Considérer un système stochastique décrit par l'equation de Smoluchowski

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{1}{m\gamma}\frac{\partial}{\partial x}\left[F(x)P(x,t)\right] + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t).$$

(i) Considérer une force constante

$$F(x) = -eE.$$

(ii) Considérer une force harmonique.

$$F(x) = -\kappa x$$

Calculer dans les deux cas la valeur moyenne de la position $\langle x(t)\rangle$ et son écart quadratique $\langle x^2(t)\rangle - \langle x(t)\rangle^2$.

**Solution**

On suppose que la distribution gaussienne

$$P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma(t)}}e^{-\frac{(x-a(t))^2}{2\sigma(t)}}.$$

vérifie l'equation de Smoluchowski. L'evolution dans le temps du centre de la distribution $a(t) = \langle x(t)\rangle$ et de l'écart quadratique $\sigma(t) = \langle x^2(t)\rangle - \langle x(t)\rangle^2$ est determinée par les equations du mouvement. En utilisant l'integration par parties,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle x(t)\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dxx\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) \\
&= -\frac{1}{m\gamma}\int_{-\infty}^{+\infty} dxx\frac{\partial}{\partial x}\left(F(x)P(x,y)\right) + D\int_{-\infty}^{+\infty} dxx\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t) \\
&= \frac{1}{m\gamma}\int_{-\infty}^{+\infty} dxF(x)P(x,y) - \frac{1}{m\gamma}xF(x)P(x,y)\mid_{-\infty}^{+\infty} \\
&- D\int_{-\infty}^{+\infty} dx\frac{\partial}{\partial x}P(x,t) + Dx\frac{\partial}{\partial x}P(x,t)\mid_{-\infty}^{+\infty}
\end{aligned}$$

Les trois derniers termes sont nuls pour une distribution gaussienne $P(x,t)$ parce qu'elle même et sa derivée s'annulent à l'infini très rapidement. On trouve donc

$$\frac{d}{dt}\langle x(t)\rangle = \frac{1}{m\gamma}\langle F(x(t))\rangle \tag{1}$$

Analoguement on calcule

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle x^2(t)\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \frac{\partial}{\partial t}P(x,t) \\
&= -\frac{1}{m\gamma}\int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \frac{\partial}{\partial x}\left(F(x)P(x,y)\right) + D\int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t) \\
&= \frac{1}{m\gamma}\int_{-\infty}^{+\infty} dx 2x F(x)P(x,y) - \frac{1}{m\gamma}x^2 F(x)P(x,y)\mid_{-\infty}^{+\infty} \\
&- D\int_{-\infty}^{+\infty} dx 2x \frac{\partial}{\partial x}P(x,t) + Dx^2\frac{\partial}{\partial x}P(x,t)\mid_{-\infty}^{+\infty} \\
&= \frac{2}{m\gamma}\langle xF(x)\rangle - 2D\left[xP(x,t)\mid_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx P(x,t)\right] \qquad (2)
\end{aligned}$$

Puisque la distribution est normalisée, on arrive à l'équation

$$\frac{d}{dt}\langle x^2(t)\rangle = \frac{2}{m\gamma}\langle x(t)F(x(t))\rangle + 2D \tag{3}$$

(On peut vérifier, par substitution directe de la distribution ansatz $P(x,t)$ gaussienne dans l'equation de Smoluchowski, que la relation est satisfaite si les paramètres $a(t)$ et $\sigma(t)$ satisfont ces deux equations du mouvement).

On considère dans les deux cas à résoudre les conditions initiales

$$x(0) = x_0; \sigma(0) = \langle x^2(0)\rangle - x_0^2 = 0.$$

Dans le cas d'une force constante $F = -eE$, l'equation pour la position devient

$$\partial_t\langle x(t)\rangle = -\frac{eE}{m\gamma},$$

qui a solution

$$\langle x(t)\rangle = x_0 - \frac{eE}{m\gamma}t.$$

En particulier, si on multiplie $\langle v(t)\rangle = \partial_t \langle x(t)\rangle$ par le facteur $-en$, où $n$ est le nombre de particules, on retrouve pour la densité de courant la relation

$$j = \sigma_0 E; \sigma_0 = \frac{ne^2}{m\gamma}$$

qui est le résultat de Drude si on identifie $\gamma = 1/\tau$.
En utilisant le resultat pour $\langle x(t)\rangle$ dans la deuxième equation, on obtient

$$\partial_t \langle x^2(t)\rangle = 2\left(\frac{eE}{m\gamma}\right)^2 t - 2\frac{eE}{m\gamma}x_0 + 2D$$

qui donne la solution

$$\langle x^2(t)\rangle = \left(-\frac{eE}{m\gamma}t + x_0\right)^2 + 2Dt = \langle x(t)\rangle^2 + 2Dt \Rightarrow \sigma(t) = 2Dt$$

On voit que le problème n'a pas une solution stationnaire, et la largeur de la distribution augmente lineairement avec le temps.

Dans le cas de force harmonique, l'equation **??** devient

$$\partial_t \langle x(t)\rangle = -\frac{\kappa}{m\gamma}\langle x(t)\rangle,$$

qui a la solution exponentielle decroissante

$$\langle x(t)\rangle = x_0 e^{-\frac{\kappa}{m\gamma}t}.$$

On voit qu'il n'y a aucune trace de mouvement oscillatoire, tandis que, dans un regime de petit amortissement, on s'attendrait des oscillations amorties. En fait, cette théorie traite la force comme une moyenne et neglige totalement les fluctuations aléatoires. Dans l'equation du mouvement résultante il n'y a donc aucun terme dynamique newtonien (du type $F = ma$). Ce traitement est donc valable pour un regime de grand amortissement.
L'equation **??** devient

$$\partial_t \langle x^2(t)\rangle = -2\frac{\kappa}{m\gamma}\langle x^2(t)\rangle + 2D$$

qui a solution

$$\langle x^2(t)\rangle = \frac{Dm\gamma}{\kappa}\left(1 - e^{-2\frac{\kappa}{m\gamma}t}\right) + \langle x(t)\rangle^2 \Rightarrow \sigma(t) = \frac{Dm\gamma}{\kappa}\left(1 - e^{-2\frac{\kappa}{m\gamma}t}\right).$$

Dans ce cas donc une solution stationnaire est admise avec $\langle x(t \to +\infty) \rangle = 0$ et $\sigma(t \to +\infty) = \frac{Dm\gamma}{\kappa}$. Tandis que à petits temps la largeur de la distribution croit comme dans le cas libre ($F(x) = 0$) où de force constante, à grands temps elle est limité par le champ de force harmonique, qui agit comme un confinement pour la distribution de probabilité (plus la constante élastique est grande, plus cette valeur limite est petite).