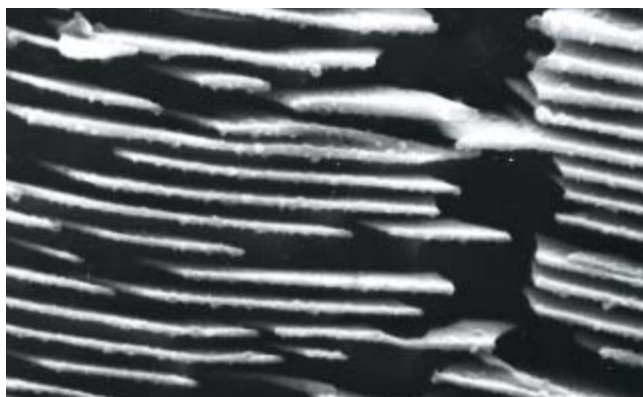
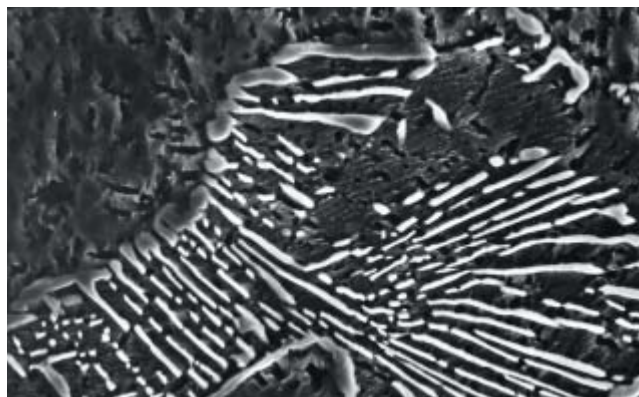
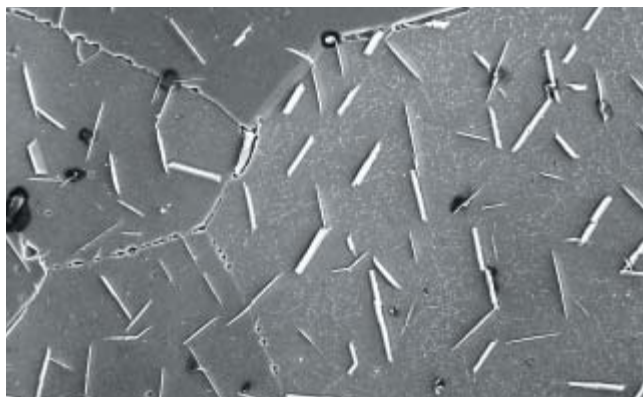




A. Criado, J. Martínez, J. Jiménez et R. Calabrès

6. STRUCTURES D'ACIER MODIFIÉES PAR LE VIEILLISSEMENT. En haut à gauche, des cristaux de carbure de fer précipités dans la ferrite d'une fibule trouvée dans la nécropole ibérique de Villanueva de Teba (IV^e-II^e siècles avant notre ère) dans la région de Burgos. En haut à droite, des plaques de cémentite sont noyées dans la perlite de l'acier d'une boucle de la même nécropole. En bas à gauche, des plaques cristallines sont présentes dans l'acier hypereutectoïde d'un clou romain du

Haut-empire de la villa romaine de Cerro Muriano (entre -100 et 100). En bas à droite : Tizona. On distingue une écorce de perlite fine associée à de la ferrite dans la zone de transition entre le noyau et la zone dure externe. Ces formes vieilles d'acier ne peuvent être reproduites en laboratoire parce qu'elles sont le résultat de centaines d'années d'évolution lente. Toute tentative de reproduction de telles structures à haute température conduit à des morphologies différentes.

tite se concentre dans la perlite sous forme de plaques en forme de prismes. Dans la bainite et la perlite, des blocs de ferrite se forment, au sein desquels la cémentite s'accumule sous des formes sphéroïdes. La précipitation de la cémentite se produit le long de certains plans des cristaux de ferrite. À mesure qu'il vieillit, le métal perd sa souplesse et sa résistance mécanique. Le processus de vieillissement dépend surtout de la diffusion lente du carbone dans la ferrite, et les formes les plus stables sont sélectionnées.

Ces phénomènes dus au vieillissement ont été observés dans tous les aciers et dans les fers archéologiques déjà étudiés. Avec le temps, les carbures s'accumulent et la taille moyenne des particules dépend du temps écoulé depuis l'élaboration de l'acier.

Afin de calculer l'âge de Tizona, nous avons construit un modèle mathématique reproduisant les phénomènes dus au vieillissement. Pour le valider, nous avons évalué l'âge de pièces antiques et médiévales dont on sait à quel moment elles ont été fabriquées,

et obtenu des résultats raisonnables. D'après notre modèle, Tizona daterait d'environ 950 ans, c'est-à-dire qu'elle aurait bien été forgée dans la première moitié du XI^e siècle, à l'époque du Cid. Nous espérons pouvoir bientôt préciser cette datation à dix ans près.

Nul ne sait comment une arme typiquement mauresque aurait pu devenir la propriété du Cid, même si ce dernier a longtemps servi un maître musulman. Par ailleurs, rien ne permet d'affirmer que la lame d'acier que nous avons étudiée, a effectivement appartenu à

l'homme de Burgos. A l'époque du Cid ou avant, les chevaliers chrétiens étaient nombreux à préférer les armes sarrasines. Ainsi, Roland, qui avait guerroyé longtemps en Espagne avant d'être tué au col de Roncevaux, en utilisait une, la célèbre *Durandal*. Charlemagne de son côté utilisait *Joyeuse*, elle aussi d'origine mauresque. De nombreuses questions restent ouvertes quant à l'origine de Tizona. Notre étude n'a établi avec certitude que deux choses : Tizona est une lame d'acier d'origine mauresque et elle date du XI^e siècle.

José CRIADO, Juan Antonio MARTÍNEZ, José Manuel JIMÉNEZ, et Rafael CALABRÈS appartiennent tous à l'équipe de recherches sur les techniques anciennes et l'archéométallurgie de la Faculté des sciences chimiques de l'Université Complutense de Madrid. Criado et Martínez sont professeurs au département de sciences des matériaux et d'ingénierie métallurgique, où Jiménez et Calabrès présentent leur doctorat.

Antonio J. CRIADO et al., *Metallographic Study of the Steel Blade of the Sword Tizona*, in *Practical Metallography*, vol. 37, n° 7 : 2000

Poema del mio Cid, Anonyme, Édition de Colin Smith, Ediciones Altaya S.A. Barcelona 1993. Ed en fr : *Le poème du Cid, La renaissance du livre*, s.d.

Le Cid : personnage historique et littéraire : anthologie de textes arabes, espagnols, français et latins avec trad., réunis par Mikel de Epalza, Suzanne Guel-laz, Paris Maisonneuve, 1983.

Un monde de spins

BRIAN HAYES

Tout au long du XX^e siècle, les physiciens ont étudié le modèle d'Ising, une représentation simplifiée de l'aimantation. Après de francs succès à une et deux dimensions, ils simulent le modèle à trois dimensions sur ordinateur...

Pierre-Simon de Laplace, mécanicien céleste, pensait que l'Univers est entièrement régi par les forces que les particules exercent les unes sur les autres. Il avait donc conçu un projet d'une ambition immense, qu'il pensait réaliser à l'aide d'un plan d'une extrême simplicité : il voulait mesurer toutes les forces et toutes les vitesses à un certain instant, puis reconstituer, par le calcul, l'évolution complète de l'Univers – passée, présente et future. Deux siècles de progrès scientifiques plus tard, le projet de Laplace n'a toujours pas abouti ; au contraire, la mécanique quantique, puis la théorie du chaos, l'ont rendu caduc. Pourtant, il existe des situations où le projet de Laplace semble réalisé : la modélisation des phénomènes physiques. Quand nous étudions un modèle plutôt que l'Univers réel, nous pouvons, en principe, suivre toutes les forces et tous les mouvements, inven-

ter et imposer des lois physiques. Pourtant, notre compréhension d'un tel modèle n'est souvent que partielle. Même si, avec ce modèle, nous parvenons à suivre les particules une à une, nous ignorons comment elles interagissent quand elles sont des millions. En d'autres termes, nous sommes alors incapables de prévoir des phénomènes thermodynamiques aussi élémentaires que l'ébullition ou le gel.

Un tel modèle, fut élaboré dans les années 1920 par les physiciens Wilhelm Lenz et Ernst Ising pour établir une théorie simplifiée du ferromagnétisme expliquant l'aimantation des barreaux de fer. Cette théorie est nommée modèle d'Ising, parce qu'Ernst Ising en fit le sujet de la thèse de doctorat, dirigée par Lenz, qu'il obtint à l'Université de Hambourg. S'il est une situation où le projet de Laplace avait un sens, c'est bien le ferromagnétisme décrit à la façon d'Ising!

Tout au long du XX^e siècle, les physiciens se sont passionnés pour ce modèle. Après le travail de pionnier d'Ising en 1925, Rudolf Peierls réalisa son importance en 1936 et Lars Onsager parvint en 1944 à déterminer par un calcul exact la transition de phase du système à deux dimensions, c'est-à-dire la température à laquelle il s'aimante brusquement. Une transition de phase est une transformation drastique d'un matériau, comme la solidification de l'eau à 0 °C. Le modèle d'Ising à trois dimensions a résisté, en revanche, aux efforts intenses entrepris pour l'explorer ; aujourd'hui, les physiciens s'évertuent toujours à le comprendre et à y identifier la transition de phase. Comme les calculs exacts demeurent hors de portée, les physiciens tentent aussi de réaliser le projet de Laplace... à l'ordinateur. Simuler ainsi le monde sur ordinateur est une gageure, car les résultats

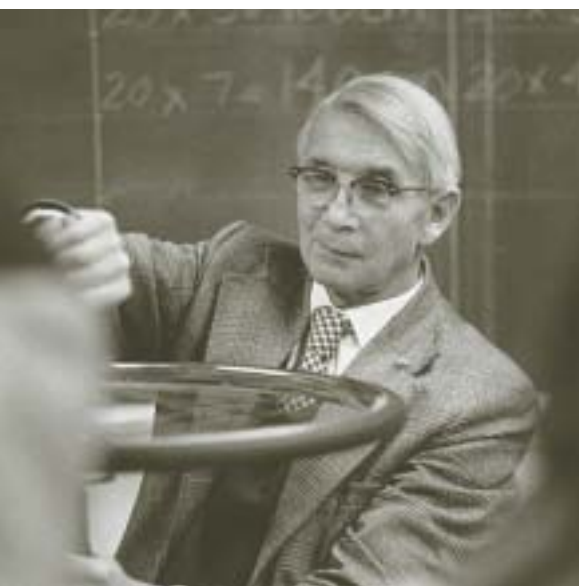
obtenus peuvent être une propriété réelle, mais aussi un artefact de calcul.

Le modèle d'Ising est une description naïve d'un réseau cristallin d'atomes de fer. Les éléments de base du modèle sont symbolisés par des flèches qui pointent, soit vers le haut, soit vers le bas ; elles représentent les spins, c'est-à-dire les moments cinétiques des atomes. Ces spins d'Ising sont disposés sur un réseau dont la maille élémentaire est carrée (ou rectangulaire). Des spins voisins «préfèrent» pointer dans la même direction, ce qui traduit le fait que l'énergie du système est petite lorsque des spins adjacents sont parallèles et grande lorsqu'ils sont antiparallèles ; dans ce modèle, les spins n'interagissent qu'avec leurs voisins les plus proches. Les spins ne sont pas tous orientés parallèlement à cause de la température : l'énergie thermique perturbe l'arrangement parfait de spins parallèles. Enfin, les spins sont soumis à une contrainte supplémentaire : un champ magnétique extérieur tend à les aligner dans sa direction.

Un modèle simple d'aimant

Ce modèle d'Ising est l'un des plus simples inventés par les physiciens pour décrire un grand nombre de particules qui ont un comportement «solidaire». Toutefois, il induit des calculs redoutables, et ce, même avec toute la puissance des calculateurs modernes.

Le modèle d'Ising reproduit bien les principaux aspects de la réalité. Les spins d'Ising correspondent à ceux des électrons en rotation autour des atomes de fer, lesquels sont rangés suivant un réseau cristallin dont la maille est cubique centrée ou cubique à face centrée. La disposition des spins d'Ising sur un réseau régulier à maille carrée ou cubique reproduit cette propriété.



Bradley University, Peoria, IL

1. ERNST ISING (1900–1998) était passionné par l'enseignement de la physique. Originaire d'Allemagne, il fut nommé «meilleur professeur de l'année aux États-Unis», en 1971.

Les interactions des spins voisins représentent le chevauchement des nuages électroniques entourant les noyaux. Au final, un seul élément n'a pas vraiment son pendant dans le monde réel : le fait que les spins d'Ising ne s'orientent que selon deux directions.

L'aimant ainsi modélisé est-il aimanté? Ses spins s'alignent-ils en parallèle comme dans un vrai ferromagnétique? Avant de répondre à ces questions, rappelons le principe de base du physicien : les systèmes tendent à évoluer vers des états d'énergie inférieure (ou d'énergie libre inférieure). C'est en appliquant cette idée que les physiciens ont remporté tant de succès dans leurs efforts pour décrire la nature. Dans le cas du modèle d'Ising, un modèle de la physique statistique, ce principe doit être appliqué de façon probabiliste. Parce qu'ils sont plus probables, les états de moindre énergie du modèle d'Ising sont ceux vers lesquels le système évolue, malgré les fluctuations thermiques qui le poussent en permanence à changer d'état. Lorsque la température est très grande, ces fluctuations thermiques sont incessantes. Chaque spin bascule continuellement et aléatoirement d'une orientation à l'autre, de telle sorte que l'aimantation moyenne reste nulle. Au contraire, lorsque la température est proche de zéro, les fluctuations thermiques tendent à disparaître. Le système est dans un état d'énergie minimale, celui où tous les spins sont alignés. Notons qu'en l'absence de champ magnétique extérieur, l'état où tous les spins sont alignés vers le haut est aussi probable que celui où ils sont alignés vers le bas.

La transition de phase

Supposons maintenant que nous réduisons continûment la température d'un système d'Ising de l'infini à zéro. Initialement désordonné, tous les spins finissent par s'aligner. Ce changement est-il continu, ou brusquement déclenché à une température donnée? Cette question est centrale, car un système à un grand nombre de particules adopte des phases différentes, c'est-à-dire des comportements différents en fonction des conditions extérieures. Parce qu'elles séparent ces comportements, les discontinuités – appelées transitions de phase – sont des repères essentiels dans l'analyse du comportement de la matière. Cette transition de phase apparaît dans les aimants réels. Refroidis-

sons lentement du fer en fusion et mesurons son aimantation : elle reste nulle jusqu'à une température nommée point de Curie ; là, à environ 1 040 kelvins, elle augmente brusquement. Si le modèle d'Ising décrit vraiment le ferromagnétisme, il doit présenter ce type de discontinuité. En d'autres termes, il existe une température (un niveau d'agitation thermique) au-dessous de laquelle le système passe brusquement dans son état aimanté.

C'est cette question qu'Ising a étudiée dans son travail de pionnier. Il s'est limité au «peigne de spins», c'est-à-dire à des alignements de spins. Existe-t-il, dans le cas du peigne, une température critique au-dessous de laquelle l'agitation thermique n'empêche plus les spins de s'aligner? Déçu, il est obligé d'admettre que ce n'est pas le cas. Voyons pourquoi. Considérons une rangée de 10 000 spins qui pointent tous vers le haut. Une telle configuration est un état



2. LE MODÈLE D'ISING à deux dimensions est un réseau de spins pointant vers le haut (en rouge) ou vers le bas (en vert). Dans l'état représenté ici, la température varie du haut vers le bas, ce qui conduit à un mélange de spins plus désorientés en haut qu'en bas, où les interactions dominant la désorganisation thermique édifient de grands domaines d'orientation uniforme.

American Scientist

d'énergie minimale, puisque toutes les paires de spins sont formées par des voisins parallèles. Si nous inversons maintenant chacun des 5 000 spins situés à droite du milieu de la rangée, l'aimantation moyenne s'annule puisque le nombre de spins qui pointent vers le haut est égal à celui des spins qui pointent vers le bas. Pourtant, le système a pratiquement la même énergie, puisque seule la paire centrale est antiparallèle ; les 9998 autres sont parallèles ! On en conclut que le couplage entre spins est trop faible, dans ce cas, pour vaincre l'agitation thermique, même la plus infime. En d'autres termes, l'état d'énergie minimale est si proche des autres états, que même les fluctuations thermiques les plus faibles empêchent le système de s'y stabiliser.

Il semble qu'Ising pensait qu'il n'existerait pas non plus de transition de phase aux dimensions supérieures. En cela, le pionnier du magnétisme avait tort.

Ouvrons une parenthèse sur sa vie. Son doctorat obtenu, Ising commença par enseigner la physique dans les lycées publics. Parce qu'il était juif, il fut licencié, en 1933, peu après la prise de pouvoir par Hitler. Après un court séjour en France, il retourna en Allemagne pour enseigner à Potsdam dans une école juive. Il en fut nommé directeur, mais l'établissement fut détruit au cours de la *Nuit de Cristal*, en 1938. Ising et son épouse fuirent alors leur patrie pour se réfugier au Luxembourg. Ils survécurent à l'occupation, et émigrèrent aux États-Unis en 1947. Ce n'est que deux ans plus tard, en 1949, qu'Ising prit

conscience de la portée de ses travaux. Aux États-Unis, il enseigna la physique et les mathématiques pendant presque 30 ans à l'Université de Peoria, dans l'Illinois. Il mourut dans cette ville à 98 ans.

Passé inaperçu, le modèle d'Ising fut redécouvert par le physicien britannique Rudolf Peierls dans les années 1930. Celui-ci comprit qu'un réseau de spins à deux dimensions a un tout autre comportement que celui d'un peigne. Une considération sur l'énergie indique pourquoi : imaginons 10 000 spins, tous pointés vers le haut (100 peignes de 100 spins alignés). Si nous en basculons 5 000 pour abolir l'aimantation, au minimum 100 paires de spins sont antiparallèles. Notons que l'état où exactement 100 paires sont antiparallèles est celui où la moitié des peignes, tous voisins, sont basculés (voir la figure 4). Dans tous les autres états, c'est-à-dire quand les 5 000 spins basculés sont répartis dans tout le système, beaucoup plus de 100 paires sont antiparallèles. Nous voyons donc que le «prix énergétique» à payer pour annuler l'aimantation d'un système d'Ising à deux dimensions est beaucoup plus grand que dans le cas unidimensionnel (il est supérieur à l'énergie d'interaction de 100 paires au moins !). Peierls eût l'intuition – juste – qu'au-dessous d'une certaine température, l'agitation thermique ne suffit plus à faire sortir le système de son état d'énergie minimale.

Le carré d'Ising

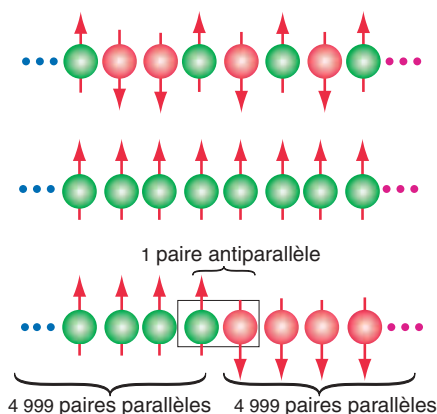
Pour s'en assurer, il fallait calculer la probabilité, à toutes les températures, de chacune des configurations possibles de spins. Prenons le cas simple du carré de spins. Considérons un système d'Ising à deux dimensions composé de quatre spins disposés aux sommets d'un carré. Puisque chacun des quatre spins prend deux valeurs, le système peut adopter 2^4 , c'est-à-dire 16 configurations possibles. Dans chaque cas, l'aimantation est égale à la différence entre le nombre de spins pointant vers le haut et le nombre de spins pointant vers le bas. Le calcul des états d'un tel système ne fait donc appel qu'à un peu d'arithmétique élémentaire. Comment en déduire la probabilité de chaque état à une température donnée ?

La réponse est donnée par le principe fondamental de la physique statistique selon lequel la probabilité que

le système se trouve dans un état donné est proportionnelle à la valeur donnée par la loi de distribution de Boltzmann. Cette dernière est définie par l'inverse de l'exponentielle de l'énergie du système E , divisée par sa température T , c'est-à-dire par la formule $e^{-E/T}$. Notons que si l'on veut exprimer l'énergie et la température dans le système international d'unités, c'est-à-dire en joules et en kelvins, il faut faire intervenir une constante dans cette définition. Celle-ci, la constante de Boltzmann, divise l'énergie du système. Ici, nous la négligerons.

La simple structure de la loi de distribution de Boltzmann est déjà riche d'enseignements. Si la température est élevée, $e^{-E/T}$ a une valeur proche de 1, quelle que soit l'énergie, et toutes les configurations ont la même probabilité d'exister. À basse température, au contraire, de minimes baisses d'énergie conduisent à une remontée du quotient E/T , ce qui suffit à faire considérablement augmenter l'exponentielle $e^{-E/T}$. Les états de basse énergie sont donc favorisés. Afin d'obtenir la probabilité exacte d'une certaine configuration, on doit normaliser la distribution de Boltzmann, c'est-à-dire diviser chaque valeur de $e^{-E/T}$ par la somme de toutes ses valeurs possibles ($\sum e^{-E/T}$, le symbole sigma, Σ , indiquant la sommation des exponentielles). Remarquons que la somme de toutes les valeurs possibles de la quantité $[e^{-E/T} / \sum e^{-E/T}]$ vaut 1, ce qui est normal puisque c'est la probabilité que le système soit dans l'une quelconque des configurations possibles. La quantité $Z = \sum e^{-E/T}$ est nommée fonction de partition. Elle joue un rôle essentiel dans la compréhension du système d'Ising et d'une manière générale de celle des systèmes à grand nombre de particules.

On détermine aisément la fonction de partition d'un système à quatre spins (voir figure 5). Pour ce faire, on calcule la valeur de $e^{-E/T}$ pour chacune des 16 configurations, puis on ajoute les résultats. Ainsi, pour une température égale à 2 (dans les unités du modèle), la somme des valeurs de la distribution de Boltzmann est égale à 27,05. À cette même température, la valeur donnée par la loi de Boltzmann pour la configuration où les quatre spins pointent vers le haut est d'environ 7,39 ; la probabilité de cette configuration est donc de $7,39 / 27,05$ soit environ 0,27. Cela signifie que l'état «aimanté» (à quatre spins pointés vers le haut) apparaît pendant un peu plus du quart du temps.



3. UN PEIGNE DE SPINS quelconque (en haut) avec ses nombreuses paires parallèles et antiparallèles. Au milieu, l'aimantation est maximale et l'énergie est minimale quand tous les spins sont parallèles. En bas, quand la moitié des spins ont été basculés, l'énergie du système est à peine supérieure à sa valeur quand tous les spins sont alignés, car il n'y a qu'une seule paire antiparallèle.

Si un tel calcul est simple à quatre spins, à 40 spins, il y a déjà quelque mille milliards de configurations possibles, et même les ordinateurs les plus puissants calculent difficilement la fonction de partition correspondante. À 400 spins, il ne faut même pas y songer... Pourtant, ce sont bien les grands nombres de spins qui nous intéressent puisque nous souhaitons connaître la fonction de partition dans la «limite thermodynamique», c'est-à-dire quand le nombre de spins tend vers l'infini.

Le calcul exact de la fonction de partition du modèle bidimensionnel est certes difficile, mais pas impossible. En 1944, Lars Onsager, un chimiste de l'Université Yale, en publia le résultat, suscitant surprise et admiration. Onsager ne procède pas par dénombrement direct mais utilise avec maestria l'algèbre des opérateurs. Je ne me risquerai pas à expliquer ici son calcul, et me contenterai de souligner qu'il obtient une expression exacte de la fonction de partition du système à la limite thermodynamique. Toutes les propriétés macroscopiquement observables du modèle peuvent être déduites de ce résultat. La théorie d'Onsager décrit notamment l'apparition de l'aimantation à une température critique T_C . L'aimantation y est proportionnelle à la quantité $(T_C - T)^{1/8}$. Notons que $(T_C - T)^{1/8}$ prend des valeurs au-dessous de la température critique, mais n'est pas définie au-dessus de cette température parce que cette quantité cesse alors d'avoir des valeurs réelles. En d'autres termes, l'aimantation disparaît au-dessus de la température critique.

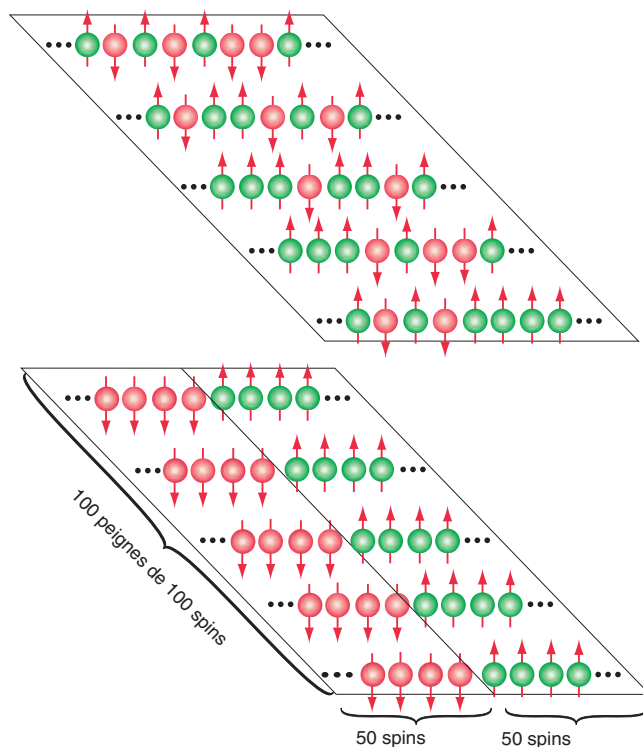
Le premier calcul exact

Une fois le chemin ouvert par Onsager, le modèle d'Ising à deux dimensions fut résolu par plusieurs méthodes. On a aussi fait des calculs dans le cas de systèmes à deux dimensions qui ressemblent à celui d'Ising, mais qui diffèrent par un aspect de leur géométrie ou par le type d'interaction des spins. Malheureusement, jusqu'à présent, le modèle d'Ising à trois dimensions n'a pas été résolu de manière exacte, ce qui frustre les physiciens.

Que change une dimension de plus? Certes, un modèle est plan, l'autre non. Pourtant la géométrie du réseau – les distances et les angles – ne joue aucun rôle dans la définition de la fonction de partition. Seule compte la topologie du

système, c'est-à-dire les connexions entre les sites les plus proches. Imaginons un système d'Ising tridimensionnel, un cube dont les arêtes renferment le même nombre de spins. Un tel système est constitué par l'empilement d'un certain nombre de carrés de spins. Nous pouvons les faire glisser, puis les disposer sur un plan. Le carré de spins de grande taille ainsi obtenu est-il un modèle d'Ising bidimensionnel? Non. La différence tient au fait que pour respecter la structure des interactions à trois dimensions, il faut admettre que de nombreux spins interagissent avec tous ceux qui leur sont proches à trois dimensions. Les anciens voisins participent donc à une série d'interactions à distance, que les spécialistes du modèle d'Ising qualifient de «liaisons non planes». Un système d'Ising tridimensionnel est donc l'équivalent d'un système d'Ising bidimensionnel, auquel on a ajouté un certain nombre de liaisons non planes, ce qui change... tout!

Tullio Regge de l'Institut Polytechnique de Turin et Riccardo Zecchina du Centre international pour la physique théorique de Trieste se sont récemment intéressés à la fonction de partition d'un réseau bidimensionnel, que l'on rend tridimensionnel en ajoutant des liaisons non planes, une à une. Ils espèrent ainsi explorer progressivement le territoire qui sépare les modèles d'Ising bidimensionnels des modèles tridimensionnels. Ils ont constaté qu'à chaque fois que l'on ajoute une liaison non plane, le volume du calcul nécessaire pour la fonction de partition double, quelle que soit la méthode utilisée. Les temps de calcul augmentent donc exponentiellement avec le nombre de liaisons non planes. C'est pourquoi le système d'Ising à trois dimensions est beaucoup plus difficile à résoudre que celui à deux dimensions. Curieusement, au-delà de trois dimensions, la situation se simplifie. Dans un réseau à quatre dimensions (et plus), les connexions sont assez denses pour qu'il soit possible de considérer que chaque spin est soumis à un



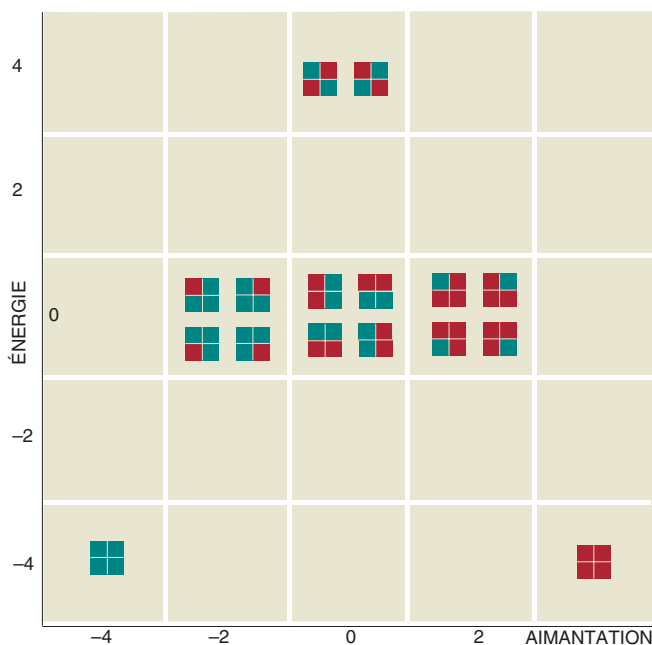
4. À DEUX DIMENSIONS (en haut), le modèle d'Ising présente un tout autre comportement qu'à une dimension. Le prix énergétique à payer pour faire sortir le système d'Ising à deux dimensions d'un état d'aimantation est beaucoup plus grand que dans le cas unidimensionnel. Ainsi, dans le cas d'un système de 10 000 spins composé de 100 peignes de 100 spins (en bas), le prix énergétique à payer pour faire passer le système de l'état de complète aimantation (10 000 spins parallèles) à celui où 5 000 spins ont basculé est au moins égal à l'énergie d'interaction de 100 paires.

champ magnétique moyen résultant de la combinaison des spins voisins.

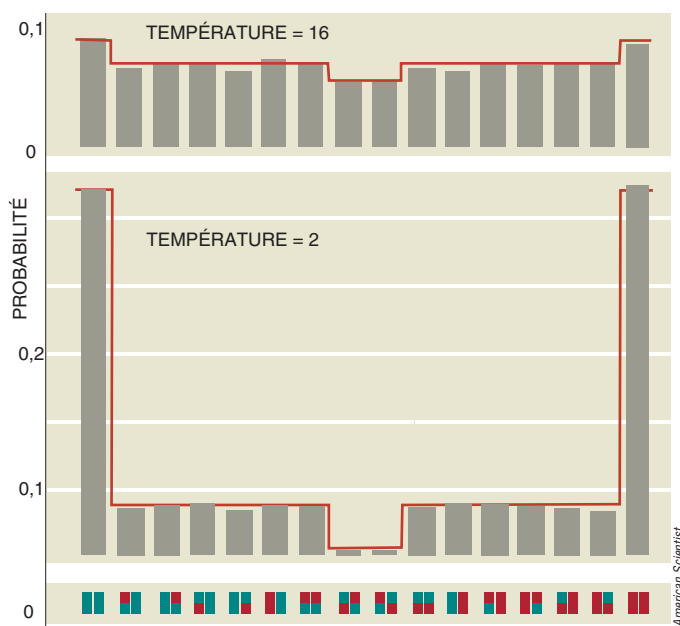
Je ne voudrais pas laisser croire que l'on ignore tout du modèle d'Ising à trois dimensions. Certes, le calcul exact de sa fonction de partition reste à faire, mais la région proche du point critique a pu être étudiée par diverses méthodes approximatives. L'une de ces approches, le développement en séries, aurait plu à Laplace. On extrapole les solutions à basse et à haute température pour en déduire leur comportement dans la région des températures intermédiaires.

Une autre méthode d'approximation a un nom qui pourrait évoquer les pires moments du stalinisme : le groupe de renormalisation. Pour résumer, l'algorithme tiré de la théorie de la renormalisation consiste à réunir des sous-ensembles de spins par blocs (carrés de spins,...), puis à remplacer chaque bloc par un spin équivalent ; ensuite, les liaisons entre les spins ainsi redéfinies sont ajustées afin de compenser l'effet de la création des blocs.

Une dernière technique est très employée pour explorer de façon approchée le modèle d'Ising à trois dimensions : la méthode de Monte Carlo. Elle porte ce nom parce qu'elle



5. SEIZE ÉTATS différents sont adoptés par le modèle d'Ising à deux dimensions et à quatre spins. À gauche, en abscisse, l'aimantation des états est égale au nombre de spins rouges moins celui de spins verts, et prend toutes les valeurs entières entre -4 et $+4$. En ordonnée, l'énergie est égale au nombre de paires antiparallèles diminué du nombre des paires parallèles, et prend des valeurs entières entre -4 et $+4$. Afin de rendre les calculs symétriques, l'énergie des états intermédiaires sert de référence, de sorte qu'il



apparaît des états d'énergie négative! Cette convention est propre au modèle d'Ising. À droite, les probabilités affectées à ces états par la distribution de Boltzmann sont données pour deux températures différentes. En haut, lorsque la température est égale à 16 dans les unités du modèle, les seize états sont quasi équiprobables. En bas, une température inférieure (égale à 2) favorise les deux états de basse énergie, ceux où tous les spins pointent dans la même direction.

est fondée sur l'utilisation de générateurs de nombres aléatoires – l'équivalent des roulettes de Monte Carlo – qui donnent une approximation de la distribution des probabilités des configurations de spins. Elle joue un rôle si important que je vais la développer.

La catastrophe du damier clignotant

L'exploration du modèle d'Ising à l'aide de puissantes méthodes mathématiques, telles que le groupe de renormalisation ou les méthodes algébriques d'Onsager, a déjà fourni beaucoup de résultats intéressants. Toutefois, le projet de Laplace n'est toujours pas réalisé : on ne sait déduire l'évolution du système inventé par Ising de l'observation des événements microscopiques qui s'y déroulent. N'existe-t-il pas un moyen empirique d'apprendre ce qui se passe sur le réseau? Ne pourrait-on pas tout simplement programmer un système d'Ising, puis le regarder évoluer? C'était précisément l'objectif – naïf – du seul programme informatique que j'ai jamais écrit. Il s'agissait d'un modèle d'Ising bidimensionnel, que j'avais paramétré à l'aide d'un tableur. Puisque ce type de logiciel est conçu pour traiter des tables, il se prête naturellement à l'enregistre-

ment des états successifs d'un réseau. À chaque itération, l'état de chaque case du tableur était déterminé en fonction de l'état des quatre cases voisines. En outre, j'avais pris soin de programmer une forme d'agitation thermique, de sorte que le basculement de chaque spin est d'autant plus probable que la température est élevée. Naturellement, je m'attendais à voir s'étendre une phase magnétique, dès qu'une certaine température était atteinte.

Ce que je vis au lieu de cela me rendit perplexe. Certaines zones étaient bien aimantées, mais les autres faisaient penser à un damier dont les lignes blanches et noires ne cessaient d'alterner. Dans ce «damier clignotant», les lignes de spins orientés vers le haut étaient séparées par des lignes de spins orientés vers le bas qui basculaient simultanément de sorte que cette étrange structure se maintenait. Cette configuration semblait pourtant être la moins favorable, puisqu'elle rendait maximal le nombre de paires antiparallèles! Je soupçonnais un moment une erreur de programmation, mais je n'en trouvais aucune...

Mes amis Tommaso Toffoli, Norman Margolus et Gérard Vichniac, de l'Institut de technologie du Massachusetts reconnurent l'erreur avant même d'avoir examiné mon pro-

gramme. Imaginons un spin pointant vers le haut quelque part au milieu d'une zone clignotante du damier. Ses quatre voisins pointent tous vers le bas, ce qui l'incite à basculer vers le bas pour les rejoindre. Toutefois, chacun de ces voisins est lui-même entouré de quatre spins pointant vers le haut et tend à changer de sens. C'est pourquoi tous les spins s'inversent à chaque étape en une alternance sans fin.

L'apparition de cette anomalie illustre les difficultés de la modélisation numérique. Il suffisait de changer un détail de programmation pour se débarrasser de cet artefact : l'ordre de la séquence par laquelle les spins «examinent» l'état de leurs voisins et «décident» de leur propre état futur. Mes amis connaissaient un remède : le problème disparaîtrait si je paramétrais le tableur selon une séquence inspirée de la structure d'un damier. Les «cases noires» devaient être toutes traitées avant les cases blanches. L'astuce était ingénieuse et fonctionna parfaitement.

Cependant, qu'en aurait pensé Laplace? J'avais du mal à croire que les spins d'un aimant suivent une séquence précise pour éviter de basculer sans cesse, et que la moitié des atomes de fer attendent poliment leur tour avant de «décider» quelle sera la

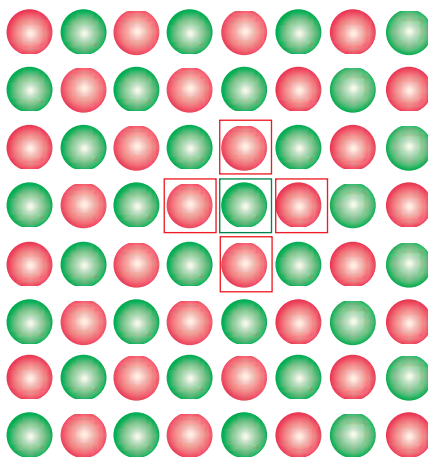
configuration de leur spin. La nature se passe de ce genre d'artifices. Pourquoi, alors, sont-ils indispensables dans les simulations numériques conçues pour la représenter ?

Une réponse à cette question est que la nature possède un meilleur ordinateur que les nôtres. L'artefact du damier clignotant résulte du rythme sur les changements d'état des spins imposé par le microprocesseur. Si nous disposions d'un processeur par spin, le problème de l'ordre des changements ne se poserait plus, puisque tous les spins basculeraient simultanément. Toutefois, je crains que la construction d'un ordinateur parallèle de taille gigantesque ne remplace le problème de l'ordre des inversions de spins par un autre : celui de la synchronisation. Je comprends mal comment tous les spins pourraient interroger tous leurs voisins au moment même, où ils sont eux-mêmes interrogés sur leur état ; cela me semble une énigme encore plus ardue que celle de l'ordre d'inversion des spins.

La méthode de Monte-Carlo

La méthode de Monte-Carlo élude ces difficultés grâce au hasard. À chaque itération, l'algorithme sélectionne un seul spin et examine quelles conséquences aurait son inversion. Si l'inversion réduit l'énergie totale du système, le programme l'effectue. Sinon, si l'énergie du système croît, le spin est soit inversé, soit laissé tel quel... au hasard ; pour prendre cette décision, l'ordinateur emploie un générateur de nombres aléatoires, de telle sorte que la répartition globale des spins basculés suit la statistique de Boltzmann. De cette façon, tout se passe comme si la probabilité d'inversion d'un spin particulier était celle que lui affecte la distribution de Boltzmann.

La plupart de ses utilisateurs considèrent la méthode de Monte Carlo comme un outil efficace pour estimer la fonction de partition. Toutefois, cet algorithme semble avoir en lui quelque chose de si physique, qu'il est tentant de le considérer comme une simulation de ce qui pourrait réellement se passer au sein d'un système d'Ising. Laplace aurait sans doute sourcillé en voyant le hasard jouer un si grand rôle dans cette simulation, mais nous sommes habitués à l'idée aujourd'hui. Personnellement, je trouve plus gênant de plaquer la sta-



6. DANS CETTE CONFIGURATION, chaque spin orienté vers le haut (dans le carré vert, par exemple) est entouré de quatre voisins (dans les carrés rouges) orientés vers le bas, qui le font basculer, et réciproquement. Le système est semblable à un damier clignotant, dont les lignes vertes et rouges alternent sans cesse. Plusieurs modèles numériques prédisent cette configuration, pourtant la plus improbable. Il s'agit là d'un artefact dû à la nature itérative des calculs à la machine.

tistique de Boltzmann sur le comportement collectif des spins. Un système physique ne décide rien et ne calcule aucune probabilité du type $e^{-E/T}$! Même dans le cadre d'une simulation, je continue à préférer la démarche empirique, dans laquelle on ne programme que les comportements individuels, sans imposer aucune loi physique au système.

C'est pourquoi, parmi toutes les simulations numériques du modèle d'Ising, celle de Michael Creutz, du laboratoire de Brookhaven, est la plus séduisante. Elle a en effet l'intérêt d'être strictement déterministe, c'est-à-dire d'exclure le hasard, sauf dans le choix des conditions initiales. Dans le modèle de M. Creutz, chaque spin se voit attribuer une énergie d'interaction définie par l'état des voisins les plus proches et une énergie ciné-

tique. Ce terme, qui représente l'énergie communiquée aux spins par les fluctuations thermiques, agit comme l'équivalent d'un réservoir d'énergie, absorbant les excès d'énergie et les restituant si nécessaire. Lors d'une itération, un spin ne s'inverse que si et seulement si sa réserve d'énergie cinétique peut couvrir le coût énergétique. En d'autres termes, il faut que l'énergie cinétique en réserve égale au moins l'énergie nécessaire à l'inversion du spin. Ce modèle a cependant lui aussi la faiblesse d'aboutir parfois à un état de type « damier clignotant ». M. Creutz impose lui aussi un séquençage. Une fois de plus, un artifice est nécessaire pour que la simulation fonctionne.

Est-ce si étonnant ? Après tout, exiger d'un programme informatique qu'il nous montre ce qui se passe « réellement » au sein d'un système qui n'existe pas, est plutôt excessif. Le modèle d'Ising n'est qu'une construction théorique inventée pour simplifier la réalité ; toutes les structures y sont supposées discrètes et symétriques, au sens mathématique du terme. Dans un monde aussi parfait, un comportement symétrique comme celui du « damier clignotant » est sans doute un véritable régime du système. S'il ne se produit pas dans les ferromagnets réels, c'est tout simplement parce qu'ils ne sont pas parfaits ! Ainsi, G. Vichniac a montré que lorsque les spins d'Ising peuvent se balancer, même légèrement, le syndrome du damier clignotant disparaît. Sans doute pourrait-on aussi le faire disparaître en brisant la symétrie temporelle ou spatiale, ou en d'autres termes en introduisant une forme quelconque « d'imperfection ». Une idée de la simulation du monde réel qui n'aurait certainement pas enchanté Laplace.

Brian HAYES est journaliste scientifique et ancien éditeur de *American Scientist*. Cet article est reproduit avec l'aimable autorisation de *American Scientist*.

Pierre Simon DE LAPLACE, *Essai philosophique sur les probabilités*, Gauthier-Villars, 1921.

Ernst ISING, *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, in *Zeitschrift für Physik*, vol. 31, pp. 253-258, 1925.

Stephen BRUSH, *History of the Lenz-Ising Model*, in *Reviews of Modern Physics*, vol. 39, pp. 883-893, 1967.

Rodney BAXTER, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, London, New York, 1982.

Michael CREUTZ, *Deterministic Ising Dynamics*, in *Annals of Physics*, vol. 167, pp. 62-76, 1986.

Barry CIPRA, *An Introduction to the Ising Model*, in *American Mathematical Monthly*, vol. 94, pp. 937-959, 1987.

Martin KRIEGER, *Constitution of Matter : Mathematical Modeling of the Most Everyday of Physical Phenomena*, University Press, Chicago, 1996.

