

Mise en perspective didactique d'un projet de recherche

Par *Lydia Chabane*

Concours externe spécial de l'agrégation de physique-chimie, option physique – Session 2023

1 Mon parcours scolaire et professionnel

2013 – 2015	Classes préparatoires (MPSI-MP*) , Lycée Chaptal, Paris
2015 – 2017	Magistère de physique fondamentale (L3, M1) , Université Paris-Sud, Orsay Stages de recherche en physique statistique hors équilibre, LPT Orsay (L3) et EPFL, Lausanne, Suisse (M1).
2017 – 2018	Master 2 ICFP, parcours Physique Quantique , ENS, Paris
2018 – 2021	Doctorat en physique statistique , IJCLab, Orsay. Intitulé : « De la rareté à la typicité : le parcours improbable d'une grande déviation ». Soutenu le 26 Novembre 2021 sous la supervision de Gatien Verley et Raphaël Chétrite.
Fév. – Mai 2022	Consultante scientifique , Auditex, Paris
2022 – 2023	Préparation de l'agrégation de Physique , Centre de Montrouge

2 Médiation scientifique et autres activités

Juin 2016	Projet de vulgarisation scientifique Conçu dans le cadre de l'option vulgarisation du Magistère de physique fondamentale d'Orsay.
2017	French Physicists' tournament Préparation et participation au tournoi de physique au sein de l'équipe Paris-Sud.
2018 – 2021	Animatrice d'ateliers scientifiques à la Maison d'Initiation et de Sensibilisation aux Sciences (mission doctorale) - Animation d'ateliers destinés à des élèves du CE2 à la 3ème afin de les initier à la démarche scientifique et à l'esprit critique. - Conception et animation d'ateliers vidéos.
Mai 2019	Pint of Science 2019 Organisation de l'événement scientifique à Orsay.
Oct 2019	Fête de la Science 2019 Participation au festival scientifique « Science sur mesure », animation du stand longueur auprès de collégiens et collégiennes.

3 Présentation de mes activités de recherche

3.1 Contexte général

En physique statistique d'équilibre, les systèmes sont étudiés dans des cadres mathématiques appelés ensembles statistiques. Les plus connus sont l'**ensemble microcanonique** qui traite d'un système isolé, donc d'énergie fixée ; et l'**ensemble canonique** qui traite d'un système à l'équilibre avec un réservoir de température fixée, imposant la valeur moyenne de l'énergie. Ces deux ensembles sont équivalents dans la limite thermodynamique sous certaines conditions mathématiques. Ces notions d'ensembles et d'équivalence d'ensembles ont par la suite été généralisées dans le cadre de la **physique statistique hors équilibre**. En particulier, la notion de « contrainte » que l'on retrouve dans l'ensemble microcanonique a été généralisée dans ce que l'on appelle *problème de conditionnement de processus stochastiques* qui a fait l'objet de ma thèse et que l'on définira dans la suite. Avant cela, commençons par une introduction des notions nécessaires à la compréhension de mon domaine de thèse. Par souci de clarté, on s'autorisera parfois quelques raccourcis dans les différentes définitions.

3.2 Cadre mathématique de ma thèse

La mécanique statistique d'équilibre est très utile pour étudier les propriétés d'équilibre des systèmes macroscopiques. Toutefois, elle n'est pas adaptée à la description de la dynamique de systèmes hors d'équilibre, ou de systèmes à peu de degrés de liberté pour lesquels les fluctuations relatives des observables physiques ne sont plus négligeables. Il existe de nombreuses façons de mettre un système hors de l'équilibre : par exemple, s'il est soumis à une force extérieure, ou s'il est en contact avec plusieurs réservoirs conduisant à un gradient de température ou de potentiel chimique, ou encore car il relaxe vers un état d'équilibre. Afin d'étudier ces systèmes, il a fallu développer une nouvelle théorie appelée la **thermodynamique stochastique**. Cette dernière fournit les outils permettant d'étudier la thermodynamique des systèmes hors équilibre, y compris des *petits* systèmes pour lesquels les fluctuations des observables physiques ne sont plus petites devant leurs valeurs moyennes. On définit alors des observables **fluctuantes** telles que la chaleur, le travail ou la production d'entropie, généralisant les concepts de la thermodynamique statistique d'équilibre. On peut ainsi étudier la thermodynamique d'un grand nombre de systèmes réels tels que les particules colloïdales, les biopolymères (ADN, ARN, protéines, etc.), les enzymes, ou les moteurs moléculaires, et de nombreuses réalisations expérimentales ont soutenu les développements théoriques.

La thermodynamique stochastique s'appuie sur la théorie des probabilités et des processus stochastiques. Avant d'aller plus loin, donnons quelques définitions :

Variable aléatoire Une variable aléatoire X est une fonction définie sur l'ensemble des résultats possibles d'un phénomène ou d'une expérience aléatoire et attribuant une valeur à chaque résultat. Par exemple, un lancer de pile ou face est une expérience aléatoire, les résultats de cette expériences sont *pile* et *face*, et la fonction X qui associe 0 à pile et 1 à face est une variable aléatoire.

Processus stochastique Un processus stochastique $X(t)$ est l'évolution temporelle (à temps discret ou continu) de la variable aléatoire X . Par exemple, si l'on effectue N lancers de pile ou face, la famille de variables aléatoires $\{X_\ell \mid \ell \in \llbracket 1, N \rrbracket\}$ associées à chaque lancer ℓ est un processus stochastique à temps discret, alors que le mouvement brownien est un processus stochastique à temps continu.

Convergence en probabilité On dit que $X(t)$ converge en probabilité vers x , et on écrit $\lim_{t \rightarrow \infty} X(t) = x$, si pour tout écart $\epsilon > 0$, il est de moins en moins probable avec le temps d'observer un écart entre $X(t)$ et x supérieur à ϵ , i.e. $\lim_{t \rightarrow \infty} P(|X(t) - x| > \epsilon) = 0$.

Processus de Markov Une classe particulière de processus stochastiques fréquemment utilisée en physique statistique est celle des processus de Markov dont l'évolution future ne dépend que du présent et non du passé. Dans la suite, nous nous intéressons à un processus de Markov $z(t)$ défini sur un ensemble discret d'états que l'on notera de manière générique i ou j . Par exemple, un tel processus peut modéliser l'état aléatoire du RER : soit il fonctionne bien (état 1), soit il est perturbé (état 2). Dans la suite, on note $z(t)$ l'état du système à l'instant t .

Un processus de Markov est caractérisé par sa **matrice de taux de transition** \hat{k} dont les composantes sont définies de la manière suivante :

- $k_{ij}(t)$ ($i \neq j$) est la probabilité par une unité de temps de sauter de l'état j vers l'état i au temps t ;
- $k_{jj}(t)$ est l'opposé de la probabilité par unité de temps de s'échapper de l'état j au temps t : $k_{jj}(t) = -\sum_{i \neq j} k_{ij}(t)$. Le choix de cette définition est lié à une condition de normalisation que l'on expliquera ci-dessous.

On note $\pi_i(t)$ la probabilité d'occuper l'état i à l'instant t . Le vecteur de probabilité $\boldsymbol{\pi}$ de composantes π_i satisfait

$$\frac{\partial \boldsymbol{\pi}}{\partial t} = \hat{k} \boldsymbol{\pi}, \quad (3.1)$$

avec comme condition initiale $\boldsymbol{\pi}(0)$. L'équation (3.1) est connue sous le nom d'« équation maîtresse ». On peut à présent comprendre que la condition $\sum_i k_{ij} = 0$ pour tout j permet de garantir la conservation de la norme de la probabilité $\sum_i \pi_i(t) = 1$ à tout temps.

Ces probabilités permettent d'étudier les valeurs moyennes des observables thermodynamiques, mais cette description n'est pas suffisante lorsqu'on s'intéresse à des systèmes où les fluctuations jouent un rôle important.

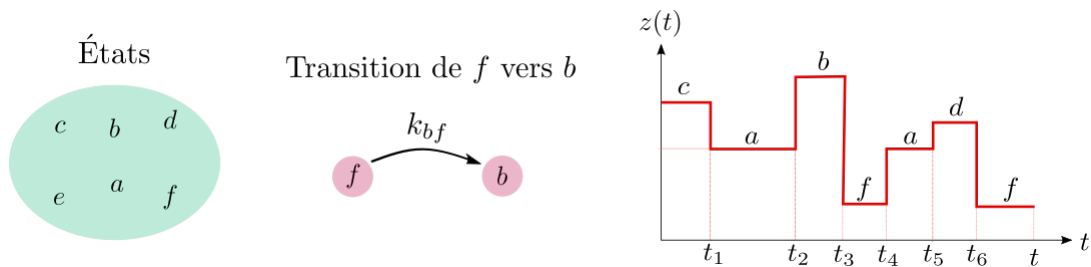


FIGURE 3.1 – (gauche) Exemple d'un ensemble discret d'états que peut occuper le système. (milieu) Exemple d'une transition. (droite) Exemple d'une trajectoire.

Pour prendre en compte ces fluctuations, une description stochastique du système peut être faite au niveau d'une **trajectoire**. Cette dernière, notée $[z]$, est une réalisation du processus de Markov entre un temps initial $t_0 = 0$ et un temps final t , c'est-à-dire la succession d'états $z(t_\ell)$ visités par le système et la donnée des instants t_ℓ auxquels une transition a eu lieu (*cf.* Fig. 3.1 pour un exemple). Chaque trajectoire $[z]$ est caractérisée par sa probabilité qui peut s'exprimer explicitement pour les processus de Markov en fonction des taux de transition et de la probabilité initiale.

Mobilisation des connaissances et compétences acquises

Proposition d'activité en classe de terminale L'équation maîtresse permet de décrire l'évolution de systèmes pouvant être modélisés par des processus de Markov. Un exemple de tels systèmes est celui des réactions chimiques. On peut les modéliser par des processus de Markov dont l'état représente le nombre de particules dans une configuration donnée, et une transition revient à ajouter ou supprimer des particules de cette configuration. Ces processus ont fait l'objet de la seconde partie de ma thèse et ont nécessité un travail de recherche conséquent. J'aimerais mobiliser les connaissances scientifiques acquises pour construire une activité réalisable en classe de terminale générale dans le cours de spécialité de physique-chimie.

Place dans la progression

- **Thème I** : « Constitution et transformations de la matière ».
- **Chapitre 2** : « Modéliser l'évolution temporelle d'un système, siège d'une transformation ».
- **Partie A** : « Suivre et modéliser l'évolution temporelle d'un système siège d'une transformation chimique ».
- **Séquence précédente** : Les élèves auront traité la séquence « Suivi temporel et modélisation macroscopique » traitant entre autres des facteurs cinétiques et de la loi de vitesse d'ordre 1.
- **Séquence actuelle** : L'activité s'inscrit dans la séquence « Modélisation microscopique ». Elle permettra de clôturer la partie A du chapitre et d'ouvrir sur la partie B « Modéliser l'évolution temporelle d'un système, siège d'une transformation nucléaire ».

Objectifs Le but de la séquence « Modélisation microscopique » est d'expliquer les caractéristiques cinétiques d'une réaction chimique grâce à un modèle microscopique (actes élémentaires). En particulier, les élèves verront la notion de « choc efficace » entre deux entités et son caractère aléatoire, ainsi que l'influence des facteurs cinétiques sur ces chocs. J'aimerais à travers cette activité¹ faire ressortir l'aspect aléatoire de la description microscopique à travers une modélisation probabiliste d'un acte élémentaire (équation maîtresse). Par la suite, on expliquera le passage du microscopique (équation maîtresse) au macroscopique (équation d'évolution de la concentration du réactif). J'aimerais que les élèves comprennent que si l'on décrit l'évolution du système par une équation sur la concentration (déterministe) alors qu'au niveau microscopique les chocs sont aléatoires, c'est parce que les écarts à cette concentration sont négligeables lorsque l'on s'intéresse à un très grand nombre de molécules.

Description de l'activité L'activité aura lieu dans le cadre d'une séance interactive en groupe. Les élèves auront à leur disposition un support documentaire. L'activité sera composée de quatre parties pouvant être résumées comme ceci :

1. **Description probabiliste** Un document introduira à travers un exemple simple (par exemple celui de la Section 3.3) les notions d'état, de probabilité d'occupation, de transition et de taux de transition. On donnera l'équation d'évolution de la probabilité.
2. **Réaction chimique** On s'intéresse à une molécule A dans un acte élémentaire $A + B \rightarrow AB$. Les élèves devront par analogie avec l'exemple précédent modéliser ce système et identifier les notions précédentes. Par exemple, la molécule A peut être libre (état 1) ou liée à B (état 2).
3. **Pour plusieurs molécules** On reprend le cas de la réaction précédente mais impliquant cette fois N molécules. On propose une nouvelle description dans laquelle on s'intéresse cette fois non pas à la configuration de la molécule A (libre ou liée), mais au nombre de molécules dans chaque configuration. Par un jeu de questions/réponses et de schémas, j'amènerai les élèves à identifier dans ce nouveau cadre les notions précédentes.
4. **Lien avec la chimie macroscopique** Cette partie prendra la forme d'une analyse documentaire. Un certain nombre de documents permettra de
 - rappeler ou définir des notions de probabilités : moyenne, écart-type, loi des grands nombres (version vulgarisée) ;
 - relier le taux de transition à la constante de vitesse de la réaction ;
 - discuter les conséquences de la limite thermodynamique sur les fluctuations.

Les élèves répondront à des questions qui leur permettront progressivement de comprendre le passage de l'équation maîtresse à l'équation d'évolution de la concentration vue en cours.

On pourra conclure cette activité en traitant un dernier exemple, celui de la désintégration radioactive, que l'on peut également modéliser par une équation maîtresse permettant de retrouver la loi de décroissance radioactive. Ces résultats serviront à introduire la séquence suivante du programme « Modéliser l'évolution temporelle d'un système, siège d'une transformation nucléaire ».

Pourquoi cette activité ? Introduire aux élèves des modèles microscopiques leur permet de développer une intuition physique sur les phénomènes macroscopiques, comme c'est le cas avec les réactions chimiques et leur modélisation par des actes élémentaires. Toutefois, je pense que se limiter à une simple présentation de ces aspects microscopiques peut faire naître une confusion chez l'élève : si le phénomène est aléatoire au niveau microscopique, pourquoi ne l'est-il pas au niveau macroscopique ? Comment passe-t-on d'une description à une autre ? Pendant une partie de ma thèse, j'ai étudié mathématiquement ces questions, en partant d'une modélisation microscopique du système vers l'étude du comportement asymptotique d'une grandeur physique dans la limite thermodynamique. Pour que l'introduction d'un modèle microscopique permette effectivement une meilleure compréhension de la physique chez les élèves, j'estime qu'il est important de rendre explicite le lien entre ces deux mondes en précisant que l'on peut négliger les fluctuations des grandeurs physiques devant leur valeurs moyennes dans la limite de grand nombre de particules.

De manière plus générale, cette activité introduit la modélisation d'un phénomène physique en utilisant la théorie des probabilités, et permet aux élèves de voir une application concrète des notions vues en cours de mathématiques. Cette compétence sera par ailleurs réutilisée pendant l'année dans le cours d'enseignement scientifique sur le modèle mathématique de Hardy-Weinberg, permettant ainsi d'en voir une application dans un autre domaine scientifique.

Enfin, j'espère à travers cette activité sensibiliser les élèves sur le caractère probabiliste des systèmes microscopiques. Je pense qu'introduire cet aspect-là dès le lycée est important pour les élèves qui poursuivront leurs études en sciences, en particulier en physique, et les aidera à mieux concevoir certaines théories dans la suite de leur apprentissage. On citera comme exemple la physique statistique et la mécanique quantique.

1. Je vais m'inspirer pour cela du [cours de Raúl Toral](#) et de [Bahram Houchmandzadeh](#).

Principe de grandes déviations

Afin de prendre en compte le caractère fluctuant des observables physiques d'intérêt, celles-ci seront définies comme des variables aléatoires. Il convient alors de spécifier la distribution de probabilité de leurs valeurs possibles. La probabilité d'observer une valeur a d'une variable aléatoire A_t peut s'écrire formellement pour un processus de Markov. Toutefois, une telle expression n'est pas exploitable en pratique. En revanche, il est possible de caractériser le comportement de l'observable dans la limite de temps long en utilisant la **théorie des grandes déviations**. Cette théorie est construite sur un principe mathématique décrivant le comportement asymptotique des probabilités. On dit que A_t satisfait un principe de grandes déviations de taux $I(a)$ si la limite

$$\ln P(A_t = a) \underset{t \rightarrow \infty}{=} -tI(a) + o(t). \quad (3.2)$$

existe. On l'écrira de manière plus visuelle :

$$P(A_t = a) \underset{t \rightarrow \infty}{\asymp} e^{-tI(a)}. \quad (3.3)$$

La fonction I est appelée **fonction de grandes déviations**. L'Eq. (3.3) signifie que les termes sous-exponentiels sont négligeables dans le développement asymptotique de la probabilité lorsque t devient grand. Ainsi, la probabilité décroît exponentiellement pour toute valeur a à l'exception des zéros a_{typ} de la fonction de grandes déviations : $I(a_{typ}) = 0$. Par conséquent, la variable aléatoire A_t converge en probabilité vers ces zéros que nous appelons **valeurs typiques** de A_t . Inversement, toute valeur $a \neq a_{typ}$ est une **fluctuation rare** puisque la probabilité de trouver de telles valeurs tend exponentiellement vers 0 lorsque t devient très grand. Il est important de noter que les fonctions de grandes déviations ont au moins un zéro pour assurer la normalisation de la probabilité et sont toujours positives. En effet, des valeurs négatives de I donneraient des probabilités supérieures à 1. Enfin, nous faisons remarquer que le facteur de normalisation étant sous-exponentiel, il n'apparaît pas dans l'Eq. (3.3) mais celui-ci est bien présent pour assurer la normalisation de la probabilité.

Reprenons l'exemple du lancer de pile ou face. Nous lançons la pièce n fois et nous appelons X_ℓ le résultat du $\ell^{\text{ème}}$ lancer. La variable aléatoire X_ℓ prend la valeur 0 (pile) ou 1 (face) avec des probabilités égales. À présent, prenons comme observable le ratio de nombre de *face* obtenu par rapport au nombre total de lancers :

$$A_n \equiv \frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^n X_\ell. \quad (3.4)$$

Comme les lancers sont indépendants, la probabilité que A_n prenne la valeur a satisfait

$$P(A_n = a) = \frac{1}{2^n} \binom{n}{na} = \frac{1}{2^n} \frac{n!}{(na)!(n-na)!}. \quad (3.5)$$

On s'intéresse maintenant au comportement de A_n lorsque le nombre de lancers devient grand. En utilisant le développement asymptotique $\ln(n!) = n \ln n - n + o(n)$, on obtient :

$$\ln(P(A_n = a)) = -n [\ln 2 + a \ln a + (1-a) \ln(1-a)] + o(n), \quad (3.6)$$

impliquant

$$P(A_n = a) \underset{n \rightarrow \infty}{\asymp} e^{-nI(a)}, \quad (3.7)$$

avec

$$I(a) = \ln 2 + a \ln a + (1-a) \ln(1-a). \quad (3.8)$$

Par conséquent, A_n satisfait un principe de grandes déviations de taux $I(a)$. Comme le montre la Fig. 3.2, I a un zéro unique $a_{typ} = \frac{1}{2}$. Ceci nous apprend que A_n converge en probabilité vers $\frac{1}{2}$, ce qui est attendu puisque la pièce n'est pas biaisée, mais aussi que sa distribution décroît exponentiellement vers 0 pour toute autre valeur.

Les valeurs autour de la valeur typique sont appelées **petites déviations** et suivent une loi gaussienne (développement au second ordre de $I(a)$). Les valeurs plus éloignées dont la distribution s'écarte sensiblement d'une gaussienne sont appelées **grandes déviations**. Bien qu'elles soient peu probables, ces fluctuations rares peuvent avoir un grand impact sur les systèmes. C'est le cas par exemple des événements climatiques extrêmes

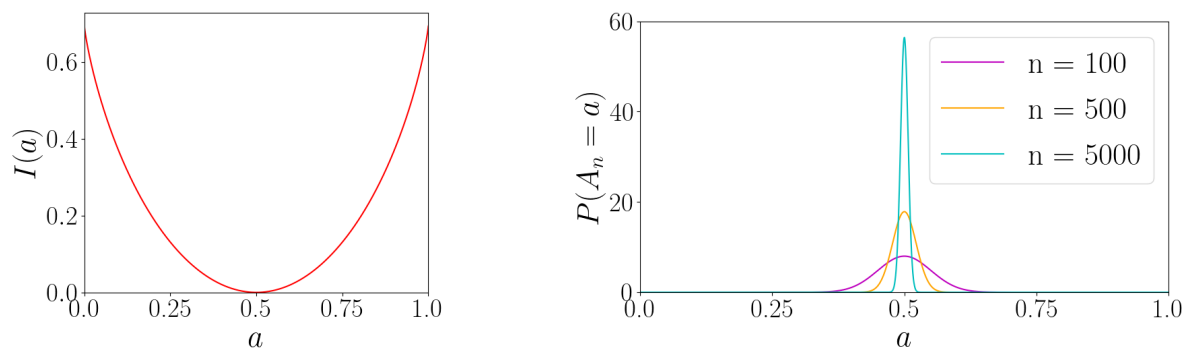


FIGURE 3.2 – (gauche) Fonction de grandes déviations du modèle de lancer de pièce. Comme attendu, la fonction de grandes déviations s’annule en $a = \frac{1}{2}$, correspondant au cas où l’on obtient autant de *pile* que de *face* lorsque le nombre de lancers tend vers l’infini. (droite) Densité de probabilité $P(A_n = a)$ pour des valeurs croissantes de n . La densité de probabilité devient plus étroite autour de la valeur typique $a_{\text{typ}} = \frac{1}{2}$ lorsque n augmente, et converge vers la fonction de Dirac centrée sur a_{typ} lorsque $n \rightarrow \infty$.

tels que les sécheresses extrêmes, les vagues de chaleur, les précipitations ou les tempêtes qui peuvent avoir des conséquences non négligeables sur les systèmes éco et socio-économiques. Et comme l’ont écrit Amir Dembo et Ofer Zeitouni : “*Il suffit de penser à une loterie pour être convaincu que des événements rares (comme toucher le jackpot) peuvent avoir un impact énorme.*”

Mobilisation des connaissances et compétences acquises

Proposition d’activité en CPGE Mon travail de thèse ayant porté sur des notions abordées à la fois dans le programme de physique et de mathématiques de la filière MP, je propose de faire une activité en collaboration avec le professeur de mathématiques. Cette activité s’inscrira dans la cadre du chapitre « Éléments de thermodynamique statistique » du programme de physique et du chapitre « Variables aléatoires discrètes » du programme de mathématiques, et portera sur la description de la thermodynamique statistique via une approche de grandes déviations.

Description de l’activité L’activité aura lieu dans le cadre d’une séance de TD durant laquelle les étudiants travailleront en binôme sur un problème guidé élaboré par le professeur de mathématique et moi-même. Le problème sera composé de deux parties.

Une première partie, plus mathématique, portera sur la théorie des grandes déviations. Dans un premier temps, celle-ci pourra être introduite à travers l’exemple simple du lancer de pile ou face décrit précédemment. Dans un second temps, la théorie sera développée de manière plus générale et plus rigoureuse. Cette partie du problème sera l’occasion de travailler sur les notions du programmes de mathématiques portant sur les variables aléatoires discrètes, la modélisation du jeu de pile ou face infini et la loi faible des grands nombres.

La seconde partie du problème aura pour objet d’appliquer les résultats de la première partie à la thermodynamique statistique. Pour cela, je vais m’inspirer du contenu d’un article scientifique¹ qui m’a beaucoup aidée pendant ma thèse afin que les étudiants puissent décrire les éléments de thermodynamique statistique vus en cours dans le langage des grandes déviations. Plus concrètement, on s’intéressera à un système à N particules indépendantes en contact avec un réservoir de température. Les étudiants devront identifier la grandeur d’intérêt (énergie par particule) qui constitue une variable aléatoire supposée vérifier un principe de grandes déviations. Ils décriront son comportement asymptotique dans la limite thermodynamique. En particulier, ils constateront que la valeur moyenne de l’énergie coïncide avec sa valeur la plus probable. Enfin, ils étudieront le comportement gaussien des petites déviations en développant la fonction de grandes déviations autour de sa valeur typique et identifieront la variance. Cette partie du problème aborde les notions du programme de physique portant sur l’énergie moyenne et l’écart quadratique moyen, et sur le cas d’un système à N particules indépendantes.

Pourquoi cette activité ? Je pense que la thermodynamique statistique n'est pas évidente à appréhender pour des étudiants qui l'abordent pour la première fois. D'un point de vue personnel, j'ai eu du mal au début à développer une intuition sur les différents concepts de cette théorie et je ne comprenais pas forcément l'intérêt d'étudier la valeur moyenne et l'écart-type de l'énergie. Une fois en thèse, j'ai découvert la théorie des grandes déviations qui fournit un formalisme mathématique adéquat pour l'étude de la thermodynamique statistique d'équilibre, ce qui m'a permis d'avoir une vue d'ensemble de ce domaine et de mieux le comprendre. J'aimerais donc utiliser ce recul au service des étudiants, d'une part pour qu'ils aient une meilleure compréhension des notions de thermodynamique statistique, et d'autre part pour qu'ils voient une application en physique des concepts étudiés en mathématiques. En effet, le programme de mathématiques de la filière MP est dense et abstrait, et les étudiants ne voient pas toujours l'intérêt pratique des notions vues en cours. J'estime qu'il est important d'insister sur l'utilité des mathématiques dans d'autres domaines scientifiques, en particulier de la physique, et une manière d'y arriver est de travailler en collaboration avec le professeur de mathématique afin de proposer des activités ou des séances de TD en commun.

Par ailleurs, je pense que cette activité reste utile à la préparation aux concours d'entrée aux grandes écoles. Par exemple, les grandes déviations ont fait l'objet de l'épreuve de mathématiques de la filière PSI du concours Centrale-Supélec de 2017. Enfin, j'estime que les connaissances acquises pourraient servir aux étudiants dans la suite de leur formation, voire de leur parcours professionnel, si ces derniers décident de s'orienter dans les secteurs de la physique, la théorie de l'information, la gestion du risque ou encore la finance.

1. Article intitulé [The large deviation approach to statistical mechanics](#) écrit par Hugo Touchette.

3.3 Initiation à mon sujet de thèse à travers un modèle jouet

Dans toute cette section, nous allons découvrir petit à petit la problématique du *conditionnement d'un processus de Markov* à travers un exemple simple sans grand intérêt physique mais qui a l'avantage de donner un peu d'intuition à ce qui passe. J'expliquerai comment chaque résultat pour ce modèle jouet illustre les résultats plus généraux et abstraits de ma thèse sans toutefois en expliciter les complexités mathématiques.

Avant de définir le modèle, il est important de comprendre que l'un des résultats principaux de ma thèse — objet du contenu de ce dossier — consiste en la généralisation de la résolution du problème de conditionnement d'un processus de Markov homogène en temps (i.e. avec des taux de transition indépendants du temps) à des processus conduits périodiquement (i.e. avec des taux de transition périodiques), justifiant ainsi le choix des taux de transition ci-dessous.

Définition du modèle jouet

On considère un système à deux niveaux avec des états notés \mathbf{e}_\pm . Par exemple, imaginons que l'on s'intéresse au sommeil d'un chat. L'état \mathbf{e}_+ est l'état du chat réveillé et \mathbf{e}_- est l'état du chat endormi. Par simplicité, la matrice des taux de transition est choisie symétrique et constante par morceaux :

$$\hat{k}(t) = \begin{pmatrix} -k(t) & k(t) \\ k(t) & -k(t) \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

le taux $k(t)$ étant une fonction T -périodique et constante par morceaux

$$k(t) = \begin{cases} k^0 & \text{for } t \in [0, \alpha T[, \\ k^1 & \text{for } t \in [\alpha T, T[, \end{cases} \quad (3.10)$$

où $\alpha \in]0, 1[$, et où k^0 et k^1 sont deux constantes positives (cf. Fig. 3.3). Pour $T = 24$ h et $\alpha = \frac{1}{3}$ par exemple, cela signifie que le chat s'endort ou se réveille à l'instant t avec le même taux $k(t)$, ce dernier variant périodiquement sur une journée et prenant deux valeurs différentes k^0 entre minuit et 8 h, et k^1 entre 8 h et minuit.

On veut suivre l'état du chat sur n jours ($n \in \mathbb{N}$). On note $z(t)$ l'état du chat à l'instant t et on s'intéresse aux trajectoires $[z]$ entre $t = 0$ et $t = nT$ (avec $T = 24$ h) constituée des états successivement occupés par le chat et

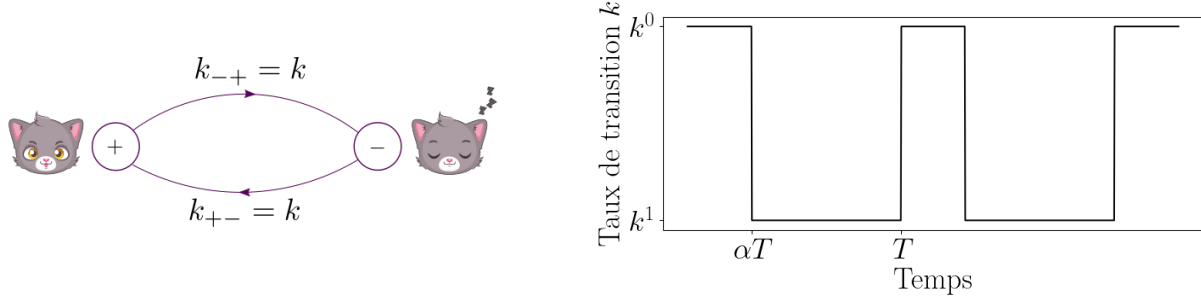


FIGURE 3.3 – Taux de transition $k(t)$ apparaissant dans la matrice de taux de transition \hat{k} de l'Eq. (3.9).

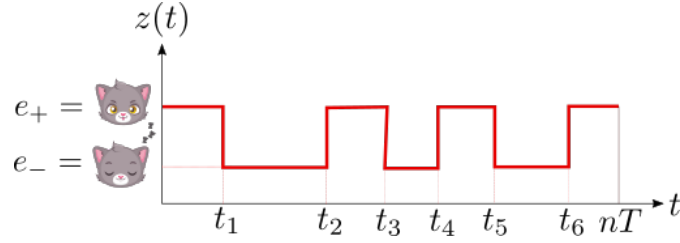


FIGURE 3.4 – Un exemple de trajectoire.

de la donnée des temps auxquels une transition a eu lieu (réveil ou endormissement). Un exemple de trajectoire est représenté sur la Fig. 3.4. Pour cette trajectoire, le chat est réveillé entre $t = 0$ et t_1 ($z(t) = \mathbf{e}_+$), et s'endort à t_1 (transition $\mathbf{e}_+ \rightarrow \mathbf{e}_-$), etc.

On s'intéresse à présent au sommeil du chat sur les deux parties de la journée. Nous voulons savoir d'une part si le chat s'endort plus qu'il ne se réveille la nuit (entre minuit et 8 h), et d'autre part s'il se réveille plus qu'il ne s'endort le reste de la journée (entre 8 h et minuit). Pour cela, on introduit la fonction $g_{-+}(t)$ associée à la transition $\mathbf{e}_+ \rightarrow \mathbf{e}_-$ définie par

$$g_{-+}(t) = \begin{cases} 1 & \text{for } t \in [0, \alpha T[, \\ -1 & \text{for } t \in [\alpha T, T[. \end{cases} \quad (3.11)$$

La fonction g_{-+} compte donc positivement les endormissements la nuit, et les compte négativement le reste de la journée. De même, on définit la fonction $g_{+-}(t)$ associée à la transition $\mathbf{e}_- \rightarrow \mathbf{e}_+$ par $g_{+-}(t) = -g_{-+}(t)$ (cf. Fig. 3.5). Nous pouvons maintenant définir l'observable physique d'intérêt $A[z]$, fonction des trajectoires, par :

$$A[z] = \frac{1}{nT} \sum_{t \in [0, nT] \mid z(t^+) \neq z(t^-)} g_{z(t^+), z(t^-)}(t), \quad (3.12)$$

où la somme porte sur les temps auxquels une transition a lieu et où t_- (resp. t_+) est le temps juste avant (resp. après) la transition. L'observable $nT \times A$ compte donc sur n jours :

- la différence entre le nombre d'endormissements et le nombre de réveils (nombre **net** de transitions $\mathbf{e}_+ \rightarrow \mathbf{e}_-$) dans la première partie de chaque période, i.e. entre minuit et 8 h de chaque jour ;
- la différence entre le nombre de réveils et le nombre d'endormissements (nombre **net** de transitions $\mathbf{e}_- \rightarrow \mathbf{e}_+$) dans la seconde partie de chaque période, i.e. entre 8 h et minuit de chaque jour.

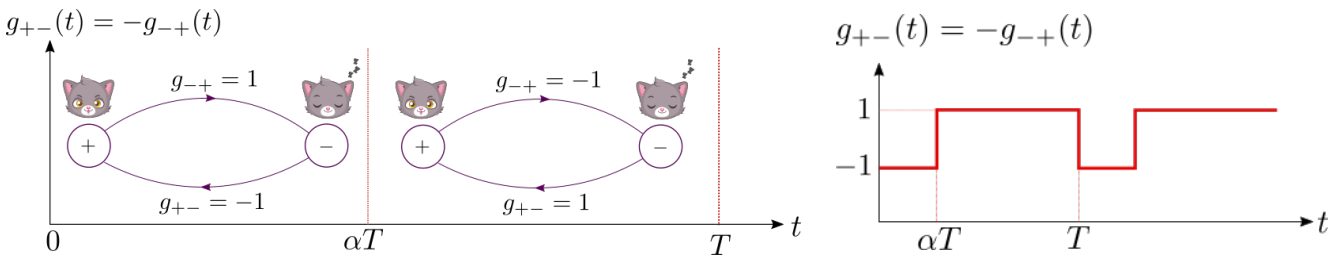


FIGURE 3.5 – (gauche) Schéma définissant g_{+-} et g_{-+} sur chaque partie de la période. (droite) $g_{+-}(t)$.

Généralisation On peut définir des observables plus générales à deux composantes impliquant à la fois une fonction T -périodique des sauts $g_{ij}(t)$ et une fonction T -périodique des états $h_i(t)$:

$$\mathbf{A}[z] = \begin{pmatrix} \frac{1}{nT} \sum_{t \in [0, nT] \mid z(t^+) \neq z(t^-)} g_{z(t^+), z(t^-)}(t) \\ \frac{1}{nT} \int_0^{nT} dt h_{z(t)}(t) \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Cette observable générale représente de nombreuses grandeurs physiques incluant les principales observables en thermodynamique. Par exemple, considérons un système en contact avec un réservoir température, et supposons que ses niveaux d'énergie $U_i(t)$ ont été rendus dépendants du temps par un forçage externe. En prenant $g_{ij}(t) = U_i(t) - U_j(t)$ et $h_i(t) = \partial_t U_i(t)$, les deux composantes de $nT \times \mathbf{A}[z]$ représentent respectivement la chaleur $Q[z]$ et le travail $W[z]$ le long de la trajectoire $[z]$. La chaleur correspond donc à la variation de l'énergie due à une variation de l'état du système (sauts) à temps fixé, et le travail à la variation de l'énergie par rapport au temps (forçage) à état fixé. La somme de ces deux contributions correspond à la variation totale de l'énergie entre les instants 0 et nT :

$$\Delta U(nT) = W[z] + Q[z], \quad (3.14)$$

retrouvant ainsi le premier principe de la thermodynamique qui reste donc valable au niveau d'une trajectoire. Il est à noter que la variation d'énergie est une fonction d'état et ne dépend pas de la trajectoire contrairement au travail et à la chaleur.

Maintenant que l'on a défini l'observable d'intérêt pour notre modèle jouet, nous allons nous intéresser à sa valeur typique et ses fluctuations dans les sections suivantes.

Étude des fluctuations : théorie des grandes déviations

Revenons à notre modèle jouet. Le chat peut se réveiller ou s'endormir à n'importe quel moment de la journée de façon aléatoire avec une certaine probabilité régie par le taux de transition $k(t)$. Puisque A dépend de la trajectoire $[z]$ qui est une variable aléatoire, c'est aussi une variable aléatoire et doit s'étudier dans un cadre probabiliste. Comme nous l'avons vu dans la Section 3.2, il est en général plus intéressant d'étudier le comportement de l'observable dans la limite de temps long. On peut montrer que l'observable A de l'Eq. (3.12) satisfait un principe de grandes déviations

$$P(A = a) \underset{n \rightarrow \infty}{\asymp} e^{-nTI(a)}, \quad (3.15)$$

où la fonction de grandes déviations I est représentée dans la Fig. 3.6. Pour un très grand nombre de périodes n , l'observable A converge vers sa valeur typique. Depuis la Fig. 3.5, on s'attend par symétrie à ce que cette valeur soit égale à $a_{\text{typ}} = 0$ pour notre processus (A est une somme de $+1$ et de -1 à probabilités égales). C'est effectivement ce que l'on observe dans la Fig. 3.6 : le point d'annulation de la fonction de grandes déviations est bien nul. Par ailleurs, nous faisons remarquer qu'en plus de la donnée de la valeur la plus probable de notre observable, la fonction de grandes déviations permet de décrire le comportement asymptotique de ses fluctuations rares que l'on traite la partie suivante.

Introduction au problème de conditionnement d'un processus de Markov

Nous sommes jusque là partis d'un système décrit par sa matrice de taux de transition \hat{k} qui définit pour une observable aléatoire une distribution de probabilité décrite par une fonction de grandes déviations I . Nous voulons à présent **conditionner** notre processus sur une **fluctuation rare**. Autrement dit, nous voulons :

1. **restreindre** les trajectoires accessibles au système uniquement à celles pour lesquelles l'observable $A[z]$ prend une valeur imposée a_* (Fig. 3.7) : on parle de conditionnement *microcanonique* par analogie avec l'ensemble microcanonique dans lequel l'énergie est fixée et n'est pas autorisée à fluctuer ;
2. construire une nouvelle matrice de taux de transition \hat{K} pour laquelle l'observable aura une nouvelle distribution de probabilité décrite par une nouvelle fonction de grandes déviations $I_{\hat{K}}$ et pour laquelle l'observable aura pour valeur typique, non plus a_{typ} , mais a_* , i.e. $I_{\hat{K}}(a_*) = 0$.

Ceci définit le problème de conditionnement qui a été résolu pour des processus de Markov homogènes en temps, puis, dans le cadre de ma thèse, pour des processus de Markov conduits périodiquement.

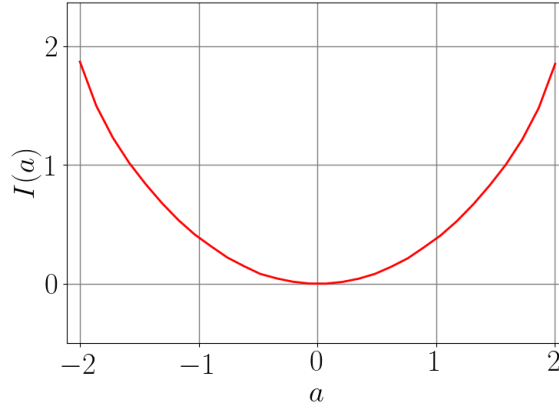


FIGURE 3.6 – Fonction de grandes déviations $I(a)$. La courbe est obtenue pour $\alpha = 0.3$, $T = 1$, $k^0 = 3$, $k^1 = 1$.

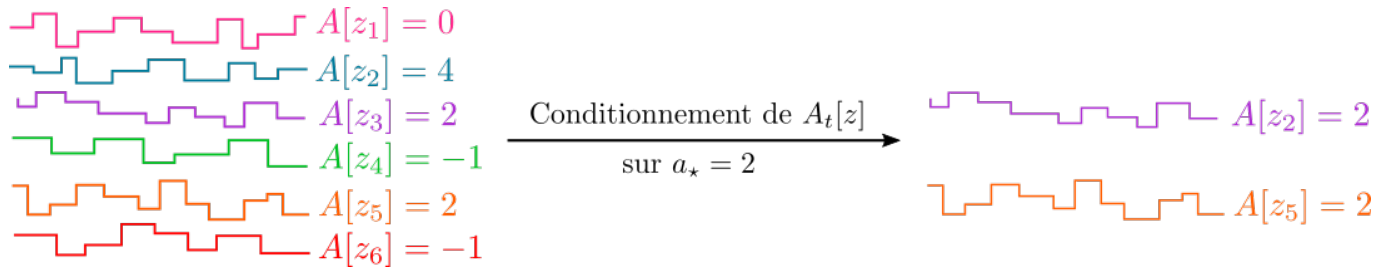


FIGURE 3.7 – Représentation schématique du conditionnement microcanonique : ce dernier consiste à filtrer les trajectoires pour ne garder que celles qui réalisent la valeur que l'on a imposée à l'observable.

Retour sur le modèle jouet

Nous avons vu que l'observable $A[z]$ convergeait dans la limite de temps long vers $a_{\text{typ}} = 0$. Nous conditionnons à présent $A[z]$ sur une fluctuation rare, par exemple $a_* = 0.4$ et cherchons à répondre à la question : « *Comment doit être la nouvelle matrice de taux de transition \hat{K} pour que la valeur typique de A sous \hat{K} soit $a_* = 0.4$?* ».

L'application des résultats obtenus dans ma thèse sur notre modèle jouet a permis la construction de la matrice \hat{K} dont les composantes $K_{+-}(t)$ et $K_{-+}(t)$ sont représentées graphiquement. Sur la Fig. 3.8, nous avons tracé les nouveaux taux $K_{+-}(t)$ et $K_{-+}(t)$ et les taux d'origine $k_{+-}(t) = k_{-+}(t) = k(t)$ afin d'observer qualitativement l'effet du conditionnement sur le processus de Markov initial. Dans le nouveaux processus, nous avons fixé à $a_* = 0.4$ le nombre moyen par unité de temps d'endormissements par rapport aux réveils, comptés positivement s'ils se produisent sur la première partie de chaque cycle et négativement sur la seconde partie. Dans le processus d'origine, ce nombre vaut zéro en raison de la symétrie de la matrice de taux de transition. Ainsi, imposer $a > 0$ devrait d'une part privilégier les transitions contribuant positivement à l'observable, et d'autre part défavoriser celles y contribuant négativement. Cela revient à augmenter le nouveau taux de la transition $\mathbf{e}_+ \rightarrow \mathbf{e}_-$ et à diminuer celui de la transition $\mathbf{e}_- \rightarrow \mathbf{e}_+$ sur $[0, \alpha T]$, et inversement sur $[\alpha T, T]$. Effectivement, par rapport au taux d'origine k , on voit sur la Fig. 3.8 que $K_{+-} < k^0 < K_{-+}$ sur $[0, \alpha T]$ de sorte que les endormissements sont favorisés en moyenne sur la première partie de la période, tandis que $K_{-+} < k^1 < K_{+-}$ sur $[\alpha T, T]$ de sorte que les réveils sont favorisés en moyenne sur la seconde partie de la période : le conditionnement a brisé la symétrie de la matrice de taux d'origine.

Enfin, nous observons que les nouveaux taux de transition ne sont plus constants par morceaux. Il n'est cependant pas intuitif de comprendre cette dépendance temporelle. Nous pouvons simplement dire que l'espace des taux de transitions à explorer dans la détermination du nouveau processus n'a pas de raison de se limiter à celui de taux constants par morceaux.

Pour aller plus loin On pourrait a priori trouver d'autres taux de transition pour lesquels A prend $a_* = 0.4$ comme nouvelle valeur typique. L'unicité du processus effectif présenté ici réside dans le fait qu'il s'agit d'une part du processus de Markov le plus probable satisfaisant les conditions du problème (c'est l'unique solution d'un

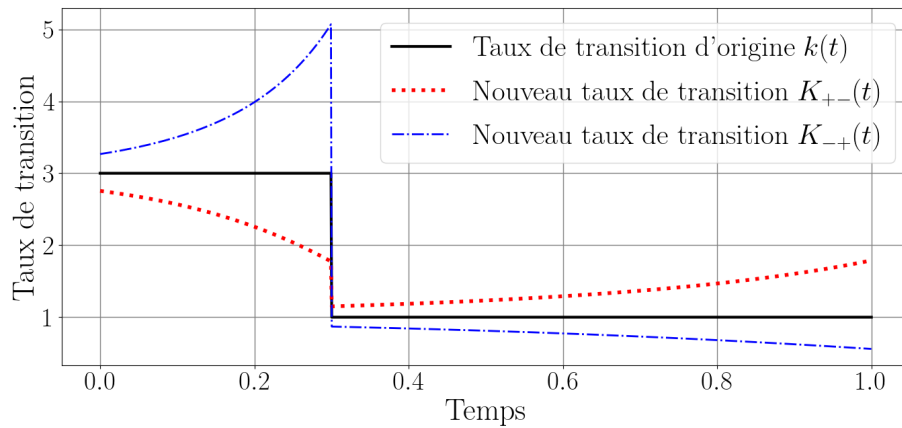


FIGURE 3.8 – Taux de transition d’origine $k(t)$ (ligne noire continue) et nouveaux taux de transition $K_{+-}(t)$ (ligne rouge en pointillée) et $K_{-+}(t)$ (ligne bleue en pointillée). La courbe est obtenue pour $\alpha = 0.3$, $T = 1$, $k^0 = 3$, $k^1 = 1$, $a_\star = 0.4$.

problème d’optimisation sous contrainte), et d’autre part que c’est celui qui permet de démontrer l’équivalence d’ensembles microcanonique et canonique dans le cadre hors équilibre.

Discussion conclusive

Ce travail de thèse implique des aspects fondamentaux de la physique statistique telles que la généralisation hors équilibre de notions d’équilibre. À l’équilibre, la valeur de l’énergie $E = E^\mu$ est fixée dans l’ensemble microcanonique alors qu’elle est autorisée à fluctuer dans l’ensemble canonique. Ce qui est en revanche fixé dans cet ensemble, c’est la température T qui impose la valeur moyenne de l’énergie $\langle E \rangle = E^c(T)$. Dans la limite thermodynamique, les fluctuations de l’énergie sont négligeables devant sa valeur moyenne et on peut écrire $E \simeq E^c(T)$. Si l’on choisit la température de sorte que $E^c(T) = E^\mu$, l’énergie dans l’ensemble canonique a en moyenne la même valeur que dans l’ensemble microcanonique : on parle alors d’équivalence d’ensembles. Le problème de conditionnement est une généralisation hors équilibre de ces concepts. En effet, le conditionnement est une généralisation de l’ensemble microcanonique (on fixe la valeur de l’observable $A = a_\star$) tandis que le processus effectif généralise l’ensemble canonique (on fixe la valeur typique de l’observable sous ce nouveau processus). On veut alors que la nouvelle valeur typique soit égale à a_\star de sorte que les processus effectif et conditionné soient équivalents dans la limite de temps long.

D’un point de vue plus pratique, ce travail montre que la grande déviation (fluctuation rare) d’une observable pour un processus donné correspond à la valeur typique de cette observable pour un autre processus, et fournit un moyen de construire la matrice de taux de transition de cet autre processus.

4 Mes activités de médiation scientifique

Au cours de ma thèse, je me suis investie dans plusieurs actions de médiation scientifique. En particulier, j’ai choisi de faire ma mission doctorale à la Maison d’Initiation et de Sensibilisation aux Sciences (MISS), structure scientifique qui accueille des élèves (du CE2 à la 3ème) afin de les introduire à divers sujets scientifiques (SVT, mathématiques, histoire, physique, chimie, informatique, etc.). J’y ai animé plusieurs ateliers thématiques au cours desquels nous faisons en sorte que les élèves soient actifs, émettent des hypothèses et apprennent par eux même à travers les différentes activités manuelles proposées, le tout dans une ambiance bienveillante et ludique.

Une journée-type à la MISS commence par l’accueil des élèves dans une salle dédiée. Chaque animateur prend alors le temps de se présenter, d’introduire son sujet de thèse et de répondre aux questions des élèves. Cet exercice m’a appris à rendre un sujet complexe à la fois attrayant et accessible à des élèves, parfois très jeunes : cette compétence est l’essence même du métier d’enseignant. Par la suite, les élèves sont répartis en groupes auxquels un animateur est assigné, puis sont amenés au *laboratoire* : c’est ici qu’auront lieu les différents ateliers.

Au cours de la journée, les élèves découvrent à travers une thématique donnée (histoire des nombre, musique

et sciences, couleurs du nanomonde, etc.) l’exploration, l’expérimentation et la démarche scientifique. Notre rôle en tant qu’animateur est de les accompagner dans cette découverte en leur laissant la place suffisante pour s’exprimer, raisonner par eux même, et être critiques sur leurs hypothèses. En effet, nous accordons une importance particulière à l’esprit critique et essayons de leur faire réaliser que l’on ne sait pas tout et que ce n’est pas grave de se tromper. Ainsi, j’envisage de poursuivre la méthodologie appliquée à la MISS dans ma future classe en m’efforçant de dispenser un enseignement actif à travers diverses activités comme des débats scientifiques entre les élèves, la critique constructive d’une affirmation sur un sujet donné ou encore la résolution autonome d’une problématique (analyse, hypothèse, vérification expérimentale ou numérique).

Si la thèse m’a permis d’acquérir des connaissances scientifiques techniques et très spécialisées, mes activités de médiation scientifique m’ont permis de renforcer mes compétences en vulgarisation, pédagogie et communication, compétences qui, selon moi, se doivent d’accompagner le bagage scientifique d’un enseignant. J’ai ainsi appris à comprendre les élèves, à adapter mon discours face à eux en usant de métaphores, d’images, d’analogies ou de jeux, tout en étant consciente de leurs limites scientifiques.

Au-delà de ces compétences de pédagogie, ces ateliers m’ont appris à mettre en place une séance de travaux pratiques qui amène l’élève à réfléchir aux expériences qu’il fait, et non pas à suivre une recette pré-établie. Parmi les ateliers que j’ai animés, les activités de l’atelier « Musique et Sciences » par exemple sont directement exploitables dans le cadre du chapitre « Ondes et signaux » du programme de 2^{nde} générale et technologique à travers une séance de TP autour du son (cloche à vide, logiciel de visualisation d’onde sonore, mesure de la vitesse du son, etc.).

Enfin, cette expérience m’a appris à m’adapter à différentes situations. Par exemple, afin de poursuivre nos activités pendant la période de confinement, nous avons conçu des ateliers-vidéos que les élèves pouvaient faire depuis chez eux. Cela m’a permis de découvrir de nouveaux formats de pédagogie qui pourraient être réexploités dans le cadre de l’enseignement. D’autre part, nous avons accueilli des élèves d’établissements très divers, dont classés REP. De ce fait, nous adaptons l’atelier à la classe dans son ensemble, mais aussi à chaque élève en tant qu’individu. J’ai ainsi pu accompagner des profils différents d’élèves, allant de l’élève timide à l’élève curieux, en passant par l’élève désintéressé ou plaisantin. Nous avons également accueilli un élève en situation de handicap (moteur et cognitif) qui a suivi l’atelier avec ses camarades accompagné de son AVS. Dans tous les cas, j’ai toujours essayé d’intégrer chaque élève à la discussion générale en prenant en compte sa personnalité, et de faire de la différenciation pédagogique en ajustant mes questions ou explications à chacun.

5 Pour conclure

Mon intérêt pour les sciences m’a conduit à faire un doctorat, mais ma passion pour l’enseignement et la médiation scientifique m’amène aujourd’hui à me présenter au concours de l’agrégation.

Mon expérience dans le milieu académique ainsi qu’un court passage dans le monde professionnel privé m’ont fait comprendre que mon épanouissement professionnel ne pourra se construire que dans un milieu où la priorité est donnée à l’intérêt général, à l’égalité et à l’éthique. Pour rester fidèle à mes valeurs et mes ambitions, j’ai choisi d’orienter la poursuite de ma voie professionnelle vers l’enseignement. Je souhaite ainsi mettre à profit les compétences que j’ai acquises tout au long de mon parcours en formant à mon tour les futurs acteurs de la société, en les guidant et en les faisant grandir, de la même manière que mes professeurs m’ont formée, m’ont guidée et m’ont fait grandir, toujours avec bienveillance et sincérité.

Selon moi, l’éducation et la transmission du savoir sont le socle d’une société saine et solide. Consciente des difficultés qui touchent le métier d’enseignant, je suis prête à y faire face et à faire de mon mieux pour intéresser les jeunes aux sciences, mais aussi être à leur écoute, les motiver, les soutenir et les encourager.