

# Simulations numériques et expériences scientifiques

Anouk Barberousse

Université Lille I et UMR Savoirs, Textes, Langage

# Introduction

# Objet de l'exposé : les simulations numériques

- Élément principal d'une simulation numérique : un programme informatique
- Usage intensif dans l'ensemble des disciplines scientifiques
- Vocabulaire flottant : "modèles numériques", "modèles computationnels", "expériences numériques", ...

# Questions abordées

- Les simulations numériques sont-elles capables de produire
  - des données *empiriques* ?
  - de même qualité que les expériences ?
- Un ordinateur est-il vraiment susceptible de nous apprendre quoi que ce soit sur le monde ?
- Les expériences ne sont-elles pas, de toute évidence, notre principale source de données empiriques, et la plus légitime ?

# Angle d'attaque

- La question est d'actualité, comme en témoigne l'usage courant des simulations comme substituts d'expériences -- elles sont considérées comme produisant des données empiriques.
- Aller au-delà de l'évidence initiale du privilège des expériences ; en analyser les raisons et les confronter à un examen détaillé des simulations numériques.

# Plan

- Qu'appelle-t-on des données "empiriques" ?
- Critères de comparaison entre expériences et simulations du point de vue de la production de données :
  - caractère probant
  - fiabilité
  - nouveauté

**"Données empiriques"**

# "Données"

- Sens flou
- Des éléments d'information que l'on tient pour acquis, sur lesquels on peut s'appuyer.
- Par opposition aux hypothèses et théories, ils ne sont pas susceptibles d'être transformés au cours de l'investigation empirique.
- Les briques élémentaires de la construction des connaissances.
- Des ensembles de nombres, souvent inutilisables tels quels
- Grande importance du *traitement* (informatique) des données

# Données "empiriques"

- Des éléments d'information *sur* des systèmes physiques (biologiques, sociaux, ...)
- Mode traditionnel d'obtention de données empiriques : par interaction avec un système dans le monde
  - interaction perceptive, accompagnée d'une interprétation
  - interaction instrumentale, également accompagnée de plusieurs couches d'interprétation
- Mode plus récent : par l'intermédiaire de simulations numériques

# Sur quoi l'information recueillie porte-t-elle ?

## **Expériences :**

- Distinction entre objet et cible de l'expérience
- La relation importante est celle de *représentativité* de l'objet de l'expérience vis-à-vis de sa cible
- La représentativité est garantie par les connaissances d'arrière-plan sur l'objet d'une part, la cible de l'autre.

## **Simulations :**

- La distinction entre objet et cible est-elle pertinente ?
- La relation importante est celle de *représentation* (le modèle représente  $\pm$  bien la cible).
- La qualité de la représentation est garantie par les connaissances générales que l'on a sur la cible.

# Premiers éléments de comparaison

# Relations de représentation

## "Objet"

- Fondement de la relation de représentation : identité matérielle *ou* mêmes équations
- L'identité matérielle est insuffisante pour valider la relation de représentation.

Expériences

## Modèle

- Fondement de la relation de représentation : validité des équations et des valeurs initiales
- La nécessité d'entrer des valeurs initiales rend-elle les interactions physiques indispensables ?

Simulations

# Approfondissement de la comparaison

# "Outputs", résultats, données, connaissances

- Les "sorties" des simulations ("données brutes") ne sont jamais utilisées telles quelles.
- Elles subissent différents traitements destinés à la rendre utilisables *en tant que données* ("résultats").
- Selon la qualité du modèle, ces données participent au processus de constitution de connaissances.

# Critères de la comparaison

- Caractère probant
- Fiabilité
- Nouveauté

# Caractère probant et fiabilité

- Les résultats des simulations nous permettent-ils d'affirmer quoi que ce soit de valide sur les systèmes cibles ?
- La probabilité d'une hypothèse peut-elle augmenter au vu des résultats d'une simulation ?
- La fiabilité est le critère qui suscite le plus de défiance dans les débats.
- Mais dans de nombreux domaines, on ne s'appuierait pas sur les seuls résultats des expériences, jugés trop peu fiables.
- Exemples courants : industrie pharmaceutique, nucléaire civil et militaire

# Le cas des expériences

Comment établit-on la fiabilité et le caractère probant de leurs résultats ?

- Contrôle du dispositif expérimental (à partir de résultats déjà connus)
- Evaluation d'hypothèses sous-jacentes à la bonne qualité de l'expérience :
  - H1 : On mesure bien ce qu'on veut mesurer.
  - H2 : On mesure avec la précision requise.
  - H3 : Il n'y a pas d'artefacts.
  - etc.
- Ces procédures reposent sur l'utilisation de modèles.

- Modèle : ensemble de connaissances ou d'hypothèses nombreuses et détaillées sur le phénomène étudié.
- Elles guident la construction du dispositif expérimental ainsi que les actions à mener pour obtenir de l'information pertinente.
- Le jugement final sur la qualité des données produites dépend de la qualité des modèles utilisés.

# Le cas des simulations

Comment établit-on la fiabilité et le caractère probant de leurs résultats ?

- Comparaison avec des résultats déjà connus
- Validation du modèle théorique sous-jacent et de sa transcription dans le programme informatique
- Vérification de la cohérence et de la bonne tenue du calcul

- De nombreux aspects des procédures de validation sont communs aux expériences et aux simulations.
- La principale différence réside dans la procédure de vérification du calcul.
- Des causes spécifiques de dysfonctionnement sont liées aux caractéristiques du calcul :
  - opacité épistémique,
  - caractère composite des programmes,
  - on obtient des valeurs de sorties même quand le calcul effectué n'est pas celui que l'on veut.
- Mais ces problèmes peuvent être également surmontés.

# Nouveauté

- Les non-utilisateurs de simulations sont souvent convaincus que les données issues des simulations sont incapables de déboucher sur des connaissances nouvelles, contrairement aux données issues des expériences.
- Plusieurs dimensions :
  - Contexte de l'enquête empirique : Que reste-t-il à découvrir ?
  - Nature des simulations :
    - simulations fondées sur des règles d'évolution locale (automates cellulaires, ABMs, ...)
    - simulations fondées sur la discrétisation d'équations différentielles

# Les sens de la nouveauté

- En *terra incognita*
- La nouveauté qui ne surprend pas
- La nouveauté qui surprend
  - hors cadre
  - dans le cadre

# La conception "laplacienne" des simulations

- Les simulations comme séries de déductions.
- "Rien de plus dans la conclusion que dans les prémisses".
- Identification du calcul symbolique au raisonnement scientifique.
- Mais les sorties des simulations ne sont pas assimilables aux conclusions d'un raisonnement théorique.

**Conclusion**

- Deux sources de la réticences vis-à-vis de la capacité des simulations numériques à produire des données empiriques dignes de ce nom :
  - la conception laplacienne des simulations
  - le présupposé selon lequel la source des données est dans l'expérience
- Ces deux conceptions sont erronées.