

INTRODUCTION (page 1)

Sébastien DUTREUIL, Philippe HUNEMAN,
Franck VARENNE, Marc SILBERSTEIN

Modélisation et simulation :
arguments et questions vives

PARTIE I

**EPISTÉMOLOGIES DE LA
MODÉLISATION ET DE LA SIMULATION**

1. APPORTS GÉNÉRAUX DES MODÈLES ET DES SIMULATIONS

Chapitre 1 (page 21)

Léo COUTELLE & Anne-Françoise SCHMID

Modélisation, simulation, expérience de pensée :
la création d'un espace épistémologique
Regards à partir des œuvres de Vernadsky et de Poincaré

- 1] Expérience de pensée chez Vernadsky :
la création d'un espace générique
 - 1.1] Généralisation empirique et critère de Poincaré
 - 1.2] Opérateurs relationnels et expériences de pensée
- 2] Un cas historique d'épistémologie générique : Henri Poincaré
 - 2.1] Décomposition et généralité chez Poincaré
 - 2.2] La compatibilité et l'idée d'ordre
 - 2.3] Que pouvons-nous tirer de cet exemple historique ?
- 3] Conclusion. Les hypothèses de Vernadsky
et de Poincaré dans les sciences contemporaines

Chapitre 2 (page 49)

Stéphanie RUPHY

Simulations numériques de phénomènes complexes :
un nouveau style de raisonnement scientifique ?

- 1] Plusieurs styles de raisonnement en science

- 2] Ce qu'accomplit un style
- 3] Simulations réalistes composites
- 4] De nouvelles sortes d'objets
- 5] De nouvelles sortes de propositions
susceptibles d'être vraies ou fausses ?
- 6] Techniques de stabilisation
- 7] Remarques conclusives

Chapitre 3 (page 67)

Hélène GUILLEMOT

Comprendre le climat pour le prévoir? Sur quelques débats, stratégies et pratiques de climatologues modélisateurs

- 1] Les modèles de climat, entre dualité et holisme
 - 1.1] Dualité structurante
 - 1.2] Unité du squelette et diversité des membres
 - 1.3] Holisme fondamental
- 2] Stratégies de modélisateurs
 - 2.1] Une recherche organisée à l'échelle mondiale
 - 2.2] Un rapport «incroyablement visionnaire»
 - 2.3] Diversité des conceptions de la modélisation
- 3] Analyser les simulations
 - 3.1] Hiérarchiser les problèmes
 - 3.2] Extraire des rétroactions
 - 3.3] S'attaquer aux principaux suspects
 - 3.4] Critères de confiance
 - 3.5] Exercices d'intercomparaison
 - 3.6] Modèles simples, expériences idéalisées, schémas conceptuels
- 4] Développer des paramétrisations
 - 4.1] La «nouvelle physique» du LMD
 - 4.2] Développement et validations des paramétrisations
à l'aide de modèles à mailles fines
 - 4.3] Deux visions des nuages
 - 4.4] Deux réalismes
 - 4.5] Le pari de l'amélioration du modèle
 - 4.6] Les paramétrisations, talon d'Achille ou outil heuristique
- 5] Conclusion
 - 5.1] Contourner le holisme des modèles
 - 5.2] Convergence entre comprendre et prévoir
 - 5.3] Tension entre simple et complexe

2. APPORTS SPÉCIFIQUES DES MODÈLES ET DES SIMULATIONS

En physique

Chapitre 4 (page 111)

Sara FRANCESCHELLI

La déduction mathématique et la théorie physique. Exemple de solutions numériques physiquement utiles

- 1] Une déduction mathématique à jamais inutilisable pour le physicien?
- 2] De l'utilisation d'une déduction mathématique et de solutions numériques concernant un système déterministe instable
- 3] Discussion

En biologie

Chapitre 5 (page 137)

Matteo MOSSIO & Leonardo BICH

La circularité biologique: Concepts et modèles

- 1] Circularité et autodétermination biologique
- 2] Une très brève histoire de la circularité biologique
- 3] Circularité et clôture
 - 3.1] Autopoïèse
 - 3.2] (M, R) -systems
- 4] Perspectives

*Dans les transferts interdisciplinaires et
aux interfaces génériques des systèmes complexes*

Chapitre 6 (page 171)

Johannes MARTENS

Le modèle de l'agent maximisateur en biologie

- 1] Sélection naturelle et choix rationnel
- 2] L'écueil de l'héritabilité
et la structure génétique des populations
- 3] Le «gène égoïste» comme solution à l'écueil de l'héritabilité
- 4] L'évolution de l'altruisme et le dilemme du prisonnier
- 5] La maximisation de la fitness inclusive
- 6] Conclusion

Chapitre 7 (page 193)

Denis PHAN

La modélisation à base d'agents et la simulation par systèmes multi-agents de sociétés d'agents intentionnels

- 1] Derrière les agents et l'agentivité : intentionnalité et raison d'agir
 - 1.1] Agent et agentivité : des «grains de sable» aux agents intentionnels
 - 1.2] Externalisme et internalisme : deux manières de concevoir les agents
 - 1.3] L'articulation entre compréhension-explication, et la question de la spécificité des SHS
 - 1.4] Actions et raisons d'agir
- 2] La construction d'ontologies comme médiateur dans la modélisation de systèmes complexes à base d'agents pour les SHS
 - 2.1] Les «trois domaines» en jeu dans une recherche en SHS et le rôle de l'ontologie dans le processus de modélisation
 - 2.2] La modélisation AB pour la simulation par SMA et le découplage des points de vue au niveau conceptuel entre la signification «dans le monde du modèle» et la signification relativement au domaine de référence SHS
 - 2.3] La pluralité des points de vue et des niveaux d'interprétation dans la modélisation AB
- 3] Approche intentionnaliste de la modélisation AB, propriétés des systèmes complexes et sémantique du modèle
 - 3.1] L'approche intentionnaliste, les raisons d'agir et l'individualisme méthodologique
 - 3.2] Agents intentionnels en interaction, mécanismes générateurs et effets «structuraux»
 - 3.3] les SMA comme systèmes complexes artificiels et les niveaux d'interprétation des modèles AB
- 4] Conclusion

*En architecture*Chapitre 8 (page 245)

Christian GIRARD

L'architecture, une dissimulation. La fin de l'architecture fictionnelle à l'ère de la simulation intégrale

- 1] Domaine discursif
- 2] Et la maquette devint maquette numérique
- 3] Modèle, modélisation et maquette en architecture

- 4] Balancement modèle/simulation
- 5] Simulation et non-représentation
- 6] Expérience de pensée
- 7] Retour en métaphysique?
- 8] Après les fictions
- 9] Fins de chantier et fin du chantier
- 10] Architecture afictionnelle

Chapitre 9 (page 293)

Philippe MOREL

Géométrie polymorphe et jeux de langages formels:
**sur l'usage de la géométrie et des modèles dans
 l'architecture contemporaine**

- 1] Mathématiques alternatives et polyformalisme
- 2] Jeux de langages et industrialisation
- 3] Répétition
- 4] Arithmétisation
- 5] Simulation
- 6] Approximation
- 7] Précision

PARTIE II

PRATIQUES DE LA MODÉLISATION ET DE LA SIMULATION

**1. MODÈLES MATÉRIELS ET MODÈLES COMPUTATIONNELS
 EN PHYSIQUE ET EN CHIMIE**

Chapitre 10 (page 339)

Thierry FOGLIZZO

De l'observation d'une fontaine à l'explosion des étoiles.
**Un modèle analogique complémentaire des simulations
 numériques**

- 1] Les fondements de notre compréhension des supernovae
 - 1.1] Supernovae thermonucléaires et gravitationnelles
 - 1.2] Nucléosynthèse stellaire, de l'hydrogène au fer
 - 1.3] La masse critique de Chandrasekhar
 - 1.4] L'énergie des supernovæ thermonucléaires
 - 1.5] Les neutrinos des supernovae gravitationnelles
 - 1.6] Rayon de Schwarzschild et masse critique des étoiles à neutrons
 - 1.7] Les conséquences astrophysiques des supernovæ

- 2] Progrès récents pour comprendre les supernovae gravitationnelles
 - 2.1] Méthodes d'investigation
 - 2.1.1] *Des observations précises*
 - 2.1.2] *Paramètres physiques et approximations des calculs numériques*
 - 2.1.3] *Interprétation et généralisation des résultats obtenus*
 - 2.2] La nécessité d'une approche multidimensionnelle
 - 2.3] La découverte d'une nouvelle instabilité hydrodynamique : SASI
 - 2.4] Les conséquences de SASI
- 3] Première approche expérimentale de l'instabilité SASI
 - 3.1] Analogie entre les ondes sonores dans un gaz et les vagues à la surface de l'eau
 - 3.2] Une expérience à taille humaine pour la diffusion des connaissances
 - 3.3] SWASI, un outil de recherche complémentaire des simulations numériques
- 4] Conclusion

Chapitre 11 (page 359)

Gilberte CHAMBAUD

La modélisation en chimie : des atomes aux systèmes complexes

- 1] Modèles et méthodes pour la structure électronique
 - 1.1] Méthodes de détermination des structures électroniques
 - 1.1.1] *Méthodes explicitant la fonction d'onde électronique*
 - 1.1.2] *Méthode de la fonctionnelle de la densité DFT*
 - 1.2] Application à l'étude de mécanismes réactionnels
 - 1.2.1] *Quelle méthode de calcul choisir ?*
 - 1.2.2] *Comment étudier la réactivité ?*
 - 1.2.3] *Quel modèle utiliser pour le système chimique ?*
- 2] La dynamique des noyaux
 - 2.1] Dynamique quantique
 - 2.2] Spectroscopie vibrationnelle
 - 2.2.1] *Oscillateur harmonique : modèles classique et quantique*
 - 2.2.2] *Anharmonicité*
 - 2.2.3] *Évolutions des modèles théoriques*
 - 2.3] Réactivité sous l'effet de la lumière : la photochimie
 - 2.3.1] Spectres d'absorption, d'émission et couleurs de colorants organiques
 - 2.3.2] Isomérisation photo-induite d'un ligand dans un complexe de Re(I)
- 3] Dynamique moléculaire classique
 - 3.1] Énergie potentielle
 - 3.1.1] *Les champs de force : concepts et hypothèses de base*

- 3.1.2] *Champs de force : évolutions et limites*
- 3.2] Mécanique moléculaire : méthodes et performances
- 3.3] Le système et son environnement : les méthodes hybrides
 - 3.3.1] *Identification des parties QM et MM et interactions*
 - 3.3.2] *Jonctions entre les parties QM et MM*
 - 3.3.3] *Photo-isomérisation du chromophore rétinale dans la rhodopsine*
- 4] Les systèmes complexes
 - 4.1] Les liquides
 - 4.1.1] *Définition des liquides*
 - 4.1.2] *Concepts de base de la mécanique statistique des liquides moléculaires*
 - 4.1.3] *Les liquides ioniques*
 - 4.1.4] *Calcul de l'énergie libre*
 - 4.1.5] *La thermodynamique moléculaire*
 - 4.2] Les protéines et les systèmes biologiques
 - 4.2.1] *Échantillonnage de l'espace des conformations*
 - 4.2.2] *Représentations moléculaires*
 - 4.2.3] *Cibles critiques pour la santé*
- 5] Conclusions

Chapitre 12 (page 425)

Frédéric WIEBER

Contraintes et ressources computationnelles dans l'histoire de la chimie des protéines (1960-1980)

- 1] Situation épistémologique des approches théoriques en chimie des protéines
- 2] «Modélisation empirique» des objets protéiques (années 1960)
- 3] Simulation de la dynamique protéique (années 1970)
- 4] Conclusion

2. SCIENCES DE LA VIE :

FLUX, DYNAMIQUES, FORMES ET ÉCHELLES

Chapitre 13 (page 455)

Céline BROCHOT, Marie-Émilie WILLEMIN & Florence ZEMAN

La modélisation toxico-pharmacocinétique à fondement physiologique : son rôle en évaluation du risque et en pharmacologie

- 1] Construction d'un modèle PBPK
 - 1.1] Structure d'un modèle PBPK
 - 1.2] Mise en équations des processus ADME
 - 1.3] Paramétrisation des modèles

- 1.4] Évaluation des modèles PBPK
- 1.5] Analyse d'incertitude et de variabilité
- 1.6] Logiciels
- 2] Applications des modèles PBPK en toxicologie et pharmacologie
 - 2.1] Un cadre paramétrique pour l'extrapolation à des conditions réelles d'exposition
 - 2.2] Un outil en évaluation du risque toxicologique
 - 2.3] Un lien entre l'exposition et la biosurveillance des populations
 - 2.4] Une aide pour le développement des molécules thérapeutiques
- 3] Conclusion

Chapitre 14 (page 493)

Sébastien MARTIN & Bertrand MAURY

Notion de résistance de l'arbre pulmonaire bronchique dans la ventilation respiratoire humaine

- 1] Introduction
 - 1.1] Le poumon comme échangeur gazeux
 - 1.2] Enjeux de modélisation en sciences du vivant
 - 1.3] Position du problème :
la notion de résistance en physiologie respiratoire
 - 1.4] Plan du chapitre
- 2] Notion de résistance
 - 2.1] Résistance à un écoulement
 - 2.2] Mesure de la résistance par interruption de débit
- 3] Résistance à un écoulement : loi de Poiseuille et analogie électrique
 - 3.1] Loi de Poiseuille : résistance d'un tube, puissance dissipée
 - 3.2] Résistance de tubes en série, en parallèle
- 4] Résistance dans un réseau
 - 4.1] Résistance d'un arbre dichotomique symétrique
 - 4.2] Application au poumon
- 5] Différence entre les valeurs de résistance issues du modèle de Poiseuille et les valeurs expérimentales : explications possibles
 - 5.1] Résistance des tissus
 - 5.2] Variabilité morphométrique
 - 5.3] Influence de la température
 - 5.4] Effets inertiels
- 6] Simulation numérique
 - 6.1] Méthode numérique
 - 6.2] Écoulement dans une bifurcation
 - 6.3] Écoulement dans la cavité nasale
- 7] Conclusion

Chapitre 15 (page 525)

Laurent PUJO-MENJOUET

Théorie sur l'apparition de structures de Turing pour les biologistes, ou éclaircissements sur deux intuitions ingénieuses

- 1] La diffusion : équation de la chaleur
 - 1.1] Les conditions aux limites
 - 1.1.1] *Condition initiale*
 - 1.1.2] *Conditions aux bords*
 - 1.2] Fonctions propres
 - 1.3] Résolution de l'équation de la chaleur
- 2] Les équations de réaction-diffusion
 - 2.1] Une seule équation de réaction-diffusion
 - 2.1.1] *Équilibre homogène de la réaction*
 - 2.1.2] *Stabilité de l'équilibre*
 - 2.2] Un système de deux équations de réaction-diffusion
 - 2.2.1] *Linéarisation du système*
 - 2.2.2] *Règle des signes de Turing*
 - 2.2.2] *Interprétation de la règle des signes de Turing*
- 3] Conclusion

Chapitre 16 (page 561)

Pascal CARRIVAIN, Jean-Marc VICTOR & Annick LESNE

Modéliser et simuler les chromosomes : propriétés physiques et fonctions biologiques

- 1] Le contexte biologique : ADN, chromatine et processus génomiques
- 2] La place de la physique en biologie
- 3] Propriétés physiques, fonctions biologiques
- 4] L'exemple des propriétés mécaniques de l'ADN et de la chromatine
- 5] À quoi servent ici la simulation et la modélisation ?
- 6] Une modélisation multi-échelle et fonctionnelle
- 7] Des outils de simulation dédiés, inspirés des jeux vidéo
- 8] Le point de vue des biologistes
- 9] Questions ouvertes

Chapitre 17 (page 581)

Julien DELILE, René DOURSAT & Nadine PEYRIÉRAS

Modélisation multi-agent de l'embryogenèse animale

- 1] Introduction

- 1.1] La biologie du développement, résumé historique
- 1.2] Quelques approches de modélisation du développement embryonnaire
- 1.3] Vers des principes communs de modélisation
- 2] MECA: modèle de biomécanique cellulaire
 - 2.1] Équation du mouvement
 - 2.2] Forces et potentiels d'interaction
 - 2.3] Forces de comportement cellulaire
 - 2.3.1] *Le comportement de protrusion*
 - 2.3.2] *Modélisation de la force active de protrusion*
- 3] GEN: modèle de régulation génétique et de signalisation moléculaire
 - 3.1] Réactions intracellulaires entre gènes et protéines
 - 3.2] Sécrétion et transduction des ligands
 - 3.3] Réactions extracellulaires, transport et diffusion
- 4] MECAGEN: un modèle de couplage mécanogénétique
 - 4.1] Ontologie des comportements cellulaires
 - 4.2] Spécification chronologique waddingtonienne
 - 4.2.1] *Table de différenciation \mathcal{D}*
 - 4.2.2] *Table d'adhérence \mathcal{P}*
 - 4.2.3] *Table des sources et des puits \mathcal{L}*
 - 4.2.4] *Table des protrusions actives \mathcal{A}*
- 5] Illustrations dans un cadre artificiel
 - 5.1] Motifs de régulation génétique
 - 5.2] Tri cellulaire par comportements protrusifs
- 6] Discussion
 - 6.1] Déterminer le « bon » niveau mésoscopique
 - 6.2] Vers une modélisation «evo-devo»

Chapitre 18 (page 625)

René DOURSAT, Hiroki SAYAMA & Olivier MICHEL

L'ingénierie morphogénétique: modèles de processus dynamiques pour la morphogenèse

- 1] Introduction
 - 1.1] Systèmes auto-organisés présentant déjà une architecture
 - 1.2] Systèmes architecturés présentant déjà une auto-organisation
 - 1.3] Vers une auto-organisation programmable
- 2] Enrichir les systèmes physiques avec de l'information
 - 2.1] Systèmes complexes naturels
 - 2.2] Systèmes complexes augmentés
- 3] Plonger les systèmes d'information dans la physique
 - 3.1] Le design en vie artificielle
 - 3.2] La complexité en vie artificielle

- 4] Brève taxonomie des approches d'ingénierie morphogénétique
- 5] Perspectives

Chapitre 19 (page 643)

Paul VILLOUTREIX

Vers un modèle multi-échelle de la variabilité biologique ?

- 1] La variabilité en biologie
 - 1.1] Les mutations génétiques
 - 1.2] Épigenétique et stochasticité
- 2] L'aléatoire dans les théories physiques et mathématiques
- 3] Modélisation de phénomènes morphogénétiques dans le vivant
 - 3.1] La modélisation et la simulation comme outils d'exploration de certaines dynamiques du vivant
 - 3.2] Les organismes vivants sont des objets organisés mettant en jeu différents niveaux d'organisation aux dynamiques hétérogènes
- 4] Conclusion

Chapitre 20 (page 665)

Jean-Marie DEMBELE & Christophe CAMBIER

Une approche à base d'agents particule pour les processus biologiques d'agrégation

- 1] Le modèle usuel de convection-diffusion pour l'agrégation par taxie
- 2] Une approche à base d'aP pour les systèmes dynamiques
- 3] L'aP dans le phénomène d'agrégation par taxie
- 4] Émergence et réification de structures émergentes
- 5] Applications aux comportements biologiques
- 6] Conclusion

3. INGÉNIERIE ET SCIENCES DE LA CONCEPTION

Chapitre 21 (page 689)

Stéphane REDON

Modélisation et simulation adaptatives pour les nanosciences

- 1] Les défis de la conception de nanosystèmes
- 2] Approches actuelles pour la simulation atomique
- 3] Modélisation et simulation adaptatives
- 4] SAMSON

Chapitre 22 (page 703)

Frédéric BOULANGER

Modélisation multiparadigme
pour la conception des systèmes

- 1] Complexité et interactions
 - 1.1] Limites de la complexité
 - 1.2] Origines de la complexité
- 2] Modélisation, décomposition et abstraction
- 3] Hétérogénéité
- 4] Adaptation sémantique
- 5] Structure des modèles hétérogènes
- 6] Simulation et exécution
- 7] Conclusion

Chapitre 23 (page 725)

David R.C. HILL

Simulations stochastiques et calcul à haute performance :
la « parallélisation » des générateurs de nombres
pseudo-aléatoires

- 1] La simulation stochastique à événements discrets
- 2] Les nombres « vraiment » aléatoires
- 3] La génération de nombres quasi aléatoires
- 4] Les générateurs pseudo-aléatoires
- 5] Les tests séquentiels de qualité pour les générateurs
- 6] Simulations parallèles et flux aléatoires
 - 6.1] Simulation stochastique parallèle et reproductibilité
 - 6.2] Techniques de partitionnement d'un flux stochastique unique
 - 6.3] Technique de production de différents générateurs parallèles
 - 6.4] Tests de générateurs parallèles
- 7] Logiciels d'aide à la distribution du flux aléatoires
- 8] Quelques exemples de PRNG « parallèles »
compatibles avec des accélérateurs GP-GPU
- 9] Conclusion

Les auteurs (page 751)

M odélisation et simulation : Arguments et questions vives

Sébastien DUTREUIL, Philippe HUNEMAN,
Franck VARENNE, Marc SILBERSTEIN

La philosophie des sciences s'est pendant longtemps concentrée sur les théories – et sur la question de savoir si elles révélaient des lois de la nature –, s'inscrivant ainsi dans un cadre défini par le positivisme logique dans les années 1930. Depuis les années 1970, les remises en question de ce cadre se sont accumulées ; des conceptions alternatives de la science ont émergé, à l'instar de la conception sémantique des théories qui considère les théories scientifiques comme des ensembles de modèles plutôt que comme des constructions logiques basées sur des énoncés généraux capturant des lois générales de la nature et autorisant des explications déductives-nomologiques dans le style développé par Carl Hempel¹. Par la suite, des philosophes des sciences ont lancé des études sur le statut épistémologique de la *modélisation* scientifique. Ils ont apporté des contributions significatives sur le genre de connaissance produite par les modèles², leurs relations aux

[1] Voir P. Suppes, « A comparison of the meaning and uses of models in mathematics and the empirical Sciences », *Synthese*, 12, 1960 ; F. Suppe, *The Semantic Conception of Theories and Scientific Realism*, University of Illinois Press, 1989 ; B. Van Fraassen, *The Scientific Image*, Oxford UP, 1980.

[2] M. Black, *Models and Metaphors : Studies in Language and Philosophy*, Cornell UP, 1962 ; M. Hesse, *Models and Analogies in Science*, University of Notre Dame Press, 1966 ; P. Achinstein, *Concepts of Science : A philosophical analysis*, The Johns Hopkins Press, 1968 ; I. Hacking, *Representing and Intervening*, Cambridge UP, 1983 ; W. Wimsatt, « False models as means to truer theories », in M.H. Nitecki & A. Hoffman (eds.), *Neutral Models in Biology*, Oxford UP, 1987 ; R. Frigg, « Models and fiction », *Synthese*, 172(2),

théories, aux lois de la nature³ ou aux expériences⁴ et aux inférences causales⁵, aussi bien que sur les conséquences résultant de l'adoption d'une conception des modèles quant aux débats sur le réalisme *versus* l'instrumentalisme⁶, ou encore sur les critères spécifiant les conditions sous lesquelles une hypothèse est considérée comme raisonnable lors de la construction d'un modèle et sur l'importance de ces critères. Ils ont distingué les modèles mathématiques des simulations numériques⁷, identifiant des valeurs épistémiques telles que la généralité, le réalisme ou la précision⁸ et se sont efforcés de caractériser le genre de compromis (*trade-offs*) épistémique propre à différents types de modèles⁹. Ils ont discuté de cas dans lesquels plusieurs modèles différents existent pour le même phénomène et des conséquences de cela quant à l'idée de pluralisme explicatif¹⁰ (à ce sujet, on se reportera dans le présent volume aux chapitres de Léo Coutellec & d'Anne-Françoise Schmid, «Modélisation, simulation, expérience de pensée : la création d'un espace épistémologique», et de Stéphanie Ruphy, «Simulations numériques de phénomènes complexes : un nouveau style de raisonnement scientifique?»), mais ont également considéré les situations inverses dans lesquelles différents phénomènes ont un modèle commun comme c'est le cas, par exemple, en écologie comportementale et en micro-économie, qui peuvent tous les deux être modélisés par la théorie des jeux¹¹ (voir ici l'analyse de Johannes Martens, «Le modèle de l'agent maximisateur en biologie»). L'analyse de robustesse a été

2010 ; N. Nersessian, *Creating Scientific Concepts*, MIT Press, 2008 ; M.S. Morgan & M. Morrison (eds.), *Models As Mediators*, Cambridge UP, 1999.

[3] N. Cartwright, *How the Laws of Physics lie*, Oxford UP, 1983.

[4] R. Giere, *Explaining Science : A Cognitive Approach*, University of Chicago Press, 1988.

[5] J. Woodward, *Making Things Happen : A Theory of Causal Explanation*, Oxford UP, 2003.

[6] Voir à ce sujet F. Varenne, *Théorie, réalité, modèle. Épistémologie des théories et des modèles face au réalisme dans les sciences*, Éditions Matériologiques, 2012.

[7] P. Galison, *Image and Logic*, University of Chicago Press, 1997.

[8] R. Levins, «The strategy of model building in population biology», *American Scientist*, 54(4), 1966.

[9] J. Matthewson & M. Weisberg, «The structure of tradeoffs in model building», *Synthese*, 170(1), 2009.

[10] S. Mitchell, *Biological Complexity and Integrative Pluralism*, Cambridge UP, 2013 ; R. Giere, *Scientific Perspectivism*, University of Chicago Press, 2006.

[11] J. Maynard Smith, *Evolution and the Theory of Games*, Cambridge UP, 1982.

étudiée comme moyen de faire face à la pluralité de modèles¹². La spécificité des modèles computationnels a stimulé une littérature importante sur leur caractérisation, leur construction et leur validation¹³. Le chapitre de Stéphanie Ruphy montre ainsi de manière convaincante que les simulations numériques constituent un nouveau style de raisonnement scientifique, au sens que l'historien des sciences Alistair Crombie, distinguant six styles de raisonnement scientifique dans la pensée occidentale, puis le philosophe des sciences Ian Hacking, ont pu donner au terme de *style de raisonnement*, ce qui témoigne aussi bien de l'ampleur scientifique des simulations numériques dans le paysage contemporain que de leur nouveauté épistémique et de leur importance philosophique. L'étude des modèles est ainsi devenue un champ de la philosophie des sciences riche et en pleine expansion, en particulier depuis la dernière décennie ; des conférences et des sociétés telles que Society for the Study of Science in Practice sont ainsi presque exclusivement consacrées à l'étude de telles questions.

Le concept même de modèle a acquis différentes couches de complexité, et il est maintenant clair que les divers modèles auxquels les scientifiques se réfèrent correspondent en fait à des concepts différents de modèle. De plus, en considérant le discours scientifique sur les modèles à la lumière des discussions philosophiques récentes, il devient évident que plusieurs distinctions conceptuelles sont nécessaires pour rendre compte de la richesse des significations que ce terme peut revêtir dans les sciences. L'une de ces distinctions – importante – est faite entre ce que l'on appelle usuellement « modèle phénoménologique », qui sont à propos de patrons (*patterns*), et ce qui est souvent appelé « modèle mécanistique », ayant pour ambition de représenter des causes ou des processus¹⁴. La question du rôle explicatif des modèles sera vraisemblablement posée de manière différente dans chacun de

[12] Wimsatt, *op. cit.*, 1987.

[13] P. Humphreys, *Computer Simulations*, Philosophy of Science Association, 1990, vol. 2, p. 497-506 ; P. Humphreys, *Extending Ourselves: Computational Science, Empiricism, and Scientific Method*, Oxford UP, 2004 ; E. Winsberg, *Science in the Age of Computer Simulation*, University of Chicago Press, 2010 ; T. Grüne-Yanoff & P. Weirich, « The philosophy and epistemology of simulation: A review », *Simulation & Gaming*, 41, 2010, p. 20-50.

[14] Il s'agit des fonctions des modèles n° 7 et n° 8 telles qu'elles sont présentées dans l'introduction du tome 1 : « Modèles et simulations dans l'enquête scientifique : variétés traditionnelles et mutations contemporaines », in F. Varenne & M. Silberstein (dir.), *Modéliser*

ces cas. Par ailleurs, des problèmes généraux tels que ceux concernant la nature des capacités représentationnelles des modèles, la confirmation et la validation, doivent également être posés en prenant en compte cette distinction entre modèle phénoménologique et modèle mécanistique qui traverse toutes les sciences de la nature et sociales, incluant les sciences de la vie. Cette distinction est évidemment tout aussi importante lorsqu'il s'agit de traiter ce genre de questions épistémologiques que lorsque l'on s'attaque à des questions métaphysiques telles que celles qui opposent le réalisme à l'instrumentalisme, ou celles qui mettent en avant le réductionnisme, le physicalisme et leur opposent une forme ou une autre d'émergentisme ou de dualisme, etc.

Si les modèles et les simulations ont soulevé des questions d'ordre général, traversant la totalité des modèles ou l'ensemble des simulations numériques, ils ont aussi été l'occasion d'interrogations plus locales concernant tantôt l'importance d'aspects disciplinaires – par exemple la spécificité des questions soulevées par la modélisation dans une discipline en particulier, ou les problèmes liés à l'articulation de plusieurs disciplines dans le cadre d'un même modèle –, tantôt la spécificité de certains types de modèles ou de certains types de simulations en particulier. Le tournant computationnel des modèles a en particulier conduit à mettre en perspective le sens et la portée des pratiques traditionnelles de formalisation et de mathématisation dans les sciences¹⁵. La possibilité que les langages informatiques évolués donnent de composer et de combiner des modèles formels dont les langages ne sont pas identiques – voire ne sont pas axiomatiquement compatibles – a notamment été soulignée¹⁶. Plusieurs contributions de cet ouvrage s'intéressent à ce dernier point ; celle de Stéphanie Ruphy s'attache ainsi à montrer les spécificités épistémiques des modélisations réalistes composites dont les modèles du climat et les modèles

& simuler. *Épistémologies et pratiques de la modélisation et de la simulation*, tome 1, Éditions Matériologiques, 2013, p. 9-47.

[15] Humphreys, *op. cit.*, 2004.

[16] F. Varenne, *Du modèle à la simulation informatique*, Vrin, 2007. Concernant les simulations composites, voir aussi F. Varenne, « La simulation conçue comme expérience concrète », in J.-P. Müller (dir.), *Le Statut épistémologique de la simulation*, Éditions de l'ENST, 2003, p. 299-313 ; « Modèles et simulations : pluriformaliser, simuler, remathématiser », *Matière première*, n° 3, 2008, p. 153-180, repris dans Varenne & Silberstein (dir.), *op. cit.*, 2013, p. 299-328 ; « Simulation informatique et pluriformalisation des objets composites », *Philosophia Scientiae*, 13(1), 2009, p. 135-154.

cosmologiques constituent les exemples paradigmatiques, et montre comment la complexité de telles simulations entraîne une certaine forme de stabilisation de ces simulations au sein d'une communauté scientifique donnée. Denis Phan («La modélisation à base d'agents et la simulation par systèmes multi-agents de sociétés d'agents intentionnels»), avant de s'intéresser de manière spécifique à leur utilisation en sciences sociales, expose une synthèse éclairante sur les usages qui sont faits d'un type de simulation particulier, à savoir les modèles à base d'agents, dans différentes disciplines et, parallèlement, des propriétés qui sont alors attribuées aux agents selon que ce qui est modélisé est un tas de sable, un groupe d'organismes vivants ou des agents intentionnels.

D'autres contributions apportent des réflexions sur la manière dont se croisent les disciplines lorsqu'il est question de modèle : tantôt le schème explicatif d'une discipline donnée sert de modèle pour une autre discipline comme c'est le cas dans le chapitre de Johannes Martens qui montre la pertinence explicative en biologie évolutive que revêt l'analogie de l'agent maximisateur empruntée au champ de l'optimisation économique, tantôt le même modèle requiert la convergence de plusieurs disciplines intervenant à différents niveaux, nécessitant alors toute la précaution nécessaire pour articuler les disciplines entre elles, comme le montre de manière exemplaire la contribution de Pascal Carrivain, Jean-Marc Victor & Annick Lesne («Modéliser et simuler les chromosomes : propriétés physiques et fonctions biologiques») discutant avec finesse les difficultés qui se présentent pour qui veut intégrer correctement les propriétés physiques et chimiques d'un chromosome (son élasticité, son affinité avec d'autres molécules) afin de rendre compte de ses propriétés biologiques fonctionnelles (l'expression des gènes) et comme le montre également de manière claire et pédagogique le chapitre de Sébastien Martin & Bertrand Maury («Notion de résistance de l'arbre pulmonaire bronchique dans la ventilation respiratoire humaine»), lequel présente l'intérêt que peut avoir une modélisation fine et détaillée de la mécanique des fluides ayant lieu dans l'arbre respiratoire pour rendre compte de propriétés physiologiques à l'échelle de l'organisme.

L'utilisation de trois types de modèles – *in vitro*, *in vivo*, *in silico* – dans les sciences de la vie fait émerger de nombreux problèmes spécifiques dans la mesure où la connaissance scientifique est, dans des cas fréquents, produite par l'intrication de ces trois types de modèles – et une bonne partie de ce volume est consacrée à des

modèles et de simulations qui appartiennent aux sciences du vivant ou bien qui sont utilisées par les sciences du vivant (outre ceux déjà mentionnés, on trouve : Julien Delile, René Doursat & Nadine Peyriéras, «Modélisation multi-agent de l'embryogenèse animale»; Paul Villoutreix, «Vers un modèle multi-échelle de la variabilité biologique?»; Jean-Marie Dembele & Christophe Cambier, «Une approche à base d'agents particule pour les processus biologiques d'agrégation»). Les organismes modèles en particulier soulèvent de nombreux problèmes spécifiques : comment choisir, en pratique – et comment devrions-nous choisir en principe ? – entre différents organismes modèles¹⁷ ? Dans les sciences médicales, les modèles animaux sont traditionnellement évalués à l'aune de leur validité, validité s'articulant pour l'essentiel entre validité phénoménologique, validité prédictive et validité de construction, une distinction informelle qui soulève autant de questions qu'elle en résout¹⁸ : alors que la validité phénoménologique concerne souvent le syndrome, la validité prédictive concerne la capacité qu'a le modèle de prédire ce qui se passera dans la cible – ceci correspond souvent aux promesses thérapeutiques du traitement testé –, et la validité de construction s'intéresse à la question de savoir laquelle des deux ressemblances est la bonne, c'est-à-dire laquelle est pertinente et explicative. Un autre problème classique – dit de la «spécificité» des modèles – concerne la manière dont on peut généraliser depuis des expériences menées sur un organisme jusqu'à des conclusions sur l'espèce entière, le genre, la famille, le clade, ou même à tous les êtres vivants (comme c'est le cas en génétique moléculaire selon le mot célèbre de Monod pour qui ce qui est vrai du colibacille est vrai de l'éléphant). Kenneth Schaffner¹⁹ a souligné le caractère polytypique-paradigmatique de tels modèles dans les sciences de la vie – un exemple paradigmatique définit une classe d'organismes individuels

[17] S. Leonelli & R. Ankeny, «Rethinking organisms: The epistemic impact of databases on model organism biology», *Studies in the History and Philosophy of the Biological and Biomedical Sciences*, 43, 2012, p. 29-36.

[18] C. Belzung & M. Lemoine, «Criteria of validity for animal models of psychiatric disorders: focus on anxiety disorders and depression», *Biology of mood and anxiety disorders*, 1, 2011.

[19] K. Schaffner, *Discovery and Explanation in Biology and Medicine*, University of Chicago Press, 1993.

par un ensemble donné de propriétés, de telle manière que tous les individus ne présentent pas toutes les propriétés, et aucune propriété n'est présente dans tous les organismes. Les praticiens grecs avaient forgé des termes tels que « idiopathie » – pour renvoyer à la forme singulière qu'une maladie peut prendre dans un organisme individuel – et « idiosyncrasie » – pour dénoter le mélange singulier d'humeurs caractérisant le tempérament ou la constitution d'un individu. De manière intéressante, Claude Bernard a utilisé ce terme dans un contexte expérimental pour faire référence à des particularités non contrôlées d'un organisme²⁰.

Étant donné que le monde vivant a été façonné par l'évolution, et que les propriétés inhérentes aux êtres qui évoluent par sélection naturelle sont la diversité et la variété, on ne saurait s'attendre à ce que les propriétés universellement partagées à travers les groupes taxonomiques existants soient nombreuses ; par conséquent, la question de l'étendue de ce que nous pouvons apprendre de l'étude d'organismes modèles est centrale. Le philosophe Richard Burian a attiré l'attention sur ces questions ayant trait aux organismes modèles dans un article séminal de 1993, et les recherches ont été poursuivies depuis²¹. Hugh LaFollette et Niall Shanks²² ont élaboré la distinction célèbre entre modèles analogiques causaux et modèles analogiques hypothétiques, et ont remis en question la possibilité que les modèles animaux puissent appartenir à la première catégorie, limitant par conséquent de manière drastique la possibilité de tirer quelque conclusion que ce soit de l'étude d'organismes modèles ; une position largement critiquée par Daniel Steel²³, qui a mis en avant la condition d'une bonne extrapolation à partir d'organismes modèles dans un contexte de recherche biomédicale.

Un travail important reste à faire afin de comprendre la manière dont les organismes modèles interagissent avec les modèles *in vitro*, aussi bien qu'avec les simulations sur ordinateur et les cadres mathé-

[20] C. Bernard, *Introduction à l'étude de la médecine expérimentale*, J.-B. Baillière, 1865.

[21] Par exemple, M.I. Weber, *Philosophy of Experimental Biology*, Cambridge UP, 2005 ; J. Gayon, « Les organismes modèles en biologie et en médecine », in G. Gachelin (dir.), *Les organismes modèles dans la recherche médicale*, PUF, 2006, p. 9-43.

[22] H. LaFollette & N. Shanks, « Two models of models in biomedical research », *Philosophical Quarterly*, 45(179), 1995.

[23] D. Steel, *Across the Boundaries : Extrapolation in Biology and Social Science*, Oxford UP, 2008.

matiques, pour produire de la connaissance. La contribution de Céline Brochot, Marie-Émilie Willemin & Florence Zeman («La modélisation toxico-pharmacocinétique à fondement physiologique : son rôle en évaluation du risque et en pharmacologie») apporte un éclairage passionnant et particulièrement riche sur cette question, en montrant en détail comment la modélisation en pharmacocinétique, s'intéressant au trajet et devenir des xénobiotiques dans un organisme, nécessite la modélisation explicite de processus intervenants à différents niveaux d'organisation (des niveaux moléculaires au niveau organismique) et l'intégration de paramètres obtenus de diverses manières. Il s'y manifeste une diversité de moyens d'obtention des paramètres qui soulève des questions épistémologiques intéressantes tant sur le statut des «données» mobilisées et sur les conséquences de l'utilisation de «données» de nature hétérogène dans le cadre du même modèle, que sur le choix qui doit être fait lorsque plusieurs méthodes sont disponibles pour estimer le même paramètre, choix contraint par des considérations épistémologiques mais également pratiques. Par ailleurs, l'émergence de nouveaux rôles joués par les modèles, la pression croissante de la société à l'encontre de l'expérimentation animale, le développement des OGM pour des objectifs de recherche, ou de nouveaux types de traitements chimiques, sont en train de modifier, rapidement, les conditions dans lesquelles il devient pertinent d'utiliser tel ou tel type de modèle. La contribution de Brochot, Willemin et Zeman apporte également une discussion intéressante sur ce point et montre comment les contraintes pesant sur l'évaluation du risque toxicologique ont récemment mené à une réévaluation importante des modèles traditionnellement utilisés. Pour prendre un autre exemple, l'apparition des produits biopharmaceutiques – c'est-à-dire de macromolécules obtenues par bio-ingénierie par opposition aux molécules obtenues par des méthodes de chimie traditionnelle – défie le monde de l'expérimentation animale. De telles macromolécules sont souvent conçues *in vitro* (grâce à la bio-ingénierie), de manière à avoir une affinité maximale pour leur cible humaine, sur la base d'un calcul *in silico* permettant de choisir parmi des milliards d'autres molécules. Pourtant, parce que la cible chez l'humain n'a pas le même rôle, voire n'existe pas, chez la souris, l'organisme modèle doit être «humanisé» pour l'expérience si l'on veut observer les effets recherchés. Un fil conducteur du volume qu'on va lire est donc l'accent sur l'entrecroise-

ment opératoire de ces différents types de modèles, que ce soit dans les sciences du vivant – pour lesquelles les organismes modèles jouent un rôle crucial – et dans les sciences sociales.

Pour clore cette introduction destinée à rendre compte de certaines problématiques inhérentes à la philosophie de la modélisation et de la simulation, on avancera une idée exprimée par un terme de prime abord ambigu, mais sans doute indispensable : nous souhaiterions que l'ensemble formé des deux tomes de *Modéliser & simuler*, par sa vertu tendancielle synoptique due à ses 1 700 pages et 56 contributions (ce deuxième tome symbolisant bien évidemment une clôture qui n'est que provisoire), contribue à la prise de conscience – sans doute davantage du lectorat non praticien de ces outils que de leurs concepteurs et utilisateurs – et à la prise en charge épistémologique de ce qu'on voudrait nommer ici un *scepticisme computationnel*. Par ce terme – que l'on pense pouvoir ranger sous la catégorie des «valeurs épistémiques» telles que les pense notamment Hilary Putnam²⁴ –, on évoque l'idée que les démarches modélisatrices et simulatrices, principalement les actions et projections *in silico*, s'inscrivent pleinement dans une épistémologie du doute rationnel, pilier intangible de la démarche scientifique. Or, la puissance calculatoire des ordinateurs, la diversité des modes de simulation, l'amplification du phénomène «boîte noire» impliquée par ces deux facteurs, tout cela, entre autres, concourt à un possible effet de «sidération» devant l'effectivité de ces expériences *in silico*, lesquelles, par leur potentielle multiplicité des combinaisons paramétriques, et des multiples pondérations des variables que l'on est en mesure d'appliquer, peuvent devenir une fin en soi, une fuite en avant dans ce qu'on appelle trivialement le virtuel. Si la carte devient le territoire, fût-ce asymptotiquement, quels bénéfices épistémiques peut-on attendre et quel crédit accorder à ces connaissances ? C'est un défi grandissant pour les sciences computationnelles des systèmes (les plus) complexes, qui doivent affronter, outre la question classique des incertitudes quant aux systèmes étudiés, celle des méta-incertitudes, c'est-à-dire des incertitudes non seulement sur l'objet étudié mais sur sa transformation en un objet à la fois intermédiaire et tiers, l'objet simulé ou, si l'on peut dire, une concrétude dont l'épure est abstraite. Les simulations multi-échelles

[24] *Fait/Valeur : la fin d'un dogme et autres essais* [2002], Éditions de l'Éclat, 2004.

et/ou multi-aspects de phénomènes hétérogènes et composites sont, et produisent, des objets de connaissance inédits. Ici, peut-être plus qu'ailleurs en sciences, ce scepticisme computationnel a du sens.

Organisation de l'ouvrage

Ce second tome de *Modéliser & simuler* paraît un an après le premier. Avec cette parution, il s'agit de poursuivre l'entreprise de mise en regard des travaux de recherche les plus avancés et les plus contemporains sur la nature et sur l'évolution récente des modèles, des simulations et de leurs apports tant techniques que méthodologiques et épistémologiques. Avec une diversité toujours plus grande des contributeurs et des disciplines de recherche, ce tome 2 a pour ambition non de dupliquer mais de compléter et d'amplifier les nombreuses perspectives déjà ouvertes par le tome 1. Notre choix, dans ce tome 2, a donc consisté à mettre en valeur certaines disciplines ou certaines approches peu ou pas du tout représentées dans le tome 1.

Les contributions de la partie épistémologique du premier tome posaient déjà un grand nombre de questions générales au sujet des avancées récentes des pratiques de modélisation et de simulation, dont en particulier les suivantes : comment lier et distinguer mathématisation et modélisation ? Comment appréhender les similitudes et les différences entre modèles mathématiques et modèles computationnels ? Chercher des modèles, est-ce encore chercher des lois ? Dans quelle mesure les simulations sur ordinateur peuvent passer pour des substituts de l'expérience ? Quel impact les nouvelles pratiques de simulation devraient-elles avoir sur notre manière de faire de la philosophie des sciences ? Quel effet le développement d'un modèle peut-il avoir sur le test puis sur l'accréditation plus large d'une théorie ? Comment penser les phénomènes d'émergence dans les modèles computationnels ? Complexifier un modèle, est-ce s'interdire de comprendre ce qu'il modélise ? Quels sont les concepts susceptibles de qualifier et d'explicitier la manière inédite dont les simulations multi-échelles et/ou multi-aspects permettent aujourd'hui la simulation de phénomènes hétérogènes et composites ?

Dans la première partie de ce second tome (« Épistémologies de la modélisation et de la simulation »), un premier ensemble de contributions complète cette liste d'interrogations d'ordre général. Les questions suivantes y sont posées : dans quelle mesure l'essor contemporain

des simulations complexes et intégratives impose-t-il une extension de l'épistémologie et de ses objets pour lui faire prendre la forme d'une épistémologie dite générique? En ce qui concerne les simulations composites, doit-on considérer qu'elles introduisent véritablement un nouveau style de raisonnement scientifique? Et quel sens donner alors au terme de style? Comment la diversité des approches de modélisation numérique du climat met-elle particulièrement en évidence les tensions et les indécisions – présentes chez les modélisateurs eux-mêmes – entre la modélisation simple (avec paramétrisations) et la modélisation complexe (avec déficit de compréhension analytique)? Ce premier ensemble de chapitres²⁵ permet donc de préciser et de qualifier un peu plus encore les apports généraux – tant pour la connaissance que pour la philosophie et la sociologie de la connaissance, c'est-à-dire pour l'épistémologie au sens large – des formes nouvelles de modèles et de simulations dans les sciences.

Toujours dans la première partie, un second ensemble de chapitres étudie un certain nombre d'apports épistémologiques plus spécifiques. Ces apports spécifiques des modèles et des simulations peuvent d'abord intervenir dans un champ disciplinaire précis²⁶. Les questions suivantes y sont abordées : en physique, quels sont les caractères qui rendent une simulation numérique physiquement utile? Ou encore, dans les systèmes complexes vivants, comment la modélisation per-

[25] 1. Apports généraux des modèles et des simulations : chapitre 1, Léo Coutellec & Anne-Françoise Schmid, « Modélisation, simulation, expérience de pensée : la création d'un espace épistémologique. Regards à partir des œuvres de Vernadsky et de Poincaré » ; chapitre 2, Stéphanie Ruphy, « Simulations numériques de phénomènes complexes : un nouveau style de raisonnement scientifique? » ; chapitre 3, Hélène Guillemot, « Comprendre le climat pour le prévoir? Sur quelques débats, stratégies et pratiques de climatologues modélisateurs ».

[26] 2. Apports spécifiques des modèles et des simulations (en physique, en biologie, dans les transferts interdisciplinaires et aux interfaces génériques des systèmes complexes, en architecture) : chapitre 4, Sara Franceschelli, « La déduction mathématique et la théorie physique. Exemple de solutions numériques physiquement utiles » ; chapitre 5, Matteo Mossio & Leonardo Bich, « La circularité biologique : concepts et modèles » ; chapitre 6, Johannes Martens, « Le modèle de l'agent maximisateur en biologie » ; chapitre 7, Denis Phan, « La modélisation à base d'agents et la simulation par systèmes multi-agents de sociétés d'agents intentionnels » ; chapitre 8, Christian Girard, « L'architecture, une dissimulation. La fin de l'architecture fictionnelle à l'ère de la simulation intégrale » ; chapitre 9, Philippe Morel, « Géométrie polymorphe et jeux de langages formels : sur l'usage de la géométrie et des modèles dans l'architecture contemporaine ».

met-elle d'assumer la question épineuse de la circularité? Ces apports plus spécifiques des modèles et des simulations peuvent ensuite se manifester non pas dans une discipline unique mais entre disciplines : tantôt donc dans les transferts conceptuels et théoriques entre disciplines, tantôt au niveau des propriétés génériques de certaines catégories de systèmes complexes. Ainsi, peut-on développer une recherche féconde à partir des questions suivantes : quelle est la portée exacte de l'analogie d'un modèle de comportement d'agent économique dans la compréhension de certains processus proprement biologiques? Ou encore, dans quelle mesure le recours à la simulation informatique d'agents intentionnels peut permettre d'aborder plus concrètement des questions de principe – puis de réalisabilité de systèmes de simulation – dans des problématiques analogues mais plus développées de simulations de systèmes sociaux?

Enfin, les deux dernières contributions de cette partie épistémologique portent sur l'architecture, discipline mixte et charnière en elle-même, car pouvant être caractérisée à la fois comme science humaine, science de la conception et ingénierie. On y voit que la diffusion précoce et aujourd'hui extrêmement avancée des nouvelles techniques de simulation intégrative accroît les tensions et les concurrences – aux conséquences parfois très concrètes – entre les usages tantôt descriptifs, tantôt esthétiques, tantôt prescriptifs, voire idéologiques, de tel ou tel modèle ou encore de telle ou telle simulation. Plus radicalement et plus philosophiquement en ce sens, cette diffusion à marche forcée accroît aussi les tensions entre certaines manières mêmes de concevoir préférentiellement la pratique des modèles et des simulations en architecture ou encore directement entre certains formalismes ou même encore entre certains procédés de composition de formalismes ainsi même qu'entre certaines manières de concevoir le passage – ou le retour – vers la réalisation, la fabrication et de plus en plus aujourd'hui vers l'impression 3D. Ainsi plusieurs questions sont abordées ici : l'essor tous azimuts de la simulation dans l'architecture ne menace-t-il pas directement le fondement même de cette discipline, dès lors que la simulation intervient désormais à plus d'un titre et à bien des niveaux en architecture? Qu'apporte la machine à états discrets aux approches mathématiques traditionnelles en architecture? Quelle vision nouvellement normative – et peut-être aussi politique du monde – la prise en compte effective et accrue des pluralités des géométries disponibles,

c'est-à-dire la prise en compte du polyformalisme natif des simulations intégratives, impose-t-elle ? S'agit-il là d'une révolution qui serait à la fois technique et épistémologique ou bien simplement d'une évolution ?

En ce qui concerne la seconde partie («Pratiques de la modélisation et de la simulation»), le tome 1 y proposait classiquement trois sections disciplinaires : «Physique, sciences de la Terre et de l'Univers», «Sciences du vivant» et «Sciences sociales». Ici, elle conserve la fonction de donner la parole avant tout aux praticiens eux-mêmes : ses visées restent donc davantage méthodologiques qu'épistémologiques, même si l'épistémologie n'y est pas absente (au moins au sens où ces pratiques exhibent toujours des manières de «faire modèle»). Les pratiques y sont abordées par les modélisateurs eux-mêmes avec le double souci d'informer sur des techniques récentes et de proposer une mise en perspective comparative et/ou historique des techniques qu'ils adoptent. Mais, pour le présent ouvrage, nous avons fait là aussi le choix de compléter l'éventail des disciplines comme des domaines transverses présentés. Dès lors, il ne semblait plus possible de reprendre tout à fait la catégorisation disciplinaire précédente et ce sont des sous-parties plus amples qui sont ici proposées : «Modèles matériels et modèles computationnels en physique et en chimie», «Sciences de la vie : flux, dynamiques, formes et échelles», «Ingénierie et sciences de la conception».

Nous nous devons tout d'abord de compléter les contributions en physico-chimie par deux aspects qui nous paraissaient manquer dans le tome 1. Tout d'abord, il s'agissait de témoigner de la persistance d'une pratique séculaire en physique, aujourd'hui toujours vivante bien que souvent éclipsée par le considérable essor des modèles formels puis des simulations sur ordinateur : le recours persistant et – il faut le dire – toujours inventif à des modèles matériels pour servir à des protocoles expérimentaux de substitution²⁷. Rappelons que la crédibilité de ces protocoles expérimentaux de substitution se fonde sur l'analogie formelle entre certaines lois propres à différents domaines de la physique. Si la pratique en est séculaire, la question que pose aujourd'hui ce genre de pratique est inédite puisqu'elle porte désormais sur la concurrence directe entre approches par modèles formels et simulations à base computationnelle d'une part et approches par

[27] Chapitre 10, Thierry Foglizzo, «De l'observation d'une fontaine à l'explosion des étoiles. Un modèle analogique complémentaire des simulations numériques».

modèles matériels d'autre part. Avoir aujourd'hui encore des raisons, comme physicien, de recourir à des modèles matériels, n'est-ce pas être capable de comprendre et d'expliquer, par contraste, ce que continue à apporter à l'enquête de connaissance une telle pratique à la différence de ce que peuvent apporter les modèles formels et les simulations sur ordinateur les plus contemporains ? N'est-ce pas être à même de mettre au jour certaines limites des nouvelles pratiques de modélisation et de simulation à l'ère computationnelle ? Un autre aspect, plus exactement un autre domaine essentiel de la physico-chimie nous semblait également manquer dans le tome 1 : ce qu'il est convenu d'appeler la chimie computationnelle. Deux chapitres s'y consacrent ici pleinement. Une contribution d'envergure²⁸ retrace tout d'abord dans le détail l'esprit des techniques ainsi que les apports et les limites de diverses approches de modélisation et de simulation, cela quand la chimie va de l'étude des structures électroniques jusqu'à celles des protéines et des systèmes vivants en passant par les différentes échelles intermédiaires. Même si elle est écrite par un chimiste de formation devenu finalement épistémologue, la deuxième contribution²⁹ nous a semblé être plus à sa place dans la partie « pratiques » plutôt que dans la partie « épistémologies » de l'ouvrage. En exposant des cas précis d'évolution et de discussions de techniques computationnelles en chimie des protéines, cette contribution nous semble en effet prolonger utilement la contribution synthétique précédente en exemplifiant certaines questions soulevées et en montrant leur dimension inséparablement méthodologique (compromis techniques, choix de formalismes, variétés et hétérogénéités des ressources, diversité de leurs formats et de la qualité des données) et d'épistémologie appliquée.

Alors que plusieurs contributions du tome 1 avaient montré, d'une part, l'importance croissante en biologie des approches de simulation *bottom-up* centrées sur les éléments individuels et, d'autre part, des simulations intégratives, pluriformalisées et fondées sur des sous-modèles de processus hétérogènes (mécaniques, chimiques, électriques, etc.) et à fonctions épistémiques eux-mêmes parfois hétéro-

[28] Chapitre 11, Gilberte Chambaud, « La modélisation en chimie : des atomes aux systèmes complexes ».

[29] Chapitre 12, Frédéric Wieber, « Contraintes et ressources computationnelles dans l'histoire de la chimie des protéines (1960-1980) ».

gènes (modèles phénoménologiques-descriptifs, mécanistes-explicatifs, numérisation de scènes, etc.), les contributions de la partie 2 de ce tome 2 confirment ces analyses et vont même un pas plus loin en montrant que plusieurs types de techniques de modélisation et de simulation à visée intégrative, multi-aspectuelles et multi-échelles sont à l'étude et commencent à apporter des résultats notables. Dans ce contexte, il nous a semblé décisif de proposer d'abord des contributions qui posent à nouveaux frais la question liminaire – certes ancienne en biologie théorique – de la pertinence des approches de physique et de biophysique en biologie de modélisation³⁰. C'est le cas notamment pour le traitement du difficile problème du rôle des propriétés physiques de l'ADN et du chromosome dans l'expression des gènes, l'approche multi-échelles et multi-aspects proposant une contribution importante à la compréhension des mécanismes de la régulation inséparablement génétique et épigénétique des organismes vivants³¹. Le travail de modélisation du processus de respiration qui est ici présenté illustre de manière exemplaire la nécessité dans laquelle les chercheurs se trouvent souvent aujourd'hui de décomposer un modèle mathématique initial en le discrétisant, cela de manière à permettre une pluriformalisation opérationnelle et calibrable, c'est-à-dire une articulation pas à pas du comportement de ce modèle avec le comportement d'autres modèles (dont, en l'espèce, un modèle de simulation réaliste de morphologie de l'arbre pulmonaire et un modèle de simulation de la morphologie nasale)³². Car cette question prend une forme renouvelée aujourd'hui : comme on le voit de manière éclatante dans le présent ouvrage, une approche de modélisation intégrative particulière se doit en effet d'apporter des réponses opérationnelles, techniques et au moins locales à cette question par ailleurs massive – et sans doute mal posée dans sa généralité – de la continuité, de la non-continuité ou encore de la réductibilité entre phénomènes physiques et phénomènes biologiques. La pratique contemporaine de modélisation en pharmacocinétique montre sa capacité à dépasser les approches

[30] Chapitre 15, Laurent Pujo-Menjouet, « Théorie sur l'apparition de structures de Turing pour les biologistes, ou éclaircissements sur deux intuitions ingénieuses ».

[31] Chapitre 16, Pascal Carrivain, Jean-Marc Victor & Annick Lesne, « Modéliser et simuler les chromosomes : propriétés physiques et fonctions biologiques ».

[32] Chapitre 14, Sébastien Martin & Bertrand Maury, « Notion de résistance de l'arbre pulmonaire bronchique dans la ventilation respiratoire humaine ».

compartimentales antérieures et à intriquer – dans une simulation toujours plus réaliste – une diversité de processus hétérogènes comme une diversité de formats de données³³. À côté des aspects de forme, de dynamique de croissance ou de morphogenèse des systèmes vivants³⁴, il se trouve aussi que les approches traditionnelles des phénomènes de flux ou encore des phénomènes de taxie³⁵ par modèles mathématiques sont considérablement modifiées et enrichies par ces approches de modélisation et de simulation non seulement intégratives mais de fait intégrées. La variabilité biologique elle-même, base des approches biométriques, semble aussi pouvoir être plus précisément étudiée dans ses causes au moyen des approches de modélisation multi-échelle³⁶. Un tel déploiement de possibilités nouvelles – en termes de techniques de modélisation, de transfert comme d'intégration de formalismes ou encore d'algorithmes divers – engage enfin certains praticiens à prendre acte du dépassement définitif des approches de modélisation trop unilatérales du XX^e siècle (modélisations mathématiques, cybernétiques ou numériques), à jeter de nouveaux ponts conceptuels et opérationnels entre sciences du vivant et sciences de la conception et à travailler à la constitution d'une discipline transverse et mixte qu'ils nomment une *ingénierie morphogénétique*³⁷.

Il n'est d'ailleurs pas insignifiant que, pour la dernière section sur les pratiques, nous avons justement tenu à offrir une place de choix à l'ingénierie et aux sciences de la conception. Si l'adoption de la simulation numérique a bien entendu été décisive pour l'arrivée très précoce dans les bureaux d'études des différentes pratiques de conception assistée par ordinateur (CAO), cela dès les années 1950-1960, l'adoption ultérieure dans ce même contexte des différentes approches de modélisation et de programmation par modules puis par objets a été

[33] Chapitre 13, Céline Brochot, Marie-Émilie Willemin & Florence Zeman, « La modélisation toxico-pharmacocinétique à fondement physiologique : son rôle en évaluation du risque et en pharmacologie ».

[34] Chapitre 17, Julien Delile, René Doursat & Nadine Peyriéras, « Modélisation multi-agent de l'embryogenèse animale ».

[35] Chapitre 20, Jean-Marie Dembele & Christophe Cambier, « Une approche à base d'agents particule pour les processus biologiques d'agrégation ».

[36] Chapitre 19, Paul Villoutreix, « Vers un modèle multi-échelle de la variabilité biologique ? ».

[37] Chapitre 18, René Doursat, Hiroki Sayama & Olivier Michel, « L'ingénierie morphogénétique : modèles de processus dynamiques pour la morphogenèse ».

également extrêmement rapide à partir des années 1970. Il est donc sans doute essentiel que l'épistémologie veille et s'informe aussi au sujet de l'évolution des techniques et des pratiques dans ce domaine, sans laisser cette tâche à la seule philosophie des techniques. Il paraît par exemple très instructif et tout à fait significatif que ces nouvelles approches facilitent considérablement la conception de nanosystèmes. Dans la contribution que nous avons choisie sur ce sujet³⁸, sont exposées de manière pondérée et articulée la véritable nature, la véritable fécondité ainsi que les limites d'un pan de ce que certains ont appelé un peu vite d'un terme médiatique la convergence NBIC (Nano-Bio-Info-Cognition). On y voit que, comme on peut s'y attendre pour des phénomènes non visibles à l'œil nu, la simulation de conception y joue certes un rôle décisif mais surtout qu'une telle simulation ne peut pas par principe être aussi simple que les simulations traditionnellement utilisées en CAO des macrosystèmes techniques : à cause de l'échelle adoptée, il leur est nécessaire de prendre en compte certaines interactions entre lois de la physique, ainsi qu'entre lois de la physique et lois de la chimie, interactions qui à l'échelle des macrosystèmes ont jusque-là été considérées comme négligeables. Le déploiement de simulations intégratives à base de modèles multiples et pluriformalisés s'y révèle donc comme d'autant plus justifiée. Ces simulations étant cependant particulièrement complexes – comme maintes contributions des deux tomes de *Modéliser & simuler* l'ont désormais amplement démontré – parce que n'étant pas contrôlées par une théorie mathématique préalable de leur comportement de convergence, cela à la différence des simulations numériques, il en résulte que la question de leur robustesse comme celle de leur calibration puis de leur validation ne sont nullement triviales. Une deuxième contribution montre qu'il n'est pas toujours nécessaire de passer à l'échelle nano pour avoir à résoudre des problèmes d'interaction entre lois hétérogènes et donc des problèmes d'interfaçage entre modèles hétérogènes pour la modélisation d'objets composites³⁹. Même dans le cas de la conception sur ordinateur de macrosystèmes, certains problèmes d'interfaçage entre formats de

[38] Chapitre 21, Stéphane Redon, « Modélisation et simulation adaptatives pour les nanosciences ».

[39] Chapitre 22, Frédéric Boulanger, « Modélisation multiparadigme pour la conception des systèmes ».

données peuvent apparaître dans la mesure où le niveau d'abstraction des sous-modèles à intriquer est variable. La recherche d'un niveau sémantique de partage joue ici un rôle opérationnel crucial et très similaire – bien qu'à portée épistémique différente – au rôle que joue la recherche d'ontologies commune et d'interfaçage pour la simulation multi-aspectuelle ou multi-échelle, que ce soit en biologie intégrative ou encore en simulations sociales. La science de la programmation enfin fait partie des sciences de la conception à un double titre car elle participe de la conception d'artefacts qui sont des objets aux fonctions épistémiques immédiatement doubles : en tant que symboles, ce sont des objets qui portent la fonction de référer à un système réel ou fictif (ou encore projeté, dans le cadre des sciences de la conception) dont il existe ou non des théories ou des lois de comportement. En tant qu'objets réalisés partie par partie et dont les propriétés physiques sont recherchées pour elles-mêmes – et donc pour leur opérationnalité physique –, mais aussi en tant qu'objets qui sont contrôlés par une conception préalable sur le papier, ce sont bel et bien des fruits d'un travail d'ingénierie. Or, avec l'essor actuel du calcul parallèle, du calcul en grille et de la programmation pour processeurs graphiques en vue du traitement massif et rapide de données en grand nombre, le tournant algorithmique des modèles subit lui-même une avancée voire une inflexion dans sa propre inflexion. Le recours croissant aux simulations stochastiques parallèles (en climatologie, en biologie intégrative, en modélisation des tremblements de terre, des tsunamis ou encore en finance), ouvre la voie à de nouvelles techniques de simulation massives comme aussi à de nouvelles interrogations sur les fondements conceptuels des algorithmes nouvellement développés⁴⁰.

[40] Chapitre 23, David R.C. Hill, « Simulations stochastiques et calcul à haute performance : la "parallélisation" des générateurs de nombres pseudo-aléatoires ».