

### 3 - Modélisation et complexité

par Pierre Perrier

#### 1 Modélisation

*La modélisation est la recherche d'une expression simplifiée de la Nature dans sa complexité, qui permette d'en prévoir le comportement dans un intervalle de temps et d'échelle de grandeur. En simplifiant le Réel, le modèle donne accès à des prédictions plus ou moins précises selon la complexité résiduelle à l'échelle considérée, prédictions accessibles à la manipulation algébrique ou algorithmique. De façon pratique, l'usage de l'ordinateur ouvre, grâce à la modélisation, un champs scientifique nouveau avec sa méthodologie propre de validation expérimentale du modèle et d'usage de celui-ci pour prédire des comportements inaccessibles à la mesure car situés dans le passé ou le futur lointain ou à des échelles trop grandes ou trop petites pour être instrumentées.*

L'expression complète et cohérente d'un modèle est exigée pour être traitée sur ordinateur, en sorte que l'analyse numérique des modèles a beaucoup fait progresser la science dans la rigueur de ses hypothèses ; on exige la connaissance de la sensibilité des comportements de la Nature aux faibles perturbations, jusqu'aux limites imposées au champ du calcul ; on cherche la simplicité des modèles, qui a elle-même accru la modestie des scientifiques face aux bornes de leurs capacités prédictives ; elle a éliminé l'illusion que les "lois " de tous les comportements physiques, voire psychologiques ou sociaux, seraient accessibles à la Science assurant une mathématisation de toute la Nature.

La vérification expérimentale des hypothèses faites pour bâtir le modèle est à fonder dans un cycle de vérification expériences-calculs, validation qui met en cause, et la validité des expériences, et leur précision propre, et la validité des calculs avec leurs erreurs de programmation, et leur approximation discrète d'expressions mathématiques en général continues. La restitution d'un ensemble d'expériences singulières est nécessaire pour accéder à la moyenne que vise à calculer le modèle. Ainsi l'indétermination quantique fondamentale et l'application de lois des grands nombres contribuent à exclure du champ des modèles les événements singuliers ou faisant intervenir la non-localité et la dépendance vis à vis du processus de vérification. L'épistémologie de l'approche par modèle se révèle ainsi limiter singulièrement les ambitions explicatives de la science ; elle permet de considérer la connaissance scientifique dans un cadre plus équilibré et rigoureux.

Par exemple, l'hypothèse de la constance de la "constante " d'attraction universelle se vérifie par la cohérence des résultats de prédiction du mouvement des astres et la capacité donnée aux navigateurs de "faire le point " par référence à des tables prédictives du mouvement des astres, assimilés à des points dans le ciel. La modélisation se révèle maintenant un instrument efficace d'acquisition et de validation de connaissances nouvelles quand elle s'applique à restituer la cosmogénèse.

#### 2 Complexité et turbulence

Si la modélisation est une étape nécessaire de saisie du réel, c'est parce que celui-ci est complexe par son grain et sa dynamique. Le réel est granuleux et non pas indéfiniment délié ; il est fini et borné, individualisant des fermions exclusifs et interdisant d'interpoler le comportement à petite échelle du comportement à grande échelle. Le réel observable à la taille humaine est à mi-chemin,

en échelle logarithmique, des plus grandes et des plus petites tailles. Ainsi les mots utilisés par la science dans un sens précis avaient une valeur analogique (objet, particule, onde, point) et les verbes représentaient les actions et interactions entre eux (déplacement, ligne droite, structure en formation, en destruction chaotique, transmission de chaleur ou de messages informatifs...). L'usage des mêmes mots et verbes en philosophie et métaphysique pouvait induire des conflits de sens ou, au contraire, des convergences dans l'explication conjuguée du comment et du pourquoi. L'usage des modèles relativise mieux ces rapprochements que le formalisme mathématique platonicien, qui vise à l'explication totale. Mais c'est la complexité du réel qui, en gardant le déterminisme macroscopique, a le plus relativisé la prétention à utiliser la formulation mathématique des modèles comme métaphysiquement explicative.

Deux types de complexité ont été révélés par la pratique de la modélisation : la complexité des arrangements géométriques (on disait autrefois des formes) et la complexité de la dynamique. Le nombre d'édifices moléculaires possibles à partir des corps simples, leur arrangement aléatoire avec diverses échelles structurales, ont introduit une énorme diversité dans les agrégats qui nous entourent, éloignant deux états extrêmes, le "tout cristal" et le tout gazeux homogène "amorphe" respectant les lois des grands nombres. La technologie actuelle s'est saisie des agrégats fibrés, feuilletés, alternativement amorphes et cristallins, en s'inspirant de la complexité de la Nature sur la terre ; il en résulte l'obligation de modéliser des mélanges de domaines ayant des équations de comportement différentes, des interfaces multiples et singulières, et l'outil mathématique de choix pour remonter des petites échelles vers les grandes est l'homogénéisation et l'identification de formes "fractales", c'est-à-dire à répétibilité ou différenciation de formes multiéchelles. La complexité dynamique résulte du comportement instationnaire de parties du réel en mouvements irréguliers, provoqué par des interactions multiples. Poincaré, en identifiant mathématiquement le comportement des systèmes dynamiques, en a montré l'imprédictibilité à temps fini, et l'observation de la plupart des phénomènes dynamiques naturels a confirmé que cette imprédictibilité conduisait presque partout à des comportements chaotiques imprévisibles même s'ils étaient déterministes à notre échelle. L'usage de modèles numériques a permis de retrouver et préciser ces notions générales, en leur adjoignant une notion "d'explosion combinatoire" essentielle : la succession des bifurcations, comme la succession d'événements à seuils, ou à tests logiques (dans les programmes d'ordinateur comme dans les systèmes biologiques gérant de l'information) conduit à un nombre de cas possibles exponentiellement croissant avec leurs occasions. Cette croissance exponentielle des possibles exclut de les explorer tous par le calcul, puisqu'ils sont rapidement en nombre supérieur à tout ce qui pourrait être mémorisé ou simulé avec toutes les particules de l'univers. La modélisation de la turbulence devient ainsi un objectif scientifique dans chaque cas d'étude particulier de matière condensée (écoulements de fluides ou de matière...) dont l'importance est analogue scientifiquement à celle de l'étude de phénomènes de base à l'échelle quantique et pratiquement plus grande puisqu'elle gouverne toute la prédictibilité nécessaire en technologie.

### **3 Du microscopique au macroscopique : critique de la notion d'émergence**

L'existence fréquente de structures macroscopiques sans source microscopique évidente sinon le bruit usuel (résultant de la turbulence à une échelle inférieure, par exemple le bruit thermique) a pu faire croire à une "loi d'émergence" qui serait comme surajoutée (ou à surajouter dans les modèles) aux phénomènes moyens aléatoires usuels. La modélisation numérique plus fine des modèles ne consiste pas à simplement raffiner le pas de calcul en espace ou en temps, mais à ajouter à l'équation directe homogénéisée, l'équation linéarisée et son équation adjointe. Celle-ci donne les zones de sensibilité du phénomène observé dans le domaine considéré et compte tenu de ses limites

et interfaces. L'équation linéarisée fournit une série de modes correspondant à des énergies et périodes décroissantes. On peut alors ajouter à la résolution de l'équation de base celle du système dynamique des modes propres instantanés excités en ses points sensibles du domaine étudié (et le plus souvent sur ses limites) par le bruit à micro-échelle et on voit "émerger" les modes les plus amplifiés sous la forme de "structures ordonnées" plus ou moins stables. On n'a jamais trouvé jusqu'à présent "d'émergence" supplémentaire aux modèles usuels macroscopiques mais seulement le besoin d'une modélisation plus précise, qui prenne en compte correctement la croissance des structures favorisées par les conditions aux limites et le bruit microscopique aux endroits réceptifs. En fait, les structures émergentes sont comme les produits du "moule des modes propres", moule qui est imposé par les conditions aux limites. Les équations de base de la physique n'induisent ou ne sont cohérentes qu'au jeu des particules élémentaires ; celles-ci ne génèrent pas de structure aux tailles très supérieures aux limites imposées et informant ces formes dites émergentes dont elles deviennent les sources ou les moles.

On pourrait aussi imaginer que les "chaînes de bits" porteuses d'informations et réalisées par tous moyens matériels (permettant leur duplication ou exploitation) auraient elles-mêmes de "structures internes significatives" résultant de "l'émergence" de messages à partir d'un bruit les codant aléatoirement. Le même raisonnement, reposant sur le déterminisme des modèles qui leur donneraient naissance, exclut qu'ils soient générés autrement que par modes induits par des messages déjà portés par les conditions aux limites.

*Ainsi retourne-t-on au vieux principe de cohérence philosophique qui veut que le plus (de forme) ne sorte pas du moins (de forme ou d'information) ; on est renvoyé à une source au niveau quantique de toute forme émergente qui ne résulte pas d'un moule préexistant et formant la forme directement ou par l'intermédiaire de modes amplifiés qu'elle excite.*

A titre d'exemple le processus de transition à la turbulence d'écoulements cisailés initialement laminaires fait appel, comme on commence à le valider par modélisation, à l'amplification de séries de plusieurs modes propres se transmettant leur énergie de perturbation sur souvent plus de 5 ordres de grandeur à partir d'un bruit de fond très faible venant d'une perturbation très faible des conditions aux limites en fluctuation de vitesse ou de pression (ondes sonores). L'état final comprend un certain nombre de grosses structures morphologiquement semblables et interagissant pour nourrir le chaos général de la turbulence suivant cependant des "lois statistiques moyennes" assez précises. La physique des processus multiéchelles se révèle ainsi d'une richesse extrême déjà complètement contenue dans la plupart des modèles disponibles actuellement. On se rappellera pour bien saisir la complexité de la physique réelle que le passage des interactions quantiques des particules au modèle de l'équation de Schrödinger, à celui du modèle de Boltzmann, à celui de l'équation de Navier-Stokes des fluides et aux équations avec modèle de turbulence 3D puis 2D géostrophique fait intervenir 5 échelles de modélisation en mécanique des fluides usuelle (pour la prédiction des climats sur plus de 20 ordres de grandeur) et que chacun de ces modèles "informe" les grosses structures.

On notera également que l'identification de la source des événements singuliers (par exemple la tempête de fin de siècle) est difficile mais non exclue de toute prédiction probabiliste. C'est la réceptivité de l'équation modèle finale et la possibilité de saturation non linéaire à ce niveau des formes extrêmes qui filtreront l'émergence à partir du bruit aux échelles inférieures, excepté s'il y a cohérence entre les échelles ; ceci est a priori extrêmement improbable mais peut fixer la probabilité finale de l'événement exceptionnel étudié.

## 4 Quelques éléments conceptuels et pratiques acquis par l'analyse numérique

En utilisant la rigueur mathématique dans l'examen des procédures algorithmiques de résolution des équations modélisées et des traitements d'information, les spécialistes ont dégagé un corps de doctrine conceptuel et pratique qui assure une nouvelle connaissance des mouvements des corps inertes, des corps vivants informés au cours du processus d'évolution et des intelligences informées au cours des processus d'éducation ou d'apprentissage.

Examinons successivement ces acquis conceptuels et pratiques.

Dans le domaine de la simulation numérique des modèles physiques, il est apparu rapidement (avec la progression de la vitesse de calcul et de la taille des mémoires des super ordinateurs) que la mise en œuvre de l'algorithmique comme moyen de discrétiser des équations aux dérivées partielles devait faire face à trois problèmes propres à ces équations :

A.1 La régularité des solutions données par un algorithme ne garantissait pas leur conformité au modèle continu. Celui-ci est obtenu par homogénéisation mathématique dans les meilleurs des cas, ou simplement par inférence des propriétés de gradient des paramètres physiques du réel observé à l'échelle modélisée. Ainsi faut-il démontrer tôt ou tard mathématiquement l'existence et l'unicité des solutions du problème posé et la cohérence de la donnée des conditions aux limites et des conditions initiales du calcul. Comme le temps de calcul doit être fini pour une discrétisation du problème homogène aux besoins, il importe de maîtriser le processus de descente vers la solution, de l'accélérer le plus possible surtout si l'on suit un phénomène instationnaire. Il importe donc de savoir si la solution cherchée est dans un bassin attracteur large (stable) ou pointu (instable), avec éventuellement des vallées d'approche bien marquées, et si la solution fait partie d'un ensemble dense de solutions (un trou d'obus parmi des milliers d'autres d'un champ de bataille ?).

A.2 Le processus de descente lui-même peut être plus ou moins efficace. Plus on s'adresse à une descente mathématiquement régulière, plus on voudra utiliser la connaissance précise de la solution au voisinage du point de descente et ne pas avancer au hasard mais selon le gradient de la solution au premier, deuxième ordre... Le nombre de pas de calcul  $N$  va ainsi diminuer et la convergence sera en  $1/N$ ,  $1/N^2$ ... On peut aussi utiliser l'état adjoint, contrôler de façon optimale la variation des paramètres de descente et espérer converger en  $e^{-N}$  puisque l'on connaît le but visé : satisfaire en tout point du domaine de calcul l'équation discrétisée et respecter les conditions aux limites. Dans ce cas la convergence sera de plus en plus rapide et l'on convergera uniformément vers la solution sans générer de bruits parasites au cours de la descente.

A.3 Enfin, la précision du résultat dépendra de la bonne discrétisation du problème. Pour un nombre donné de points de contrôle de la solution, il est bien sûr évident que la précision sera d'autant meilleure que l'on mettra davantage en jeu les points où la solution varie, pour que l'interpolation entre ceux-ci ne génère que le minimum d'erreurs. Malheureusement il faudrait connaître la solution pour mettre les points au mieux, et on choisit donc de raffiner à mesure de la génération de la solution, avec le risque que la solution fine ne soit pas captée en cours de processus.

B. Si l'on s'intéresse maintenant à une chaîne de bits ou de données décrivant générativement l'objet solution du problème, on peut l'obtenir, soit par classe d'équivalence à un objet connu (génération de données décrivant le réel selon un programme déjà connu, c'est l'objectif de la plupart des traitements d'images) soit par dépendance logique générant un programme et ses

données ; c'est le cas des algorithmes génétiques. Dans ce cas on doit également disposer d'une fonction coût, analogue à la distance à la satisfaction de l'équation mais qui ne peut générer facilement des gradients et est donc condamnée à la convergence extrêmement lente d'une progression aléatoire (convergence en un sur racine de N) et à condition que les fluctuations soient bien normées (c'est pour cela qu'on travaille au niveau des bits).

C. Enfin on peut essayer de fabriquer un "modèle opératoire" qui pour toute entrée de conditions aux limites donnera directement une solution moyenne. On constitue alors une interface de nœuds de discrétisation au bord d'un réseau, et la sélection de données compatibles issues de solutions fournira les "poids" de corrélation entre ces données assurant la prédiction d'un nouveau cas. Si l'on prend N réalisations de la Nature ou d'une simulation complexe de celle-ci en entrée E, alors on obtiendra une approximation des traits saillants de ces dernières dans le domaine considéré. On n'a plus affaire à N itérations de descente mais à un apprentissage de N situations permettant de prédire une nouvelle situation homogène aux précédentes. Ce modèle est extrêmement puissant puisqu'il ne différencie pas l'aspect fonctionnel et l'aspect paramétrique et en met une image holographique répartie dans le réseau. Il peut donc extraire aussi bien des systèmes de contrôle automatique de trajectoires que le trait saillant (conceptuel au sens de l'utilisateur) d'un ensemble de données ou de comportements. Il sera utilisé en technologie quand ses limites seront mieux cernées car hors des limites son comportement peut devenir imprévisible bien que déterministe.

## **5 Application pratique des concepts précédents et implications philosophiques**

On va appliquer les concepts précédents tels qu'on peut les utiliser pour la prévision de phénomènes physiques complexes, à la critique conceptuelle de l'évolution génétique et de l'apprentissage des vivants.

a – Deux types de "prévisions dans le complexe" sont importants pour l'homme. La prévision de l'évolution moyenne de son environnement et celle des aléas extrêmes dont il doit se couvrir.

Il est clair que l'évolution moyenne ne peut être prédite exactement à partir de la résolution de l'équation homogénéisée. Il faudrait pour cela que les processus modélisés soient assez peu non linéaires, ni "hachés" .en même temps, pour que leur prévision moyenne ne soit pas entachée d'erreur. Or les effets à long terme peuvent venir d'effets qui sont minimes à court terme dans la boîte en temps et espace où se fait l'homogénéisation. Il suffit que l'effet cumulé d'événements rares ait une influence majeure : par exemple si tel polluant ne se dissipe pratiquement pas et n'est accumulé que pendant une très faible partie du temps (inversion de température rare, par exemple), il n'en résulte pas moins un effet notable à terme. De même si un événement extrême détruit un cycle écologique sa reconstitution peut être longue et non représentée par la moyenne, et les accidents naturels restent donc redoutables.

b – L'analyse des êtres vivants montre deux éléments contradictoires.

Le système de dérivation des différentes espèces vivantes est bien établi par de nombreux témoins du passé datables confirmant deux éléments importants de leur dérivation :

- d'une part, une dérivation en vallées et bassins attracteurs bien distincts mais reliés, qui éliminent une descente dans un système de convergences séparées, espèces par espèces,

- d'autre part, des bassins attracteurs assez larges, où la variabilité a permis la sélection dirigée par l'homme, conduisant au cheval de trait et de course ou au petit chien d'accompagnement et au Saint Bernard (très loin par la taille mais fonctionnellement identiques).

Mais on note avec étonnement un raccourcissement du temps de convergence vers les espèces les plus complexes, temps d'autant plus court qu'elles étaient plus complexes : du milliard d'années depuis les virus et les bactéries simples ( $10^{3-4}$  bits de message) jusqu'aux bactéries avec photosynthèse ( $10^6$  bits de message génétique), puis des tranches de demi-milliard d'années encore vers l'algue verte ( $10^7$  bits), les invertébrés ( $10^8$  bits) et les animaux supérieurs ( $10^9$  bits), dont le nombre de générations est très faible par siècle. Ce type de convergence est exponentiel et donc incompatible avec le processus de dérivation continue aléatoire de l'algorithme correspondant. En fait la variabilité dans les espèces et les temps d'adaptation aux écosystèmes sont complètement compatibles avec l'algorithmie génétique sélectionnant par le "plus reproduit" les variations aléatoires connues expérimentalement ; mais les "sauts" entre espèces ne le sont pas. Il faut admettre un processus complémentaire de contrôle optimal réalisant la fonction d'une émergence contrôlée ; les algorithmes les plus évolués à "recuits simulés" (mélange aléatoire-déterministe) échappent seuls à cette descente trop lente. Mais ils ne sont pas encore exponentiels.

De toute façon, la densité des molécules à base carbone de poids moléculaire élevé et viables que l'on trouve expérimentalement actuellement dans les biopuces confirme que l'émergence par le hasard n'a pu jouer que pour les protéines les plus simples, par les "moules" de ces protéines dans la "machinerie" des cellules. Des interactions multiples des systèmes fonctionnels du vivant résultent de la coexistence de protéines à destination fonctionnelle spécifique dans les mêmes milieux aqueux non partitionnés ; ceci oblige à des produits de probabilité énormes dans une sélection aléatoire, que réalisent mal les médicaments aux effets secondaires toujours très élevés. On rappelle qu'une décomposition cartésienne simple en  $n$  unités fonctionnelles indépendantes reporte sur les  $n!$  interfaces la réelle complexité du choix de molécules compatibles efficaces parmi une foule de molécules inefficaces. L'ajustement au milieu, par contre, est parfaitement décrit par les algorithmes génétiques.

c – Enfin la modélisation de la convergence faible des apprentissages des réseaux neuronaux reconstitue bien l'efficacité et la durée des processus d'apprentissage parents-enfants et enfants-enfants, par jeux et traditions de société permettant la multiplication des expériences de dressage et d'ajustement au réel. Cependant on doit noter que ceci oblige au développement préalable du réseau des capteurs et des effecteurs qui permettront la mise au point des gestes contrôlés puis des comportements autocontrôlés et des comportements sociaux nourris par l'apprentissage et la communication avec l'extérieur. Problème de poule et d'œuf...

Plutôt que d'éliminer les questions philosophiques ou métaphysiques comme mal posées grâce à une supposée puissance explicative du hasard et de l'émergence, les acquis récents de la modélisation des phénomènes complexes aident à cerner l'importance des questions et les points d'interrogation durs en ouvrant des questionnements de difficulté analogue à ceux posés par le modèle quantique : comment expliquer le contrôle optimal de l'évolution et de ses sauts, comment expliquer la source des informations apprises par apprentissage et des capacités conceptuelles supérieures pendant des capacités fonctionnelles inférieures ?

Il faudra bien que le métaphysicien propose des réponses à ces questions ; car la modélisation numérique, loin de tout scientisme, montre dès aujourd'hui que ces réponses échapperont définitivement à une saisie explicative par la science pure.