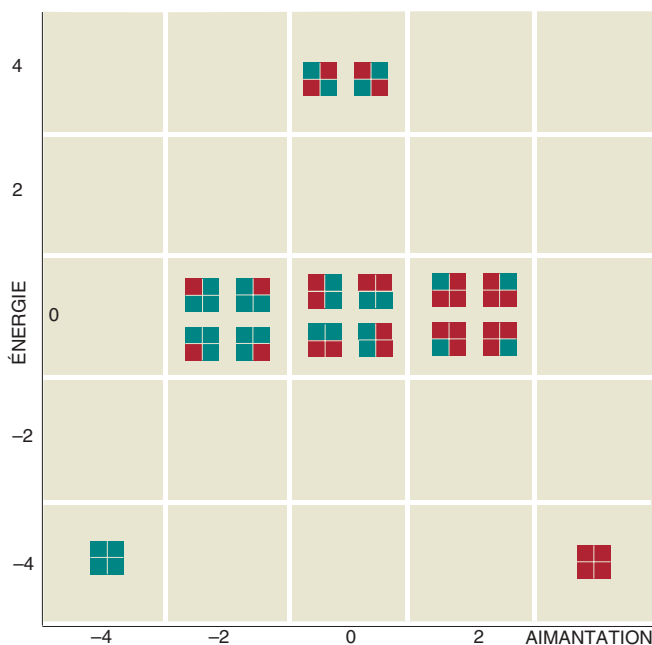
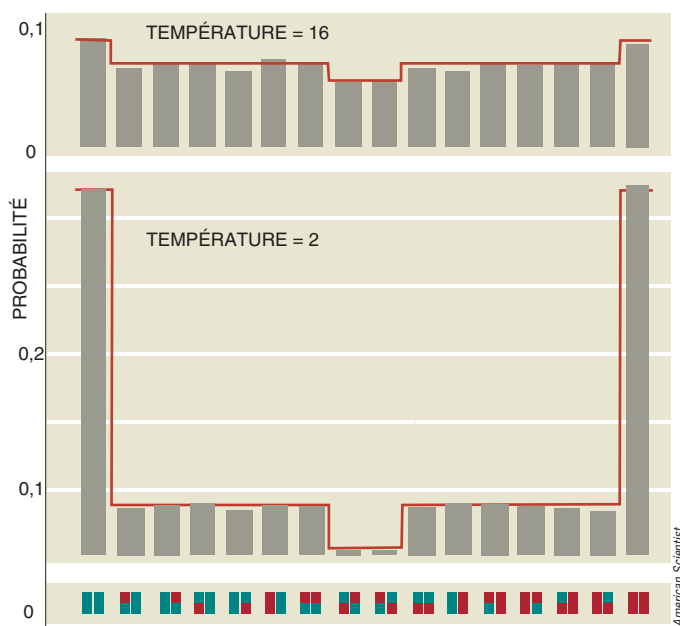




5. SEIZE ÉTATS différents sont adoptés par le modèle d'Ising à deux dimensions et à quatre spins. À gauche, en abscisse, l'aimantation des états est égale au nombre de spins rouges moins celui de spins verts, et prend toutes les valeurs entières entre -4 et $+4$. En ordonnée, l'énergie est égale au nombre 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

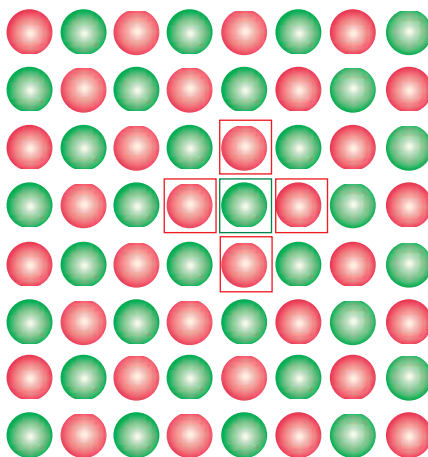
configuration de leur spin. La nature se passe de ce genre d'artifices. Pourquoi, alors, sont-ils indispensables dans les simulations numériques conçues pour la représenter ?

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.