*, Manuscript, University of California, Berkeley, 1-51, 2010.

Lena Sanders

- [DRA 2000] Dray, W.H., « Explanation in History », in J. Fetzer, ed., pp. 217-242, 2000.
- [EDM 2005] Edmonds B., Moss S., «From KISS to KIDS – An ‘Anti-simplistic’ Modelling Approach, in Multi-Agent and Multi-Agent-Based Simulation», *Lecture Notes in Computer Science*, Volume 3415/2005, pp. 130-144, 2005.
- [EPS 2006] Epstein J., *Generative social science: studies in agent-based computational modeling*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 356 p, 2006.
- [HEM 1963] Hempel, C.G., « Reasons and Covering Laws in Historical Explanation », in Hook, ed., 1963, pp. 143-163, 1963.
- [FAV 1998] Favory F., Mathian H., Raynaud C., Sanders, L., « Sélection géographique, déterminisme et hasard », in Archaeomedes, *Des oppida aux métropoles*, Paris: Anthropos, collection Villes, pp. 151-248, 1998.
- [FIE 2016] Fieldhouse E., Lessard-Phillips L., Edmonds B., « Cascade or echo chamber? A complex agent-based simulation of voter turnout », *Party Politics*, 22(2), pp. 241-256, 2016.
- [FRA 2015] François J.-C., Boularan Z., Ciesielski H., Mathian H., Sanders L., « Mobilité géographique et réussite au Brevet des collèges dans l'agglomération parisienne », in Courty G. (ed), *La mobilité dans le système scolaire. Une solution pour la réussite et la démocratisation ?* Presses Universitaires du Septentrion, Lille, pp. 35-57, 2015.
- [FRA 2014] François J.-C., Mathian H., Sanders L., Waldeck R., Bulle N., Phan D., « Modélisation par SMA de la structuration sociale de l'espace scolaire: une ontologie intégrée mais non réductrice de plusieurs points de vue méthodologiques », in Phan D. (dir) *Ontologies et modélisation par SMA en SHS*, Hermes-Lavoisier, Londres-Paris, pp. 461-475, 2014.
- [FUJ 2001] Fujita M., Krugman P., Venables A.J., *The spatial economy : Cities, regions and international trade*, MIT Press, 381p., 2001.
- [KRU 1996] Krugman P., “Confronting the Mystery of Urban Hierarchy”, *Journal of the Japanese and international Economies*, 10, pp. 399-418, 1996.
- [LAF 2015] Lafuerza, L. F., Dyson, L., Edmonds, B., & McKane, A. J., “Simplification and analysis of a model of social interaction in voting”, *European Physical Journal B*, 89:159, 2015.
- [LAF 2016] Lafuerza, L. F., Dyson, L., Edmonds, B., & McKane, A. J., “Staged Models for Interdisciplinary Research”, *PLoS ONE*, 11(6), 2016.
- [LAK 2014] Lake M. W., « Trends in Archaeological Simulation », *Journal of Archaeological Method and Theory*, 21(2), pp. 258–287, 2014.

## Analyse spatiale de phénomènes sociaux

- [LEN 2011] Lenclud G., « L'explication historique dans les sciences de l'homme », in Martin Th., *Les sciences humaines sont-elles des sciences?* Vuibert, collection "Philosophie des sciences", pp. 93-118, 2011.
- [LIV 2014] Livet P., Phan D., Sanders L., « Diversité et complémentarité des modèles multi-agents en sciences sociales », *RFS (Revue Française de Sociologie)*, 55,4, pp. 689-729, 2014.
- [MAN 2005] Manzo G., « Variables, mécanismes et simulations : une synthèse des trois méthodes est-elle possible ? Une analyse critique de la littérature », *Revue Française de Sociologie*, 46, 1, pp. 37-74, 2005.
- [MAR 2013] Marchionni, C., & Ylikoski, P., "Generative explanation and individualism in agent-based simulation", *Philosophy of the Social Sciences*, 43(3), pp. 323-340, 2013.
- [MAR 2011] Martin Th., *Les sciences humaines sont-elles des sciences?*, Vuibert, collection "Philosophie des sciences", 2011.
- [MIN 1965] Minsky M.L., « Matter, Mind and Models », *Proceedings of IFIP Congress*, pp. 45-49, 1965.
- [NAD 2007] Nadeau R., « L'explication rationnelle en histoire: Dray, Collingwood et Hempel », in Christian Nadeau et Alexis Lapointe (éd.), *La philosophie de l'histoire au XXe siècle. Hommages offerts à Maurice Lagueux*, Québec, Presses de l'Université Laval, pp. 165-221, 2007.
- [PUM 2006] Pumain D., "Alternative explanations of hierarchical differentiation in urban systems", in Pumain D. (ed.) *Hierarchy in natural and social sciences*, Springer, Methodos series 3, pp. 169-222, 2006.
- [PUM 2010] Pumain D., Saint-Julien Th., *Analyse spatiale: les localisations*, Armand Colin, Paris, 2010.
- [PUM 2013] Pumain D., Sanders L., "Theoretical principles in interurban simulation models: a comparison", *Environment and Planning A*, volume 45, pp. 2243-2260, 2013.
- [PUM 2009] Pumain, D., Sanders, L., Bretagnolle, A., Glisse, B., Mathian, H., "The future of urban systems: exploratory models", In *Complexity perspectives in innovation and social change*, Springer Netherlands, pp. 331-360, 2009.
- [RUS 2011] Russo, F., "Explaining causal modelling. Or, what a causal model ought to explain", *New Essays in Logic and Philosophy of Science*, College Publications, London, 2011.
- [SAN 2012] Sanders L., « Regards croisés de géographes, économistes et archéologues sur la hiérarchie des systèmes de peuplement : de l'empire aux systèmes complexes », *Région et Développement*, n°36, in Schaffar A. (ed.), n° spécial « Hiérarchies et croissances urbaines - Nouveaux regards sur les lois de Zipf et de Gibrat pour les villes », pp. 127-146, 2012.

Lena Sanders

- [SAN 2008] Sanders L., Mathian H., "Expérimenter sur le futur des villes européennes avec un modèle multi-agents", *13e Journées de Rochebrune «Expérimentation et systèmes complexes»*, Vol. 400, 2008.
- [SCH 2012] Schaffar A. (ed.), n° spécial « Hiérarchies et croissances urbaines - Nouveaux regards sur les lois de Zipf et de Gibrat pour les villes », *Région et Développement*, n°36, 2012.
- [SCH 2012] Schelling, T.S., « Dynamic Models of Segregation », *Journal of Mathematical Sociology*, 1, pp. 143-186, 1971.
- [SCH 2015] Schmitt C., Rey-Coyrehourcq S., Reuillon R., Pumain D., « Half a billion simulations, Evolutionary algorithms and distributed computing for calibrating the SimpopLocal geographical model », *Environment and Planning B*, 42(2), pp. 300-315, 2015.
- [SHE 1982] Sheppard E., "City size distribution and spatial economic change", *International Regional Science Review*, October, 7, 2, pp.127-151, 1982.
- [SMI 2000] Smith B., Varzi A., "Fiat and bona fide boundaries" *Philosophical and Phenomenological Research*, pp. 401-420, 2000.
- [SMI 2005] Smith M., "City size in late postclassic Mesoamerica", *Journal of Urban History*, 31, 4, pp. 403-434, 2005.
- [ZIP 1949] Zipf G.K., *Human behavior and the principles of least effort*, Cambridge, Mass, Addison-Wesley Press, Cambridge, 1949.

---

# Modélisation pour la Biologie de Synthèse

**François Kepes**

*Académie des Technologies &  
institut de Biologie des Systèmes et de Synthèse (iSSB),  
Genopole, CNRS, Université d'Évry,  
France  
francois.kepes@univ-evry.fr*

---

*ABSTRACT:*

*La biologie synthétique est la discipline interface d'ingénierie des artefacts biologiques complexes. Dans sa quête d'artefacts systémiques qui peuvent être facilement conçus, compris et entretenus, il vise à concevoir et utiliser des modèles simplifiés de phénomènes biologiques.*

*Synthetic Biology is the cross-disciplinary engineering of complex biological artefacts. In its pursuit of systemic artefacts that can be easily conceived, understood and maintained, it strives at devising and using simplified models of biological phenomena.*

*KEYWORDS: Modeling, simulation, Synthetic Biology, Systems Biology, Reduction*

---

François Képès

## **1. Qu'entend-on par Biologie de Synthèse ?**

A ce jour la biotechnologie est loin de mettre en pratique les principes qui fondent toute ingénierie mature. C'est encore un difficile artisanat de solutions *ad hoc* obtenues par de pénibles essais et erreurs. La biologie de synthèse vise à introduire ces principes d'ingénierie en biotechnologie. Elle va ainsi favoriser l'éclosion d'une véritable bioéconomie basée sur la connaissance, aujourd'hui balbutiante.

### **1.1. Où nous mèneront les formes avancées de la biotechnologie ?**

Rêvons un peu du jour où les innovations en sciences du vivant seront créées dans des laboratoires virtuels en trois dimensions. En sus de la vision, serait fait appel aux sens du toucher et de l'audition pour façonner efficacement des biomolécules ou des circuits biochimiques. Directement, ou par le truchement d'un outil de télécommunication, un dialogue productif s'établirait via la participation des clients et la collaboration des experts requis. En somme, on aurait reconstitué la manière dont les artisans travaillaient il y a un siècle. À ceci près que les objets qu'il s'agit maintenant de façonner sont nanoscopiques, à rebours des roues de charrettes de nos aïeuls. D'où la nécessité d'une intermédiation technique très sophistiquée.

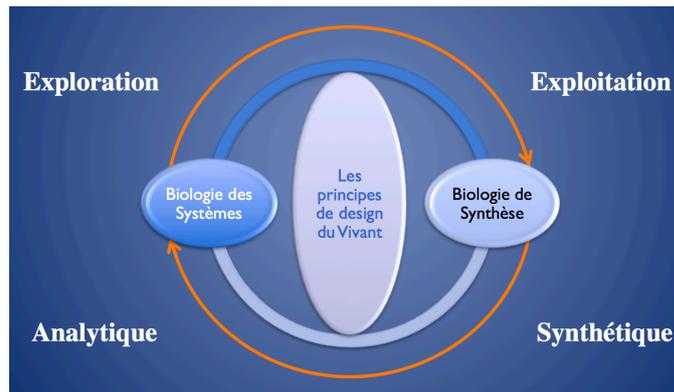
Développer cette intermédiation revient non seulement à bénéficier de l'usage direct de nos capacités cognitives et sensorielles qui sont considérables, mais aussi à outiller notre intelligence collective. Cela participe également à démystifier des biotechnologies qui nous sont sensibles parce qu'elles touchent au biotope dont nous sommes partie prenante.

### **1.2. Quels sont ses moteurs actuels ?**

Toute révolution (ou forte évolution) industrielle implique de permettre à de nombreux ingénieurs de s'emparer de capacités qui étaient jusque là réservées à une poignée d'experts. Cela demande d'outiller ces ingénieurs. Le tour de la biotechnologie est arrivé, cela s'appelle actuellement « biologie de synthèse ».

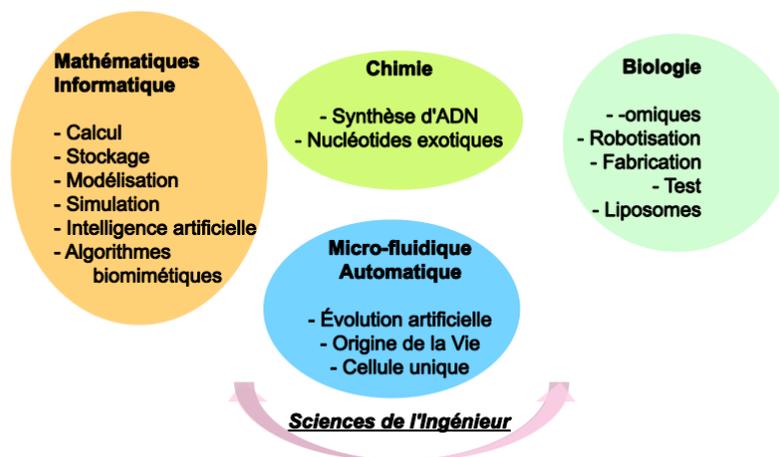
Depuis les années 1990, les triomphes de la biologie analytique, regroupés sous le terme de « -omiques », comprenant génomique, transcriptomique, protéomique etc., ont entraîné de nouveaux besoins d'interprétation afin de nourrir le processus de découverte en biologie. Ces besoins ont été couverts en particulier par l'usage de modèles mathématiques et de simulations numériques, dans ce qu'il est convenu de nommer "biologie des systèmes", dès la fin des années 1990. Cette approche s'est révélée féconde pour découvrir les principes de design du vivant, dont un exemple pourrait être le réseau d'interactions biochimiques qui permet de constituer une horloge comme celle de notre rythme circadien, ou un interrupteur différentiel.

L'étape suivante était écrite d'avance. À partir du moment où nous avons compris certains principes de design, nous sommes tentés d'appliquer ces principes dans une approche, non plus d'exploration et d'analyse, mais d'exploitation et de synthèse. Les principes du vivant sont explorés par la biologie des systèmes, et exploités par la biologie de synthèse (Figure 1).



**Figure 1.** Les principes de design du vivant sont explorés par la biologie des systèmes et exploités par la biologie de synthèse.

Cela justifie que la biologie de synthèse soit intrinsèquement pluridisciplinaire. Selon les projets envisagés, différentes configurations transdisciplinaires sont envisageables, toujours baignées par les sciences de l'ingénieur (Figure 2).



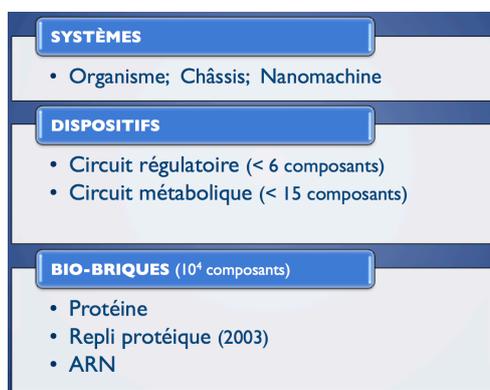
**Figure 2.** Composantes disciplinaires contribuant à l'émergence de la biologie de synthèse, baignée par les sciences de l'ingénieur.

### 1.3. *Quels artefacts sont produits ?*

Les produits de la biologie de synthèse sont globalement de deux types.

D'une part des *artefacts acellulaires* tels que pavages bi- ou tri-dimensionnels, en particulier d'acides nucléiques s'auto-assemblant pour former des nano-cages. Une application possible se trouverait en galénique, pour contenir un médicament et le libérer en un lieu et moment choisis par l'application d'une petite molécule qui sert de clé pour ouvrir la cage. La même motivation pourrait s'appliquer à un autre type d'artefact acellulaire, la protocellule. Tel un liposome sophistiqué, la protocellule se compose d'une enveloppe mêlant lipides et protéines, ces dernières conférant à l'ensemble la spécificité d'adressage, par exemple vers des cellules tumorales; et d'un compartiment interne aqueux, pouvant par exemple contenir des toxines dont la libération après adressage spécifique permettrait de tuer ces cellules tumorales. Bien entendu, la protocellule permet aussi de poser des questions fondamentales, par exemple concernant des scénarii plausibles pour l'origine de la vie.

D'autre part des *artefacts cellulaires*, c'est-à-dire des cellules dont le matériel héréditaire a été modifié pour exprimer des circuits biochimiques synthétiques, en d'autres termes des organismes génétiquement modifiés (OGM). Typiquement, dans une approche constructiviste, le travail consistera à assembler des composants de base nommés "biobriques", codés par des segments d'ADN, en des circuits biochimiques ou "dispositifs" (horloge, interrupteur etc.), qui peuvent être de nature régulatoire ou métabolique. Selon une progression hiérarchique, ces dispositifs peuvent eux-mêmes être assemblés en "systèmes", des cellules d'OGM (Figure 3).



**Figure 3.** Principe de hiérarchie dans la construction d'artefacts de type cellulaire (OGM). À la base se trouvent les bio-briques, composants typiquement codés par un segment d'ADN. Un dispositif est un circuit biochimique positionnant en interaction plusieurs bio-briques. Un système est une cellule (mais ce pourrait être une nano-particule) plaçant en interaction plusieurs dispositifs.

#### 1.4. Une ingénierie de la biologie ?

Tout l'esprit de la biologie de synthèse consiste à introduire les principes qui fondent toute ingénierie mature dans les domaines de la biologie et de la biotechnologie. Ces principes sont les suivants.

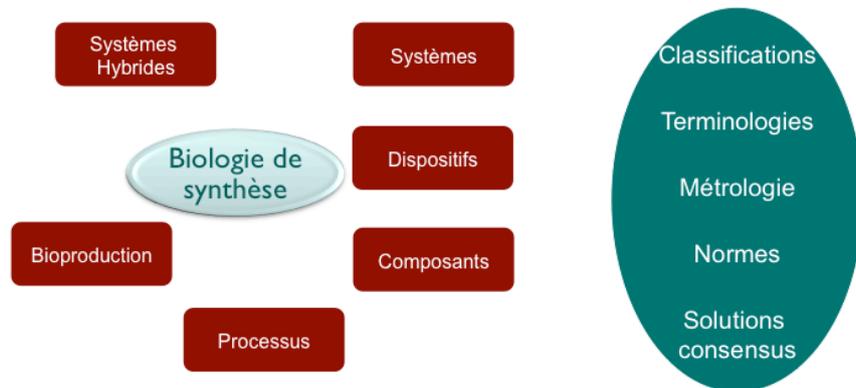
Normalisation : il s'agit de standardiser les biobriques, les dispositifs, et les méthodes de leur assemblage en entités du niveau supérieur (Figure 4).

Hierarchie : comme illustré plus haut, les assemblages peuvent s'envisager sur plusieurs niveaux hiérarchiques successifs, de composant à dispositif à système.

Ré-utilisation : une des conséquences de la normalisation est de permettre la ré-utilisation des mêmes composants dans des compositions variées, de même qu'un certain transistor peut être utilisé dans des montages électroniques divers, comme un amplificateur ou un détecteur de mouvement.

Découplage entre conception et fabrication : ce découplage apporte de la flexibilité et représente avec la normalisation l'un des critères les plus importants pour la maturité d'une ingénierie. Ceci fait de la biologie de synthèse un domaine profondément multidisciplinaire, et non un sous-domaine de la biologie. En effet la conception fait appel à des méthodes mathématiques et informatiques, et la fabrication aux outils de la biologie moléculaire ou de la chimie.

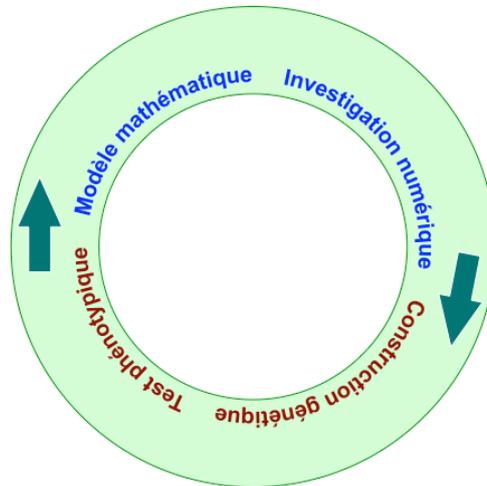
Orthogonalité et modularité : l'idée est que les différents dispositifs ou sous-circuits synthétiques fonctionnent indépendamment l'un de l'autre (modularité), et sans interférence avec les circuits naturels (orthogonalité).



**Figure 4.** Vers une normalisation de la biotechnologie par la biologie de synthèse. Par exemple les caractéristiques quantitatives d'un composant devront faire l'objet de mesures (métrologie) destinées à élaborer son cahier de spécifications suivant une norme donnée. Cette approche est classique en électronique ou mécanique, elle ne l'est pas en biologie.

François Képès

Prenons l'exemple hypothétique d'une petite compagnie innovante qui en 2026 cherche à développer une pompe à insuline biocompatible qui puisse être implantée chez les diabétiques, améliorant ainsi leur confort de vie. L'un des ingénieurs de cette compagnie est chargé de concevoir et fabriquer l'horloge rythmant toutes les heures la mesure du niveau de sucre sanguin, suivie de l'injection d'une dose appropriée d'insuline. Puisque l'ensemble du dispositif devra être biocompatible, l'ingénieur se penche sur les modèles connus d'horloges ne faisant intervenir que des molécules biologiques. Il adopte l'un des modèles les plus simples, qui concerne l'horloge "circadienne" qui rythme nos 24 heures. Partant d'un modèle mathématique (quelques équations) bien établi de l'horloge circadienne, il en réalise des simulations numériques avec l'aide de son ordinateur. Ce modèle inclut bien sûr quelques paramètres, qu'il va faire varier pour ramener la période de son horloge virtuelle de 24 à 1 heure. Supposons que cela l'amène à diminuer un paramètre, par exemple la stabilité d'une protéine P impliquée dans l'horloge. Une fois satisfait de son horloge virtuelle, l'ingénieur va maintenant l'implémenter, la fabriquer avec de vrais biomolécules. Pour déstabiliser la protéine P, il y greffe un signal de dégradation. Plus exactement il synthétise ou fait synthétiser la région d'ADN qui code la version de P dotée du signal de dégradation. Une fois construit le circuit biochimique complet, l'ingénieur le teste. Pour cela, il aura auparavant rendu fluorescente — toujours au niveau de l'ADN la codant — une protéine-clé de son circuit, par exemple P. Il observe que P n'est pas dégradée à la vitesse souhaitée, et que l'horloge a une période un peu trop longue. Il utilise le résultat de ses observations pour re-calibrer les paramètres de son modèle mathématique initial, plus près du but final, donc plus précisément. Ainsi il repart une seconde fois dans ce cycle à quatre étapes : modèle mathématique, simulation numérique, fabrication et test à la paillasse. Si nécessaire, il réitérera ce cycle plusieurs fois, jusqu'à être satisfait du résultat. En somme, l'ingénieur met en œuvre une spirale améliorative répétant ce cycle à quatre étapes jusqu'à satisfaction du cahier des charges initial (Figure 5).



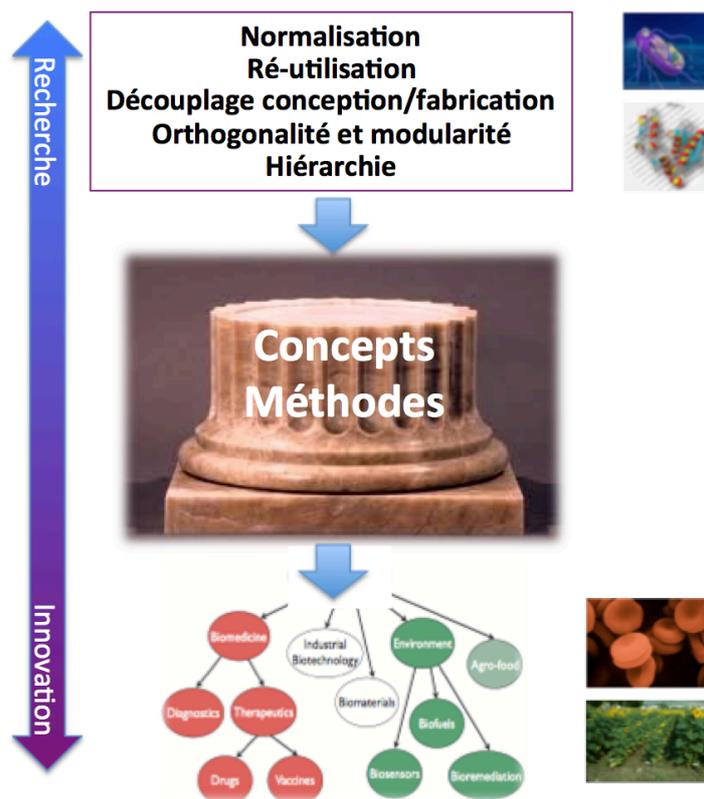
**Figure 5.** La spirale améliorative en biologie de synthèse répète le cycle montré ici jusqu'à satisfaction du cahier des charges initial. La conception (bleu) comprend la mise en place d'un modèle mathématique ; sa simulation numérique permet de modifier les paramètres jusqu'à obtenir le résultat souhaité. La fabrication (brun) comprend la construction du circuit synthétique respectant les paramètres ainsi obtenus. La construction fait appel au génie génétique de l'ADN codant les biomolécules nécessaires ; puis les molécules et circuits ainsi construits sont caractérisés par des tests adéquats.

### 1.5. Au fait, pourquoi en parler ?

L'ambition de la biologie de synthèse est de concevoir rationnellement et de construire de manière standardisée de nouveaux systèmes inspirés par la biologie, ou fondés sur ses composants. Construire un système biologique qui fonctionne comme prévu est une manière de s'assurer que l'on a compris les phénomènes sous-jacents, et en ce sens la biologie de synthèse permet de faire progresser les connaissances sur le monde vivant. Cependant les applications industrielles ne sont jamais loin, étant donnée la perspective ingénierale qui imprègne le domaine. Le potentiel économique de ces applications est considérable, puisqu'elles touchent aussi bien à la santé, l'environnement, l'énergie et les matériaux. Un aussi large spectre d'applications nous indique que la biologie de synthèse ne consiste pas en une collection limitée de solutions industrielles, mais plutôt en un ample socle méthodologique et conceptuel (Figure 6). Ce socle générique peut trouver applications dans n'importe quel segment des biotechnologies (Figure 7), ce qui explique le potentiel économique porté par ce domaine en expansion rapide. Aux États-Unis en 2015, le Woodrow Wilson International Center for Scholars a dénombré 116 produits ou procédés issus de la biologie de synthèse qui sont sur le

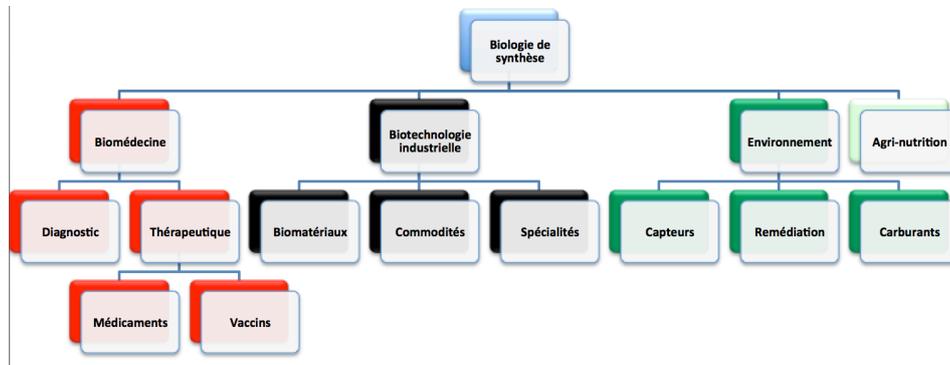
François Képès

marché ou proches de l'être. Autre symptôme de ce potentiel, le Forum de Davos a classé en 2012 la biologie de synthèse numéro 2 des 10 technologies-clés émergentes.



**Figure 6.** La recherche académique, éventuellement inspirée par des défis du monde réel, abonde le socle de concepts et méthodes qui constitue l'essence de la biologie de synthèse. En particulier, elle apporte les connaissances et outils génériques permettant d'approcher les conditions d'une véritable ingénierie. Ce socle est exploité par les biotechnologies de toutes couleurs. Du secteur industriel remontent alors de nouveaux défis, dont certains motiveront des études académiques.

## Modélisation pour la biologie de synthèse

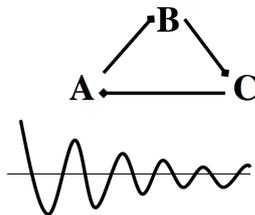


**Figure 7.** Versatilité et diversité de la biologie de synthèse en termes d'applications biotechnologiques.

## 2. Complexifier ou simplifier ?

### 2.1. Le cas du Répressilateur

Le Répressilateur a été décrit en 2000 par Elowitz et Leibler [ELO2000]. Il s'agit de l'une des 3 publications fondatrices de la biologie de synthèse, à une époque où le terme n'était pas encore en usage, puisque le terme *Synthetic Biology* a été proposé en 2004 par des chercheurs du MIT. Ce Répressilateur est un petit circuit synthétique de 3 inverseurs positionnés en permutation circulaire (Figure 8, haut). Tout électronicien placé devant un tel circuit pourra prédire son comportement. Selon les valeurs attribuées aux paramètres, soit le niveau des 3 éléments A, B et C est stabilisé à une valeur moyenne, soit il oscille autour de cette valeur moyenne. Cette oscillation peut être, soit entretenue, soit amortie (Figure 8, bas) pour aboutir asymptotiquement à la stabilisation.



**Figure 8.** Le circuit du Répressilateur (en haut) est constitué de 3 inverseurs en permutation circulaire. Cette configuration engendre un comportement (en bas) oscillatoire, amorti ou entretenu, ou une stabilisation homéostatique.

François Képès

Une description de nature biomoléculaire siérait mieux au Répressilateur qui est un circuit biochimique de type régulateur. Chacun des 3 composants réprime la synthèse du suivant, et ce selon une permutation circulaire. Plus précisément, chaque composant est un gène codant une protéine, dite facteur de transcription, capable de réprimer la transcription du gène suivant en se fixant sur sa zone régulatrice, dite promoteur. Finalement, le troisième facteur de transcription réprime le premier gène, et la boucle est ainsi bouclée. L'effet de répression, par opposition à l'activation, justifie qu'il s'agisse formellement d'un inverseur ; en effet, plus le facteur de transcription est concentré, mieux il inhibe la transcription du gène suivant et donc la production de la protéine que code ce gène. En fait, ce circuit appartient à la catégorie des circuits de rétroaction négative selon la nomenclature de René Thomas, ce qui suffit à anticiper ses propriétés globales. L'ensemble de ces constructions génétiques ont été introduites dans une cellule bactérienne vivante, sous forme d'ADN synthétisé chimiquement sur mesure. Afin de mesurer l'état du système, les auteurs de l'article ont introduit une autre construction génétique dans la bactérie. Cette seconde construction portait un gène codant une protéine fluorescente, ce qui rend sa concentration aisément lisible. Ce gène était placé sous le contrôle du promoteur sensible à l'un des 3 facteurs de transcription décrits plus haut. Ainsi, cette construction permettait de lire aisément, non pas l'état du système, mais l'état de l'un des 3 éléments du système. En principe, cela suffit à inférer l'état des autres éléments, puisqu'il est anticipé que A, B et C vont s'allumer alternativement si le circuit oscille bien.

Cependant, il restait à démontrer que ce circuit fonctionnerait comme prédit dans une cellule vivante, et surtout à établir les paramètres adéquats pour obtenir une oscillation entretenue. Là réside le mérite de l'article de Elowitz et Leibler.

Concernant les prédictions, les auteurs ont proposé deux approches distinctes visant à modéliser la dynamique de leur petit circuit : une modélisation déterministe, supposant qu'un grand nombre de molécules en interaction conféraient au système un comportement stable et peu bruité ; et une modélisation de nature stochastique, supposant qu'un petit nombre de molécules entraînaient *de facto* des fluctuations dans le comportement du système, avec le risque d'une perte ou d'un amortissement des oscillations. Ces deux modèles mathématiques ont ensuite fait l'objet d'investigations numériques à l'aide de calculateurs. Il a ainsi été possible de faire varier la valeur des différents paramètres, et à la faveur de ces investigations informatiques, d'observer les conséquences desdites valeurs sur le comportement du circuit. Ces paramètres sont regroupés dans la table 1 ci-dessous. En-dessous sont indiquées qualitativement les valeurs que devraient prendre ces paramètres pour favoriser le comportement oscillatoire. En bas se trouvent rappelés les comportements possibles du circuit.

PARAMÈTRES DU MODÈLE
Concentrations en facteurs de transcription Taux de synthèse protéique Taux de dégradation protéique Taux de dégradation des ARNm
VALEURS DES PARAMÈTRES FAVORISANT LES OSCILLATIONS
<u>Forts promoteurs de synthèse d'ARNm</u> <u>Forts promoteurs de synthèse protéique</u> <u>Faible fuite de synthèse d'ARNm</u> Taux similaires de dégradations pour protéine et ARNm
COMPORTEMENTS POSSIBLES
Stabilité Oscillation en cycle limite

**Table 1.** Paramètres et leurs valeurs, et comportements possibles du circuit biochimique régulateur de type « Répressilateur ». L'expression des gènes passe par leur transcription en ARN messagers (ARNm) sous l'influence de facteurs de transcription qui se fixent sur l'ADN dans des régions dites « promoteurs ». Un promoteur dit « fort » active fortement la synthèse d'ARNm. Un promoteur montre une faible fuite si, non activé, il donne lieu à très peu de synthèse d'ARNm. Ensuite ces ARNm sont traduits en protéines. Aussi bien les protéines que les ARNm sont sujets à dégradation plus ou moins rapide.

Les valeurs paramétriques soulignées dans la table 1 sont celles qui vont être discutées ci-dessous à titre d'exemples. En effet, après le modèle mathématique et son investigation numérique, vient maintenant la phase de construction à la paillasse de ce circuit. Son schéma théorique a été implémenté dans 2 épisomes (petits ADN circulaires synthétisés à façon) : le premier porte le circuit oscillatoire du Répressilateur, le second le rapporteur fluorescent du fonctionnement de ce circuit.

Pour favoriser les oscillations, nous avons vu dans la table 1 qu'entre autres paramètres, il faudrait des promoteurs de synthèse d'ARNm qui soient à la fois forts en état d'activation, et à faible fuite en état de répression. Ceci a demandé à la paillasse une altération des composants naturels. Le choix s'est porté sur des promoteurs hybrides forts mais pouvant être réprimés de manière étanche (pour l'expert, il s'agit du Lambda PL combiné à TetR ou LacI).

François Képès

Ce travail s'est achevé par la caractérisation de la construction génétique implémentant ce circuit. Il est apparu que 40% des cellules montraient un clignotement fluorescent, cependant que 60% ne montraient pas cette oscillation entretenue. D'autre part, si l'on suivait une cellule en division et ses deux filles, on constatait que l'état de l'oscillateur (son « heure ») était transmis à la descendance, mais que les horloges des 2 cellules-sœurs se décalait vite l'une par rapport à l'autre. Autrement dit, cette horloge connaissait de fortes fluctuations, probablement liées au faible nombre de molécules impliquées dans son mécanisme. Cela implique aussi que le modèle stochastique initial était *a priori* plus adapté à la situation réelle que sa contrepartie déterministe.

Si l'objectif avait été ensuite de construire une horloge de période plus stable ou moins fluctuante, il aurait fallu réviser le modèle puis la construction du circuit. Des pistes possibles consisteraient en la production d'un plus grand nombre de copies des molécules impliquées dans le circuit, afin de combattre la stochasticité observée, ou bien en l'addition de boucles de rétroaction supplémentaires afin d'amortir les fluctuations (Figure 9). On voit bien qu'en lançant de telles pistes, les chercheurs poursuivraient la spirale améliorative discutée plus haut (Figure 5). En fait c'est ce qui s'est passé depuis l'an 2000 à l'échelle de la communauté scientifique concernée.



**Figure 9.** *Modéliser pour construire, et construire pour modéliser.*

## **2.2. Complexifier ou simplifier**

L'exemple qui illustre ici notre propos est le Répressilateur. Il est visible que son modèle des 3 inverseurs est simple (Figure 8). Il est très représentatif des circuits biochimiques qu'essaie de fabriquer la biologie de synthèse, même si cette dernière en a construit contenant jusqu'à une douzaine de composants, que ce soient des circuits régulatoires comme ci-dessus, ou métaboliques. La raison de cette simplicité, sous laquelle on subodore une simplification, est ... simple. Le choix ingénieral de la biologie de synthèse s'accorde bien à un système de construction

rationnel se faisant du bas vers le haut, du composant au dispositif ou au système. Les circuits biochimiques sont donc construits du bas vers le haut et restent simples, à défaut de quoi la rationalité de l'approche serait mise en danger, ainsi que notre capacité à concevoir, comprendre et maintenir nos artefacts synthétiques.

Cette approche simplificatrice est à l'œuvre aussi dans la vaste majorité des travaux analytiques faisant appel à la modélisation et simulation, qui caractérisent la biologie des systèmes. Un modèle *in silico* doit en tel cas être perçu comme relevant d'une logique similaire à celle de l'essai acellulaire, ou modèle *in vitro*. Leur objectif commun est de déterminer par l'expérience quel jeu de composants — et d'interactions les liant — est nécessaire et suffisant pour reproduire tel phénomène du monde vivant. Ainsi accordent-ils une valeur explicative à leur modèle. Un modèle peut aussi servir à prédire ; ou à contrôler ; ou encore à concevoir avant de fabriquer (biologie de synthèse). La vérification, pour ces modèles *in vitro* ou *in silico*, recourt donc à l'expérimentation *in vivo*. Un exemple facile d'un tel modèle en serait la synthèse des protéines. Les essais *in silico* ou *in vitro* viseraient à mettre en place les composants nécessaires et suffisants (ribosomes, facteurs associés, ARNm, précurseurs, fournisseurs d'énergie etc.) pour reproduire la synthèse d'une protéine, fut-elle moins efficace qu'*in vivo*.

Cependant, il existe bel et bien en biologie une autre classe, largement minoritaire, de modèles mathématiques associés à des simulations numériques, qui vise à l'exhaustivité. Il s'agit par exemple de simuler le fonctionnement d'une cellule complète, comme dans le modèle « pleine cellule » de Markus Covert. Son objectif est une « modélisation de navigation », par opposition à la modélisation d'explication décrite plus haut. Il se veut un modèle à l'échelle 1 pour 1 du fonctionnement d'une petite bactérie au génome court, le mycoplasme. S'il était un modèle entièrement valide, ce qui n'est pas le cas (60% selon l'auteur), il pourrait servir à poser des questions au vivant sans manipuler la bactérie réelle, d'où un gain de temps et d'argent. Cette approche n'est pas sans rappeler celle de l'Empereur de Chine qui selon la légende avait demandé que son personnel établisse une carte de son empire à l'échelle 1 pour 1.

### 3. Bibliographie

- [BEC 2000] Becskei A, Serrano L. Engineering stability in gene networks by autoregulation. *Nature* 2000;405:590-3.
- [BIK 2008] Bikard D, Képès F. Succès de la première équipe française lors de la compétition iGEM de biologie synthétique. *Médecine / Sciences* 2008; 24:541:544.
- [CSO 2012] Csörgo B, Fehér T, Tímár E, Blattner FR, Pósfai G. Low-mutation-rate, reduced-genome *Escherichia coli*: an improved host for faithful maintenance of engineered genetic constructs. *Microb Cell Fact.* 2012;11:11.

François Képès

- [DYM 2011] Dymond JS et al. Synthetic chromosome arms function in yeast and generate phenotypic diversity by design. *Nature* 2011;477:471–6.
- [ELO 2000] Elowitz MB, Leibler S. A synthetic oscillatory network of transcriptional regulators. *Nature* 2000;403:335–8.
- [ERE 2016] Eremeeva E, Abramov M, Margamuljana L, Rozenski J, Pezo V, Marlière P, Herdewijn P. Chemical Morphing of DNA Containing Four Noncanonical Bases. *Angew Chem Int Ed Engl.* 2016;55(26):7515-9.
- [ESV 2013] Esvelt KM, Wang HH. Genome-scale engineering for systems and synthetic biology. *Molecular Systems Biol.* 2013; 9:641.
- [GAR 2000] Gardner TS, Cantor CR, Collins JJ. Construction of a genetic toggle switch in *Escherichia coli*. *Nature* 2000;403:339–42.
- [GIB 2010] Gibson DG et al. Creation of a bacterial cell controlled by a chemically synthesized genome. *Science* 2010;329:52-6.
- [HUT 2016] Hutchison CA 3rd et al. Design and synthesis of a minimal bacterial genome. *Science* 2016;351(6280):aad6253.
- [KAN 2017] Kannan K, Gibson DG. Yeast genome, by design. *Science.* 2017;355(6329):1024-1025.
- [KAR 2012] Karr JR, Sanghvi JC, Macklin DN, Gutschow MV, Jacobs JM, Bolival B Jr, Assad-Garcia N, Glass JI, Covert MW. A whole-cell computational model predicts phenotype from genotype. *Cell.* 2012 Jul 20;150(2):389-401.
- [KEP 2011] Képès F. La biologie de synthèse, plus forte que la Nature ? Le Pommier, 2011.
- [KEP 2012] Képès F, Jester BC, Lepage T, Rafiei N, Rosu B, Junier I. (2012). The layout of a bacterial genome. *FEBS Lett.* 2012;586:2043-2048 (special issue on synthetic biology).
- [PAD 2013] Paddon CJ et al. High-level semi-synthetic production of the potent antimalarial artemisinin. *Nature* 2013;496:528-32.
- [THO 1990] Thomas R, D'Ari R. *Biological Feedback* (Boca Raton, CRC Press, 1990).

#### 4. Webographie

Informations générales francophones sur la biologie de synthèse : <http://www.biologie-de-synthese.fr>

Étude 2015 du Woodrow Wilson International Center for Scholars : <http://www.synbioproject.org/cpi/applications/>

Classification 2012 du Forum Économique Mondial de Davos : <https://www.weforum.org/agenda/2012/02/the-2012-top-10-emerging-technologies/>

---

# Big-data, machine learning, data-based models and data-driven simulations, avatars and internet of things

## Boarding on the 4th industrial revolution

Francisco Chinesta<sup>1</sup>, Emmanuelle Abisset-Chavanne<sup>1</sup>, Jose Vicente Aguado<sup>1</sup>, Domenico Borzacchiello<sup>1</sup>, Elena Lopez<sup>1</sup>, Anais Barasinski<sup>2</sup>, David Gonzalez<sup>3</sup>, Elias Cueto<sup>3</sup>, Chady Ghnatios<sup>4</sup>, Jean Louis Duval<sup>5</sup>

<sup>1</sup>High Performance Computing Institute & ESI GROUP Chair  
Ecole Centrale de Nantes, 1 rue de la Noe, 44300 Nantes, France  
@ : Francisco.Chinesta@ec-nantes.fr

<sup>2</sup>GeM Institute & ESI GROUP Chair  
Ecole Centrale de Nantes, 1 rue de la Noe, 44300 Nantes, France  
@ : Anais.Barasinski@ec-nantes.fr

<sup>3</sup>I3A, Universidad de Zaragoza, Maria de Luna s/n, E-50018 Zaragoza, Spain  
@ : ecueto@unizar.es

<sup>4</sup>Notre Dame University-Louaize, P.O. Box : 72, Zouk Mikael, Zouk Mosbeh, Lebanon  
@ : cghnatios@ndu.edu.lb

<sup>5</sup>ESI GROUP, 99 rue des Solets, F-94513 Rungis, France  
@ : Jean-Louis.Duval@esi-group.com

---

*RÉSUMÉ. Ce chapitre retrace l'évolution des modèles en sciences et ingénierie. Au début il y avait les données, mais afin d'améliorer les capacités prédictives et la compacité des outils de simulation, elles furent progressivement remplacées par des modèles, qui une fois calibrés à partir des données expérimentales, furent utilisés pour prédire le comportement de systèmes complexes. Ces prédictions furent initialement réalisées en résolvant analytiquement les modèles mathématiques associés, et quand ces derniers ne permettaient pas une telle résolution exacte, leur résolution fut confiée aux ordinateurs. Cependant, aujourd'hui, les modélisations apparaissent insatisfaisantes dans nombre de cas. Dans de telles circonstances, réaliser les simulations directement à partir des données, sans l'intermédiaire de modèles, apparaît comme un changement de paradigme dans les sciences de l'ingénieur. De plus, l'utilisation de données massives a permis de bâtir des passerelles entre données, information, connaissance et prise de décisions. Ce chapitre résume un certain nombre d'éléments clés qui contribuent à dessiner l'industrie du futur.*

*ABSTRACT. This chapter retraces the history of models in sciences and engineering. In the history of sciences first there were data, that looking for enhancing compactness and reliability*

were progressively substituted by models. These, in turn, were calibrated from data collected from experiments and then used for predicting the behavior of complex systems. These predictions were carried out first by solving analytically these models and then, for too complex models compromising its exact solvability, by using powerful computers. However, nowadays, models fail in many cases to describe accurately the considered physical systems. In these circumstances data-driven modeling allows for performing simulation based solely on data. Moreover the use of the big amount of available data combined with dimensionality reduction strategies allows bridging data, information, knowledge and decision-making, for defining a new paradigm in computational sciences. This chapter summarizes some key ingredients that are shaping the fourth industrial revolution.

*MOTS-CLÉS : Réduction de modèles, Abaque, APPs, Objets Conectés, Temps-Réel, Prise de Décisions, Données Massives, Machine learning, Data-Driven, Avatar.*

*KEYWORDS: Model Order Reduction, Nonlinear Dimensionality Reduction, Vademecum, Simulation APPs, Internet Of Things, Real-time Decision Making, Big-Data, Machine Learning, Data-Driven, Virtual Twin.*

---

## 1. The big picture

In the history of sciences, first there were observations and measurements that resulted in data. For example Babylonian astronomers collected and registered day after day, day and night, the position of stars, planets, comets, ... However, two main difficulties rapidly appeared : (i) the volume of data increased very fast ; and (ii) the analysis of these data in order to make predictions was quite complex and then their reliability was usually compromised. In order to circumvent these difficulties, models expressed using the language of mathematics were introduced trying to compress data and generating data to demand, making possible better and more accurate predictions. In the field of astronomy Ptolemy, Kepler, Copernicus, Galileo, Newton, ... among many others, made decisive contributions at the early age of cosmology. Models were improved being the only judge their predictive capacity. New models appeared, others were improved and others disappeared because they were not in agreement with new observations, because they were not accurate enough or because they were integrated in more general theories. In the field of gravity, Einstein's contribution was a major historical success however today scientists are still looking for a quantum theory of gravity. Thus, citing George Box, all models are wrong but some are useful !

When considering a useful model, its use in science or for engineering purposes required its solution. When those models became too complex (nonlinear coupled systems of partial differential equations) its analytical solution was compromised in most circumstances and more particularly in those of practical interest : those involving complex geometries, models and boundary conditions. Fortunately computers came to our rescue. However, computers are only able to make very efficiently elemental operations, and consequently it was necessary to transform complex mathematical objects (derivatives, integrals, ...) into simpler objects, elementary operations, and at the same time reducing the number of points and times at which the solution of the model is found (there is an infinity of points into a domain of any dimension, 1D, 2D or 3D, and an infinity of time instants into a time interval, and it is definitively too much even for any powerful machine that could exist !), from which the solution could be interpolated everywhere (in space and time). Such a procedure is known as numerical simulation and constituted a real revolution at the end of the second millennium and one of the three pillars of 20th century engineering, being modeling and experiments (for model calibration and validation purposes) the other two pillars.

However prior to solve a given problem the user must introduce the different involved parameters (e.g. material parameters and applied loads) as well as define the domain in which the problem is posed. As soon as the problem is solved (by using more and more powerful computers and fast, robust and accurate algorithms) different quantities of interest can be then calculated. However the just described procedure has a main handicap : it rarely allows proceeding in real-time, even when considering high performance computing, operating on powerful computing platforms. In those circumstances the real-time performance required in some applications (e.g. haptic feedback in surgical simulation or simulation-based control involved in robotics, internet of things or autonomous robots) are compromised. Moreover, optimization and

inverse analyses involved in calibration procedures require many direct calculations to find the optimal or the searched parameters, in optimization and inverse analyses respectively. Finally, uncertainty quantification and propagation also require enhancing the efficiency of usual strategies.

One could think that all these issues could be circumvented with the mere use of more powerful computers. Even if it could be a valuable route, it compromises the accessibility to the appropriate simulation resources (required for ensuring innovation) of small and medium industries. In order to democratize simulation, new solutions are required, at the beginning of the so-called fourth industrial revolution (also known as "factory of future" or "factory 4"). A possible alternative consists of calculating offline (using all the needed computational resources and computing time) a parametric solution containing the solution of all possible scenario, that is then particularized online using light computational facilities, as deployed devices, tablets or even smartphones, for performing efficient simulation, optimization, inverse analysis, uncertainty propagation and simulation-based control, all them under real-time constraints.

## 2. From computational vademecums to simulation APPs

Even if someone could think for a while that for constructing the parametric solutions just announced it is enough to solve the model at hand for any possible choice of the parameters that it involves, it is clear that such a procedure rapidly fails because it involves a combinatorial explosion (e.g. ten parameters each one taking ten possible values will involve ten to the power of ten possibilities, and 10 parameters taking 10 possible values remains too simplistic in applications of practical interest). The construction of these parametric solutions was feasible by using model order reduction methods able to circumvent the curse of dimensionality (the aforementioned combinatorial explosion).

Among them we can cite the Proper Orthogonal Decomposition method (POD), that allows extracting the most significant characteristics of the solution, the so-called modes. These can then be applied for solving models slightly different to the ones that served to define the reduced approximation basis in the training stage, by projecting the searched solution on the reduced basis. Another family of model reduction techniques lies in the use of reduced bases (RB) constructed by combining a greedy sampling algorithm and an a priori error indicator. It needs some amount of offline work (training) but then the reduced basis can be used online for solving different models with a control of the solution accuracy because the availability of error bounds [CHI16]. An alternative approach consists in using separated representations [LAD85, LAD89, LAD96, AMM06, AMM10, CHI16] of different nature :

- Separating space and time for defining non-incremental solvers

$$u(x, t) \approx \sum_{i=1}^N X_i(x)T_i(t), \quad [1]$$

that can be decided in a space-frequency separation within the Fourier space ;

– Separating the different space coordinates for addressing efficiently models defined in degenerated domains (e.g. plates, shells, laminates, extruded profiles, ...). The fully separated representation reads

$$u(x, y, z) \approx \sum_{i=1}^N X_i(x)Y_i(y)Z_i(z), \quad [2]$$

while the in-plane-out-of-plane writes

$$u(x, y, z) \approx \sum_{i=1}^N X_i(x, y)Z_i(z); \quad [3]$$

– Separating physical and conformational coordinates  $c_1, \dots, c_m$ , for addressing highly dimensional models encountered in quantum chemistry or statistical mechanics

$$u(x, t, c_1, \dots, c_m) \approx \sum_{i=1}^N X_i(x)T_i(t)C_i^1(c_1) \cdots C_i^m(c_m); \quad [4]$$

– Separating usual coordinates and model parameters (material parameters, geometrical parameters or initial and boundary conditions),  $p_1, \dots, p_m$ ,

$$u(x, t, p_1, \dots, p_m) \approx \sum_{i=1}^N X_i(x)T_i(t)P_i^1(p_1) \cdots P_i^m(p_m), \quad [5]$$

for constructing the so-called computational vademecums. Separated representations, at the heart of the so-called proper generalized decomposition —PGD—, allow circumventing efficiently the curse of dimensionality (combinatorial explosion). These vademecums can be viewed as a sort of modern monograms related to complex multi-parametric partial differential equations. They contain the pre-calculated solution for any possible scenario described by any choice of the different parameters defining it.

For a review on such techniques and their applications in engineering sciences the interested reader can refer to [CHI10, CHI11, CHI13a, CHI13b] and the numerous references therein concerning the space-time / space-frequency decomposition [BOU97, LAD99, AMM07, AMM11, BOU13, RIO13, BAR14], separation [BOG12, VID12, VID13, BOG14, BOR15] and parametric solutions [CHI13b, HEY13, AMM14, NER15] leading to real-time simulations [CHI13b, GON14, GON15], optimization [GHN11, CHI13b, BOR16], simulation-based control [GHN12, GON12, CHI13b, AGU15], uncertainty propagation [NOU08, NOU09a, NOU09b, NOU10], multi-scale upscaling [LAM10, NER10, CRE13].

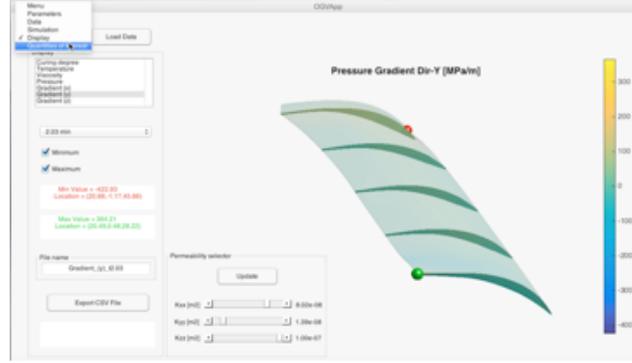
To illustrate the use of parametric solutions we are considering as example automatic tape placement —ATP— process for composite structures manufacturing. In this process a moving laser of power  $q$  and laying velocity  $v$  is melting the incoming tape



**Figure 1.** ATP – Automated Tape Placement - computational vademecum

that is welded on the substrate part. The heat conduction inside the part depends on at least three contact resistances because the different degree of consolidation of the different plies. The identification of these thermal resistances and the evaluation of the process window is a delicate task, traditionally time consuming. An appealing alternative route consists of solving the thermal model by introducing the laser power  $q$ , the laying velocity  $v$  and the three thermal resistances  $h_1$ ,  $h_2$ ,  $h_3$  as extra-coordinates, i.e.  $u(x, y, z, q, v, h_1, h_2, h_3)$ . Then, the computed parametric solution (obtained by solving the associated  $7D$  non-linear partial differential equation involving space,  $3D$ , the 3 thermal resistances, the laser power and the laying velocity) allowed an easy and fast inverse identification of the thermal resistances. Finally, different scenarios can be evaluated and analyzed in real time, allowing the definition of the process window and even the process optimization and control in real time on a tablet. A picture of such a computational device is depicted in Fig. 1 where process conditions can be modified in real time by using the horizontal sliders located on the lower part of the tablet screen [CHI14]. Obviously the way of showing valuable information in an ergonomic way requires psycho-technical analyses.

Sometimes, a parametric solution does not suffice for attaining the model evaluation, in particular in complex coupled models. In those circumstances different model reduction techniques (POD, RB and PGD) can be combined, for efficiently solving coupled multi-physic problems. Fig. 2 illustrates a composite consolidation APP that integrate thermo-kinetics, chemorheology and flow-induced laminate consolidation. The developed APP, combining POD, PGD and empirical interpolation for addressing nonlinear issues, allowed solving each scenario (process) in 0.4 seconds instead of the 5 hours required when using standard simulation tools in equivalent computing platforms [AGU17]. These Apps can be viewed as a sort of avatars (virtual twins) that replace processes allowing a fast and accurate dialogue of plant supervisors.



**Figure 2.** Composite consolidation process APP

### 3. Bridging data, information, knowledge and decision-making

The interest of constructing parametric solutions and of using reduced models was highlighted in the previous section ; however, extracting the uncorrelated parameters in certain cases (e.g. when considering shapes or microstructures, widely encountered in engineered materials and metamaterials —materials exhibiting gradient of properties or embracing many functionalities— at the heart of the incipient new industrial revolution) is not an easy task. In that case, machine and manifold learning techniques, and more specifically nonlinear dimensionality reduction techniques, as for example locally linear embedding (LLE), kernel-PCA (the nonlinear counterpart of principal component analysis —PCA), local-PCA, among many other choices, allows extracting them from the training data. As soon as the uncorrelated parameters are extracted, e.g.  $\xi_1, \dots, \xi_r$ , two main options exist : (i) as soon as a new case must be treated, its solution is simply interpolated on the manifold (constructed from the training data) from its closest neighbors [LOP16] and then decisions can be taken in real time ; and (ii) a parametric solution within the PGD framework can be constructed by using the just extracted uncorrelated parameters

$$u(x, t, \xi_1, \dots, \xi_r) \approx \sum_{i=1}^N X_i(x) T_i(t) \Xi_i^1(\xi_1) \dots \Xi_i^m(\xi_r), \quad [6]$$

and then, as soon as a new case comes, characterized by parameters  $\xi_1^*, \dots, \xi_r^*$ , the parametric solution is particularized in real-time [GON16], from

$$u(x, t, \xi_1^*, \dots, \xi_r^*) \approx \sum_{i=1}^N X_i(x) T_i(t) \Xi_i^1(\xi_1^*) \dots \Xi_i^m(\xi_r^*). \quad [7]$$

Thus, in a natural way, information can be obtained from data after removing all the existing hidden correlations. This information is then translated into knowledge.

Here again cognitive sciences are involved, as well as in the last and most important stage, the one relating knowledge to decision-making. For the human being knowledge is primordial, humans are interested in understanding the intimate and subtle mechanisms in the nature of things. However, in machines, these intellectual needs are less inherent to their nature, and decisions can be made from a new kind of intelligence (artificial), based on data via data-mining and data-analytics, instead of being based on mathematical expressions.

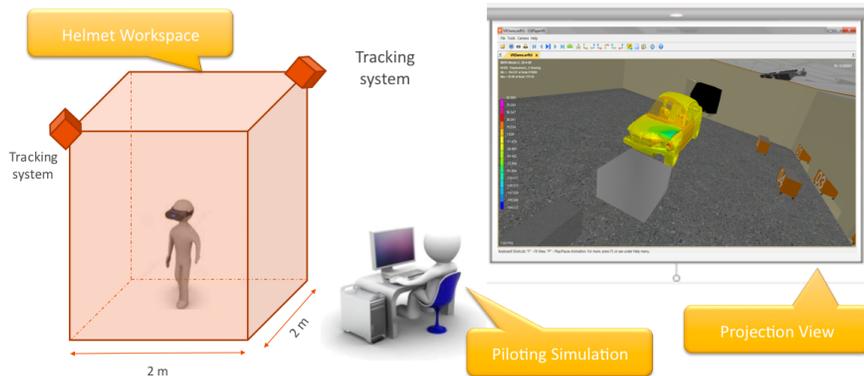
Data-Driven simulation constitutes another appealing opportunity, more than this, in our opinion it constitutes a real change of paradigm in simulation-based engineering sciences – SBES –. Standard simulation in classical mechanics is based on the use of two very different types of equations. The first one, of axiomatic character, is related to balance (conservation) laws (momentum, mass, energy...), whereas the second one consists of models that scientists have extracted from collected, natural or synthetic data with more or less success with respect to their predictive capacities.

Data-driven simulation consists of directly linking data to computers in order to perform numerical simulations. These simulations will employ universal laws while minimizing the need of explicit, often phenomenological, models. They are based on manifold learning methodologies able to extract the uncorrelated behavior of constitutive relations from again a huge amount of collected data [IBA16].

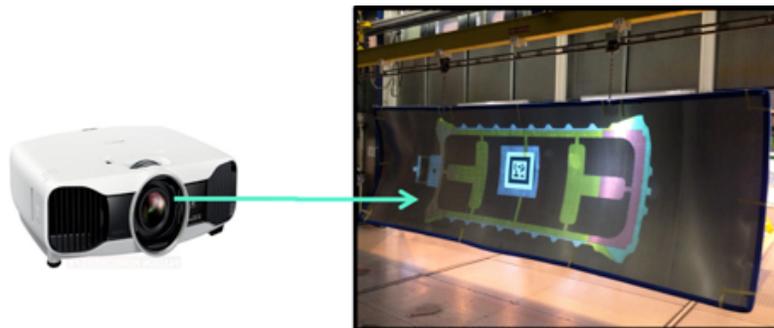
This approach is especially interesting when considering complex engineered materials (metamaterials) for which constitutive relations become with difficulty accessible, because there are many possible designs, most of them confidential.

In the case of heterogeneous materials at the microscopic scale, with well defined constitutive equations for their constituents, data-driven allows defining proper homogenization and up-scaling procedures that result in macroscopic constitutive behaviors defined on a manifold derived from the microscopic knowledge. The same framework is found when addressing models where surface effects are preponderant with respect to the bulk contribution, as usually encountered in engineered materials, thin plies composites, ... subjected to a variety of coupled physics : thermal, electromagnetic, ...

The main drawback of such an approach is the huge amount of required data, some of them inaccessible from the nowadays testing facilities. Such difficulty can be circumvented in many cases, and in all cases alleviated, by considering complex tests, collecting as many data as possible (e.g. by using image correlation) and then using an inverse approach in order to generate the whole behavior manifold from few complex experimental tests, in a subtle alliance of testing machines, devices for collecting data and powerful computers for treating these huge amount of data in a variety of ways (machine and deep learning) and also to complete the behavior manifold by learning and determining missing data.



**Figure 3.** Immersive visualization platform for advanced virtual reality : the user perceive within a 3D framework (thanks to the virtual reality 3D glasses) the parametric solutions precomputed and decode in the computer screen

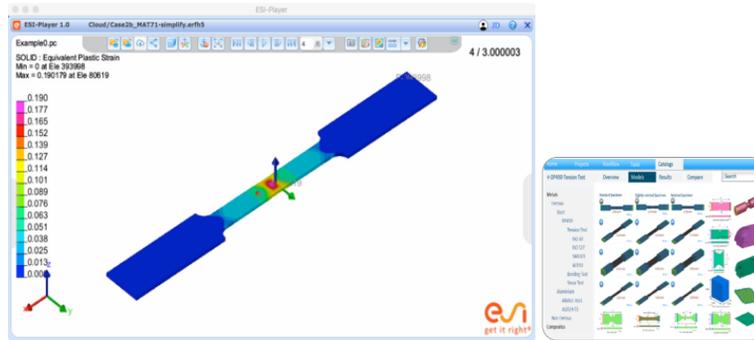


**Figure 4.** Augmented reality for facilitating operations : the different colors indicate the regions in which different operations must be carried out

#### 4. Some views on the industry of future

Parametric solutions allowed addressing existing processes in a more efficient way as described previously, but also addressing efficiently and successfully new processes as additive manufacturing and 3D printing. These parametric solutions and their associated simulation APPs are being developed and introduced within immersive environments (e.g. making use of the Helmet workspace, adequate tracking systems, the parametric solution and the projection view, as illustrated in Fig. 3) for defining new virtual reality environments. Augmented reality can also proceed from such real-time solutions to help operators as illustrated in Fig. 4.

These tools could be also efficiently employed for enhancing model calibration procedures within a “virtual material lab” platform, by constructing parametric vir-



**Figure 5.** *Parametric test (left) on parametric coupons (right) for calibration purposes*

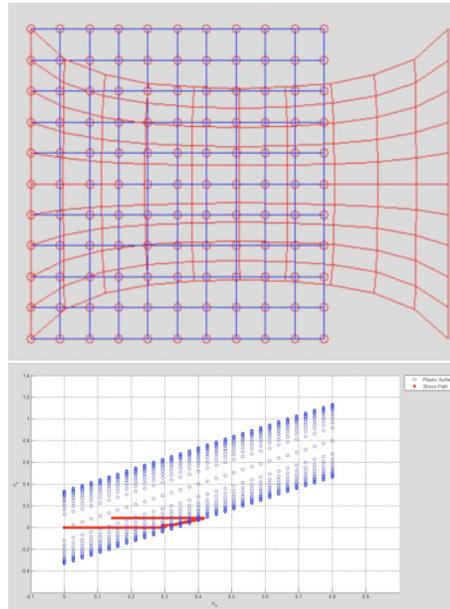
tual tests for different kind of coupons with parametric behavior laws, loading and geometries. Then, the identified behavior could be the input of parametric process or structural performance analyses as sketched in Fig. 5. Obviously to simplify and generalize its use, these tools should proceed at the cloud level.

More ambitious is the combination of tests with data-driven methodologies that could reduce the necessity of pre-assuming constitutive relations and then succeeding in considering the real behavior collected and manipulated as described in the previous section. Some preliminary achievements are depicted in Fig. 6, opening a new era for the mechanics of materials making use of faster procedures for more optimal designs.

Machine, manifold and deep learning are also being used for clustering and classifying behaviors; to identify and anticipating malfunctioning components or damaged structures (non destructive testing) by combining machine learning applied on data-series with signal analysis (e.g. wavelets) and data-assimilation; or to perform data-driven hybrid strategies combining physical models and data-analytics.

Autonomous and connected robots (included bio-inspired) will populate factories and interact with humans. The situation is not so far from the nowadays revolution of autonomous and connected cars. Here decisions must be taken in real time after evaluating many scenarios and selecting the optimal one. Real-time is again the main constraint for defining trajectories and update them within a dynamic environment. Robotics becomes a simple data-driven application system, able to manage uncertainty. Here sensors are needed to capture the environment, and the objective is using the minimum number located at the optimal positions.

The measurements are of different nature : images, sound, radar, ... and patterns must be extracted in real-time (again machine learning can enrich the existing methodologies) and from few locations extended to the entire environment by using adequate data-assimilation strategies, while controlling the multiple errors introduced in order to guarantee a sufficient degree of accuracy to minimize as much as possible risks. In this context, data, signal and image analyses become the protagonist, but because the



**Figure 6.** Model-free mechanical responses via data-driven simulations : (left) hyper-elastic material and (right) elastoplasticity with hardening (loading trajectory —red— and yield surface —blue—)

applications envisaged, all them must run under the real-time constraint. Finally, another specificity of robotics interacting with humans is the necessity of rendering those robots flexible, and of course the control of flexible (deformable) robots is more difficult than the control of their rigid counterpart. Here again, its control could be possible by using offline pre-computed behaviors, used online under the real-time constraint.

## 5. Conclusions

We are not at the beginning of the end, but at the end of the beginning ! There is plenty of room for dreaming and realizing the dreams. Virtual twins will be the main protagonists of the third millennium engineering. Data is expected enriching modeling approaches and even replacing too poor models in order to improve predictions accuracy. The big amount of collected data, including synthetic data generated from simulations, should perform bringing data, information, knowledge and decision making, operating under real-time constraints.

## Acknowledgments

Author acknowledges the *Region Pays de la Loire* for its substantial financial support to the project *Factory 4.0*. Also the participation of many industries and groups, in particular ESI group (F. Boitout, S. Laverdure, C. Tanasescu, ...) and its chair at ECN, that supported most of researches concerned in this chapter ; General Electric, Stelia, AIRBUS group, among many others. Also to other colleagues, post-doc and PhD students contributing to these researches at Ecole Centrale de Nantes (ICI & GeM Institutes – C. Argerich, B. Bognet, D. Canales, C. Dedieu, G. Gregoire, R. Ibanez, A. Leon, S. Montagud, M. Perez, G. Quaranta, C. Sandino, H. Tertrais, A. Scheuer, ... –) and the University of Zaragoza (I. Alfaro, A. Badias, ...).

## 6. Bibliographie

- [AGU15] J.V. Aguado, A. Huerta, F. Chinesta, E. Cueto. Real-time monitoring of thermal processes by reduced order modelling. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 102/5, 991-1017, 2015.
- [AGU17] J.V. Aguado, D. Borzacchiello, C. Ghnatios, F. Lebel, R. Upadhyay, C. Binetruy, F. Chinesta. A Simulation App based on reduced order modeling for manufacturing optimization of composite outlet guide vanes. *Model. and Simul. in Eng. Sci.*, 4 :1, 2017, DOI 10.1186/s40323-017-0087-y
- [AMM06] A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, R. Keunings. A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modeling of complex fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 139, 153-176, 2006.
- [AMM07] A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, R. Keunings. A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modeling of complex fluids. Part II : Transient simulation using space-time separated representation. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 144, 98-121, 2007.
- [AMM10] A. Ammar, F. Chinesta, A. Falco. On the convergence of a greedy rank-one update algorithm for a class of linear systems. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 17/4, 473-486, 2010.
- [AMM11] A. Ammar, F. Chinesta, E. Cueto, M. Doblare. Proper Generalized Decomposition of time-multiscale models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 90/5, 569-596, 2011.
- [AMM14] A. Ammar, A. Huerta, F. Chinesta, E. Cueto, A. Leygue. Parametric solutions involving geometry : A step towards efficient shape optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 268C, 178-193, 2014.
- [BAR14] A. Barbarulo, H. Riou, L. Kovalevsky, P. Ladeveze. PGD-VTCR : a reduced order model technique to solve medium frequency broad band problems on complex acoustical systems. *Journal of Mechanical Engineering*, 60/5, 307-314, 2014.
- [BOG12] B. Bognet, A. Leygue, F. Chinesta, A. Poitou, F. Bordeu. Advanced simulation of models defined in plate geometries : 3D solutions with 2D computational complexity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 201, 1-12, 2012.
- [BOG14] B. Bognet, A. Leygue, F. Chinesta. Separated representations of 3D elastic solutions in shell geometries. *Advanced Modelling and Simulation in Engineering Sciences*, 2014, 1 :4, <http://www.amses-journal.com/content/1/1/4>

- [BOR15] F. Bordeu, Ch. Ghnatios, D. Boulze, B. Carles, D. Sireude, A. Leygue, F. Chinesta. Parametric 3D elastic solutions of beams involved in frame structures. *Advances in Aircraft and Spacecraft Science*, 2/3, 233-248, 2015.
- [BOR16] D. Borzacchiello, J.V. Aguado, F. Chinesta. Reduced Order Modelling for efficient numerical optimisation of a hot-wall Chemical Vapour Deposition reactor. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, 27/4, DOI 10.1108/HFF-04-2016-0153, 2016.
- [BOU97] P.A. Boucard, P. Ladeveze, M. Poss, P. Rougée. A non-incremental approach for large displacement problems. *Computers & Structures*, 64, 499-508, 1997.
- [BOU13] L. Boucinha, A. Gravouil, A. Ammar. Space-time proper generalized decompositions for the resolution of transient elastodynamic models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 255, 67-88, 2013.
- [CHI10] F. Chinesta, A. Ammar, E. Cueto. Recent advances and new challenges in the use of the Proper Generalized Decomposition for solving multidimensional models. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 17/4, 327-350, 2010b.
- [CHI11] F. Chinesta, P. Ladeveze, E. Cueto. A short review in model order reduction based on Proper Generalized Decomposition. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 18, 395-404, 2011.
- [CHI13a] F. Chinesta, R. Keunings, A. Leygue. The Proper Generalized Decomposition for advanced numerical simulations. A primer. *Springerbriefs*, Springer, 2013.
- [CHI13b] F. Chinesta, A. Leygue, F. Bordeu, J.V. Aguado, E. Cueto, D. Gonzalez, I. Alfaro, A. Ammar, A. Huerta. Parametric PGD based computational vademecum for efficient design, optimization and control. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 20/1, 31-59, 2013.
- [CHI14] F. Chinesta, A. Leygue, B. Bognet, Ch. Ghnatios, F. Poulhaon, F. Bordeu, A. Barasinski, A. Poitou, S. Chatel, S. Maison-Le-Poec. First steps towards an advanced simulation of composites manufacturing by automated tape placement. *International Journal of Material Forming*, 7/1, 81-92, 2014.
- [CHI16] F. Chinesta, A. Huerta, G. Rozza, K. Willcox K. Model Order Reduction, In the *Encyclopedia of Computational Mechanics*, 2nd Edition, Wiley, 2016.
- [CRE13] M. Cremonesi, D. Neron, P.A. Guidault, P. Ladeveze. A PGD-based homogenization technique for the resolution of nonlinear multiscale problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 267, 275-292, 2013.
- [GHN11] Ch. Ghnatios, F. Chinesta, E. Cueto, A. Leygue, P. Breitkopf, P. Villon. Methodological approach to efficient modeling and optimization of thermal processes taking place in a die : Application to pultrusion. *Composites Part A*, 42, 1169-1178, 2011.
- [GHN12] Ch. Ghnatios, F. Masson, A. Huerta, E. Cueto, A. Leygue, F. Chinesta. Proper Generalized Decomposition based dynamic data-driven control of thermal processes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 213, 29-41, 2012.
- [GON12] D. Gonzalez, F. Masson, F. Poulhaon, A. Leygue, E. Cueto, F. Chinesta. Proper Generalized Decomposition based dynamic data-driven inverse identification. *Mathematics and Computers in Simulation*, 82/9, 1677-1695, 2012.
- [GON14] D. Gonzalez, E. Cueto, F. Chinesta. Real-time direct integration of reduced solid dynamics equations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 99/9, 633-653, 2014.

- [GON15] D. Gonzalez, I. Alfaro, C. Quesada, E. Cueto, F. Chinesta. Computational vademecums for the real-time simulation of haptic collision between nonlinear solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 283, 210-223, 2015.
- [GON16] D. Gonzalez, J.V. Aguado, E. Abisset-Chavanne, E. Cueto, F. Chinesta. kPCA-based parametric solutions within the PGD framework, *Archives of Computational Methods in Engineering*, DOI 10.1007/s11831-016-9173-4, 2016.
- [HEY13] Ch. Heyberger, P.A. Boucard, D. Neron. A rational strategy for the resolution of parametrized problems in the PGD framework. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 259, 40-49, 2013.
- [IBA16] R. Ibanez, E. Abisset-Chavanne, J.V. Aguado, D. Gonzalez, E. Cueto, F. Chinesta F. A manifold-based methodological approach to data-driven computational elasticity and inelasticity. *Archives of Computational Methods in Engineering*, DOI 10.1007/s11831-016-9197-9, 2016.
- [LAD85] P. Ladeveze. On a family of algorithms for structural mechanics (in french). *Comptes Rendus Académie des Sciences Paris*, 300/2, 41-44, 1985.
- [LAD89] P. Ladeveze, The large time increment method for the analyze of structures with nonlinear constitutive relation described by internal variables, *Comptes Rendus Académie des Sciences Paris*, 309, 1095-1099, 1989.
- [LAD96] P. Ladeveze. *Mécanique non linéaire des structures*. Hermès, Paris, 1996.
- [LAD99] P. Ladeveze. *Nonlinear Computational structural mechanics. New approaches and non-incremental methods of calculation*. Springer Verlag, 1999.
- [LAM10] H. Lamari, A. Ammar, P. Cartraud, G. Legrain, F. Jacquemin, F. Chinesta. Routes for efficient computational homogenization of nonlinear materials using the Proper Generalized Decomposition. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 17/4, 373-391, 2010.
- [LOP16] E. Lopez, D. Gonzalez, E. Abisset-Chavanne, E. Cueto, C. Binetruy, F. Chinesta. A manifold learning approach for integrated computational materials engineering. *Archives of Computational Methods in Engineering*, DOI 10.1007/s11831-016-9172-5, 2016.
- [NER10] D. Néron, P. Ladevèze, Proper generalized decomposition for multiscale and multiphysics problems, *Archives of Computational Methods In Engineering*, 17/4, 351-372, 2010.
- [NER15] D. Neron, P.A. Boucard, N. Relun. Time-space PGD for the rapid solution of 3D nonlinear parametrized problems in the many-query context. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 103/4, 275-292, 2015.
- [NOU08] A. Nouy. Generalized spectral decomposition method for solving stochastic finite element equations : invariant subspace problem and dedicated algorithms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197, 4718-4736, 2008.
- [NOU09a] A. Nouy, O. Le Maitre. Generalized spectral decomposition method for stochastic non linear problems. *Journal of Computational Physics*, 228/1, :202-235, 2009.
- [NOU09b] A. Nouy. Recent developments in spectral stochastic methods for the numerical solution of stochastic partial differential equations. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 16/3, 251-285, 2009.
- [NOU10] A. Nouy. Proper Generalized Decompositions and separated representations for the numerical solution of high dimensional stochastic problems. *Archives of Computational Methods in Engineering - State of the Art Reviews*, 17, 403-434, 2010.

- [RIO13] H. Riou, P. Ladeveze, L. Kovalevsky. The Variational Theory of Complex Rays : An answer to the resolution of mid-frequency 3D engineering problems. *J Sound Vib.*, 332, 1947-1960, 2013.
- [VID12] P. Vidal, L. Gallimard, O. Polit. Composite beam finite element based on the Proper Generalized Decomposition. *Computers & Structures*, 102, 76-86, 2012.
- [VID13] P. Vidal, L. Gallimard, O. Polit. Proper Generalized Decomposition and layer-wise approach for the modeling of composite plate structures. *International Journal of Solids and Structures*, 50/14-15, 2239-2250, 2013.



---

## Exemple du projet Cigéo

### Centre industriel de stockage géologique

**Benjamin Rotenberg**, CNRS, INC, UMR PHENIX

#### **Introduction**

Plus qu'un *vecteur*, c'est-à-dire un outil pour le dialogue entre recherche académique et industrie, la modélisation fait l'*objet* d'un dialogue extrêmement riche entre ces deux mondes. Ce dialogue peut prendre diverses formes qui ne sont d'ailleurs pour la plupart pas spécifiques à la modélisation. A titre d'illustration, nous présentons brièvement ici le cas du stockage des déchets nucléaires, et plus particulièrement le projet Cigéo (centre industriel de stockage géologique) pour la gestion ultime des déchets de haute et moyenne activité à vie longue.

Les enjeux d'un tel dispositif dépassent largement les problèmes techniques associés et mobilisent ainsi de nombreux acteurs, au premier rang desquels l'Andra (Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs), en charge du projet, mais aussi les industriels producteurs de déchets (EDF, AREVA, CEA) ainsi que l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN, qui instruit les dossiers pour le compte de l'Autorité de Sécurité Nucléaire). De nombreux partenaires académiques sont impliqués dans des projets de recherche en lien avec Cigéo. Enfin, la société civile est également au cœur du projet, notamment avec un suivi parlementaire, effectué par la Commission Nationale d'Evaluation des recherches et Etudes relatives à la gestion des matières et des déchets radioactifs (CNE2) pour le compte de l'Office parlementaire d'évaluation des choix scientifiques et technologiques (OPECST).

**Le rôle de la modélisation dans ce contexte est double.**

D'une part, il s'agit bien sûr de dimensionner et prédire l'évolution d'une installation industrielle de grande ampleur. Celle-ci connaîtra différentes phases qui se déploieront sur des échelles de temps longues : centaine d'années pour l'exploitation, puis milliers à centaines de milliers d'années après fermeture. La modélisation est dès lors indispensable tant à grande échelle (géologie, climat) qu'à l'échelle du site industriel (génie civil, avec des couplages thermo-hydro-mécanique / chimie / transferts de gaz qui doivent être modélisés). Ce sont bien des *modèles* qui permettent de concevoir l'installation et de nourrir la démonstration de sûreté, qui conditionne la décision de créer ou non ce centre de stockage. Compte tenu des enjeux et des échelles de temps considérées, on ne peut pas s'arrêter à la phénoménologie (lois de comportement) : il faut que les modèles des ingénieurs s'appuient sur la compréhension des mécanismes sous-jacents.

Pour la modélisation, il s'agit donc d'abord de comprendre comment les mécanismes fondamentaux, aux petites échelles, conduisent aux comportements observés à l'échelle macroscopique. Parmi les matériaux principalement étudiés dans ce contexte on peut citer les matériaux argileux (roche du milieu géologique et barrières ouvragées) et les bétons. Il faut ainsi modéliser les processus qui gouvernent à l'échelle microscopique le transport et la rétention des radionucléides, ainsi que les propriétés mécaniques des matériaux. Dans un second temps, la modélisation doit permettre de passer aux échelles méso- puis macroscopiques : du grain de matière au matériau (rôle des hétérogénéités, prise en compte de couplages multi-physiques), du matériau à l'ouvrage, de l'ouvrage au site géologique. Nous ne discuterons pas ici du dialogue entre modélisation et expériences (en laboratoire ou in situ) qui joue bien sûr un rôle fondamental dans l'alimentation et la validation des modèles.

### **Le riche dialogue entre recherche académique et industrie dans ce contexte a lieu sous de multiples formes**

Les questions scientifiques autour de Cigéo sont réellement interdisciplinaires, à la croisée des géosciences, de la physique, de la chimie, des mathématiques, de l'ingénierie, des sciences de l'environnement... Les interactions des acteurs industriels avec la communauté académique sont donc indispensables et se manifestent sous diverses formes, qui ne sont d'ailleurs pas forcément spécifiques à la modélisation, ni à ce contexte.

Le partenariat bilatéral avec un laboratoire sur un thème fondamental peut se faire à court terme avec des contrats de thèse ou de post-doc et par la participation commune à des projets (ANR, Europe), à moyen terme avec une chaire industrielle

(ex: "Stockage et entreposage des déchets radioactifs" Andra/EDF/Areva à l'Ecole des Mines de Nantes) ou à long terme au sein d'Unités Mixtes de Recherche (ex: Laboratoire Mécanique des Structures Industrielles Durables CNRS/EDF/CEA avec un axe de recherche sur la mécanique numérique; Institut de Chimie Séparative de Marcoule CNRS/CEA/UM/ENSCM avec un laboratoire modélisation mésoscopique et chimie théorique).

Les partenariats multilatéraux sont aussi nombreux. L'Andra a par exemple organisé des actions pluriannuelles de recherche sous la forme de "groupements de laboratoires" associant plusieurs équipes académiques et d'autres acteurs. Le CNRS soutient également les collaborations scientifiques entre laboratoires académiques en lien avec les questions de l'industrie nucléaire à travers des GDR disciplinaires ou thématiques (ex en cours: MaNu, Mathématiques pour le Nucléaire), ou à travers des consortia plus larges associant tous les partenaires. Dans la continuité de plusieurs programmes interdisciplinaires (PACE, PACEN), le programme NEEDS (Nucléaire: énergie, environnement, déchets, société) associe ainsi CNRS, CEA, EDF, AREVA, Andra, IRSN et BRGM autour des grandes questions scientifiques qui se posent dans ce contexte. Des collaborations interdisciplinaires entre laboratoires académiques, venant de tous les instituts du CNRS, sont ainsi nées de partenariats multilatéraux avec des industriels.

Enfin, en sortant un peu du cadre du stockage des déchets, on peut mentionner d'une part des actions plus individuelles, telles que l'embauche dans l'industrie de docteurs formés dans les laboratoires académiques, sujet fondamental qui dépasse largement le thème abordé ici, ou encore le financement de prix pour des travaux de recherche (ex: le prix Paul Caseau fondé par EDF et l'Académie des Technologies a récompensé en 2016 des travaux de modélisation), et d'autre part des actions autour de codes open source, telles que le Code\_Aster (Analyses des Structures et Thermomécanique pour des Etudes et des Recherches) d'EDF ou la plateforme SALOME (CEA/EDF/OpenCascade)

## **Conclusion**

Cigéo offre ainsi un exemple où la modélisation est au cœur d'un grand projet industriel et des questions scientifiques associées. Dans ce contexte, le dialogue entre recherche académique et industrie est essentiel, et se manifeste sous de nombreuses formes, dans la durée, avec des bénéfices pour toutes les parties.



# Tables rondes et quelques conclusions

Rédaction : Comité d'organisation

*Les tables rondes ont suivi les séries d'exposés relatifs aux trois thématiques proposées. Outre les spécificités évoquées dans les trois débats, on trouve aussi des préoccupations communes. Ainsi la question de la puissance de calcul, au centre du premier débat, se pose également dans les deux autres. Par exemple, il est parfois plus judicieux de ne pas augmenter la taille et la complexité d'un modèle, pouvant nécessiter une augmentation de la puissance de calcul pour sa mise en œuvre, et plutôt de se limiter à des modèles « simples » demandant moins de moyens, plus facilement compréhensibles et maîtrisables, mais au prix d'un effort conceptuel et méthodologique.*

*En tout état de cause, les points cruciaux soulevés lors de ces tables rondes sont résumés ci-après.*

## ***Table ronde 1 : Modélisation et simulation, faut-il toujours plus de puissance de calcul ?***

Animateur : *Denis Veynante* (Mission Calcul et Données, CNRS)

Participants : *Frédéric Alexandre* (Laboratoire Bordelais de Recherche en Informatique), *Michaël Beuve* (Institut de Physique Nucléaire de Lyon), *Christophe Denis* (EDF, Centre de mathématiques et de leurs applications, Cachan), *Serge Gratton* (Institut de Recherche en Informatique de Toulouse), *Éric Guilyardi* (Laboratoire d'Océanographie et du Climat : Expérimentation et Approches Numériques, Paris), *Jean-François Lavignon* (Bull, TS-JFL), *Lauriane Mouysset* (Groupe de Recherche en Économie Théorique et Appliquée, Vincennes).

La puissance de calcul et les capacités de stockage ont augmenté prodigieusement depuis les premiers ordinateurs et rien n'indique que cette tendance ne continue pas pendant un « certain temps », tant que les limites physiques ne sont pas atteintes.

Le débat a abordé la question des modèles simples et des modèles complexes pour un même problème. En mécanique des fluides par exemple, des modèles

## 2 Tables rondes et quelques conclusions

simples sont parfois plus utiles que des modèles complexes : la puissance de calcul n'est pas toujours la facette la plus importante, elle n'est pas forcément limitante.

La puissance de calcul nécessaire dépend du problème posé. En aéronautique, par exemple, les modèles pour simuler les écoulements sont très sophistiqués, avec de nombreux éléments fixes et mouvants. De leurs côtés, les modèles de simulation de l'évolution du climat sont complexes. Les programmes correspondant comportent parfois des centaines de milliers de lignes de code. De plus, ils incluent des sous-modèles de processus de différentes catégories, physiques, chimiques et biologiques. Leur conception et leur mise en œuvre demandent une pluridisciplinarité, voire une interdisciplinarité opérationnelle.

Quel que soit le domaine, on retiendra que simplifier un modèle est une tâche difficile, il faut l'expérience de modélisateurs aguerris, déjà rodés à la conception et à l'utilisation de modèles complexes.

Se pose également le problème de l'adéquation entre les architectures de calcul, l'assemblage de processeurs et les problèmes posés : ce sont plutôt les modélisateurs qui s'adaptent aux systèmes de calcul, et pas l'inverse. Beaucoup d'algorithmes n'utilisent que 1% de la puissance réellement disponible sur un ordinateur. Il n'y a pas de vrais marchés dans le secteur industriel à cette fin. En effet, l'augmentation des performances est profitée davantage aux jeux et *smartphones* qu'aux applications techniques. Néanmoins, le problème de l'adéquation des systèmes de calcul est d'autant plus difficile à résoudre que de nouvelles architectures de machines sont apparues, comme des architectures hybrides.

En ce qui concerne la programmation, après Fortran, de nouveaux langages ont été conçus (C, C++, Python, etc)<sup>1</sup>, mais les compilateurs Fortran restent les mieux optimisés. Ainsi, les codes actuels des programmes de simulation de l'évolution du climat sont encore écrits en Fortran. Le passage au C++, par exemple, réduirait considérablement le nombre de lignes de code, mais la mise au point reste quand même très longue, malgré les avantages d'une programmation structurée. Les langages plus conceptuels (type Java) sont en général interprétés ; ils sont plus efficaces pour la programmation, mais l'exécution est beaucoup moins rapide que celle des langages compilés. La portabilité des codes reste aussi fortement dépendante de l'architecture des machines. La question de la détection et de la correction des erreurs demeure, quant à elle, délicate. Il existe néanmoins des procédures, par exemple en électronique embarquée, qui, grâce à des sous-couches,

---

<sup>1</sup> Habituellement, on classe ces langages dans 4 catégories principales : langages procéduraux (par exemple, Fortan, Algol, Pascal, Basic etc.), langages fonctionnels (comme Lisp), Centrés-objet (Smalltalk, C, C+, C++, ...) et logique (comme Prolog). D'autres langages ont été développés pour des classes d'applications particulières (par exemple, pour la programmation de systèmes multi-agents) ou comme surcouche à des bibliothèques structurées d'algorithme (comme R). NDLR

permettent de générer des lignes de code certifiées (sans erreur) à partir d'un simple algorithme de base.

Il faut aussi retenir que la question de la consommation énergétique n'est pas secondaire. Par exemple, pour modéliser un cerveau avec 30 000 neurones, la consommation est évaluée à 1MW. Or il y a des dizaines de milliards de neurones. Les limites actuelles de la modélisation du cerveau ne sont donc pas seulement liées à la complexité du problème, mais aussi et plus prosaïquement aux limites physiques.

Au total, les coûts inhérents à l'utilisation de grands moyens de calcul sont encore élevés, bien supérieurs à ceux d'une informatique personnelle, même en réseau, ou encore à celle d'un laboratoire. De plus, il est nécessaire d'accompagner ces moyens matériels de compétences humaines pointues. Il donc faut essayer de rationaliser les infrastructures de calcul à l'image du GENCI, le grand équipement national de calcul intensif, des mésocentres régionaux, ou des maisons de la modélisation et de la simulation.

Enfin, la formation de modélisateurs à BAC + 8 nécessite des enseignements fondamentaux et pluridisciplinaires, avec, en plus, une mise en pratique de l'interdisciplinarité. Des compétences en mathématiques et informatique sont requises ainsi qu'une bonne connaissance des domaines d'applications.

### ***Table ronde 2: Modèles simples ou modèles complexes ? Simplification ou complexification ?***

Animateur : *Philippe Davy* (Géosciences Rennes)

Participants : *Gilles Bernot* (Laboratoire d'Informatique, Signaux et Systèmes de Sophia Antipolis), *Daniel Borgis* (Processus d'activation sélective par transfert d'énergie uni-électronique ou radiatif, Paris), *Hubert Charles* (Biologie Fonctionnelle, Insectes et Interactions, Lyon), *François Képès* (Institut de Biologie Systémique et Synthétique, Genopole, Evry et Académie des technologies), *Michel Loreau* (Station d'Écologie Théorique et Expérimentale, CNRS, Moulis), *Aurélie Méjean* (Centre International de Recherche sur l'Environnement et le Développement, Vincennes), *Léna Sanders* (Géographie-Cités, Paris),

La question à traiter est en fait largement partagée par la communauté des modélisateurs. Ainsi a-t-elle été évoquée dans les autres sessions et tables rondes de ce colloque. En effet, il est évident qu'un modèle ne représente jamais la réalité dans tous ses détails, mais seulement certains aspects et à un niveau de granularité bien défini selon l'objectif de la modélisation. Par exemple, le modèle de Lorenz constitue une très grande simplification des phénomènes météorologiques, impropre à la prévision, mais permet d'étudier certaines propriétés fondamentales. C'est ainsi qu'un régime chaotique a été mis en évidence comme solution possible de ce

#### 4 Tables rondes et quelques conclusions

modèle réduit. Cette dynamique a été constatée pour des modèles plus complexes dédiés, eux, à la prévision. Cela étant, on sait qu'un régime chaotique peut être prévisible sur une durée déterminée. C'est ainsi qu'on peut définir un horizon temporel pour la prévision météorologique : en diminuant la maille géographique et temporelle et en augmentant la puissance de calcul, on peut reculer un peu cet horizon, mais pas le supprimer.

Les exposés et la discussion ont été à la fois généraux et conceptuels, tout en se basant sur des problèmes concrets en biologie, écologie, géographie et économie. C'est ainsi qu'au cours de cette table ronde ont été présentés et discutés les modèles KISS (*Keep It Simple, Stupid*), les plus simples, et des modèles KIDS (*Keep It Descriptive, Stupid*), les plus complexes.

Dans le domaine des sciences de la vie, on note, par exemple, que la construction d'un objet biologique peut être d'un grand ordre de complexité. L'exemple des relations entre la structure primaire (1D) d'une protéine et ses configurations spatiales est illustratif. La complexité est amplifiée si l'on souhaite identifier, parmi ces configurations, celles qui sont fonctionnelles. En effet, une multitude de tests sont possibles pour y aboutir. Il faut alors concevoir et implémenter des heuristiques pour se limiter à quelques centaines ou milliers de redéploiements possibles (Ingénierie reverse) pour réduire la complexité combinatoire.

Un autre exemple est celui des simulations moléculaires visant à résoudre l'équation de Schrödinger. Au début, on se consacrait uniquement à la simulation des éléments purs, puis des transitions de phase et des liquides moléculaires. Aujourd'hui la modélisation moléculaire concerne la biologie (en particulier pour les protéines). On reste toutefois limité par la complexité du problème pour arriver à des simulations multi-échelles. On note que pour résoudre les problèmes de grande complexité, notamment combinatoire, les ordinateurs quantiques pourraient permettre des progrès déterminants.

Les modèles économiques, même ceux n'ayant pas d'ambition prédictive, sont plus ou moins complexes selon la question posée. Par exemple, dans le cas du changement climatique, l'objectif est la réduction des émissions de gaz à effet de serre, et il s'agit simplement d'éclairer la décision publique. L'exercice reste cependant très difficile car on ne connaît pas l'évolution de certains paramètres, comme celle du prix attribué au CO<sub>2</sub> et plus particulièrement à « la tonne de CO<sub>2</sub> ».

En écologie, comme dans plusieurs autres secteurs scientifiques, il y a deux écoles : l'une plaide pour les modèles simples, l'autre pour les modèles complexes. Néanmoins, le choix dépend là encore du problème posé. L'exemple proposé montre comment des problèmes très complexes sont abordés par une équipe très pluridisciplinaire. Néanmoins, quand on étudie certains problèmes, comme la stabilité des systèmes écologiques, il est utile et efficace de faire des allers-retours entre les 2 types de modèles.

Sur la base de ces expériences, des questions communes et quelques éléments de réponse à ces questions peuvent être mentionnés :

1- Complexifier ou simplifier : quelle est la « bonne » démarche ? La réponse dépend du problème posé. Il semble néanmoins préférable d'utiliser d'abord des modèles simples, type *modèles Kleenex* (tirés d'une boîte à « modèles jetables »), qui répondent uniquement à un problème spécifique. L'utilisation de ce type de modèle n'implique pas l'abandon d'une démarche « constructiviste », à savoir complexifier à partir d'un modèle simple. Il faut cependant maîtriser cette évolution au mieux pour éviter toute complexification inutile, voire contre performante : l'étude du modèle et sa mise en œuvre devenant très difficile. À l'inverse, en partant d'un modèle complexe censé représenter au plus près le réel, on peut tenter des simplifications, par exemple en réduisant la complexité en fonction de ce qu'on peut raisonnablement observer ou sur quoi on peut agir. Il n'empêche que l'inférence des propriétés des modèles simplifiés ou, au contraire complexifiés, est difficile à partir de ce que l'on sait sur le modèle initial.

Le rôle joué par les données, en nombre et en qualité, est à souligner. Ainsi, est-il inutile de complexifier un modèle si les données ne sont pas suffisantes et fiables.

On constate que les communautés concernées, celles des « modèles simples » et celle des « modèles complexes » sont curieusement déconnectées alors que le passage d'une pratique à l'autre serait sans doute souhaitable sinon nécessaire.

2- Dispose-t-on d'outils pour valider un modèle ? Un modèle peut-il toujours être validé ? Ces questions sont récurrentes et encore sans réponse générale. Plus précisément, en économie, les modèles ne sont pas stables dans le temps et résistent à la validation. Bien que la validation basée sur la reproduction des tendances passées soit une démarche intéressante, elle ne garantit pas les prédictions pour le futur. En revanche, cette démarche peut être valable pour les systèmes non adaptables et non évolutifs, à structure et à fonctionnement stationnaires dans le temps, ce qui exclut très largement les systèmes dont les composantes principales sont des êtres vivants, par exemple les écosystèmes « naturels », et évidemment, les sociétés humaines ainsi que la plupart de leurs organisations, à moins de pouvoir modéliser les adaptations et les évolutions. Nous en sommes loin.

Dans la continuité de cette discussion, deux autres questions ont émergé : un modèle validé est-il nécessairement « bon » ? Faire un bon modèle, n'est-ce pas d'abord poser une bonne question ? La réponse dépend bien évidemment de l'usage qu'on souhaite en faire : un modèle à des fins technologiques doit être validé, mais cette validation ne vaut que pour un type de système et un mode de fonctionnement donné de ce système. Un modèle dans un processus de production de connaissances ne nécessite pas forcément d'être validé, on pourrait même dire le contraire : s'il est mis en défaut, c'est qu'il ne représente pas la réalité et qu'il est donc nécessaire de le modifier ou même de le jeter et d'en élaborer un autre. On est typiquement dans une

démarche scientifique poppérienne, d'ailleurs utile quelle que soit les objectifs de la modélisation : trouver la bonne expérience et les bonnes données pour la réfuter.

En d'autres termes, on peut distinguer les modèles prédictifs, ou normatifs (on veut reproduire des expériences, contrôler un fonctionnement), qui nécessitent d'être validés, et les modèles de compréhension, ou cognitifs, où le modèle est un élément dans la boucle d'acquisitions des connaissances. Son « invalidation » montre qu'il manque quelque chose ou que quelque chose est faux, on acquiert alors de la connaissance par rapport à celle qu'il contient initialement. En revanche, s'il est validé on peut penser qu'il contient les connaissances disponibles et atteignables à un moment donné. On peut alors essayer de le réfuter par des expériences complémentaires, mais on peut aussi s'en satisfaire provisoirement.

3- Les limites de la méthode sont à préciser : ces limites relèvent-elle des possibilités de formalisation ou des connaissances et des moyens disponibles pour l'étude et l'utilisation du modèle ? Le premier cas est relatif aux difficultés rencontrées pour formaliser certains processus (par exemple, des comportements d'êtres vivants). Le second cas concerne le manque de résultats théoriques (par exemple, d'outils mathématiques), ou de moyens techniques et pratiques (par exemple, d'algorithmes et/ou de puissance de calcul).

4- Enfin, s'agissant de la formation, on peut retenir qu'il y a des initiatives diverses, selon les besoins et les compétences disponibles. Ainsi, des enseignements « classiques » à finalités plus ou moins disciplinaires peuvent intégrer des parties dédiées à la modélisation. Il existe aussi des formations spécifiques, comme la filière « Bio-Informatique et Modélisation » (BIM) lancée il y a 16 ans à l'Insa de Lyon.

En résumant les échanges qui ont eu lieu dans l'ensemble de la session, on s'aperçoit *a posteriori* que c'est lors de cette table ronde que les questions les plus communes, celles partagées par le plus grand nombre de modélisateurs et d'utilisateurs de modèles, ont été abordées.

### ***Table ronde 3 : La modélisation est-elle un vecteur de dialogue entre recherche académique et industrie ?***

Animateur : *François De Charentenay* (Académie des Technologies)

Participants : *Olivier Chadebec* (Grenoble Génie Électrique), *Francesco Chinesta* (Institut de recherche en génie civil et mécanique, Nantes), *Jean-Michel Fourneau* (Données et Algorithmes pour une Ville Intelligente et Durable, Versailles), *Jean-Yves Delannoy* (SOLVAY, UMI COMPASS CNRS/Solvay & Université de Pennsylvanie), *Christophe Prud'Homme* (Centre de Modélisation et de Simulation de Strasbourg), *Christian Saguez* (Académie des

Technologies, Teratech et SiMSEO), *Benjamin Rotenberg* (Physicochimie des Electrolytes et Nanosystèmes interfaciaux, Paris).

La modélisation est une méthodologie largement partagée entre recherche et industrie et depuis longtemps, au moins depuis que le secteur industriel a élaboré des objets techniques sophistiqués. Des exemples multiples pourraient être cités : modélisation géométrique pour la construction, modélisation arithmétique et algébrique pour les calculs sur les quantités, modélisation analytique pour la dynamique des entités en mouvement, etc. On pourrait donc dire qu'il n'y a rien de nouveau si ce n'est le terme « vecteur ». Ce statut est relativement nouveau. On en retrouve un de même nature dans la pratique de l'interdisciplinarité où le modèle peut être un « trait d'union » entre les disciplines impliquées, il est un élément d'un langage commun, mais il est aussi un objet opératoire liant des objets de natures parfois très différentes. Que peut-on dire aujourd'hui sur les liens entre recherche, monde académique d'une part, et monde technique, mondes des objets, monde de ceux qui les fabriquent et les diffusent, d'autre part : complémentarités ou différences éventuelles de points de vue ? Le modèle et la modalisation sont-ils devenus des objets industriels ?

Tout d'abord, la vision « hiérarchique » de la démarche doit être relativisée sinon abandonnée, à savoir le modèle d'origine académique puis son utilisation par l'industrie, correspondant à la vision schématique : l'industriel-client et la recherche répondant à sa question (bien posée) en élaborant « un modèle-produit ». C'est vrai dans certains cas, mais ce n'est pas une règle générale. Souvent l'élaboration d'un modèle et les développements méthodologiques nécessaires pour son utilisation résultent d'un travail collaboratif entre les partenaires. Le partage des tâches dépend des compétences et des moyens disponibles et mobilisables de part et d'autre. Par exemple, la validation d'un modèle, avant son utilisation systématique, demande des tests « en vraie grandeur » qui, la plupart du temps, sont possibles uniquement en milieu industriel. Inversement, certains aspects très théoriques sont plutôt réservés au monde académique, mais dans la pratique les choses sont plus subtiles. Il faut aussi noter que le modèle n'est pas qu'un objet technique mais un moyen pour dialoguer, ainsi pour mieux comprendre certains processus et mécanismes, il joue un rôle heuristique. Il est alors une entité permettant d'organiser, de structurer les échanges et la modélisation est le moyen d'y arriver. Bien d'autres usages des modèles et de la modélisation pourraient-être cités montrant que le croisement des expériences entre recherche et industrie est bénéfique aux deux parties.

Cela étant, on peut aller plus loin ; en effet, de petites entreprises spécialisées dans le développement et la commercialisation de modèles ont été créées, et cela s'est accompagné de la mise à disposition des compétences correspondantes. Par exemple, pour le programme SIMSEO (la simulation au service des entreprises)<sup>2</sup>, il

---

<sup>2</sup> SIMSEO est un programme du PIA (Programme Investissement d'Avenir).

s'agit de permettre à des PME qui n'utilisent pas la simulation de se tourner vers ce domaine, à travers du conseil, des offres de service, etc. Pour les grands groupes, les laboratoires communs présentent un grand intérêt, notamment parce que les développements y sont rapides et les compétences rapidement mobilisables.

Actuellement, la structuration des relations entre les équipes de mathématiques, d'une part et les entreprises, d'autre part, est très avancée. Ainsi, plusieurs maisons de la Modélisation-Simulation-Optimisation (MSO) à Grenoble, à Strasbourg, etc., ont été créées, ainsi que le réseau les mettant en relation. Ce réseau est animé par l'Agence pour les Mathématiques en Interactions avec l'Entreprise et la Société (AMIES).

Certes, la recherche vient en support à l'industrie, mais l'industrie peut également apporter un complément à la recherche, par exemple en fournissant de données plus nombreuses et de bonne qualité, ou encore de sécuriser les codes, permettant des simulations plus fiables. L'industrie peut aussi apporter au secteur académique des problèmes plus fondamentaux, et aider les chercheurs à comprendre des mécanismes de base ou à élaborer une méthodologie « non-standard ». Pour illustrer ce propos, on peut prendre le cas de la modélisation d'une Citroën AX en béton (renforcée par des éléments métalliques) : les chercheurs modélisaient alors des phénomènes complexes sur des géométries simples, on leur a demandé de s'intéresser à des phénomènes plus simples mais sur des géométries plus complexes.

De ces échanges, on en déduit que contrairement à des idées reçues, les relations et les coopérations entre recherche et industrie sont réelles et actives. Il en a peut-être toujours été ainsi, mais les formes de coopération ont évolué dans le temps, devenant progressivement plus structurelles et collectives. Il semble en revanche qu'il y ait un nouveau besoin en recherche française dans les grandes initiatives en modélisation. On peut ainsi identifier des besoins de travaux fondamentaux, de nouveaux algorithmes, pour le *Deep learning*, le *BigData*.

## Conclusion... provisoire

La modélisation est devenue une méthodologie partagée par la plupart des secteurs scientifiques et technologiques. Cet essor est bien sûr le résultat des travaux des chercheurs et ingénieurs, qui en ont aussi une approche critique. Le développement de cette méthodologie a été soutenu par celui de l'informatique, en interaction avec les mathématiques, dans toutes ses composantes : méthodes numériques, logiciels dédiés, matériel de plus en plus performant, réseaux, etc. La simulation est alors un complément devenu nécessaire à la modélisation. Il s'agit bien de la science et des technologies informatiques souvent regroupées avec un ensemble de pratiques sous le terme générique de « numérique ». De plus, la qualité des prédictions, quand elles sont requises, dépend largement des propriétés du modèle et de celles des données disponibles ou accessibles. Pour ces dernières, les méthodologies et les métrologies choisies ou, si besoin, conçues spécifiquement, jouent un rôle essentiel.

Depuis les années 1990, cet effort a été accompagné par les institutions scientifiques, au premier rang desquels le CNRS. Cet effort continue. Le milieu industriel a participé dès le début à ces progrès dans divers secteurs, par exemple l'avionique, le génie des procédés, avec ses multiples applications, l'automobile, le transport ferroviaire, le secteur de l'énergie, etc. Dans quelques cas particuliers, la simulation a déjà remplacé certains dispositifs expérimentaux (il existe par exemple des souffleries numériques). L'agriculture, l'alimentation, la gestion des milieux naturels, et bien-sûr le secteur de la santé commencent à bénéficier des apports de la simulation. La simulation s'appuie sur des modèles, mais son utilisation opérationnelle demande beaucoup de rigueur dans la construction et la validation de ces modèles. Il faut se montrer très prudent dans des secteurs où la démarche n'est pas bien rôdée, où la formalisation des connaissances doit faire de grands progrès et même où les connaissances elles-mêmes manquent. Par exemple, on peut penser qu'un jour l'expérimentation animale sera avantageusement remplacée par l'utilisation de logiciels de simulation, mais nous en sommes encore loin. Il faut surtout éviter la précipitation parfois incitée par des considérations plus idéologiques que scientifiques.

Enfin, pour faire face aux développements importants de la modélisation, des spécialistes de haut niveau doivent être formés. Chacun s'accorde à dire que le niveau de Bac+8, c'est-à-dire celui de docteur, est vraiment souhaitable. Cependant il est possible de canaliser en amont la formation via des filières spécialisées. Les expériences menées doivent être suivies avec un grand intérêt pouvant mener à une réflexion collective susceptible de constituer le thème d'un futur colloque.

## Présentation

La modélisation est devenue une méthodologie incontournable dans de nombreux domaines scientifiques et technologiques. Elle est devenue une pièce majeure dans la boîte à outils des ingénieurs. Une soixantaine d'année après les premières occurrences significatives du mot dans la littérature scientifique et technologique, le CNRS et l'Académie de technologies ont décidé de faire le point en organisant un colloque sur le sujet. L'ampleur du champ à couvrir a mené à focaliser les interventions sur trois thématiques communes et très actuelles :

1. Modélisation et simulation, faut-il toujours plus de puissance de calcul ?
2. Modèles simples ou modèles complexes ? Simplification ou complexification ?
3. Rôle de la modélisation dans le dialogue entre la recherche académique et l'industrie

De plus, trois tables rondes ont complété les exposés.

Ce colloque s'est tenu le 6 décembre 2016, au siège du CNRS, à Paris. Il a été ouvert par les présidents du CNRS et de l'Académie des technologies, MM. Alain Fuchs et Alain Bugat. Ayant connu un grand succès, au point que le nombre de participant a été limité pour des raisons matérielles, le comité d'organisation a proposé aux intervenants de rédiger leurs contributions afin d'éditer des actes. Ils sont l'objet de cet e-ouvrage. Le bilan incite à prévoir d'autres manifestations de ce type dans l'avenir.

