

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.

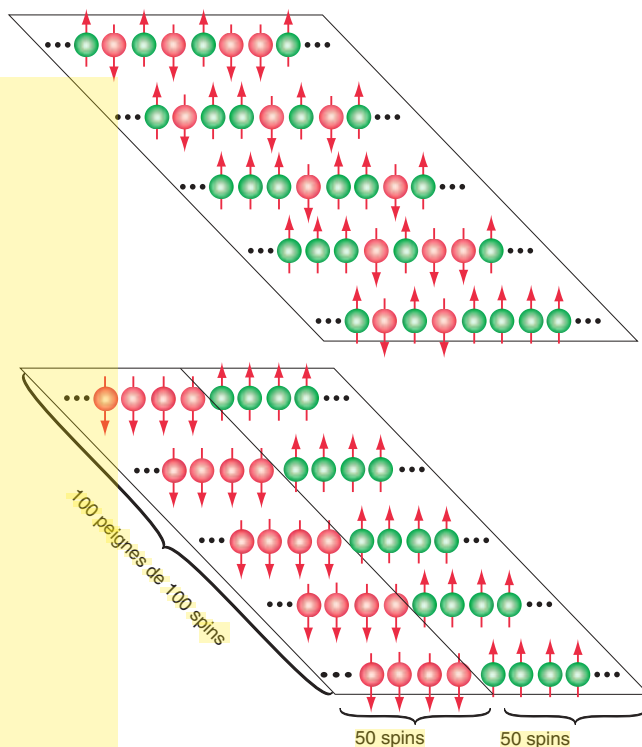
Le premier calcul exact

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



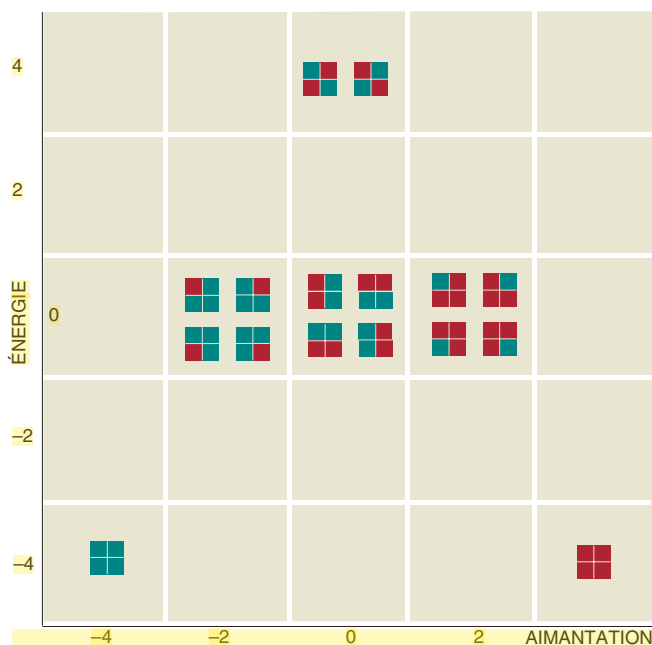
4. À DEUX DIMENSIONS (en haut), le modèle d'Ising présente un tout autre comportement qu'à une dimension. Le prix énergétique à payer pour faire sortir le système d'Ising à deux dimensions d'un état d'aimantation est beaucoup plus grand que dans le cas unidimensionnel. Ainsi, dans le cas d'un système 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.

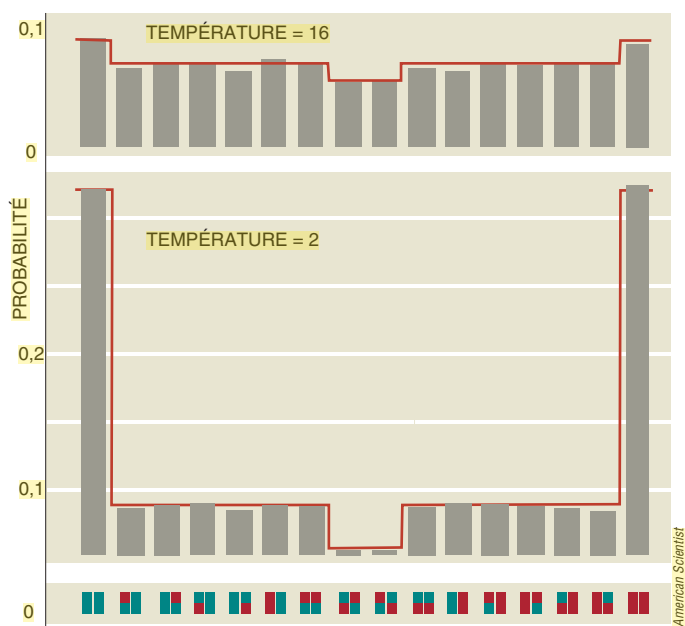
Je ne voudrais pas laisser croire que l'on ignore tout du modèle d'Ising à trois dimensions. Certes, le calcul exact de sa fonction de partition reste à faire, mais la région proche du point critique a pu être étudiée par diverses méthodes approximatives. L'une de ces approches, le développement en séries, 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