

## Le tournant computationnel et l'innovation théorique

Anouk Barberousse, IHPST, CNRS - Université Paris 1 - Ecole normale supérieure  
Cyrille Imbert, LPHS - Archives Poincaré, CNRS - Université Nancy 2

<version avant les corrections sur épreuves>

<Merci de se référer à la version publiée pour citer ce texte>

Barberousse, Anouk, et Cyrille Imbert. « Le tournant computationnel et l'innovation théorique ». In *Précis de philosophie de la physique*, édité par Soazig Le Bihan. Paris: VUIBERT, 2013.

Depuis la seconde moitié du XX<sup>ème</sup> siècle, la physique connaît un « tournant computationnel » d'une importance considérable. Le calcul numérique s'est trouvé considérablement facilité par la construction et la diffusion des ordinateurs à usage scientifique ; est de plus apparue une nouvelle pratique scientifique, celle des simulations numériques, qui a profondément modifié le développement de certaines branches de la physique. Certains ouvrages historiques ou sociologiques ont déjà été consacrés à ce bouleversement, comme notamment Galison (1997) ; cependant, l'étude philosophique des effets de ce bouleversement sur la science n'en est qu'à ses débuts (Rohrlich 1990, Winsberg 1999, 2001, Humphreys 2004, Frigg et al. 2008, à paraître).

L'ampleur du tournant computationnel ne peut manquer d'avoir des répercussions épistémologiques de grande importance ; cependant, leur nature précise reste encore à déterminer. Deux thèses sont envisageables à propos de la nature de ce bouleversement. Selon la première, d'obédience continuiste, l'augmentation des capacités de calcul constitue un changement purement quantitatif : les ordinateurs permettent de réaliser beaucoup plus vite les calculs nécessaires à la prédiction et l'explication des phénomènes ou à la confirmation des théories car la solution (numérique) de certaines équations, qui était purement et simplement inaccessible, peut désormais être calculée. Ce changement quantitatif au sein de la science n'appelle pas de nouvelles analyses philosophiques, comme le montrent Frigg and Reiss (2009).

Selon la seconde thèse en revanche, défendue par Paul Humphreys (2004) et d'obédience discontinuiste, le changement causé par l'usage massif d'ordinateurs en physique n'est pas seulement quantitatif, mais également qualitatif. Selon lui, la nature même de l'activité de recherche en physique est transformée par l'utilisation de ces nouveaux outils, qui ne sont pas seulement de puissantes aides au calcul numérique, mais bien un moyen de pratiquer un autre type de science, une science intrinsèquement *computationnelle*.

Il n'est pas question dans cet article de trancher de façon générale entre ces deux thèses. Leur évaluation précise nécessite en effet d'aborder des questions variées comme le rôle des humains dans la science (est-il le même dans la science computationnelle que dans la période précédente ?), le statut de l'observation à l'ère des capteurs et du traitement automatique des données (une perception visuelle et une donnée expérimentale produite par un grand appareil de mesure automatisé sont-elles des observations dans le même sens ?) ou

la nature quasi-expérimentale de l'étude des phénomènes au moyen de simulations (qu'ont en commun l'étude d'un modèle par du calcul littéral fait à la main et son exploration numérique ?). Et, selon que l'on aborde telle ou telle de ces questions, la réponse à la question (continuisme ou discontinuisme ?) peut varier.

Notre but dans cet article, par-delà les professions de foi révolutionnaires ou conservatrices à propos de la science computationnelle, est d'identifier et d'analyser certains changements qui sont causés au sein de l'activité de théorisation par l'usage des ordinateurs, à la lumière des contraintes qui pèsent sur le développement d'une activité théorique féconde. Plus précisément, nous visons à illustrer la thèse selon laquelle le choix des modèles et des hypothèses étudiés dans le cadre de la science computationnelle ne se fait plus selon les mêmes modalités qu'auparavant et peut pour cette raison ne plus correspondre aux descriptions que des auteurs comme Kuhn ou Cartwright donnent de la dynamique de la science. A travers cette analyse, nous voulons montrer que la science computationnelle ouvre une ère en partie nouvelle dans laquelle l'activité de théorisation, moins contrainte, peut-être plus audacieuse. Nous suivons donc Humphreys lorsqu'il affirme que le changement introduit par l'apparition des ordinateurs n'est pas seulement quantitatif, mais nous cherchons à approfondir et préciser son analyse.

En résumé, nous proposons de défendre la thèse suivante : la difficulté rencontrée dans l'exploration des modèles contraint drastiquement l'activité scientifique et permet d'en expliquer certains traits, dont son conservatisme ; dans l'ère computationnelle, même si la contrainte demeure, la science peut être moins conservatrice parce qu'elle possède davantage de moyens de calcul ; il s'agit là d'une discontinuité du point de vue de l'activité théorique puisque les scientifiques peuvent aujourd'hui envisager de développer des branches de recherche (des hypothèses, des modèles) qu'il serait impensable d'explorer sans ordinateurs : non seulement la science va plus vite (accélération quantitative), mais elle peut aussi prendre des directions différentes (différences qualitatives).

Dans la première section, nous présentons comment Kuhn et Cartwright décrivent et expliquent, en s'opposant à Popper, les caractéristiques de la dynamique de la science et de l'activité de théorisation, et notamment leur caractère conservateur. Dans la deuxième section, à la suite des analyses de Humphreys, nous montrons que leur description est incomplète parce qu'elle ne tient pas compte des contraintes imposées par les limitations du savoir mathématique disponible à une époque donnée et par les ressources technologiques qui s'y rapportent. En effet, selon nous, la complexité des tâches que doivent accomplir les scientifiques dans les calculs qu'ils effectuent sur les représentations mathématiques est responsable d'une large part du conservatisme de l'activité scientifique. Cette analyse nous permet de montrer que la discontinuité entre la science computationnelle et la science antérieure est de deux types : faible quand la science computationnelle développe des traditions de recherche déjà existantes et que la discontinuité est essentiellement quantitative, et forte quand elle permet d'en créer de nouvelles. La dernière partie de l'article illustre la thèse selon laquelle apparaissent aujourd'hui des pratiques scientifiques qui violent l'orthodoxie des règles conservatrices de la modélisation traditionnelle, notamment à partir d'exemples de simulations reposant sur l'utilisation d'automates cellulaires.

## **1. La dynamique de la science, le conservatisme scientifique et ses explications traditionnelles**

Deux types de tâche peuvent être distingués en philosophie des sciences. Le premier consiste à identifier les buts de la science et à déterminer à quelles conditions il est légitime

de considérer que ces buts sont atteints. De tels buts sont par exemple l'identification de régularités expérimentales, de théories ou d'hypothèses satisfaisantes, la prédiction des phénomènes, et leur explication. Ces buts ne peuvent pas toujours être réalisés de façon satisfaisante à une époque donnée ; c'est pourquoi le philosophe des sciences doit également s'attaquer à un second type de tâche : étudier la science du point de vue de sa dynamique. Cela consiste à caractériser la façon dont les scientifiques tentent, au fur et à mesure que la science progresse, de se rapprocher de l'accomplissement de ces buts. C'est à ce type de tâche qu'appartiennent les analyses qui suivent, car elles visent à dégager les caractéristiques de la dynamique de la science computationnelle.

Dans cette section, nous commençons par rappeler certaines descriptions philosophiques majeures de la dynamique de la science afin de mieux repérer dans un deuxième temps, par contraste, en quoi la science computationnelle s'écarte du régime précédant l'utilisation des ordinateurs. Nous présentons tout d'abord brièvement la description de Popper, puis celles de Kuhn et de Cartwright, en nous attachant à souligner les éléments qui nous serviront dans les sections 4 et 5 à analyser la science computationnelle.

D'après la conception poppérienne (voir par exemple Popper 1935, 1963), la dynamique de la science est cyclique et on peut y distinguer deux moments particulièrement importants. Dans le premier, un scientifique propose une conjecture, qui est d'autant meilleure qu'elle est audacieuse et possède un contenu empirique riche. Cela signifie qu'elle doit permettre d'effectuer des prédictions nombreuses, et par là même d'envisager des tests variés de sa validité. Ainsi l'attitude scientifique recommandée par Popper est-elle d'adopter des conjectures toujours plus risquées. Dans le second moment, les scientifiques tentent de réfuter la conjecture.

Lorsqu'une hypothèse a été réfutée, l'attitude scientifique adéquate n'est pas d'essayer de la sauver en l'adaptant aux résultats des tests, mais de revenir à la première étape afin de choisir une nouvelle hypothèse qui survive à des tests plus nombreux. Les qualités associées à une telle pratique sont ainsi la créativité et l'inventivité, le refus du conservatisme, l'obstination méticuleuse, et enfin le courage intellectuel, requis pour mettre systématiquement en péril ses créations les plus chères. La critique ouverte et la mise à l'épreuve incessante de toutes les hypothèses scientifiques qui composent les théories sont, selon Popper, les caractéristiques majeures de l'activité scientifique. Par conséquent, les révolutions scientifiques sont pour lui des événements qui diffèrent seulement par degré, et non par nature, de l'activité scientifique quotidienne. Pour reprendre l'expression de Lakatos (1994, p. 3), les sciences sont, selon Popper, l'objet d'une « révolution permanente ».

Kuhn (1970) a par la suite défendu une description plus conservatrice de la dynamique de la science. Selon lui, les révolutions scientifiques sont séparées par des périodes de science normale pendant lesquelles l'activité scientifique consiste à résoudre, au moyen des théories disponibles, les problèmes qui peuvent l'être. Certains problèmes doivent donc être négligés, à savoir ceux qu'il semble difficile de traiter dans le cadre théorique accepté. La science, et en son sein l'activité de théorisation, est donc une activité conservatrice à double, voire à triple titre. L'activité scientifique normale n'a tout d'abord pas pour but de remettre en question les théories disponibles. De plus, les problèmes sélectionnés pour être étudiés diffèrent peu des problèmes paradigmatiques déjà résolus. Finalement, la façon dont ces problèmes sont posés et étudiés (c'est-à-dire la façon dont les systèmes naturels sont représentés grâce au formalisme mathématique) est contrainte par les modes de résolution typiques déjà connus. Ainsi, tant l'activité de théorisation générale, c'est-à-dire le choix des hypothèses, que ses aspects particuliers, c'est-à-dire le choix des problèmes et des méthodes de résolution, sont-elles conservatrices et contraintes par l'état des pratiques scientifiques.

Dans la perspective de Kuhn, plusieurs explications du conservatisme scientifique peuvent être données. L'apprentissage d'une théorie est une activité longue et cognitivement

difficile qui a pour but d'une part d'appréhender les phénomènes pertinents au travers de ses concepts, et d'autre part de construire des explications s'inspirant de la résolution des cas paradigmatiques dans son cadre propre (Kuhn 1970, p. 257, post-script). Kuhn insiste particulièrement sur le fait que les activités d'apprentissage et de recherche passent par la fréquentation et la réutilisation de modèles spécifiques déjà bien connus et non par l'apprentissage de la théorie sous une forme abstraite et générale. Ce ne sont donc pas tous les modèles compatibles avec la théorie mais bien ces modèles spécifiques, partagés par une communauté, qui guident avant tout la recherche (*ibid*, pp. 74-77 et pp. 254-255).

En outre, le raffinement du savoir a pour effet la professionnalisation, qui est inséparable d'une résistance au changement (*ibid*, p. 98). Il ne saurait donc être question, pour les scientifiques individuels, de changer souvent de cadre conceptuel, surtout lorsque leur travail dans le cadre du paradigme courant a été bénéfique à leur carrière.

L'explication principale du conservatisme scientifique est cependant que les pratiques que nous venons de passer en revue permettent, aux yeux de Kuhn, de rendre compte du succès de la science<sup>1</sup> – or, comme il le remarque dès le début de la préface à la *Structure des révolutions scientifiques*, c'est autant le succès de la science que sa nature propre qu'il s'agit d'expliquer (*ibid*, p. 7). Selon Kuhn, l'exploration d'un paradigme et de ses modèles spécifiques est avant tout une promesse de succès. La capacité à identifier des ressemblances entre des situations déjà étudiées et l'habileté à étudier avec succès les phénomènes à travers le prisme de modèles familiers sont donc cruciales car elles permettent aux scientifiques de se lancer dans la résolution de problèmes nouveaux avec une bonne probabilité de succès (*ibid*, p. 46). La réutilisation de situations familières a pour effet que tous les problèmes envisageables ne sont pas étudiés : seuls ceux qui correspondent aux modèles couramment utilisés pour *représenter* les systèmes naturels, ou qui sont susceptibles d'être résolus dans les *formalismes* connus, ou à partir de *techniques* déjà utilisées, sont sélectionnés (*ibid*, p. 139). Le conservatisme est ainsi une méthode fiable pour sélectionner les problèmes et les résoudre à partir de succès passés de telle sorte que seul le manque d'ingéniosité est considéré comme responsable de l'échec (*ibid*, p. 63). Une dernière raison du succès du conservatisme est la difficulté de l'entreprise scientifique, qui nécessite l'approfondissement des hypothèses déjà en cours d'étude et non la dispersion désordonnée des recherches.

Kuhn n'est pas le seul défenseur de la thèse selon laquelle la science est et doit être une activité en grande partie conservatrice, notamment pour ce qui concerne le choix des modèles qui prédisent et expliquent les phénomènes naturels. Nancy Cartwright (1983) a elle aussi souligné le conservatisme des scientifiques pour ce qui est de la construction des modèles. Elle rappelle par exemple que les étudiants en mécanique quantique apprennent d'abord à manipuler les hamiltoniens<sup>2</sup> dans un petit nombre de situations fortement idéalisées, et à étendre ensuite la portée de ces hamiltoniens à d'autres situations, par combinaison des cas idéalisés (Cartwright, 1983, pp. 136 sq.). « Pourquoi y a-t-il si peu d'hamiltoniens de base ? », se demande-t-elle. Etant donné les thèses qu'elle défend par ailleurs sur la complexité de la nature (voir Cartwright, 1999), on pourrait s'attendre à ce qu'elle réponde à cette question en affirmant que le petit nombre d'hamiltoniens de base est le résultat d'une stratégie concertée pour développer la connaissance des phénomènes à partir de méthodes éprouvées, et ce en dépit de la complexité de la nature. Il n'en est rien. Elle déclare ainsi :

---

<sup>1</sup> Voir aussi Bird, 2000, pp. 273 sq. sur ce point.

<sup>2</sup> En mécanique quantique, l'équation de Schrödinger décrit l'évolution d'un système dont les énergies cinétique et potentielle sont représentées par un objet mathématique (un opérateur) appelé le « hamiltonien » du système.

« Les phénomènes à décrire sont d'une complexité sans fin. Pour qu'une recherche collective puisse être poursuivie, un groupe doit être capable de délimiter le genre de modèles qui peuvent s'affronter. S'il existait plusieurs façons pour une communauté de recherche particulière de raccrocher les phénomènes à des constructions intellectuelles, l'activité de modélisation serait complètement chaotique, et il n'y aurait aucun consensus sur les problèmes communs sur lesquels travailler » (Cartwright, 1983, pp. 143-144, notre traduction).

On voit ici que Cartwright ne fait pas appel à la stratégie consistant à s'en tenir à des méthodes mathématiques bien maîtrisées pour augmenter leur efficacité, mais aux exigences de l'organisation collective de la recherche de la communication entre chercheurs pour triompher de la variété des phénomènes et de leurs représentations possibles. Son explication est d'ordre sociologique, puisque qu'elle insiste sur la nécessité pour les chercheurs de faire des choix ordonnant et rationalisant *collectivement* leur activité de modélisation. Il leur faut en effet adopter des façons communes de travailler qui leur permettent de coordonner et d'approfondir leur travail de façon efficace. Cette première explication est proche de celles proposées par Kuhn. Cartwright donne par ailleurs une autre explication au conservatisme scientifique, selon laquelle la restriction volontaire des moyens utilisés vise à renforcer le caractère explicatif de la science :

« Une bonne théorie a pour but de couvrir une grande variété de phénomènes avec le moins de principes possible [...]. Une théorie qui aurait besoin d'un nouveau hamiltonien pour chaque nouvelle circonstance physique serait bien médiocre. Le vaste pouvoir explicatif de la mécanique quantique vient de sa capacité à déployer un petit nombre d'hamiltoniens bien compris pour couvrir un large éventail de cas, et non de sa capacité à faire coïncider une nouvelle représentation mathématique avec chaque situation. Cette dernière façon de faire serait complètement folle » (*ibid* pp. 144-145).

La réponse apportée par Cartwright à la question de savoir pourquoi il existe si peu d'hamiltoniens de base en mécanique quantique est-elle la bonne ? La recherche d'efficacité collective pour les stratégies de représentation et d'explication des phénomènes est-elle seule en cause ? Jodi Azzouni, en commentant ces passages de Cartwright, indique qu'une autre réponse est envisageable :

« [Cartwright] donne ici une impression entièrement fautive des motifs [pour lesquels aussi peu d'hamiltoniens de base sont disponibles]. La façon de faire qu'elle décrit ne s'impose que parce que les mathématiques de l'équation de Schrödinger et des hamiltoniens sont très difficiles. S'il était facile de construire un hamiltonien pour n'importe quelle situation, et de dériver ses solutions par l'intermédiaire de l'équation de Schrödinger, la méthode "complètement folle" serait tout simplement la bonne » (Azzouni, 2000, p. 29, notre traduction)<sup>3</sup>.

Dans la section qui suit, nous examinons la thèse, effleurée ci-dessus par Azzouni, selon laquelle la complexité de l'étude mathématique des modèles est un paramètre que les scientifiques sont obligés de prendre en considération dans leur pratique. Nous verrons que pour cette raison, la complexité des représentations (ou plus précisément, de l'exploration de

---

<sup>3</sup> Azzouni fait cette remarque en passant mais ne développe pas son analyse.

leur contenu) contraint drastiquement l'activité scientifique et permet d'en expliquer certains traits, dont son conservatisme<sup>4</sup>.

## 2. Les mathématiques disponibles et la complexité des problèmes limitent les choix théoriques possibles

Dans l'analyse de l'activité théorique, on met souvent l'accent sur les difficultés que présentent les étapes suivantes : le choix des hypothèses explicatives, la construction de représentations mathématisées des systèmes étudiés à partir de ces hypothèses, et la comparaison entre les informations fournies par la représentation et les résultats de l'expérience. On considère donc implicitement que la phase d'exploration des représentations mathématiques ne fait pas problème. De la même façon, Kuhn estime que si le choix des problèmes et des procédures de représentation a été fait selon les directions désignées comme fructueuses par une tradition de recherche, l'étude des représentations mathématiques pour elle-même est une étape qui ne doit pas être problématique et que l'échec incombe donc à l'individu et son manque d'ingéniosité (voir supra).

Cependant, les contraintes imposées par l'exploration mathématique des représentations scientifiques, en particulier par la résolution d'équations, pèsent d'un poids certain sur le développement scientifique. Comme le souligne Lakatos, « les vraies difficultés pour le théoricien surgissent des difficultés mathématiques du programme plutôt que des anomalies. La grandeur du programme newtonien provient en partie du développement – par les newtoniens – des mathématiques infinitésimales, qui constitue une précondition cruciale de son succès » (1970, cité par Humphreys, 2004, p. 55). Tout étudiant en physique sait en effet que la construction de représentations qui soient compatibles à la fois avec les théories disponibles et avec ce que nous savons des systèmes physiques particuliers que nous étudions (composition, géométrie, interactions, etc.) aboutit d'ordinaire à des modèles trop complexes pour qu'il soit possible d'en calculer les conséquences.

Par conséquent, il est nécessaire de tenir compte des possibilités déductives des mathématiques disponibles à une époque donnée pour évaluer dans quelle mesure une théorie est susceptible de conduire à de nouveaux résultats. Ce n'est pas seulement l'application aux phénomènes d'un schème conceptuel associé à une tradition de recherche qui gouverne le succès d'une théorie, mais aussi le savoir mathématique qui est à la disposition des chercheurs.

L'importance de la dépendance, trop souvent négligée, entre le développement des connaissances mathématiques et celui des connaissances physiques a été récemment soulignée par Humphreys (2004, pp. 55-57). Il rappelle que, même si cette dépendance va de soi pour les scientifiques, les philosophes des sciences ont majoritairement ignoré le rôle décisif du calcul et des possibilités offertes par l'état du savoir mathématique à une époque.

Humphreys propose *a contrario* deux principes qui, selon lui, doivent désormais guider l'analyse de la science. Le premier est le suivant :

---

<sup>4</sup> Bien que la pratique des idéalizations et des approximations soit un objet d'étude récurrent en philosophie des sciences, il est surprenant de constater que ce qui motive cette pratique, à savoir la complexité des problèmes étudiés, n'apparaît guère dans l'analyse ou l'explication des caractéristiques de la science.

« C'est l'invention et le déploiement de mathématiques calculables analytiquement ou numériquement qui gouverne l'essentiel du progrès des sciences physiques » (*ibid.*, p. 55).

Plus important pour notre présent propos est le second principe :

« La plupart des modèles scientifiques sont spécifiquement taillés pour s'adapter aux mathématiques disponibles, et sont donc contraints par elles » (*ibid.*, p. 56).

Ce principe signifie que d'ordinaire, les physiciens se limitent délibérément dans leur travail à l'examen de problèmes que les connaissances disponibles leur permettent de résoudre – sauf, bien sûr, quand un physicien invente une nouvelle méthode mathématique pour résoudre le problème qu'il étudie.

Relativement aux perspectives de Kuhn et de Cartwright présentées ci-dessus, les conséquences suivantes des principes de Humphreys méritent d'être soulignées :

(i) Indépendance partielle du schème conceptuel théorique utilisé et de la solvabilité des problèmes.

*Stricto sensu*, s'inscrire dans une tradition de recherche et essayer de résoudre les problèmes que la connaissance commune associée à un paradigme désigne comme les objets d'étude de la science normale (pour reprendre le vocabulaire de Kuhn) n'apporte aucune garantie à propos de la solvabilité *mathématique* desdits problèmes – sauf bien sûr à réutiliser sans modification des modèles mathématiques déjà étudiés ou des modèles d'un type pour lequel il existe des techniques de résolution connues. Certains changements dans l'un des paramètres d'un problème peuvent en effet le rendre insoluble, même s'il est entendu que tous les changements de ce type n'ont pas des conséquences aussi désastreuses, ce qui autorise l'utilisation d'équations mathématiques semblables pour décrire des situations différentes. On sait par exemple que l'évolution d'un système newtonien à trois corps ne peut pas être décrite analytiquement, alors que cela est possible pour un système à deux corps. De la même façon, un réseau de spins à deux dimensions est en général facile à étudier, alors que le passage à un réseau à trois dimensions ou l'ajout d'un champ magnétique rend le problème du calcul de sa fonction de partition NP-difficile, c'est-à-dire que sa solution ne peut être obtenue en un temps « raisonnable » au sens où il dépend de façon polynômiale de la taille des données d'entrée (Barahona, 1982, Istrail, 2000)<sup>5</sup>. Dans ces deux cas, le schème conceptuel est commun, mais les possibilités de résolution sont radicalement différentes. La réutilisation de techniques, de concepts et de méthodes de modélisation permet donc seulement d'espérer que le nouveau problème possède *peut-être* une solution accessible – mais comme nos exemples l'illustrent, l'induction n'est pas une procédure sûre en ce domaine. Il y a donc indépendance partielle entre le schème conceptuel théorique utilisé et la solvabilité du problème à résoudre. L'indépendance est partielle parce que les schèmes conceptuels des théories physiques sont en général exprimés dans des langages mathématiques qui suggèrent d'eux-mêmes des techniques de résolution.

(ii) Transversalité de la contrainte de solvabilité entre les sciences mathématiques.

Le domaine des résultats mathématiques connus, qui délimitent le champ de ce qui est scientifiquement possible à une époque, ne dépend pas du paradigme ni des concepts utilisés.

---

<sup>5</sup> Un problème est dit « NP-difficile » s'il est au moins aussi difficile que les problèmes les plus difficiles de la classe NP (c'est-à-dire que les problèmes « NP-complets »). Un problème appartient à la classe NP si sa solution peut être vérifiée en un temps de calcul polynômial, ce qui ne signifie pas qu'elle peut être découverte aussi vite.

De la même façon, la contrainte imposée par la non-solvabilité de certains problèmes mathématiques n'est pas relative à une tradition de recherche ni à un paradigme, même si c'est souvent dans le cadre d'une recherche menée au sein d'un paradigme physique que certains outils mathématiques, comme le calcul différentiel, sont développés. Le conservatisme général (ii) lié aux contraintes générales imposées par les connaissances mathématiques disponibles et le conservatisme particulier (i) lié à la réutilisation d'un paradigme ou d'hypothèses physiques supposées fécondes méritent donc d'être distingués. L'un est identique à travers les disciplines scientifiques, l'autre est propre à chaque domaine et peut donc varier d'un domaine à l'autre – de fait, certains domaines sont plus conservateurs que d'autres.

De façon plus générale, le second principe de Humphreys invite à tenir compte des contraintes pratiques qui pèsent sur le choix que les scientifiques sont amenés à faire dans leur recherche de résultats nombreux et fiables. Pour ce faire, nous introduisons la notion d'« attractivité » d'un problème scientifique, et nous défendons la thèse selon laquelle les pratiques théoriques reflètent l'attractivité effective des problèmes étudiés. L'attractivité d'un problème dépend d'une part de la portée du résultat escompté (de son importance théorique, de sa généralité, de son utilité, etc.), et d'autre part de l'espoir qu'on a de le résoudre facilement. Dans l'absolu, un problème important est attractif, mais dans les faits, il l'est parfois beaucoup moins si, en raison de sa complexité, le temps passé à tenter de le résoudre est perdu presque à coup sûr. Pendant longtemps, démontrer le grand théorème de Fermat a ainsi été considéré comme une tâche peu attractive, en raison de sa difficulté manifeste. L'attractivité d'un problème dépend donc bien des contraintes relatives à sa difficulté mathématique, et plus précisément de la connaissance qu'on a de cette difficulté : par exemple, un problème peut sembler attractif à un jeune chercheur et non attractif à un chercheur chevronné qui sait déjà que les tentatives majeures pour le résoudre ont échoué. Cette attractivité dépend enfin des ressources en calcul dont on dispose : ainsi un problème est-il peu attractif si sa solution nécessite d'utiliser de nombreux calculateurs pendant un temps trop long. Par conséquent, l'attractivité d'un problème varie avec l'évolution des connaissances. Par exemple, grâce aux tables de logarithme de Briggs et de ses successeurs, on a pu à partir du XVII<sup>ème</sup> siècle envisager de se lancer dans des calculs d'astronomie complexes et donc d'affronter des problèmes scientifiques jusqu'alors peu attractifs car trop complexes pour être résolus.

Appliquons à présent les considérations qui précèdent à la science pré-computationnelle. Ce qui la caractérise, c'est avant tout que les ressources dont disposent les scientifiques sont limitées et peu extensibles. Ce jugement, qui mobilise la notion moderne de ressources en calcul (c'est-à-dire de temps et d'espace de calcul, de nombre de calculateurs, etc.), est bien entendu vrai d'un point de vue rétrospectif, par comparaison avec la science computationnelle que nous connaissons aujourd'hui ; mais le jugement informel correspondant était également valable dans l'ère scientifique précédente. Les ressources des scientifiques étaient déjà susceptibles de variations, puisque les physiciens et mathématiciens pouvaient s'entourer de secrétaires à qui ils déléguaient certains calculs. Ils pouvaient aussi entretenir des collaborations avec leurs pairs et utiliser des instruments, comme par exemple les abaques, ou des tables de calcul, comme les tables de logarithmes de Briggs. Les résultats auxquels ils pouvaient accéder dépendaient ainsi, pour l'essentiel, de leur savoir mathématique ainsi que du temps et du nombre d'assistants ou de collègues mobilisables. L'ampleur et le nombre des tâches qu'ils pouvaient entreprendre restaient donc limités à ce que quelques esprits humains étaient capables d'accomplir.

Ce constat nous conduit à suggérer que l'activité de recherche des physiciens de l'ère pré-computationnelle est drastiquement contrainte du fait que les ressources scientifiques, humaines et techniques, permettant de produire des résultats sont peu nombreuses. C'est la

raison pour laquelle elle doit obéir à un ensemble de règles informelles qui permettent aux physiciens de tirer le meilleur parti de leurs maigres ressources pour développer au mieux leurs connaissances en produisant le maximum de résultats de la meilleure qualité possible. Ces règles de prudence scientifique visent à écarter autant que possible le risque de se lancer dans des calculs longs sans aboutir à aucun résultat et à faire en sorte d'utiliser de façon efficace les ressources scientifiques existantes. Il est à noter que ces règles, même si elles répondent à la limitation des ressources permettant de résoudre des problèmes mathématiques difficiles et visent donc à accroître la productivité de l'activité scientifique, ne portent pas toutes sur l'aspect mathématique de l'activité scientifique. Nous en proposons ici quelques exemples élémentaires – cette liste n'ayant aucune prétention à l'exhaustivité.

(1) La première règle enjoint de construire des modèles que l'on peut étudier par des méthodes analytiques déjà connues, ce qui limite le risque de rencontrer un problème insoluble.

(2) La deuxième recommande de construire des modèles qui soient compatibles avec les théories disponibles du point de vue de leur interprétation. Par exemple, il est déconseillé d'ajouter ou de supprimer des éléments dans un modèle, par rapport à ceux décrits dans la théorie. Ainsi est-il périlleux de changer l'expression d'une force (par exemple pour faire une approximation et simplifier un calcul) car il est possible que les résultats obtenus soient imputables à la valeur modifiée de la force et non à sa valeur initiale et qu'ils ne contiennent donc pas d'informations sur le système physique cible. De même, un modèle ne possédant pas toutes les symétries spatiales requises (comme le tout premier modèle de gaz sur réseaux, voir section 5) risque-t-il d'être trop pauvre pour expliquer les comportements observés dans un système naturel (par exemple un fluide isotrope).

(3) Il est également conseillé de construire des modèles dans le même formalisme que la théorie, ce qui permet d'appliquer sans difficulté les énoncés généraux de la théorie. Plus généralement, utiliser des formalismes mathématiques bien connus limite le risque de rencontrer des équations sans solution.

(4) Ordinairement, les résultats généraux (dans leur contenu et dans leur forme) sont à privilégier. Lorsque l'on peut facilement obtenir des résultats particuliers par simple assignation de valeurs à des variables, le gain en temps peut être considérable.

(5) Pour finir, sont à privilégier les modèles épistémologiquement *robustes*, au sens où ils peuvent être obtenus ou justifiés de plusieurs façons différentes. Par exemple, les équations de Navier-Stokes (voir section 4.1 pour leur expression dans le cas d'un fluide incompressible) peuvent être dérivées à partir d'hypothèses initiales différentes<sup>6</sup>, ce qui conforte l'espoir que leur étude n'est pas vaine.

Ces règles sont des exemples de procédures visant à augmenter la productivité de l'activité scientifique. A ce titre, on pourrait penser qu'il faille les appliquer en tout contexte. Néanmoins, la nécessité de les appliquer strictement prend tout son sens lorsque l'on prend conscience que les scientifiques sont le plus souvent en situation de contrainte mathématique extrême. Elles doivent donc être conçues comme visant à surmonter en partie les contraintes

---

<sup>6</sup> Elles peuvent ainsi être obtenues à partir d'hypothèses macroscopiques sur les fluides (lois d'invariance, forces liées à la viscosité) ou bien à partir de l'application de la théorie cinétique des gaz à une description microscopique des systèmes étudiés.

sévères qui pèsent sur l'activité scientifique, en particulier à l'ère pré-computationnelle. Il convient aussi de souligner que ces contraintes mathématiques n'agissent pas uniquement une fois que les modèles ont été élaborés, lorsqu'on arrive à l'étape de la résolution purement mathématique, mais bien dès les premiers moments de la théorisation.

De même, il va sans dire que ces règles ne sont pas obligatoires ; de fait, elles ne sont pas respectées dans tous les cas. Nous suggérons cependant que les omettre conduit usuellement à prendre plus de risques et à donc diminuer ses chances d'avoir une activité scientifique efficace et couronnée de succès. Certes, la prise de risque scientifique peut déboucher sur des avancées significatives : explorer un modèle mathématique peu connu, des hypothèses peu confirmées, ou étudier des situations particulières peut aboutir à des résultats novateurs ; mais le risque de n'aboutir à aucune solution satisfaisante ou à aucun résultat digne d'intérêt au bout d'un temps relativement long doit être pris en compte. On peut donc dire que ces règles (et notamment les règles 1, 2, 3, 5) favorisent la réutilisation des mêmes modèles, c'est-à-dire un certain conservatisme. Ce n'est bien sûr pas le cas lorsqu'un nouveau formalisme, une nouvelle solution analytique ou un nouveau modèle robuste sont découverts.

On voit à travers ces règles que la description de l'attractivité proposée plus haut peut être raffinée. L'attractivité d'un modèle dépend ainsi du coût de l'exploration de son contenu, mais également de la facilité ou de la difficulté de sa manipulation par des scientifiques à un moment donné, de sa réutilisation dans des situations similaires, de son degré de justification, de son utilisation et de l'interprétation des résultats qu'il permet d'obtenir.

La description qui précède reste sommaire ; elle suffit néanmoins à formuler notre explication du conservatisme de l'activité scientifique. Plus précisément, nous pouvons proposer l'hypothèse suivante :

Plus le savoir mathématique et les ressources en calcul sont minces, plus « la pression computationnelle » qui pèse sur les scientifiques est forte, plus les stratégies innovatrices (resp. conservatrices) sont risquées (resp. peu risquées) et moins (resp. plus) elles ont de chance d'être adoptées.

Selon cette hypothèse, les scientifiques qui disposent de peu de ressources ont intérêt à les utiliser de la façon la plus prudente possible, c'est-à-dire à appliquer avec fermeté les règles que nous avons mentionnées. La suite de cet article est consacrée à vérifier la validité de cette hypothèse lors du tournant computationnel en science, qui est précisément un moment de relâchement fort de la pression computationnelle liée non pas à une avancée mathématique mais à un développement technologique fournissant davantage de moyens de calcul.

### **3. Le tournant computationnel et ses conséquences attendues**

Revenons maintenant à l'analyse du tournant computationnel. Notre but est de montrer quels changements sont causés au sein de l'activité de théorisation par le développement des ordinateurs. Pour ce faire, nous présentons d'abord ci-dessous quelques thèses de Humphreys ainsi que les modifications que nous proposons d'y apporter.

Humphreys ouvre la section de son ouvrage consacrée à la science computationnelle par la discussion de plusieurs positions épistémologiques relatives au tournant computationnel (2004, p. 51). L'une d'elles consiste à affirmer que l'usage des ordinateurs n'introduit rien de significativement nouveau par rapport aux méthodes numériques qui existaient avant leur invention, à part la rapidité des calculs et l'élargissement des capacités de mémoire. *A contrario*, Humphreys souligne que l'usage des ordinateurs a provoqué une rupture dans les pratiques des scientifiques :

« Pour ceux d'entre nous qui nous intéressons à la façon dont les théories s'appliquent aux phénomènes naturels, les effets immédiats les plus importants de l'usage des méthodes de la science computationnelle est que des modèles extraordinairement plus nombreux que dans le passé peuvent être mis en contact fécond avec des systèmes réels, principalement en évitant les limitations sévères que notre ensemble restreint de techniques mathématiques analytiques nous impose ». (Humphreys, 2004, p. 53, notre traduction).

On voit ici que pour Humphreys, la capacité que nous avons acquise grâce aux ordinateurs à passer outre les limitations des techniques traditionnelles de résolution d'équations constitue un véritable bouleversement. Comme nous l'avons indiqué plus haut, une des limitations majeures de la pratique scientifique qui s'est développée depuis le XVII<sup>e</sup> siècle en physique est que le nombre des équations potentiellement utilisables est considérablement restreint. Les techniques numériques de résolution approchée des équations dont on ne connaît pas de solution analytique ne datent certes pas de l'invention des ordinateurs ; les physiciens doivent ainsi apprendre à maîtriser les méthodes « d'Euler », « de Newton » ou « de Runge-Kutta » pour résoudre les équations différentielles. Néanmoins, le coût de l'obtention de solutions approchées par ces méthodes numériques est le plus souvent tellement important que seuls certains types d'équations ont été explorés. Comme le souligne Humphreys, l'usage des ordinateurs a soudain rendu accessibles de nombreuses solutions approchées qui étaient complètement hors de portée auparavant. En conséquence, la carte de ce qui est scientifiquement possible s'en trouve transformée. Pour Humphreys, on ne saurait surestimer l'importance de cette capacité nouvelle :

« Cette extrapolation de nos capacités computationnelles nous conduit vers une région où ce qui était quantitativement différent devient qualitativement différent, car ces simulations ne peuvent pas être réalisées en pratique, sauf dans des régions où la vitesse de calcul va loin au-delà des capacités humaines. La vitesse compte. » (*ibid*, p.53, notre traduction)

Humphreys défend ici clairement la thèse selon laquelle le tournant computationnel ne consiste pas seulement en l'accélération des calculs que nous ferions plus lentement sans ordinateurs, mais en un changement profond de la pratique de la physique, qui devient *qualitativement* différente.

Afin d'approfondir la discussion commencée par Humphreys, nous étudions dans les sections qui suivent la nature de la discontinuité introduite par la science computationnelle. Notre but est de montrer que sa dynamique est d'un autre type que celle, conservatrice, que nous avons décrite et discutée dans les sections précédentes. Plus précisément, nous cherchons à la fois à confirmer les analyses précédentes et à affiner le diagnostic proposé par Humphreys.

Dans la section 2, nous avons défendu la thèse selon laquelle l'activité de théorisation et de modélisation est conservatrice dans l'ère pré-computationnelle parce qu'elle est contrainte par les connaissances mathématiques disponibles et plus généralement par la pression computationnelle : le choix de modèles trop difficiles à étudier, à manipuler ou à justifier fait augmenter le risque d'échec scientifique. Si ce diagnostic est juste, on s'attend à ce qu'un relâchement de la pression computationnelle, conduisant à un développement des possibilités de calcul, ait pour conséquence que l'activité de théorisation soit moins conservatrice et que les règles de prudence décrites plus haut soit plus souvent violées. Ainsi l'augmentation significative des moyens computationnels devrait-elle être associée à une

dynamique scientifique plus innovante et plus variée. C'est ce que nous essayons d'établir dans les sections suivantes.

Nous distinguons pour cela deux types de discontinuité dans la dynamique de science et nous les illustrons tour à tour. Dans le régime de *discontinuité faible*, les modèles qui sont étudiés sont du même type que ceux qui sont étudiés dans la science pré-computationnelle, mais le nombre des modèles particuliers qui peuvent être explorés augmente fortement, ce qui nous enjoint de parler de discontinuité. Les ordinateurs servent donc bien, dans ce cas, à parcourir plus vite, et en allant plus loin, des chemins déjà empruntés par la science pré-computationnelle. Plus significatif pour notre argument est le régime de *discontinuité forte*, dans lequel sont explorés des modèles qu'il aurait été inconcevable de prendre en compte dans l'ère pré-computationnelle, non seulement parce que leur étude requiert des ressources en calcul trop importantes, mais surtout parce qu'ils violent les règles de prudence scientifique décrites plus haut. Dans la section 4, nous donnons des exemples de discontinuité faible, et dans la section 5, nous illustrons en détail le régime de discontinuité forte à partir de deux exemples de simulations reposant sur l'utilisation d'automates cellulaires.

#### **4. Exemples de discontinuité faible entre la science computationnelle et les pratiques antérieures**

Dans cette section, nous présentons deux exemples de modèles étudiés dans le cadre de la science computationnelle qui, même s'ils appartiennent à cette classe de nouveaux cas qui peuvent être désormais étudiés au moyen d'ordinateurs, doivent cependant être analysés comme se situant dans le prolongement de pratiques antérieures. Ces exemples nous conduisent à suggérer que la rupture entre la science computationnelle et les pratiques antérieures est, dans certains cas, plus faible que dans l'analyse de Humphreys.

Dans les cas que nous présentons, certaines des règles de prudence décrites plus haut sont respectées. Bien entendu, les règles 1 et 4 sont violées, puisqu'une simulation numérique est peu générale du fait qu'elle assigne nécessairement des nombres particuliers aux variables du modèle. Cela mis à part, dans ce régime de discontinuité faible, les modèles sont développés peu ou prou de la même façon que ceux qui étaient élaborés dans le cadre de la science pré-computationnelle ; en revanche la nouvelle puissance de calcul permet de *prolonger* l'étude au-delà de ce qu'il était possible de faire, dans des domaines de paramètres jusque là inaccessibles. Il y a donc continuité qualitative mais discontinuité quantitative, d'où le terme de « discontinuité faible ».

##### **4.1 Simulations de fluides reposant sur la discrétisation de l'équation de Navier-Stokes**

La dynamique des fluides est l'un des domaines les plus représentatifs et les plus féconds de la science computationnelle. Les simulations numériques de tous types y abondent, en raison de la complexité des calculs nécessaires pour prédire le comportement des fluides. Nous présentons ici un type de simulation numérique dans ce domaine, qui repose sur l'obtention de solutions approchées aux équations de Navier-Stokes au moyen de la discrétisation de ces équations.

Les équations de Navier-Stokes sont issues d'une réécriture de l'équation fondamentale de la dynamique pour une particule fluide de masse  $dm = \rho dV$ ,  $\rho$  étant la densité du fluide. L'équation fondamentale de la dynamique rapporte l'inertie d'un corps, c'est-à-dire la résistance qu'il oppose à un changement dans la direction ou l'intensité de sa vitesse, à sa masse et aux forces qui s'exercent sur lui.

Les forces agissant sur la particule fluide sont :

- celles qui résultent de la viscosité  $\mu$  du fluide,
- celles qui résultent de la pression  $p$ ,
- et toutes celles ( $\mathbf{f}$ ) qui sont dues aux champs de forces extérieurs au fluide, comme le champ de gravitation.

Prenons pour simplifier l'équation de Navier-Stokes pour un fluide incompressible,

Le membre de gauche représente l'inertie de la particule fluide, le premier terme étant la dérivée *partielle* de la vitesse, qui décrit l'accélération due au changement local de vitesse, le second terme étant une dérivée partielle qui décrit l'accélération advective due à un apport de matière n'ayant pas la même vitesse. Dans le membre de droite, on trouve le gradient de pression, la viscosité, et l'ensemble des autres forces.

Cette équation est connue depuis plus de cent cinquante ans (Darrigol, 2006). Elle a fait depuis l'objet de recherches soutenues, qui ont donné quelques résultats intéressants (on sait par exemple qu'elle a des solutions analytiques

dans certains cas, comme les écoulements de Poiseuille et de Couette). Cependant, ces recherches ont souvent avorté en raison de l'absence de solution analytique dans les cas les plus généraux. Le développement de la dynamique des fluides à partir de cette équation a ainsi été considérablement ralenti pendant plus d'un siècle par les impasses computationnelles auxquelles elle conduit.

Grâce à la puissance de calcul des ordinateurs, on peut aujourd'hui apporter des solutions approchées à cette équation dans des cas qui étaient auparavant inaccessibles, et simuler ainsi des comportements de fluides dont il était impossible d'avoir une idée précise. La méthode utilisée est la transposition dans l'écriture de programmes informatiques de techniques anciennes permettant d'obtenir des résultats approchés en transformant les équations différentielles, qui sont continues, en équations discrètes.

Les nombreuses simulations numériques ainsi obtenues sont le signe d'une accélération considérable dans la connaissance que nous pouvons avoir des fluides incompressibles *en tant qu'ils sont décrits par l'équation de Navier-Stokes*. Il y a bien rupture

es où il était auparavant impossible, tout ère computationnelle, il n'était possible que quelques rares types d'écoulements réguliers dont les nombreuses symétries permettaient de simplifier les équations de Navier-Stokes et de les résoudre (par exemple les écoulements de Poiseuille ou de Couette), il est dorénavant envisageable de simuler toute la gamme des écoulements, et notamment les écoulements turbulents, jusqu'à des nombres de Reynolds élevés<sup>7</sup>. D'un point de vue quantitatif, il s'agit d'une explosion du nombre des cas qu'il est possible de traiter ; c'est pour cette raison que nous parlons de « discontinuité ».

Cependant, comme nous l'avons rappelé, les voies conduisant à une étude des fluides au moyen de l'équation de Navier-Stokes étaient connues depuis longtemps, même si elles étaient impraticables pour des grands nombre de Reynolds. La rupture a donc lieu à l'intérieur

---

<sup>7</sup> Le nombre de Reynolds correspond au rapport entre les forces d'inertie et les forces de viscosité. Intuitivement, la viscosité freine les mouvements et ramène le fluide vers l'homogénéité. Par exemple, à faible nombre de Reynolds, un fluide retourne immédiatement au repos dès que les forces extérieures stoppent. Les forces d'inertie au contraire tendent à propager l'agitation et donc favorisent le comportement turbulent.

d'un domaine dont on possédait déjà une carte fragmentaire ; on peut décrire la nouvelle situation scientifique relative à l'équation de Navier-Stokes comme étant en « discontinuité faible » par rapport à la situation ancienne, en indiquant par là que l'usage des ordinateurs a été constamment guidé par les connaissances acquises auparavant sur cette équation. Comme nous le montrons dans la section 4.3 ci-dessous, l'usage des ordinateurs permet ici de s'affranchir des limitations dues aux difficultés de calcul, mais n'a pas pour conséquence que les règles que nous avons énoncées ci-dessous soient toutes violées de façon patente : même si les règles 1 et 4 sont abandonnées, les mêmes modèles sont explorés, mais avec une efficacité accrue, et le formalisme utilisé est le même que celui qui permet le calcul littéral, à savoir, les équations différentielles.

## **4.2 Simulations de Monte-Carlo de systèmes décrits par l'ensemble canonique**

Notre deuxième cas relève d'une pratique scientifique qui, de même que la précédente, fait figure d'exemple emblématique de la science computationnelle. Les méthodes de Monte-Carlo, si elles ne font pas appel aux ordinateurs dans leur principe général, ne peuvent cependant pas être mises en œuvre efficacement sans ordinateur, car elles requièrent d'une part de pouvoir engendrer facilement des nombres aléatoires (ou plutôt pseudo-aléatoires : puisque le fonctionnement des ordinateurs est de part en part déterministe, on ne peut obtenir de nombres véritablement aléatoires, quel que soit le sens que l'on donne à cette notion), et d'autre part de répéter à l'envi des procédures d'échantillonnage -- deux opérations qu'il est impossible, en pratique, de faire à la main. Elles ont été analysées en détail d'un point de vue à la fois historique et sociologique dans Galison (1997).

Les méthodes de Monte-Carlo sont une classe d'algorithmes permettant d'obtenir des solutions numériques d'équations à partir de procédures d'échantillonnage aléatoire répétées un grand nombre de fois. Prenons, à titre d'illustration préliminaire, un exemple indépendant des ordinateurs. Il s'agit d'une procédure simple pour calculer approximativement la valeur de  $\pi$ . On sait que le rapport entre l'aire d'un cercle et celle du carré dans lequel il est inscrit est de  $\pi/4$ . Dessinons sur le sable un cercle inscrit dans un carré et lançons un grand nombre de petits objets, par exemple des billes, dans le carré. Le rapport entre le nombre total des billes lancées qui ont atterri dans le cercle et celui de billes ayant atterri dans le carré sera approximativement de  $\pi/4$ , à condition que les billes aient la même probabilité d'atterrir partout au sein du carré. Pour obtenir une valeur approximative de  $\pi$ , il suffit donc de compter les billes, et ensuite de multiplier le rapport en question par 4. La valeur obtenue sera d'autant meilleure que le nombre total de billes sera grand. On aura donc bien calculé par cette méthode une valeur approchée de  $\pi$  à partir de la répétition de processus aléatoires (les lancers de billes), le calcul de l'étape suivante (le comptage des billes) étant ici particulièrement simple.

Lorsque l'on utilise les méthodes de Monte-Carlo avec des ordinateurs, il est possible de procéder à des échantillonnages aléatoires (correspondant aux lancers de billes dans l'exemple précédent) en nombre très important, ce qui assure que l'approximation obtenue soit fiable, à condition cependant que l'on puisse obtenir des tirages pseudo-aléatoires de bonne qualité. C'est la raison pour laquelle le développement des méthodes de Monte-Carlo, depuis les débuts des ordinateurs au sein du projet Manhattan durant la deuxième guerre mondiale, est allé de pair avec une recherche encore en cours visant à construire des générateurs fiables de nombres pseudo-aléatoires.

Les méthodes de Monte-Carlo sont utilisées dans de nombreux domaines : en chimie physique, en physique statistique comme nous allons le voir, en météorologie, en finance, dans les télécommunications, etc. Nous avons choisi l'exemple de l'étude par les méthodes de

Monte-Carlo des systèmes décrits en physique statistique par l'ensemble canonique en raison de sa relative simplicité.

L'ensemble canonique est une structure mathématique permettant de décrire des systèmes physiques fermés (par exemple des gaz) à l'équilibre thermodynamique<sup>8</sup> lorsqu'ils sont en contact avec un réservoir de chaleur. Lorsqu'un gaz est en contact avec un réservoir de chaleur, des échanges de chaleur se produisent sans que l'équilibre thermodynamique du gaz soit rompu, d'où des fluctuations dans la valeur de l'énergie totale du gaz, qui sont prises en compte par les propriétés de l'ensemble canonique. Seuls des échanges d'énergie sont possibles, mais aucun échange de matière.

Dans un tel gaz fermé en contact avec un réservoir de chaleur, la probabilité  $p_i$  pour que le système réalise un état d'énergie  $E_i$  est donnée par la formule de Boltzmann et dépend de cette énergie de façon inversement exponentielle :

où

$k_B$  étant une constante et  $T$  la température du gaz. La formule de Boltzmann a pour conséquence qu'à température constante, la probabilité que le système soit dans l'état d'énergie  $E_i$  est d'autant plus faible que  $E_i$  est élevée. A partir de cette probabilité, on peut écrire la fonction de part

$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$$

où  $k$  est le nombre des micro-états accessibles au système. La fonction  $Z$  permet un calcul facile de toutes les variables macroscopiques du système comme moyennes de grandeurs microscopiques. Elle est en effet obtenue par sommation sur l'ensemble des micro-états accessibles au système et  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  it pour chaque valeur de l'énergie le terme exponentiel. Ainsi, l'énergie interne  $U = - \frac{d \ln Z}{d \beta}$ , est-elle par exemple donnée par l'équation  $U = - \frac{d \ln Z}{d \beta}$ .

Même si la fonction de partition  $Z$  rend facile, en principe, le calcul des grandeurs macroscopiques, en pratique il n'est pas toujours facile d'effectuer ces calculs, puisque la valeur de  $Z$  elle-même (et *a fortiori* celles de ses dérivées) ne peut en générale être atteinte par un calcul analytique, le nombre de micro-états étant gigantesque. Là encore, le développement du calcul numérique, et en particulier des méthodes de Monte-Carlo, permet de sortir de l'impasse. L'idée générale est ici d'engendrer aléatoirement dans l'ordinateur des micro-états qui soient compatibles avec l'état d'équilibre macroscopique du système, de calculer leur énergie, et de sommer ensuite, avec quelques précautions, sur l'ensemble des micro-états engendrés afin d'obtenir une valeur approchée de  $Z$ .

De nombreuses méthodes ont été mises au point pour produire de telles suites de micro-états, dont la première est l'algorithme de Metropolis (Metropolis et al., 1953, Krauth, 1998). Ces méthodes reposent en général sur le fait que, pour produire un échantillon fiable,

---


$$Z = \sum_k e^{-\beta E_k}$$

systèmes dont la température, le volume et la pression restent constants au  
 On appelle « micro-état » la donnée de toutes les positions et vitesses des particules du système à un instant donné, et « macro-état » la donnée des valeurs des variables macroscopiques comme la pression, le volume ou la température. Pour un système continu, à un même macro-état correspond une infinité de micro-états.

on n'a pas besoin de connaître la probabilité de chaque état mais seulement les probabilités relatives entre états, qui sont faciles à calculer et ne nécessitent pas d'estimer  $Z^{10}$ .

On a ici un nouveau cas où l'utilisation d'ordinateurs permet une avancée considérable, puisque le calcul analytique de la fonction de partition canonique n'est possible que dans des cas très particuliers (gaz parfait, modèle d'Ising à deux dimensions, polymères simples, etc.). Comme dans le cas de la discrétisation de l'équation de Navier-Stokes présenté ci-dessus, les ordinateurs rendent possibles des calculs déjà envisagés auparavant, mais impossibles à effectuer ; ici, il s'agit de l'exploration systématique des propriétés de l'ensemble canonique pour des systèmes qu'il n'était pas possible d'étudier auparavant. De ce point de vue, l'usage des ordinateurs prolonge une pratique antérieure, puisque le cadre théorique utilisé reste essentiellement le même – même si, à un grain plus fin de description, il y a rupture, puisqu'il est désormais possible d'étudier des modèles qu'il serait peut-être impossible d'étudier par le calcul littéral. Dans la section suivante, nous analysons plus en détail les caractéristiques de ces usages des ordinateurs et montrons qu'ils prolongent les pratiques précédentes.

### 4.3 Analyse : la science computationnelle comme prolongement et accélération des pratiques antérieures

Les exemples que nous venons de présenter montrent comment, grâce aux ordinateurs, des projets scientifiques qui étaient auparavant restés lettre morte en raison des limitations des capacités de calcul des chercheurs peuvent aujourd'hui être menés à bien. Dans les cas de ce type, la dynamique de la construction de modèles dans la science computationnelle reste essentiellement la même que dans la pratique antérieure, à deux différences près :

- elle s'accélère, puisque le contenu des modèles peut être facilement exploré, et de façon beaucoup plus rapide qu'auparavant ;
- les modèles sont explorés dans des domaines de paramètre beaucoup plus étendus ; d'autre part les modèles voisins qu'il est possible d'étudier sont plus nombreux, puisque certaines voies envisagées auparavant, qui débouchaient sur des impasses computationnelles, sont désormais dégagées (par exemple, même s'il existe des solutions analytiques au modèle d'Ising à deux dimensions, l'ajout d'un champ magnétique rend le problème insoluble littéralement, mais l'étude numérique est désormais possible).

Les différences introduites par la science computationnelle n'ont donc pas d'incidence, dans les cas que nous avons présentés, sur la façon dont la science progresse : les chercheurs accomplissent plus vite des tâches qu'ils accomplissaient déjà auparavant, ou réussissent à exécuter des calculs qui étaient inaccessibles, mais dont ils avaient déjà eu l'idée. Ils vont pour ainsi dire plus vite sur les chemins déjà connus, et peuvent aller plus loin sur des chemins déjà imaginés.

Dans les deux exemples ci-dessus, le processus de construction de modèle ne doit rien à l'existence des ordinateurs, puisque les modèles ont été élaborés bien avant leur apparition, et résolus dans les cas les plus simples. Ce sont bien les règles de prudence mentionnées plus haut qui ont mené initialement à l'étude de ces modèles :

---


$$\frac{p(s)}{p(s')} = \frac{e^{-\beta E_s}}{Z} \times \frac{Z}{e^{-\beta E_{s'}}} = \frac{e^{-\beta E_s}}{e^{-\beta E_{s'}}}$$

<sup>10</sup> En effet,

- Certains comportements de systèmes décrits par l'ensemble canonique, de même que l'équation de Navier-Stokes, peuvent être étudiés analytiquement (règle 1) et mener à des résultats généraux (règle 4).
- Les modèles correspondants sont en bon accord avec les théories existantes et sont obtenus grâce à des idéalizations ou des approximations modérées (règle 2) (fluides incompressibles ou systèmes en contact avec un réservoir infini de chaleur).
- Les formalismes utilisés (équations différentielles et formalisme des ensembles statistiques) servent aussi à présenter les théories correspondantes (mécanique classique, mécanique statistique).
- Enfin, ces modèles sont épistémologiquement robustes : l'équation de Navier-Stokes peut être dérivée de multiples façons ; la modélisation par l'ensemble canonique est valide dans de nombreux cas, comme on ne cesse de le vérifier en physique (règle 5).

La science computationnelle apparaît dans les cas de ce type comme une extension des pratiques antérieures. Aussi les sous-domaines fonctionnant selon cette modalité de discontinuité faible ne doivent pas être négligés ; ils constituent par exemple des pans entiers de l'hydrodynamique et sont amenés à se développer encore, à partir de tout le savoir accumulé dans ce domaine autour de certains modèles bien étudiés.

## 5. Exemples de discontinuité forte

Dans cette section, nous présentons d'autres domaines de la science computationnelle, qui autorisent une interprétation plus radicale des affirmations de Humphreys sur son caractère novateur. Nous analysons des exemples suggérant que, grâce aux ordinateurs, l'activité de théorisation peut être beaucoup plus innovante que par le passé. En effet, ce sont aujourd'hui des modèles et des hypothèses multiples qui peuvent être explorés, dont certains peuvent apparaître comme incongrus, et n'auraient vraisemblablement jamais été explorés sans l'aide qu'apportent les ordinateurs.

Les deux exemples que nous avons choisis sont des simulations numériques à partir d'automates cellulaires. Comme on va le voir, ils ne partagent aucune des caractéristiques que nous avons identifiées pour les modèles de l'ère pré-computationnelle, et témoignent donc d'une rupture forte avec les pratiques antérieures. Nous commençons par définir rapidement ce qu'est un automate cellulaire, puis nous analysons un exemple de simulation en sciences sociales, et un autre en hydrodynamique, comme écho au premier exemple de la section 4. Nous en tirons ensuite quelques conclusions sur les domaines de la science computationnelle qui sont en rupture forte par rapport aux pratiques antérieures.

### 5.1 Qu'est-ce qu'un automate cellulaire ?

Un automate cellulaire est un réseau de cellules dont l'état varie au cours du temps. L'ensemble des états possibles pour chaque cellule est fini ; le réseau peut être de dimension (finie et entière) quelconque. L'évolution de l'automate cellulaire se fait par pas de temps discrets. A chaque pas de temps, l'état d'une cellule change (ou non) en fonction de l'état de ses voisines : on dit que la règle d'évolution de l'automate est *locale*. Elle est la même pour toutes les cellules. Le nombre des cellules voisines concernées dépend du type de l'automate : le voisinage « de von Neumann » comporte 4 cellules autour de la cellule centrale, alors que le voisinage « de Moore » en comporte 8. La configuration de l'automate à un instant donné, c'est-à-dire l'ensemble des valeurs de toutes les cellules à cet instant, change d'un seul coup à chaque pas de temps : le changement d'état a lieu pour toutes les cellules en même temps.

On voit qu'un automate cellulaire est un objet formel dont la description est assez simple : c'est un système dynamique discret dont l'évolution ne dépend que de conditions

locales. L'étude systématique de ces objets depuis les années 1940 a cependant révélé qu'ils pouvaient faire montre de comportements d'une variété et d'une richesse insoupçonnées. C'est la raison pour laquelle on a rapidement cherché à les utiliser comme des outils de représentation des systèmes naturels, au même titre que l'on utilise de nombreux objets mathématiques, comme les équations différentielles, dans ce but. Ainsi les travaux portant sur les automates cellulaires peuvent-ils être divisés en deux grandes catégories : les travaux mathématiques qui les étudient pour eux-mêmes, en tant qu'objets formels aux propriétés complexes qui sont encore loin d'être toutes connues, et les travaux qui utilisent les automates cellulaires comme outils de modélisation pour les sciences empiriques dans diverses disciplines. A la première catégorie appartient par exemple la tentative de classification des automates cellulaires proposées par Wolfram (1984). A la seconde catégorie appartiennent les exemples que nous présentons ci-dessous.

Une caractéristique importante des automates cellulaires mérite d'être soulignée : ces objets sont difficiles à étudier à la main. Sans ordinateur, il n'est guère possible dans la pratique de suivre l'évolution d'automates de grande taille, même si on peut, comme pour tout objet mathématique, mener une étude déductive à partir de la description de ces objets. Ainsi les automates cellulaires apparaissent comme un nouveau régime de la science computationnelle, ce qui fait des modèles qui les utilisent un moyen d'explorer ce nouveau régime de science. Par ailleurs, ils sont à l'origine d'une nouvelle manière de faire de la science. Par ailleurs, ils sont à l'origine d'une nouvelle manière de faire de la science. Par ailleurs, ils sont à l'origine d'une nouvelle manière de faire de la science. Par ailleurs, ils sont à l'origine d'une nouvelle manière de faire de la science.

0	#	#	#	#	0	0	0	0			#	#		0	0
0		#	0	0	0		#	#			#		#	0	#
#		#	0	0	#	#		#			0	#		#	#
#			#	#	#		0	#	#	#	0	0			
0		0	0	#	#	#	#		#	#	#			0	0
	#	0	#		0	0	#				0	0			#
#	0	0	#					0	0	0	#	#	#		
0		#	0		#	#	#	0	0	0					#
0		#	0				#	#	0						#
0	0			#				0	#	0	0	0	0	0	#
	0	#	#	0	0	0	0	0	#	#		0	#	#	#
#		0	#	0	#		0	0	#	0	#	0		0	
	0	0			0	#	0	#	0	0	0			#	#

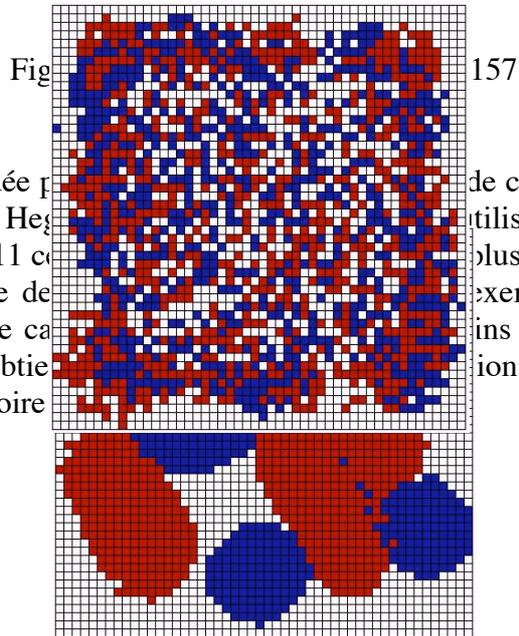
### 5.2 Un exemple de modèle utilisant des automates cellulaires en sciences sociales

Le modèle à base d'automates cellulaires le plus célèbre dans les sciences sociales est le modèle de Schelling (1969, 1971), qui sert à étudier les effets de ségrégation. On utilise ici le voisinage de Moore. Chaque cellule peut prendre trois états, et symbolise un individu quand elle n'est pas laissée blanche. Le seul comportement des individus qui est représenté dans ce modèle est celui du déménagement : les individus restent dans leur logement ou déménagent selon le nombre de leurs voisins qui appartiennent à la même catégorie qu'eux, c'est-à-dire qu'une cellule change d'état selon le nombre de ses voisins qui sont dans le même état qu'elle. Ainsi une cellule change-t-elle d'état, dans cet automate, si elle est en minorité, c'est-à-dire s'il n'y a autour d'elle qu'une, deux ou trois cellules dans le même état qu'elle, ce qui représente le comportement suivant : je déménage si je suis en minorité relativement à mes voisins. Avant de donner un exemple montrant l'évolution typique des automates gouvernés par cette règle, soulignons le caractère extrêmement idéalisé du modèle : il va sans dire qu'il ne prend en compte qu'une toute petite partie du comportement réel des agents, mais comme nous allons le voir, il n'en possède pas moins une certaine efficacité prédictive.

Partons de la situation initiale présentée par Schelling lui-même : une distribution aléatoire de cellules vides, de « 0 » et de « # » :

Figure tirée de Schelling (1971), p. 155

Au bout de quelques itérations de la règle, on obtient un net effet de ségrégation :

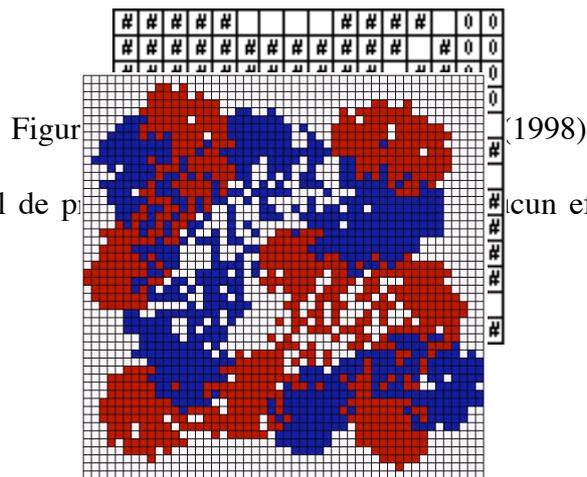


Afin d'avoir une idée plus précise de ce type d'automate, prenons d'autres exemples tirés de Hegselmann et Flache (1998) qui utilisent un voisinage de Moore généralisé à des carrés de 11 côtés. En faisant varier le paramètre de détermination de l'individu déménage dans le cas où il n'est pas dans la même catégorie que lui, on obtient à partir d'une configuration initiale aléatoire

de ce type d'automate, prenons d'autres exemples tirés de Hegselmann et Flache (1998) qui utilisent un voisinage de Moore généralisé à des carrés de 11 côtés. En faisant varier le paramètre de détermination de l'individu déménage dans le cas où il n'est pas dans la même catégorie que lui, on obtient à partir d'une configuration initiale aléatoire

Figure tirée de Hegselmann et Flache (1998)

Même si la règle d'évolution est telle que le seuil de déménagement est de 30% on obtient encore un effet de ségrégation :



En revanche, si le seuil de déménagement est plus élevé, aucun effet de ségrégation n'est observé :

aucun effet de ségrégation n'est observé :

Figure tirée de Hegselmann et Flache (1998)

En quoi de tels modèles éclairent-ils la question de la dynamique de la science ? On pourrait considérer que leur étude est marginale et n'apporte aucune information pertinente sur ce sujet. A l'inverse, on pourrait, une fois le premier étonnement passé, être aveugle à l'originalité de ces modèles et ne pas comprendre en quoi ils s'écartent des canons de la

modélisation pré-computationnelle.

Afin de répondre à la première de ces objections potentielles, nous soulignons que l'étude de phénomènes sociologiques ou économiques au moyen d'automates simples ou de modèles distribués (simulations multi-agents) n'a rien d'une bizarrerie et constitue une contribution authentique à l'économie et à la sociologie (Batty, 2007). Il s'agit d'un domaine jeune mais dynamique (voir Humphreys, 2004, § 4.6 pour une présentation philosophique) : certains des auteurs qui y ont contribué, comme Robert Axelrod ou Thomas Schelling (prix Nobel 2005), ne peuvent guère être soupçonnés de marginalité dans leur champ. Afin de répondre à la seconde, nous proposons l'analyse qui suit.

Que peut-on tirer des automates présentés ci-dessus ? Par comparaison avec d'autres approches en sciences sociales, leur capacité de représentation des faits sociaux semble désespérément simpliste -- si du moins on s'en tient à la considération de la règle d'évolution. A première vue, les comportements humains ne semblent en effet pas susceptibles d'être réduits à des mécanismes aussi simples : il semble que le choix d'un déménagement fasse intervenir bien d'autres considérations que la seule composition du voisinage.

Une analyse plus détaillée, comme celle menée par Hegselmann et Flache (1998), permet néanmoins de comprendre que le succès empirique de ces modèles s'explique (i) par leur capacité à représenter les caractéristiques fondamentales de certains processus sociaux, et (ii) par le fait que certains phénomènes sociaux à grande échelle, comme les effets de ségrégation, résultent bien de décisions prises à l'échelle individuelle, mais n'en sont pas des résultats attendus.

Le point (ii) ne fait pas difficulté : le fait que l'agrégation d'actions individuelles puisse produire des phénomènes cohérents à une échelle supérieure est couramment admis. Le point (i) constitue une hypothèse plus audacieuse, puisque les caractéristiques fondamentales des phénomènes sociaux sont rarement identifiées à des mécanismes aussi simples et partiellement opaques aux agents eux-mêmes, qui peuvent même ne pas souhaiter arriver à une telle situation de ségrégation, et avoir au contraire une préférence générale pour une répartition non ségrégative<sup>11</sup>. Cependant l'identification de mécanismes explicatifs minimaux n'est pas en contradiction avec la pratique de l'explication en économie, qui repose en général sur l'étude de modèles hautement idéalisés -- à tel point que le modèle de Schelling peut même être considéré comme un exemple typique de la construction de modèles en économie (Sugden, 2000).

Même dans ces conditions, le caractère hétérodoxe du modèle de Schelling, du point de vue de la science pré-computationnelle, mérite d'être souligné. Outre qu'il ne repose pas sur une représentation générale du phénomène étudié, il permet d'explorer une hypothèse qui ne possède pratiquement aucune justification provenant de connaissances bien établies en économie ou en sociologie, ou d'une théorie bien confirmée (violation de la règle 5). Il se distingue notamment des modèles économiques classiques en ce qu'il n'utilise pas le concept d'équilibre : en effet, la situation stable finale (la ségrégation spatiale) est obtenue comme un effet de la dynamique et non à partir d'hypothèses préalables d'équilibre. De plus, comme c'est le cas pour toutes les simulations, le résultat obtenu manque de généralité (violation de la règle 3), et il est nécessaire de vérifier par d'autres simulations que ce mécanisme possible de ségrégation est à l'œuvre dans des situations plus complexes ou différentes (voir par exemple Pancs et al. 2007, Stauffer, et al. 2007, Clark et al. 2008). En résumé, même si Schelling, qui voulait montrer qu'il n'était pas nécessaire que les habitants d'une zone soient

---

<sup>11</sup> Ces conséquences sont opaques puisque une préférence faible en faveur d'une caractéristique locale du voisinage peut suffire à produire une ségrégation globale et un environnement social complètement homogène. Il s'agit d'un effet surprenant pour le chercheur et non-intentionnel du point de vue des agents.

favorables à la ségrégation spatiale pour que l'espace urbain soit organisé en zones raciales sans mixité, put pour cela se contenter d'explorer quelques grilles de ce modèle à la main, son étude scientifique systématique et approfondie, ainsi que son extension en un champ de recherche à part entière, ne sont envisageable qu'au moyen d'ordinateurs.

Cet exemple, ainsi que plus généralement les simulations multi-agents, montre que grâce aux ordinateurs, on peut explorer de nouveaux territoires de l'espace théorique en économie et en sociologie. La nouveauté ici est double. D'abord, contrairement aux modèles présentés dans la section 4, le modèle de Schelling et ses successeurs ne se situent pas dans le prolongement de modèles bien ancrés dans la théorie économique. En outre, ils proposent une hypothèse sur des phénomènes à propos desquels la théorie économique n'indique rien de précis ni ne fournit de modèle concurrent.

### 5.3 Les fluides sur réseaux

Notre second exemple dans cette section nous ramène à l'hydrodynamique, discipline dans laquelle les modèles fondés sur les automates cellulaires constituent aujourd'hui une branche importante. Les automates cellulaires qui y sont utilisés sont appelées « fluides (ou gaz) sur réseaux ». En analysant brièvement ces modèles, nous présentons un nouveau cas de rupture forte entre la science computationnelle et les pratiques antérieures. Cet exemple est complémentaire du précédent au sens où, cette fois, ces modèles sont développés dans un domaine déjà bien décrit par la physique classique et dans lequel il existe déjà une tradition de modélisation à partir de l'équation de Navier-Stokes (voir la section § 4.1).

Dans l'étude des systèmes complexes, dont font partie les fluides, c'est la capacité des automates cellulaires à représenter des systèmes physiques possédant de nombreux degrés de liberté en interactions locales non linéaires qui est utilisée. Dans un fluide sur réseau, certaines combinaisons de cellules noires représentent des molécules ; la règle d'évolution permet de représenter les mouvements et collisions entre molécules. Les directions possibles pour les mouvements des molécules sont en nombre fini ; les vitesses prennent des valeurs discrètes, et seul un nombre fini d'interactions entre molécules sont possibles. Les fluides sur réseaux sont donc des modèles *discrets* des fluides qui sont classiquement étudiés au moyen d'équations continues comme les équations de Navier-Stokes, ainsi que nous l'avons indiqué dans la section 4.

Plusieurs automates cellulaires ont été explorés pour modéliser le comportement des fluides, d'abord à partir de réseaux carrés, puis à partir de réseaux hexagonaux. On a établi que le modèle à symétrie hexagonale appelée « FHP » (des initiales de ses trois auteurs Frisch, Hasslacher et Pomeau, 1986) est le modèle discret minimal<sup>12</sup> à partir duquel on peut retrouver un comportement hydrodynamique en deux dimensions. Cela signifie que les combinaisons de cellules noires qui représentent des molécules dans ce modèle ont collectivement un comportement qui possède une large part des propriétés des fluides observés expérimentalement : par exemple, on observe à l'écran des phénomènes d'écoulements laminaires, de turbulence, etc., caractérisés par les mêmes propriétés quantitatives que les écoulements réels.

Une simulation typique à partir du modèle FHP engage suffisamment de molécules pour qu'il soit envisageable d'étudier le comportement moyen du fluide en chaque point. Leur comportement collectif est prédit à partir des règles suivantes :

- les particules sont identiques, de masse 1 et de vitesse moyenne  $c$  ;

---

<sup>12</sup> Un modèle minimal est tel que si l'on omettait l'une de ses propriétés constitutives, il n'exhiberait pas les comportements recherchés.

- l'espace et le temps sont totalement discrets ;
- un ensemble minimal de règles de collision définissent des collisions binaires et ternaires durant lesquelles la quantité de mouvement et le nombre de molécules sont conservés ;
- deux particules sur le même site au même moment ne peuvent se mouvoir dans la même direction (principe d'exclusion).

A l'échelle des particules, le comportement du modèle est bien entendu différent de ce qu'on imagine être le mouvement des molécules d'eau par exemple, qui peuvent se déplacer en tous sens (isotropie), et non selon quelques directions privilégiées. Mais la différence entre ce modèle discret et le modèle continu décrit par l'équation de Navier-Stokes disparaît lorsque l'échelle d'observation est suffisamment grande pour que les cellules ne soient plus visibles. Ainsi, aussi surprenant que cela puisse paraître, ce modèle apparemment très pauvre de dynamique moléculaire peut manifester à peu près toutes les particularités des phénomènes hydrodynamiques, et permet donc de les étudier de façon contrôlée.

Deux remarques peuvent être faites à propos de cet exemple relativement à la conception de la science computationnelle qui est discutée dans cet article.

(i) Tout d'abord, les modèles de gaz sur réseaux ne tirent pas leur origine de la théorie de l'hydrodynamique ; en particulier ils ne sont pas issus de l'étude numérique des équations de Navier-Stokes qui constituent le coeur de cette théorie. Ils sont obtenus indépendamment, à partir de la considération de lois de conservation et des symétries correspondantes.

(ii) D'autre part, une différence significative entre cet exemple et le précédent est que les fluides sur réseaux, même s'ils n'ont pas été développés à partir des équations de Navier-Stokes mais à partir d'une dynamique moléculaire simplifiée, sont utilisés pour parfaire le développement de l'hydrodynamique : ces modèles entretiennent donc une relation privilégiée avec une théorie existante, qu'ils contribuent à approfondir. Ainsi ces modèles sont-ils calibrés en vérifiant que leur comportement à l'échelle macroscopique est bien décrit par les équations de Navier-Stokes. Cependant, ces modèles vont à l'encontre de ce que dit littéralement la mécanique à propos des symétries des systèmes étudiés (violation des règles 2 et 5) – et il s'agit en l'occurrence de violations patentes et importantes du point de vue de la mécanique classique, comme le fait que l'espace dans lequel se meuvent les « particules » à l'échelle microscopique n'est pas isotrope, puisque seules six directions de mouvement sont autorisées, ou que la gamme des vitesses possibles n'est pas continue mais que les vitesses possibles sont en nombre fini. Ainsi, la justification de la validité prédictive des gaz sur réseaux et l'interprétation de leurs résultats sont beaucoup plus difficiles que les mêmes opérations à propos des simulations directes de l'équation de Navier-Stokes (violation de la règle 2).

Même au sein d'un domaine déjà bien connu comme l'hydrodynamique, la science computationnelle permet ainsi d'explorer de nouvelles hypothèses explicatives et de nouveaux modèles, qui ne sont pas des excroissances de modèles plus classiques, et qui nous apportent un éclairage théorique différent. Cela est rendu possible par les capacités de calcul des ordinateurs, grâce auxquelles on peut se permettre des explorations théoriques qui étaient inenvisageables auparavant. L'exemple des fluides sur réseaux illustre la fécondité potentielle d'une démarche parfois jugée comme audacieuse, qui consiste à aborder un problème scientifique dans un formalisme complètement différent de celui qui est couramment adopté, ici un formalisme discret par opposition au formalisme continu des équations différentielles. Rester dans le formalisme traditionnel est un gage de sécurité ; mais cela impose de limiter les possibilités d'exploration théorique et de construction de modèles. En choisissant la voie des automates cellulaires, dont le succès a aujourd'hui montré qu'elle n'était finalement pas si risquée qu'elle paraissait de premier abord, on peut porter un regard nouveau sur un domaine

pourtant séculaire. On peut notamment comprendre de quels traits microscopiques le comportement macroscopiques dépend réellement.

#### 5.4 Analyse : la science computationnelle, vivier de nouvelles entreprises scientifiques

Nous venons de voir à travers les deux exemples ci-dessus que les capacités de calcul offertes par les ordinateurs étaient à l'origine de développements théoriques radicalement nouveaux au sens où ils procèdent à partir de modèles qui ne sont le prolongement d'aucune tentative antérieure. Qu'on ne s'y trompe pas : ni les ordinateurs ni les automates cellulaires ne transforment la démarche scientifique *en général* ; c'est plutôt la dynamique de la construction des modèles qui change en partie de rythme et de déterminants.

En résumé, la dynamique de la science est désormais libérée de la camisole de force du calcul analytique littéral. Certes, les contraintes computationnelles restent des obstacles majeurs mais elles ont été repoussées tellement loin par rapport au régime de science précédent que la façon dont on choisit d'explorer tel ou tel type de modèle n'est plus gouvernée par les mêmes impératifs. La question centrale dans le choix d'un modèle n'est plus : « Est-il soluble analytiquement ? », mais : « Puis-je mobiliser les ressources computationnelles dont je dispose pour résoudre ce modèle ? ; Etant donné les résultats espérés, cela en vaut-il la peine ? »

Dans ces conditions, les règles de prudence scientifique présentées dans la section 2 ci-dessus ne sont plus systématiquement respectées, comme l'attestent les exemples « baroques » de cette section. Comme nous l'avons vu, ces modèles ne peuvent pas être étudiés par des méthodes analytiques ; leur résolution passe par des simulations qui ne fournissent pas de résultats généraux ; ils utilisent un formalisme inédit qui ne permet pas de réutiliser facilement les acquis théoriques existants, souvent formulés dans d'autres formalismes ; enfin, leur justification et leur interprétation ne vont pas de soi.

Ainsi le développement des ressources informatiques autorise-t-il une liberté de choix bien plus grande que par le passé vis-à-vis des structures mathématiques utilisées pour la modélisation. D'abord, en rendant accessible l'étude de nouveaux modèles et donc en transformant la carte des entreprises scientifiquement possibles. Ensuite, en diminuant la « pression computationnelle », c'est-à-dire le coût relatif de l'étude d'un modèle par rapport aux ressources computationnelles d'un individu ou d'un groupe. Plus cette pression computationnelle est faible, plus il devient envisageable d'adopter des stratégies scientifiques non-conventionnelles et risquées, surtout dans les cas où l'exploration du modèle nécessite un ordinateur personnel utilisable *ad libitum* mais ne requiert pas de grand ordinateur dont l'accès est restreint et doit être demandé et justifié – ce qui peut être un facteur supplémentaire de conservatisme dans le choix des modèles. De fait, même si les propriétés fondamentales utilisées dans le modèle de Schelling (les individus ne se déterminent que relativement à leurs voisins) ou dans les gaz sur réseaux (par exemple, les propriétés de conservation) ne sont pas incongrues au vu des phénomènes à étudier, elles ne suffisent pas à justifier de prime abord l'entreprise consistant à explorer ces modèles de façon systématique : la justification et l'adoption collective des modèles vient par la suite, une fois que des chercheurs aventureux et confirmés (Thomas Schelling d'un côté, Uriel Frisch, Brosl Hasslacher et Yves Pomeau de l'autre) ont individuellement assumé le risque d'étudier ces modèles et d'en apprendre suffisamment sur leur évolution dans le temps pour s'assurer de leur intérêt.

Il est donc légitime de considérer que la dynamique de la science est entrée dans une nouvelle ère avec le développement des ordinateurs. L'adoption de stratégies scientifiques plus aventureuses est facilitée par l'abondance des ressources computationnelles. Des voies s'ouvrent qui, au sein de la science traditionnelle, auraient semblé trop risquées ou

impraticables. Les ordinateurs, en relâchant la pression computationnelle, permettent aux scientifiques de ne pas en rester à des stratégies bien rodées, sûres, et donc conservatrices, et de tirer de nouveaux bénéfices, propres aux stratégies plus audacieuses.

## 6. Conclusion

Le tournant computationnel introduit sans conteste des transformations majeures dans la pratique scientifique. Pour ce qui concerne la construction et l'exploration de modèles, nous avons vu que ces transformations pouvaient être analysées en première approche de deux façons différentes, comme étant d'un côté dans le prolongement des pratiques antérieures (où les nouveaux modèles sont généralement une extension de théories et modèles déjà bien maîtrisés), et de l'autre comme impliquant une rupture (dans le sens où le développement de modèles de types radicalement nouveaux est autorisé). Ainsi certaines branches de la science voient-elles leur développement s'accélérer prodigieusement (discontinuité faible car seulement quantitative); et par ailleurs, des branches nouvelles, fruits de la science computationnelle, plus foisonnantes, voient le jour (discontinuité qualitative ou forte). Ainsi, la dynamique des fluides computationnelle et les simulations de Monte-Carlo, quoique non révolutionnaires théoriquement, sont devenus de nouveaux champs d'étude. Et l'étude des modèles inspirés de celui de Schelling ou des gaz sur réseaux ont fini par se développer en des branches de recherche radicalement nouvelles. L'utilisation des ordinateurs permet donc à la fois de franchir les barrières computationnelles qui constituaient des contraintes fortes sur le développement scientifique, et d'ouvrir des voies entièrement nouvelles.

Pour analyser ce tournant computationnel, nous avons dû décrire et essayer d'expliquer le plus ou moins grand conservatisme, souligné notamment par Kuhn et Cartwright, qu'on peut observer en science dans les activités de théorisation et de modélisation. Contre les explications insistant sur les raisons internes à une science ou les explications purement sociologiques, nous avons défendu la thèse que la prise en compte de la contrainte computationnelle, liée à la difficulté mathématique des problèmes et partagée synchroniquement par l'ensemble des disciplines, permet de comprendre en quoi, pour obtenir des résultats, les scientifiques doivent souvent s'appuyer sur des stratégies déjà rodées qui sont généralement une garantie contre l'échec. Nous avons également essayé de préciser les stratégies utilisées pour répondre à la contrainte computationnelle en identifiant des règles élémentaires que les scientifiques suivent en fonction du degré de conservatisme de leur pratique. Notre analyse explique ainsi que le conservatisme n'est pas un état de fait épistémologique immuable mais varie en fonction des situations scientifiques puisque le relâchement de la contrainte computationnelle, lié au développement du savoir mathématique et des ressources computationnelles, rend possible l'étude de modèles plus nombreux et plus divers, c'est-à-dire l'adoption de stratégies plus audacieuses autorisant parfois des avancées scientifiques inédites.

## Références

Azzouni, J. (2000). *Knowledge and Reference in Empirical Sciences*, Londres : Routledge.

Barahona, F. (1982). « On the Computational Complexity of Ising Spin Glass », *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 15 : 3241–3253.

- Batty, M. (2007). *Cities and complexity : understanding cities with cellular automata, agent-based models, and fractals*, Cambridge, Massachussets : MIT Press.
- Bird, A. (2000). *Thomas Kuhn*, Princeton : Princeton University Press.
- Cartwright, N. (1983). *How the laws physics lie*, Oxford : Oxford University Press.
- Clark, W. A. V. et Fossett, M. (2008) « Understanding the social context of the Schelling segregation model », *Proceedings of the National Academy of Science of the United States of America*, March 18; 105(11): 4109–4114.
- Darrigol, O. (2006). *Worlds of Flows. - A History of Hydrodynamics from the Bernouillis to Prandtl*, Oxford : Oxford University Press.
- Frigg, R. et Reiss, J., (2009). « The Philosophy of Simulation : Hot New Issues or Same Old Stew ? », *Synthese*, 169 (3), pp. 593-613.
- Frigg, R. Hartmann, S., et Imbert, C. (dir.) (2008). *Models and Simulations 1*, numéro spécial de *Synthese*, vol. 169, no. 3.
- Frigg, R., Hartmann, S., et Imbert, C. (dir.). *Models and Simulations 2*, numéro spécial de *Synthese* (à paraître).
- Frisch U., Hasslacher, B., Pomeau, Y. (1986). « Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation », *Physics Review Letter*, 56, 1505-1508.
- Galison, P. (1997). *Image and Logic : a material culture of microphysics*, Chicago : University of Chicago Press.
- Hegselmann, R. and Flache A. (1998). "Understanding Complex Social Dynamics: A Plea for Cellular Automata Based Modelling," *Journal of Artificial Societies and Social Simulation*, 1.
- Humphreys, P. (2004). *Extending Ourselves: Computational Science, Empiricism, and Scientific Method*, Oxford : Oxford University Press.
- Istrail, S. (2000). « Statistical Mechanics, Three-dimensionality and NP-completeness », *Proceedings of the thirty-second annual ACM symposium on Theory of computing*. ACM, New York USA : 87–96.
- Krauth, W. (1998). « Introduction to Monte Carlo Algorithms », In : *Advances in Computer Simulation* (J. Kertesz et I. Kondor, dir.) Lecture Notes in Physics, Springer Verlag.
- Kuhn, T. (1970). *La Structure des Révolutions Scientifiques*, Champs Flammarion, traduction par Laure Meyer, 1983.
- Lakatos, I. (1970). « Falsification and the Methodology of Research program », In Imre Lakatos and Alan Musgrave (eds.) *Criticism and the Growth of Knowledge*. Cambridge: Cambridge University Press : 91–197.
- Lakatos, I. (1994). *Histoire et méthodologie des sciences : programmes de recherche et*

*reconstruction rationnelle*, Paris : Presses Universitaires de France.

Metropolis, N., Rosenbluth A., Rosenbluth M., Teller A., et Teller E. (1953). « Equation of State Calculations by Fast Computing Machines », *Jour. Chem. Phys.*, 21, 6 : 1087-1092.

Pancs R. et Vriend N. J. (2007). « Schelling's spatial proximity model of segregation revisited », *Journal of Public Economics*, 91 (1-2) : 1-24.

Popper, K. R. (1935). *La Logique de la découverte scientifique*, traduction par Nicole Thyssen-Rutten, Philippe Devaux, Payot, coll. « Bibliothèque scientifique », 2007.

Popper, K.R. (1963). *Conjectures et Réfutations: La croissance du savoir scientifique*, traduction par Michelle-Irène B. de Launay et Marc B. de Launay, Payot, coll. « Bibliothèque scientifique », 2006.

Rohrlich, F. (1990). « Computer Simulation in the Physical Science », *PSA 1990*, volume 2: 507-518.

Schelling, T. (1969). « Models of segregation », *American Economic Review* (59) : 488-493.

Schelling, T. (1971). « Dynamic models of segregation », *Journal of mathematical sociology* 1 : 143-186

Stauffer, D. et Solomon, S. (2007). « Ising, Schelling and self-organisation », *The European Physical Journal B : Condensed Matter and complex Systems*, 57 (4) : 473-477.

Sugden, R. (2000). « Credible worlds :the status of theoretical models in economics », *Journal of Economic Methodology*, 7 : 1-31.

Winsberg, E. (1999). « Sanctioning Models: The Epistemology of Simulation », *Science in Context*, 12: 275-92.

Winsberg, E. (2001). « Simulations, Models, and Theories: Complex Physical Systems and their Representations », *Philosophy of Science*, 68: S442-S454.

Wolfram, S. (1984). « Universality and complexity in cellular automata », *Physica D* (10): 1-35.