

活性布朗粒子链在温差周期通道中的定向运动*

曾锦钰¹⁾²⁾ 何玉玲^{1)2†)}

1) (华南师范大学, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室, 广东省高等学校物质结构与相互作用基础研究卓越中心, 物理学院, 广州 510006)

2) (华南师范大学, 广东省量子调控工程与材料重点实验室, 粤港量子物质联合实验室, 广州 510006)

摘要

本文采用数值模拟方法研究了具有温度梯度的二维周期通道中活性布朗粒子链的定向输运行为, 建立了同时考虑空间不对称周期势、剪切流、温度梯度以及粒子自驱动作用的朗之万动力学模型, 系统分析了剪切流、势场结构、基础温度、温差和自驱动速度等因素对粒子链输运行为的影响。研究结果表明, 在无温差条件下, 仅剪切流不能诱导粒子链产生定向输运, 而剪切流与空间不对称周期势的协同作用能够产生明显的定向输运, 且平均速度随剪切率呈非单调变化。在存在温差时, 空间非均匀热涨落改变了粒子链的输运特性, 温差效应与空间不对称势及剪切流之间形成竞争关系, 从而调制粒子链的输运速度, 并在一定参数范围内导致输运方向发生反转。此外, 基础温度主要通过调节热噪声强度影响输运效率, 而粒子自驱动速度和空间不对称势共同决定粒子链的输运方向。本文进一步分析了粒子链长度及系统尺寸对输运行为的影响, 结果表明本文采用参数下粒子链定向输运的主要变化规律具有较好的稳健性。本文结果有助于理解温差环境下活性粒子链的非平衡输运机制, 并为微纳尺度活性物质的输运调控提供理论参考。

关键词: 布朗粒子链, 温差, 不对称周期势, 剪切流

基金: 国家自然科学基金(批准号: 12075090, 12475036)和广东省自然科学基金(批准号: 2024A1515012575)资助的课题。

† 通信作者. E-mail: hey1@m.scnu.edu.cn

第一作者. E-mail: 1849121469@qq.com

1 引言

活性物质的输运特性已成为当前研究的热点问题之一，主要是因为其在非平衡统计物理以及在生物与人工微系统中都有着重要意义和广泛的相关性^[1-6]。活性粒子能够持续地从环境中获取能量并将其转化为定向运动^[2,5,6]。这种非平衡动力学行为已在多个生物系统中被广泛观察到，例如细菌以及由化学、光学或声学场驱动的人工微型游动物^[7-14]。

以往关于活性物质输运的研究大多集中于单个粒子在结构化环境中的动力学行为，例如周期势场、受限通道或障碍阵列^[15-21]。在这些系统中，定向输运通常是由于空间或时间不对称性诱导的整流机制产生，从而导致诸如棘轮输运和绝对负迁移（absolute negative mobility, ANM）等现象^[20,22]。然而，当粒子通过弹性耦合形成链状结构时，其集体运动已不能简单地视为单粒子动力学的线性叠加。因为内部弹性相互作用的存在引入了额外的长度和时间尺度，产生了集体形变模态以及单粒子系统中不存在的非平凡输运行为^[20,22,23]。

近些年的研究结果表明，在外力或稳定层流作用下的活性粒子链能够表现出显著的非平衡现象，包括绝对负迁移和输运反转^[22-26]。这些研究揭示了弹性耦合、外部驱动以及空间不对称性之间的相互作用在决定输运方向和效率方面起着关键作用。然而，现有工作大多局限于等温环境，即热涨落在空间上是均匀的。实际上，在真实的微尺度和纳米尺度系统中温差普遍存在。温差与均匀热噪声不同的是温差会破坏热平衡，温差会通过热诱导力和空间依赖的噪声强度显著影响粒子动力学行为^[27-29]。尽管在单粒子体系中，热泳效应和温度驱动输运已得到了广泛研究，但在存在剪切流和不对称势的情况下，温度梯度对活性粒子链的输运影

响仍然知之甚少。特别是，目前尚不清楚温度梯度如何与剪切诱导的定向运输机制在弹性耦合的活性系统中相互作用，以及温差是否会增强或抑制等温条件下观察到的定向运输。

为了解决这个问题，本文系统地研究了在一个有限的二维周期通道中，具有不对称周期势、剪切流和温度梯度作用的活性布朗粒子链的输运行为。本文通过改变流的剪切率、势场不对称性、温度差以及粒子自驱动速度等参数以揭示多种运输机制下粒子链的输运行为。结果表明，剪切流、活性和温度在调控集体输运中发挥着各自不同且相互竞争的作用，并为在非平衡条件下操控活性粒子链提供了新的物理认识。

2 模型和方法

考虑一条粒子（半径为 r ）数为 $n=20$ 的活性粒子链在二维矩形（ L_x, L_y ）通道中的运动。如图1所示，通道上下边界采用反射边界条件， x 方向为周期性边界条件。在该二维通道中，粒子主要沿 x 方向运动，相邻活性粒子之间通过弹簧连接形成柔性粒子链。同时，在系统中引入了沿 x 方向，剪切强度随 y 方向改变的剪切流场。中心轴 $y=0$ 将通道分成了流动方向相反的两部分区域。因此，剪切流在 $y=0$ 处取零值。设第 i 个粒子的位置为 $\mathbf{r}_i=(x_i, y_i)$ ，其自驱动方向由单位矢量

$$\vec{n}_i \equiv (\cos \theta_i, \sin \theta_i) \quad (2.1)$$

表示，该方向由极角 θ_i 决定。

作用在第 i 个粒子上的力有粒子间的排斥力 $\mathbf{F}_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij}$ 和弹簧力 $\mathbf{G}_i = -\nabla_i V(r)$ ^[19,20]。 $\mathbf{F}_{ij}$ 为粒子 i 与粒子 j 之间的相互排斥力采用线性弹簧形式，

其刚度常数为 k_1 。 $V(r) = -\frac{k_2}{2} \sum_{i=1}^{n-1} (|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i| - r_0)^2$ ， r_0 是弹簧的自然长度， k_2 是弹

簧常数。 其中粒子间排斥作用采用线性软核排斥模型：

$$\mathbf{F}_{ij} = \begin{cases} k_1(2r - r_{ij})\mathbf{e}_r, & r_{ij} < 2r \\ 0, & r_{ij} \geq 2r \end{cases} \quad (2.2)$$

这里 r_{ij} 为粒子 i 与粒子 j 之间的中心距离, $\mathbf{e}_r$ 为从粒子 j 指向粒子 i 的径向单位矢量。选取较大的 k_1 值是确保模拟“硬粒子”行为, 以及禁止粒子间出现重叠现象^[2,19,20,31,32]。

沿 x 方向的弹簧力 $\mathbf{G}(x) = -\frac{\partial V}{\partial x}$ 满足如下方程：

$$G_{xi} = \begin{cases} G(x_{i+1} - x_i), & i = 1, \\ G(x_{i+1} - x_i) - G(x_i - x_{i-1}), & 1 < i < n, \\ -G(x_i - x_{i-1}), & i = n, \end{cases} \quad (2.3)$$

这里的矢量定义为 $\mathbf{r}_{i,i+1} = \mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i$, 其 x 分量为 $x_{i+1} - x_i$; r_0 是弹簧的自然长度, k_2 是弹簧常数。同样地, 沿 y 方向的弹簧力与沿 y 方向的弹簧力形式是相同的。

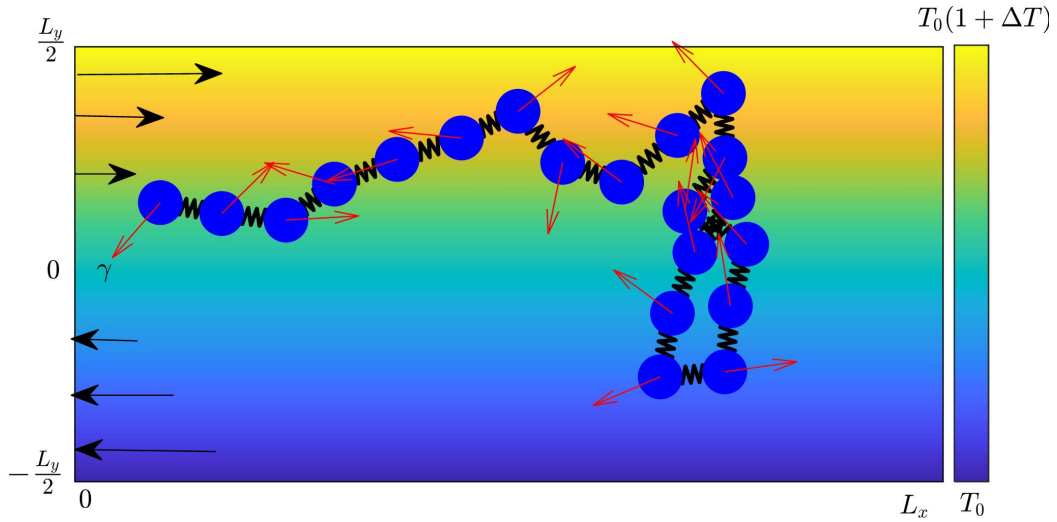


图 1 温差环境中活性粒子链运动的模型示意图

Fig. 1. A model of the movement of an active particle chain in a temperature-difference environment.

假设在该二维通道中, 沿 y 轴方向存在温度梯度, 即通道的上下边界

($y = -\frac{L_y}{2}, y = \frac{L_y}{2}$) 的温度差为 ΔT ，如图 1 所示。温度分布作为 y 的函数可表示为：

$$T(y) = T_0 \left[1 + \Delta T \frac{(y + \frac{L_y}{2})}{L_y} \right], \quad (2.4)$$

其中， T_0 表示体系的基础温度， ΔT 表示通道上下边界之间的相对温度差^[28]。因此，粒子在具有温度梯度的通道中运动时，其平移扩散系数 D_T 和转动扩散系数 D_θ 变为如下形式^[29,32]：

$$D_T(y) = \mu k_B T_0 \left[1 + \Delta T \frac{(y + \frac{L_y}{2})}{L_y} \right], \quad (2.5)$$

$$D_\theta(y) = \mu_r k_B T_0 \left[1 + \Delta T \frac{(y + \frac{L_y}{2})}{L_y} \right], \quad (2.6)$$

其中， k_B 为玻尔兹曼常数， μ 和 μ_r 分别表示粒子的平动迁移率和转动迁移率。

由于粒子的取向演化由转动扩散系数 D_θ 控制，因此 D_θ 决定了粒子自驱动方向的

持续时间，其对应的取向持续时间约为 $\tau_p = \frac{1}{D_\theta}$ ，相应的持久长度可表示为

$$l_p = \frac{v_0}{D_\theta}. \quad (2.7)$$

当 l_p 较小时，粒子取向变化较快，自驱动方向的持续性较弱，系统动力学逐渐接近非活性布朗粒子链的极限；当 l_p 较大时，持续性自驱动对粒子链构型和势垒跨越行为的影响更加明显。由于本文的温度场具有空间非均匀性， $D_\theta(y)$ 及 $l_p(y)$ 均随粒子所在的横向位置变化。

本文主要研究剪切流、不对称周期势、相对温差和自驱动速度之间的耦合作

用。在数值计算中，转动迁移率及其与局域温度的关系保持不变，未对 D_θ 进行独立参数扫描。因此，本文仅通过改变 v_0 考察活性强度变化对输运行为的影响，暂不对转动扩散系数和持久长度的独立作用进行系统讨论。相关问题将在后续研究中进一步考察。

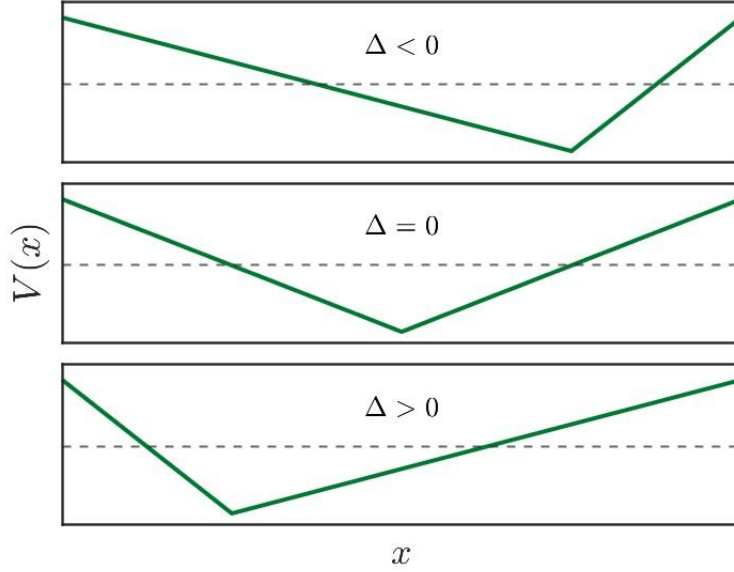


图 2 不对称势垒的示意图

Fig. 2. Schematic diagram of the asymmetrical barrier

此外，在二维通道中还存在空间不对称的周期势垒 $V(x)$ ，形式如下^[20]：

$$V(x) = \begin{cases} V_0(1 - \frac{x}{L_1}), & 0 \leq x < L_1 \\ \frac{V_0}{L_2}(x - L_1), & L_1 \leq x < L_x \end{cases} \quad (2.8)$$

其中， V_0 为势垒高度， $L_x = L_1 + L_2$ 为空间周期。势场的不对称性由参数 $\Delta = \frac{(L_1 - L_2)}{L_x}$ 来表征。当 $L_2 < L_1$ 时， $\Delta > 0$ ，此时称之为正向结构不对称势。反之，当 $L_2 > L_1$ 时， $\Delta < 0$ ，反向结构不对称势。当 $L_2 = L_1$ 的情况下， $\Delta = 0$ 对应对称势场。由此，粒子链在 x 方向上还会受到由于空间不对称产生的作用力为^[20]：

$$F_p(x) = \begin{cases} \frac{U_0}{L_1}, 0 \leq x < L_1 \\ -\frac{U_0}{L_2}, L_1 \leq x < L_x \end{cases} \quad (2.9)$$

需要指出的是，式(2.8)为连续的分段线性周期势，因此势函数在 $x = L_1$ 及周期边界处均保持连续。由于势函数在极值点处存在尖点，其导数对应的作用力在该位置具有有限跳变。该有限不连续为分段线性周期势的固有特征^[30]。在数值计算中，极值点按照相邻区间进行赋值，并通过时间步长收敛性检验验证其不会影响本文主要输运结果。为排除极值点处有限力跳变可能对数值结果产生的影响，本文进一步通过时间步长敏感性检验和局部平滑势对比检验了计算结果的数值稳定性和稳健性。局部平滑势仅在势能极值点附近对作用力进行局部平滑，使有限跳变转变为连续过渡，而其他区域的力场保持不变，所得平均输运速度及其随剪切率变化的总体规律与原始分段线性势基本一致。时间步长敏感性检验结果对比检验所得输运方向、输运反转及主要变化趋势均保持不变，仅在较大剪切率区域存在较小的定量差异。上述结果表明，本文的主要物理结论对势能极值点处的有限力跳变及时间离散尺度均具有良好的稳健性。

当通道中存在空间不对称周期势、温差和剪切流场的情况下，粒子链上第 i 个粒子的运动行为可用朗之万方程描述^[33,34]：

$$\frac{dx_i}{dt} = \gamma y_i + v_0 \cos \theta_i + \mu [F_i^x + G_i^x + F_p(x_i)] + \sqrt{2D_T(y_i)} \xi_i^x(t), \quad (2.10)$$

$$\frac{dy_i}{dt} = v_0 \sin \theta_i + \mu [F_i^y + G_i^y] + \sqrt{2D_T(y_i)} \xi_i^y(t), \quad (2.11)$$

$$\frac{d\theta_i}{dt} = -\frac{\gamma}{2} + \sqrt{2D_\theta(y_i)} \xi_i^\theta(t), \quad (2.12)$$

其中忽略了流体力学的相互作用， γ 表示流的剪切率， v_0 为粒子的自驱动速度， $D_T(y_i)$ 和 $D_\theta(y_i)$ 分别表示平动扩散系数和转动扩散系数。噪声项 $\xi_i^x(t)$ 、 $\xi_i^y(t)$ 和 $\xi_i^\theta(t)$ 为相互独立的高斯白噪声^[5, 34]，满足

$$\langle \xi_i^\alpha(t) \rangle = 0, \quad (2.13)$$

$$\langle \xi_i^\alpha(t) \xi_i^\beta(t') \rangle = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \delta(t-t'), \alpha, \beta \in \{x, y, \theta\}, \quad (2.14)$$

扩散系数 $D_T(y_i)$ 和 $D_\theta(y_i)$ 具有空间依赖性，上述朗之万方程包含乘性噪声。

本文将式 (2.10) - 式 (2.12) 按 Itô 意义解释，数值积分采用 Euler-Maruyama 方法^[35-37]。本文的随机动力学方程直接定义为 Itô 型随机微分方程，而非由其他随机积分表示转换得到，因此数值实现中不额外加入 Itô-Stratonovich 表示转换产生的附加漂移项。平动和转动迁移率均假设为空间无关常数，温度的空间依赖性仅通过局域扩散系数进入噪声振幅。在每个时间步中，扩散系数均由该时间步起始位置 y_i^m 计算，即采用左端点离散：

$$x_i^{m+1} = x_i^m + A_{x,i}^m \Delta t + \sqrt{2D_T(y_i^m) \Delta t} \eta_{x,i}^m, \quad (2.15)$$

$$y_i^{m+1} = y_i^m + A_{y,i}^m \Delta t + \sqrt{2D_T(y_i^m) \Delta t} \eta_{y,i}^m, \quad (2.16)$$

$$\theta_i^{m+1} = \theta_i^m + A_{\theta,i}^m \Delta t + \sqrt{2D_\theta(y_i^m) \Delta t} \eta_{\theta,i}^m, \quad (2.17)$$

其中， $A_{x,i}^m$ 、 $A_{y,i}^m$ 和 $A_{\theta,i}^m$ 分别表示第 m 个时间步中粒子在 x 、 y 方向以及取向角方向的确定性漂移项，其具体形式为

$$A_{x,i}^m = \gamma y_i^m + v_0 \cos \theta_i^m + \mu [F_i^{x,m} + G_i^{x,m} + F_P(x_i^m)], \quad (2.18)$$

$$A_{y,i}^m = v_0 \sin \theta_i + \mu [F_i^y + G_i^y], \quad (2.19)$$

$$A_{\theta,i}^m = -\frac{\gamma}{2} + \omega. \quad (2.20)$$

其中， $A_{x,i}^m$ 、 $A_{y,i}^m$ 和 $A_{\theta,i}^m$ 为相互独立的标准高斯随机变量^[35-36]，满足

$$\langle \eta_{\alpha,i}^m \rangle = 0, \quad (2.21)$$

$$\langle \eta_{\alpha,i}^m \eta_{\beta,j}^n \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \delta_{mn}, \quad \alpha, \beta \in \{x, y, \theta\} \quad (2.22)$$

本文计算中取粒子的固有角速度 $\omega = 0$ 。 $A_{\alpha,i}^m$ 对应原朗之万方程中的确定性漂移项，数值实现中不额外加入由 Itô-Stratonovich 表示转换所产生的附加漂移项^[35-37]。

由于粒子链整体仅在 x 方向受到外部驱动力，因此本文只讨论粒子链沿 x 方向的平均速度。粒子链的平均速度定义为所有粒子在 x 方向位移的平均值除以总模拟时间，其表达式为^[25]：

$$v_x = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{nt} \left\langle \sum_{i=1}^n [x_i(t) - x_i(0)] \right\rangle, \quad (2.23)$$

其中, $x_i(t)$ 表示第 i 个粒子在时刻 t 的 x 坐标, n 为粒子链中粒子的总数。由于

$$X_{cm}(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i(t), \quad (2.24)$$

其中, $X_{cm}(t)$ 表示粒子链在时刻 t 的质心坐标, 上式等价于粒子链质心沿 x 方向的长时间平均速度, 即

$$v_x = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle X_{cm}(t) - X_{cm}(0) \rangle}{t}, \quad (2.25)$$

这里符号 $\langle \dots \rangle$ 表示对不同初始条件和不同噪声实现下得到的粒子轨迹进行统计平均。

3 无温差环境中布朗粒子链的运动行为

首先, 本节假设活性粒子链在无温差的环境中运动, 为了模拟粒子链的运动达到长时间稳定输运状态, 在数值计算时, 我们设置粒子的初始位置是随机的 [33,38,39]。积分时间步长为 $\Delta t \leq 10^{-3}$, 总时长为 $t \geq 10^7$ 。为提高数值计算的准确性以及最小化统计误差, 我们的数值结果是通过随机初始条件的轨迹取系综平均值。为验证本文所采用系统参数的合理性, 我们分别考察了链长 n 、系统长度 L_x 和系统宽度 L_y 对输运行为的影响。结果表明, 在所研究参数范围内, 改变上述参数不会改变粒子链定向输运的主要变化规律。其中, 链长和系统长度主要影响输运速度的具体数值, 而系统宽度会引起输运效率的定量变化, 但系统的主要物理机制保持一致。因此, 本文的数值结果均是基于以下参数设置 (如有改变会另有说明): 通道尺寸 $L_x = 20$ 和 $L_y = 10$, 活性粒子的半径 $r = 0.5$, 弹簧的自然长度 $r_0 = 3r = 1.5$, 平动迁移率 $\mu = 1.0$ 和转动迁移率 $\mu_r = 0.75$, 体系的基础温度

$T_0 = 0.01$ ，粒子间刚度常数 $k_1 = 100$ 和弹簧常数 $k_2 = 40$ 。为检验长时间平均速度的统计稳定性，本文进一步选取若干代表性参数点，采用不同随机初始条件和独立噪声序列进行了重复模拟。所得平均速度之间差异较小，表明本文采用的长时间统计结果具有较好的稳定性。

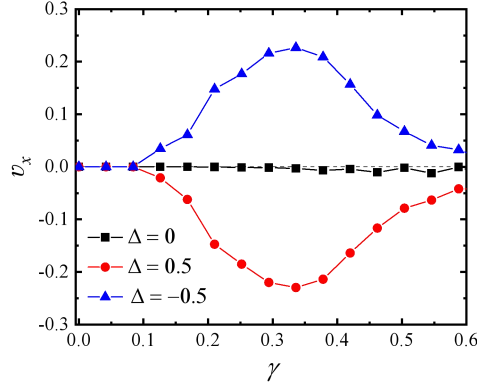


图 3 在不考虑粒子的自驱动速度的情况下 $v_0 = 0$ ，选取势垒的不对称参数分别为 $\Delta = 0$ ，

$\Delta = 0.5$ 和 $\Delta = -0.5$ 时，粒子链的平均速度 v_x 与流剪切值 γ 的关系。

Fig. 3. Average velocity v_x of particles chain as a function of the shear rate γ for different asymmetric-potential parameter $\Delta = 0$, $\Delta = 0.5$ and $\Delta = -0.5$, in the absence of self-propulsion v_0 .

首先，如图 3 所示，假设粒子的自驱动速度为零（ $v_0 = 0$ ），且系统无温差（ $\Delta T = 0$ ）的情况下，粒子链的运动行为与势垒不对称性参数和剪切流的关系。结果表明，当势垒对称（ $\Delta = 0$ ）时，无论剪切率如何变化，粒子链均不会出现定向输运行为。这说明当通道中势垒对称且不考虑粒子自驱动速度的情况下，仅靠剪切流不足以产生粒子链的定向运动。当不对称参数 $\Delta > 0$ 时，粒子链的平均速度 v_x 值小于零，说明粒子链沿 x 轴的负方向出现定向输运行为。反之，则粒子链沿 x 轴的正方向出现定向输运行为。这表明不对称势诱导了粒子链出现定向输运现象，且输运方向与不对称势参数的符号有关。也就是说不对称势为反对称的结构（即 $\Delta > 0$ 和 $\Delta < 0$ ），诱导定向输运速率大小相等反向相反。为此，在无环境温

差下的研究可只取输运方向为正（即沿着 x 轴正方向）的不对称参数值。

进一步可以发现，在固定不对称势下，平均速度随剪切率呈现明显的非单调变化。当剪切率较小时，剪切流增强了粒子链的整体运动能力，使粒子链更容易跨越空间势垒，因此平均速度逐渐增大。当剪切率继续增加至约 $\gamma \approx 0.3$ 时，输运效率达到最大值，此时剪切流对粒子链跨越势垒的促进作用最为显著。然而，当剪切率进一步增大时，平均速度反而逐渐减小并最终趋近于零。这是因为过强的剪切流增强了粒子链在上下区域之间的速度差异，使粒子链在不同区域受到相反方向流场的作用更加明显，从而削弱了空间不对称势产生的整流效应，使粒子链沿正、负方向跨越势垒的概率重新趋于一致，最终导致净输运逐渐消失。

综上，在无温差条件下，粒子链的定向输运来源于空间不对称势提供的方向偏置与剪切流增强粒子链跨越势垒能力之间的协同作用。二者缺一不可：不对称势决定输运方向，而剪切流主要调节输运效率。当剪切流过弱时，粒子链难以跨越势垒；而剪切流过强时，又会削弱空间整流效应，因此系统存在一个最佳剪切率使输运效率达到最大。

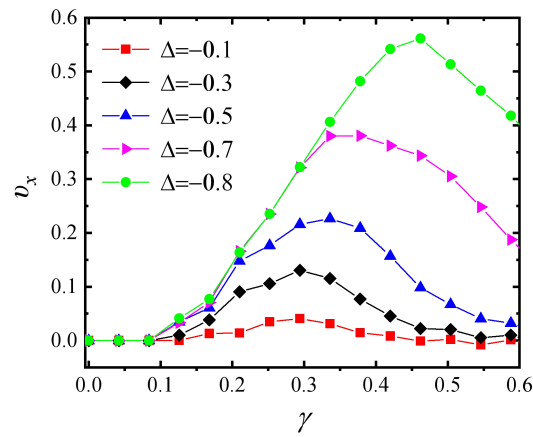


图 4 不考虑粒子的自驱动速度 $v_0 = 0$ ，势垒的不对称参数 Δ 在 $[0 \sim -1]$ 的范围内取值时，

粒子链平均速度 v_x 与剪切率 γ 的关系。

Fig. 4. Average velocity v_x of the particle chain as a function of the shear rate γ for different asymmetric potential parameter Δ ($[0 \sim -1]$), without the self-propulsion speed v_0 .

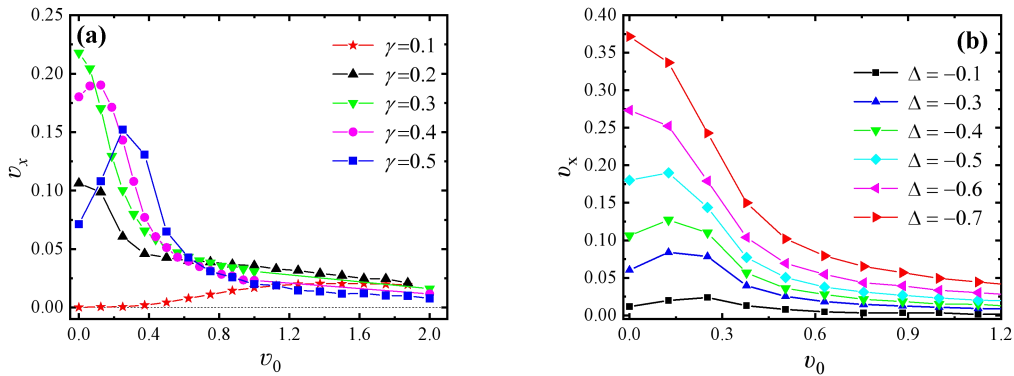
与图 3 相同的参数条件下，仅改变势垒的不对称参数 Δ 值(在 $[0 \sim -1]$ 区间)，

随着 Δ 的绝对值越大，粒子链的平均速度 v_x 也越大，并且诱导粒子链定向输运速率达到峰值的流剪切率也越大，结果如图4所示。对于所有不对称参数，平均速度均随剪切率增加呈现先增大后减小的非单调变化，这进一步说明剪切流主要通过调节粒子链跨越势垒的能力来影响输运效率，而不是决定输运方向。

进一步可以看到，随着 $|\Delta|$ 的增大，粒子链的平均速度明显增大，同时达到最大平均速度所对应的最佳剪切率逐渐向较大的剪切率方向移动。这是由于增大势场的不对称性后，周期势在两个方向上的势垒高度和势垒宽度差异进一步增大，使粒子链沿优选方向跨越势垒更加容易，而沿相反方向跨越势垒更加困难，从而增强了正、反两个方向跃迁概率之间的不平衡性，因此整流效应不断增强，平均输运速度随之提高。

另一方面，随着势场不对称程度增加，势垒两侧的空间宽度及势能斜率差异进一步增大，从而使粒子沿正、反两个方向跨越势垒时所经历的局域力场不同，增强了两个方向跃迁概率之间的不对称性。这也是最佳剪切率随 $|\Delta|$ 增大而逐渐增大的主要原因。当剪切率继续增大时，过强的剪切流重新削弱了空间不对称势产生的整流作用，使粒子链沿两个方向跨越势垒的概率逐渐趋于平衡，因此平均速度再次下降。

综上所述，空间不对称势决定了粒子链跨越势垒时正、反两个方向跃迁概率的不对称性，而剪切流主要调节粒子链克服势垒的能力。随着势场不对称程度增加，空间整流作用不断增强，因此需要更强的剪切流才能充分发挥其促进输运的作用，两者共同决定了粒子链定向输运效率。



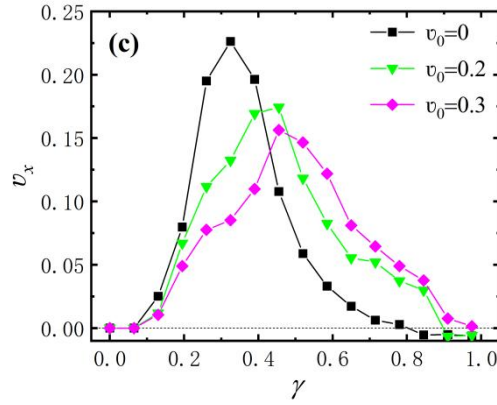


图 5 (a)和(b)分别是固定不对称势参数 $\Delta = -0.5$ 时变化流的剪切率 γ 和固定流的剪切率 $\gamma = 0.4$ 时变化不对称势参数 Δ 下, 粒子链的平均速度 v_x 与粒子自驱动速度 v_0 的关系。 (c) 是固定不对称势参数 $\Delta = -0.5$, 在不同自驱动速度 v_0 ([0、0.2、0.3])下, 粒子链平均速度 v_x 与流的剪切率 γ 的关系

Fig. 5. Average velocity v_x of the particle chain as a function of the self-propulsion speed v_0 (a) under different shear rates γ , fixed the asymmetric potential parameter $\Delta = -0.5$ and (b) under different asymmetric potential parameters Δ , fixed the shear rate $\gamma = 0.4$. Average velocity v_x of the particle chain as a function of the shear rate γ under different self-propulsion speeds v_0 fixed $\Delta = -0.5$.

以上结果都是假设粒子的自驱动速度为零的情况得到的。为了调查粒子自驱动速度对粒子链定向输运行为的影响, 可改变粒子链上粒子的自驱动速度 v_0 , 如图 5(a)和(b), 分别展示了取不同流的剪切率 γ 和势垒的不对称参数 Δ 值的情况下粒子链平均速度 v_x 随自驱动速度 v_0 的变化关系。当自驱动速度较小时, 粒子的运动主要受剪切流和空间不对称势共同调控, 粒子链能够沿势场优选方向跨越势垒, 因此具有较高的整流效率。随着自驱动速度逐渐增大, 粒子的主动运动增强, 其运动方向主要由自身取向决定, 而取向又不断受到转动扩散的随机化作用, 因此粒子链在势场中的运动随机性增强, 削弱了空间不对称势所产生的方向选择作用, 使正、反两个方向跨越势垒的概率差减小, 从而导致平均输运速度逐渐降低。

图 5(c)进一步表明,在不同自驱动速度下,平均速度随剪切率均表现为先增大后减小的非单调变化,但最佳剪切率随着自驱动速度的增加整体向较大剪切率方向移动。这说明,当粒子主动运动增强时,剪切流需要提供更强的协同作用才能有效促进粒子链跨越势垒并维持定向输运。因此,自驱动速度并非简单增强粒子链的输运能力,而是与剪切流和空间不对称势共同竞争决定粒子链的输运行为。当自驱动较弱时,剪切流与空间不对称势的整流作用占主导;随着自驱动速度增加,主动运动逐渐削弱势场整流效应,因此系统需要更大的剪切率才能获得最大的平均输运速度。

综上,粒子链的定向输运由剪切流、空间不对称势和粒子自驱动三者共同决定。其中,空间不对称势提供方向选择性,剪切流促进粒子链跨越势垒,而自驱动增强了粒子运动的随机探索能力,三者之间的竞争与协同共同决定了粒子链的输运效率。

4 布朗粒子链在温差环境中的运动

与等温环境相比,温差的存在会引起空间的非均匀热涨落,这从本质上破坏了热平衡。环境温差与剪切流和不对称周期势诱导定向输运形成直接竞争。

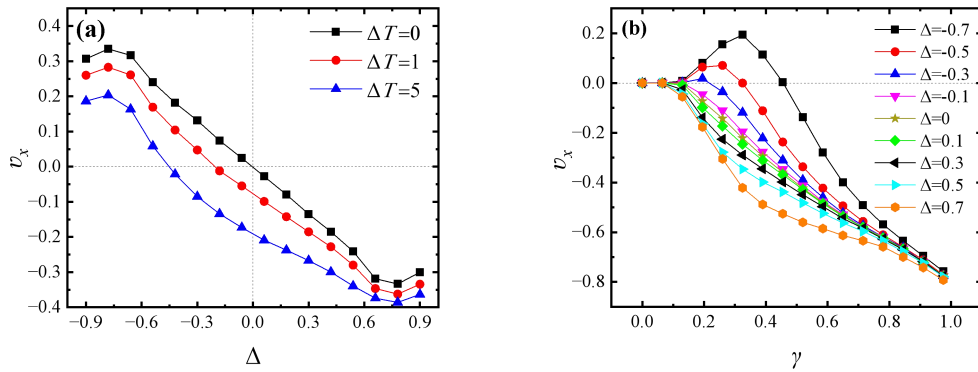


图 6 在温差环境下 (基础温度 $T_0 = 0.03$), 粒子链平均速度 v_x 与势垒不对称参数 Δ 和流的剪切率 γ 的关系, (a)固定流的剪切率 $\gamma = 0.3$, (b)是固定相对温度差 $\Delta T = 5$ 。

Fig. 6. Average velocity v_x of the active particle chain, under the temperature difference ($T_0 = 0.03$), as function of the asymmetric parameter Δ and the shear rate γ of flow, (a) the shear rate of flow is fixed $\gamma = 0.3$. (b) and (c) the shear rate and the asymmetry parameter are changed, respectively, with fixed the relative temperature difference $\Delta T = 5$.

为了研究温度梯度对粒子链定向输运行为的影响，在保持粒子自驱动速度 $v_0 = 0$ 的条件下，图 6 对比分析系统无温差 ($\Delta T = 0$) 和存在温差 ($\Delta T > 0$) 两种情况。与均匀温度环境相比，引入温度梯度后，系统中的热噪声强度随空间位置发生变化，从而形成空间非均匀热涨落，打破了均匀热环境下的输运平衡，并改变粒子链跨越势垒的跃迁概率。因此，温差效应与空间不对称势及剪切流共同作用决定了粒子链的输运行为。

如图 6(a)所示，在固定剪切率 $\gamma = 0.3$ 时，随着相对温差 ΔT 的增大，平均速度整体逐渐减小，并在部分不对称参数范围内发生由正向输运向反向输运的转变。这说明温度梯度改变了粒子链沿两个方向跨越势垒的概率分布。当温差较小时，不对称势仍然主导粒子链的定向输运；随着温差逐渐增大，空间非均匀热涨落不断增强，粒子链更容易克服原本较高方向上的势垒，使正、反两个方向跃迁概率之间的差异逐渐减小，最终导致原有整流效应被削弱，并在一定参数范围内发生输运方向反转。因此，温差与空间不对称势之间表现出明显的竞争关系：不对称势提供方向偏置，而温差通过调节热涨落改变粒子链跨越势垒的能力。

图 6(b)进一步给出了固定温差 $\Delta T = 5$ 时平均速度随剪切率的变化关系。可以看到，当剪切率较小时，平均速度主要由不对称势和温差共同决定；随着剪切率逐渐增加，粒子链平均速度均逐渐减小，并最终转变为反向输运。这说明剪切流不仅能够促进粒子链跨越势垒，同时也会改变粒子链在通道中的空间分布，使温差产生的非均匀热涨落作用进一步增强。当剪切流较弱时，不对称势产生的空间整流效应占优势，粒子链保持正向输运；而当剪切流继续增强后，温差效应逐渐占据主导地位，使粒子链更容易沿相反方向完成跃迁，因此出现由正向输运向反向输运的转变。

综合来看，在无自驱动条件下，粒子链的定向输运由空间不对称势、剪切流和温差三种因素共同决定。其中，空间不对称势提供定向输运所需的方向选择性，剪切流主要调节粒子链跨越势垒的效率，而温差通过改变空间热噪声分布调制粒子链的跃迁概率。当三者之间的相对作用发生变化时，系统将表现出输运效率变化甚至输运方向反转等丰富的非平衡输运现象。

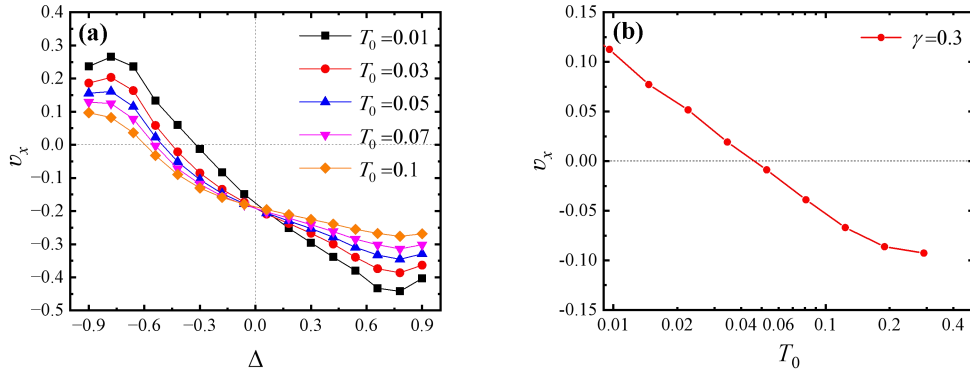


图 7 固定系统相对温度差 $\Delta T = 5$ 和流的剪切率 $\gamma = 0.3$ 。(a)选取不同的系数基础温度 T_0 [0.01~0.1]值, 粒子链平均速度 v_x 与不对称势参数 Δ 的关系。(b)固定不对称势参数 $\Delta = -0.5$, 粒子链平均速度 v_x 与系统基础温度 T_0 的关系。

Fig. 7. Fixed the relative temperature difference $\Delta T = 5$ and the shear rate of flow $\gamma = 0.3$. (a) Average velocity v_x of particle chain as a function of the asymmetric potential parameters Δ with different the base temperature T_0 . (b) Average velocity v_x of particle chain as a function of the the base temperature by fixing the asymmetric potential parameters $\Delta = -0.5$.

同样, 假设粒子链的自驱动速度为零, 固定系统相对温度差 $\Delta T = 5$ 和流的剪切率 $\gamma = 0.3$, 研究了粒子链的定向输运行为与系统基础温度 T_0 的关系, 如图 7 所示。当系统是正向不对称势结构时, 升高基础温度 T_0 , 粒子链的定向运动的平均速率被削弱, 表明较强热噪声会削弱剪切流和不对称势诱导的定向输运效应。

由图 7(a)可以看出, 在不同基础温度下, 平均速度随不对称参数 Δ 的变化规律基本一致, 但随着基础温度 T_0 的增大, 平均速度的绝对值整体减小。这说明基础温度并不会改变空间不对称势决定的输运方向, 而主要影响粒子链跨越势垒的能力。随着基础温度升高, 体系热噪声整体增强, 粒子链沿正、反两个方向跨越势垒的概率同时增加, 从而减弱了空间不对称势所提供的方向选择性, 使定向输运效率逐渐降低。因此, 基础温度主要通过调节热涨落强度影响粒子链的输运效率, 而不会改变由不对称势决定的输运方向。

图 7(b)进一步给出了固定不对称参数 $\Delta = -0.5$ 时平均速度随基础温度 T_0 的变

化关系。可以看到，当基础温度较低时，粒子链保持沿 x 轴正方向的定向运输；随着基础温度不断升高，平均速度逐渐减小，并最终发生由正向运输向反向运输的转变。当基础温度继续增大时，平均速度逐渐趋于稳定。这表明，较弱的热噪声有利于粒子链在剪切流作用下跨越势垒，同时仍能够保持空间不对称势提供的方向选择性；而当热噪声增强到一定程度后，随机热涨落显著提高了粒子链跨越各方向势垒的概率，使原有整流效应不断减弱，并最终改变了系统中不同运输机制之间的相对竞争关系，从而导致运输方向发生反转。

综合来看，在存在温度梯度的体系中，粒子链的定向运输由基础温度、剪切流和空间不对称势共同决定。其中，基础温度主要调节体系热噪声强度，从而影响粒子链跨越势垒的概率和运输效率；空间不对称势提供定向运输所需的方向选择性；剪切流则促进粒子链跨越势垒。当基础温度较低时，空间整流效应占主导地位；随着基础温度升高，热涨落不断增强，逐渐削弱空间整流作用，并与剪切流共同调制粒子链的输运行为，在一定参数范围内最终导致运输方向发生转变。

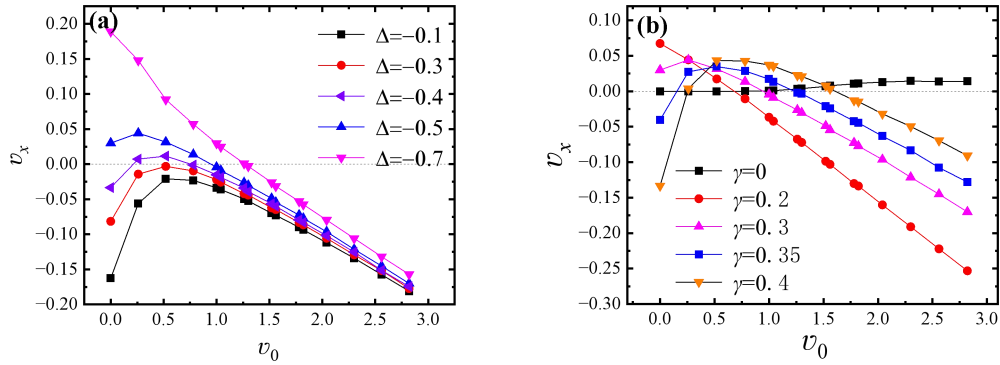


图 8 固定系统温度环境时 ($\Delta T = 5$, $T_0 = 0.03$)，粒子链平均速度 v_x 与自驱动速度 v_0 的关系。(a)固定流的剪切率 $\gamma = 0.3$ ，改变不对称势参数 Δ 。(b)固定不对称势参数 $\Delta = -0.5$ ，改变剪切率 γ 。

Fig. 8. In a temperature-difference environment($\Delta T = 5$, $T_0 = 0.03$), average velocity v_x of the particle chain as a function of the self-propulsion speed v_0 , (a) with the different asymmetric parameters Δ at fixed shear rate $\gamma = 0.3$, and (b) with the different shear rates γ at fixed asymmetric parameter $\Delta = -0.5$, respectively.

为了进一步研究粒子自驱动在温差环境下对粒子链定向输运行为的影响,固定系统温差为 $\Delta T = 5$ 、基础温度 $T_0 = 0.03$,分别考察不同不对称势参数和不同剪切率条件下,粒子链平均速度随自驱动速度 v_0 的变化规律,如图8所示。

由图8(a)可以看出,在固定剪切率 $\gamma = 0.3$ 时,不同不对称势参数下粒子链平均速度对自驱动速度的响应存在明显差异。当势场不对称程度较弱时(较小的 $|\Delta|$),随着自驱动速度增大,平均速度先减小后增大,并在一定参数范围内发生输运方向反转;而随着势场不对称程度进一步增强(较大的 $|\Delta|$),粒子链更倾向于保持由空间不对称势决定的输运方向,仅表现为平均速度的连续变化。这说明,自驱动作用能够改变粒子链跨越势垒的方式,其影响程度取决于空间不对称势提供的整流能力。当势场整流较弱时,自驱动能够较容易打破原有的方向选择性,从而导致输运方向发生改变;而当势场整流较强时,自驱动主要表现为调节输运效率,而不足以完全改变势场决定的输运方向。

图8(b)进一步给出了固定不对称势参数 $\Delta = -0.5$ 时,不同剪切率下平均速度随自驱动速度的变化关系。可以看到,在无剪切流条件下,平均速度始终保持为正,并随自驱动速度变化较小,说明此时粒子链的输运方向主要由空间不对称势决定。引入剪切流后,随着剪切率增大,平均速度整体向负方向移动,并逐渐出现由正向输运向反向输运的转变。同时,较大的剪切率使输运方向对自驱动速度更加敏感,自驱动速度越大,平均速度下降越明显。这说明剪切流改变了粒子链跨越势垒时的动力学条件,使自驱动产生的主动运动更容易与温差诱导的非均匀热涨落相耦合,从而进一步削弱空间不对称势的整流作用,最终促使系统发生输运方向反转。

综合图8(a)和图8(b)可以发现,在存在温差的情况下,粒子链的定向输运由空间不对称势、剪切流、自驱动以及温差共同决定。其中,空间不对称势提供方向选择性,剪切流调节粒子链跨越势垒的能力,温差改变空间热涨落分布,而自驱动增强粒子链主动探索不同势垒路径的能力。随着自驱动速度增加,主动运动逐渐削弱空间整流效应,并重新调整剪切流、温差和空间不对称势之间的竞争关系,因此系统不仅表现出输运效率的变化,而且能够在一定参数范围内发生输运方向反转。

需要指出的是，在转动扩散系数保持给定关系的条件下，改变自驱动速度 v_0 也会相应改变粒子的持久长度 l_p 。因此，图 8 中的结果反映了自驱动强度及运动持续性共同变化对粒子链运输的综合影响。由于本文主要关注温差、剪切流及空间不对称势共同作用下粒子链的运输行为，因此计算过程中固定了转动扩散参数，仅通过改变自驱动速度研究活性效应，目前尚不能将两种作用完全区分。改变 D_θ 是否能进一步改变粒子的持续运动能力，并可能影响粒子链的运输效率和方向，这一问题值得在后续工作中进一步开展系统研究。

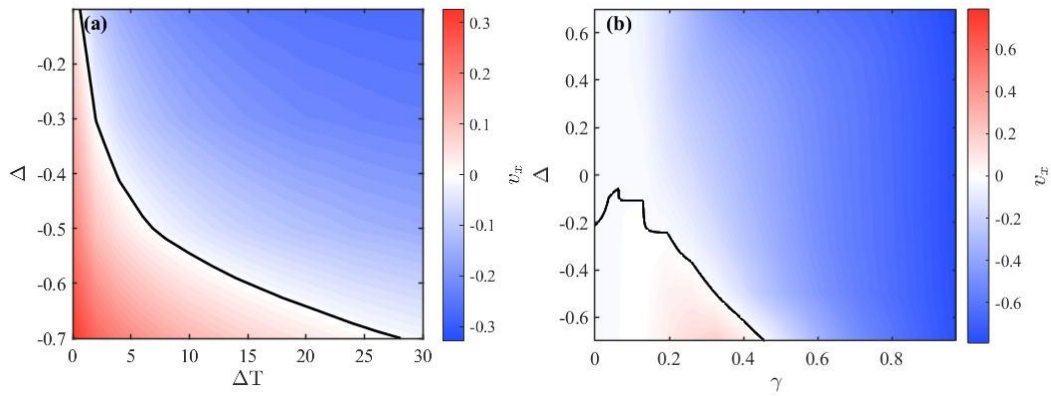


图 9 温差环境下粒子链平均速度 v_x 的二维参数相图：(a) 固定流的剪切率 $\gamma = 0.3$ ，平均速度 v_x 随相对温度差 ΔT 和势垒不对称参数 Δ 的变化；(b) 固定势垒不对称参数 $\Delta = -0.5$ ，平均速度 v_x 随流的剪切率 γ 和相对温度差 ΔT 的变化。黑色实线表示 $v_x = 0$ 的运输反转边界。

Fig. 9. Phase diagrams of the average velocity v_x under a temperature-gradient environment. (a)

Average velocity v_x in the $(\Delta T, \Delta)$ parameter plane at a fixed shear rate $\gamma = 0.3$. (b)

Average velocity v_x in the $(\gamma, \Delta T)$ parameter plane at a fixed asymmetric parameter

$\Delta = -0.5$. The black solid line denotes the transport-reversal boundary ($v_x = 0$).

为了进一步揭示温差与势垒不对称性的协同调控作用，我们在 $(\Delta T, \Delta)$ 参数空间内进行了二维参数扫描，并绘制了粒子链平均速度 v_x 的相图，如图 9(a)所示。颜色表示平均速度的大小及方向，其中暖色区域对应正向运输，冷色区域对应反向运输，黑色实线表示 $v_x = 0$ 的运输反转边界。可以看出，随着温差 ΔT 增大，

正向输运区域逐渐收缩，而反向输运区域不断扩展，说明温差增强了热涨落对不对称势诱导整流机制的竞争作用。当温差超过一定阈值后，即使保持较大的反向不对称势，也会发生输运方向反转。相图中的零速度边界清晰地区分了正、反向输运区域，表明输运反转由温差与势垒不对称性之间的竞争共同决定。

图 9(b)进一步给出了固定反向不对称势参数 $\Delta = -0.5$ 时，粒子链平均速度在 $(\gamma, \Delta T)$ 参数空间中的分布。从图中可以看出，在较小剪切率区域，平均速度主要为正值，说明此时不对称势诱导的整流作用占据主导。随着剪切率和温差的增大，系统逐渐跨越 $v_x = 0$ 输运反转边界，进入反向输运区域。尤其是在较大的温差条件下，仅需较小的剪切率即可诱导输运反转，表明温差能够增强剪切流对粒子链输运方向的调控作用。随着剪切率进一步增大，整个参数空间逐渐被反向输运区域占据，说明剪切流与温差具有协同作用，共同促进反向输运。

综合图 9(a)和图 9(b)可以看出，输运方向并非由单一参数决定，而是由温差、剪切流和势垒不对称性共同竞争的结果。二维参数相图不仅清晰给出了正、反向输运区域的分布，而且确定了输运反转发生的临界边界，为理解多参数耦合作用下的非平衡输运规律提供了整体物理图像。

5 结论

本文采用数值模拟方法研究了二维不对称周期通道中，粒子链在剪切流、相对温差和自驱动共同作用下的定向输运行为。通过改变剪切率、周期势不对称参数、相对温差、基准温度和自驱动速度，系统分析了粒子链质心平均速度的大小、方向及其输运反转规律。结果表明，粒子链的定向输运并非由单一外场决定，而是来源于不对称势垒整流、剪切流驱动、空间非均匀热涨落及粒子自驱动之间的协同与竞争。

在无温差条件下，不对称周期势为粒子链沿两个方向跨越势垒提供了不同的空间路径和受力条件，而剪切流则通过粒子链在通道横向位置上的分布，将横向构型涨落转化为沿 x 方向的定向驱动。两者耦合后，粒子链沿正、反方向跨越势垒的概率不再相等，从而形成非零平均输运。当周期势为对称结构时，两个方向的势垒跨越过程相互抵消，因此剪切流本身不能产生稳定的净输运。随着剪切率增大，剪切流对链构型和势垒跨越的促进作用首先增强，使平均速度增大；但当

剪切率过大时，强剪切会削弱不对称势对运动方向的选择作用，并增大双向运动的混合程度，因而平均速度表现出先增大后减小的非单调特征。由此可见，无温差条件下的定向输运来源于剪切流与不对称势之间的协同整流，而最佳输运对应二者作用强度相匹配的参数区域。

温差的引入使平动和转动扩散系数随横向位置变化，从而产生空间非均匀的热涨落。该非均匀噪声一方面改变粒子链在通道不同横向区域的停留概率，使粒子链接触到不同方向和强度的局域剪切流；另一方面改变粒子链跨越周期势垒的频率。因此，温差并不是简单地增加一个均匀随机扰动，而是通过重新分配粒子链对不同流动区域和势垒区域的采样概率，改变原有的整流平衡。当相对温差较小或不对称势较强时，势垒不对称性仍占主导，粒子链保持原有输运方向；随着相对温差增大，非均匀热涨落逐渐削弱不对称势诱导的方向选择，并与剪切流共同改变正、反向越垒概率。当两种方向的有效跃迁概率达到平衡时，平均速度降为零；继续增大温差后，原有平衡被反向打破，从而出现输运方向反转。二维参数相图中的 $v_x = 0$ 边界正对应不同输运机制相互平衡的临界条件，并直观展示了正向和反向输运区域随参数变化的演化规律。

基准温度主要决定系统整体热涨落的尺度。在较低温度下，粒子链跨越势垒的能力较弱，输运主要受到势垒结构和剪切流控制；适度提高温度能够增加粒子链克服势垒的概率，使外场整流作用得到更充分的体现。然而，当热涨落过强时，随机扩散会削弱势垒两侧跃迁概率的差异，使粒子链对不对称结构的辨别能力下降，最终导致平均速度减小、趋于饱和或发生反转。因此，温度对输运的影响具有双重作用：适度热涨落有助于越垒，而过强热涨落会破坏定向整流。

粒子的活性进一步引入了具有取向持续性的非平衡运动，并改变粒子链的构型涨落和势垒跨越频率。在自驱动速度较小时，持续运动可以帮助部分粒子克服势垒，并与剪切流和不对称势共同调节输运效率；但随着自驱动速度继续增大，主动运动逐渐削弱粒子链对外部势垒和局域剪切方向的响应，使原有整流机制受到扰动。由于自驱动、温差、剪切流和不对称势对正、反向跃迁概率的影响不同，其竞争可导致平均速度的非单调变化以及一次或多次输运反转。较大自驱动速度下，输运行为逐渐由外部势垒整流主导转变为主动涨落与外场竞争共同主导。

综上，本文所观察到的定向输运可以归结为粒子链沿正、反方向的有效势垒

跨越概率不相等。当剪切流、不对称势、非均匀热涨落和自驱动对两个方向的综合作用不同，系统产生非零净输运；当两方向的有效跃迁概率相等时，平均速度为零；当主导机制发生交换时，则出现输运方向反转。二维参数相图进一步给出了不同输运区域及其临界边界，揭示了多参数耦合条件下粒子链输运由协同增强、竞争抑制到方向反转的整体规律。上述结果为理解非均匀温度环境中弹性耦合粒子体系的非平衡输运机制，以及通过外场参数调控粒子输运方向和效率提供了理论依据。

参考文献

- [1] Marchetti M C, Joanny J F, Ramaswamy S, Liverpool T B, Prost J, Rao M, Simha R A 2013 *Rev. Mod. Phys.* **85** 1143
- [2] Volpe G, Gigan S, Volpe G 2014 *Am. J. Phys.* **82** 659
- [3] Sarracino A, Cecconi F, Puglisi A, Vulpiani A 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 174501
- [4] Sebastian R, Jens E, Gerhard G 2021 *New J. Phys.* **21** 013016
- [5] Bechinger C, Di Leonardo R, Löwen H, Reichhardt C, Volpe G, Volpe G 2016 *Rev. Mod. Phys.* **88** 045006
- [6] Gompper G, Winkler R G, Speck T, Solon A, Nardini C, Peruani F, Löwen H, Golestanian R, Kaupp U B, Alvarez L, Ishikawa T 2020 *J. Phys.: Condens. Matter* **32** 193001
- [7] Shimizu TS, Tu Y, Berg HC 2010 *Mol. Syst. Biol.* **6** 390
- [8] Drescher K, Goldstein R E, Michel N, Polin M, Tuval I 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 168101
- [9] Lauga E, DiLuzio W R, Whitesides G M, Stone H A 2006 *Biophys. J.* **90** 400
- [10] Di Leonardo R, Dell’Arciprete D, Angelani L, Iebba V 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 038101
- [11] Denissenko P, Kantsler V, Smith D J, Kirkman-Brown J 2012 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **109** 8007
- [12] Wang J, Gao W 2012 *ACS Nano* **6** 5745
- [13] Mijalkov M, Volpe G 2013 *Soft Matter* **9** 6376
- [14] Nelson B J, Kaliakatsos I K, Abbott J J 2010 *Annu. Rev. Biomed. Eng.* **12** 55
- [15] Tailleur J, Cates M E 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 218103
- [16] Solon A P, Stenhammar J, Cates M E, Kafri Y, Tailleur J 2018 *New J. Phys.* **20** 075001

- [17] Speck T 2020 *Soft Matter* **16** 2652–2663
- [18] Ros A, Eichhorn R, Regtmeier J, Duong T T, Reimann P, Anselmetti D 2005 *Nature* **436** 928
- [19] Eichhorn R, Regtmeier J, Anselmetti D, Reimann P 2010 *Soft Matter* **6** 1858
- [20] Eichhorn R, Reimann P, Hänggi P 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 190601
- [21] Chepizhko O, Altmann E G, Peruani F 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 238101
- [22] Zhu W J, He Y L, Ai B Q 2019 *J. Stat. Mech.* 103208
- [23] McDermott D, Olson Reichhardt C J, Reichhardt C 2016 *Soft Matter* **12** 8603
- [24] Denisov S, Flach S, Hänggi P 2014 *Phys. Rep.* **538** 77
- [25] Reimann P 2002 *Phys. Rep.* 361 57
- [26] Hänggi P, Marchesoni F 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 387
- [27] Duhr S, Braun D 2006 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **103** 19678
- [28] Kubo R 1966 *Rep. Prog. Phys.* **29** 255
- [29] Piazza R, Parola A 2008 *J. Phys.: Condens. Matter* **20** 153102
- [30] Ai B Q 2017 *Phys. Rev. E* **96** 012131
- [31] Ai B Q, He Y F, Zhong W R 2015 *Soft Matter* **11** 3852-3859
- [32] Meng F H, Liu J L, He Y L 2020 *J. Phys. A: Math. Theor.* **53** 095005
- [33] Szamel G 2014 *Phys. Rev. E* **90** 012111
- [34] van Kampen N G 2007 *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (Amsterdam: North-Holland)
- [35] Kloeden P E, Platen E 1992 *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations* (Berlin: Springer)
- [36] Higham D J 2001 *SIAM Rev.* **43** 525
- [37] Higham D J, Kloeden P E 2021 *An Introduction to the Numerical Simulation of Stochastic Differential Equations* (Philadelphia: SIAM)
- [38] Mannella R 2002 *Int. J. Mod. Phys. C* **13** 1177
- [39] Ermak R, McCammon J A 1978 *J. Chem. Phys.* **69** 1352

Directed transport of an active Brownian particle chain in a periodic channel with a temperature gradient

ZENG Jinyu¹⁾²⁾ HE Yuling^{1)2)†}

1)(Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of

Education), Guangdong Basic Research Center of Excellence for Structure and Fundamental Interactions of Matter, School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

2)(Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials, Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

Abstract

The directed transport of active Brownian particle chains in spatially inhomogeneous thermal environments is governed by the interplay among activity, external driving, spatial asymmetry, and thermal fluctuations. In this work, we numerically investigate the transport of an active Brownian particle chain confined in a two-dimensional periodic channel subjected to a temperature gradient. An system of Langevin equations is constructed by incorporating an asymmetric periodic potential, shear flow, spatially dependent translational and rotational diffusion, elastic coupling between neighboring particles, and particle self-propulsion. The stochastic equations are interpreted in the Itô sense and numerically integrated using the Euler - Maruyama scheme. By systematically varying the shear rate, potential-asymmetry parameter, relative temperature difference, base temperature, and self-propulsion speed, we examine how these nonequilibrium mechanisms cooperate or compete to determine the transport direction and efficiency of the particle chain.

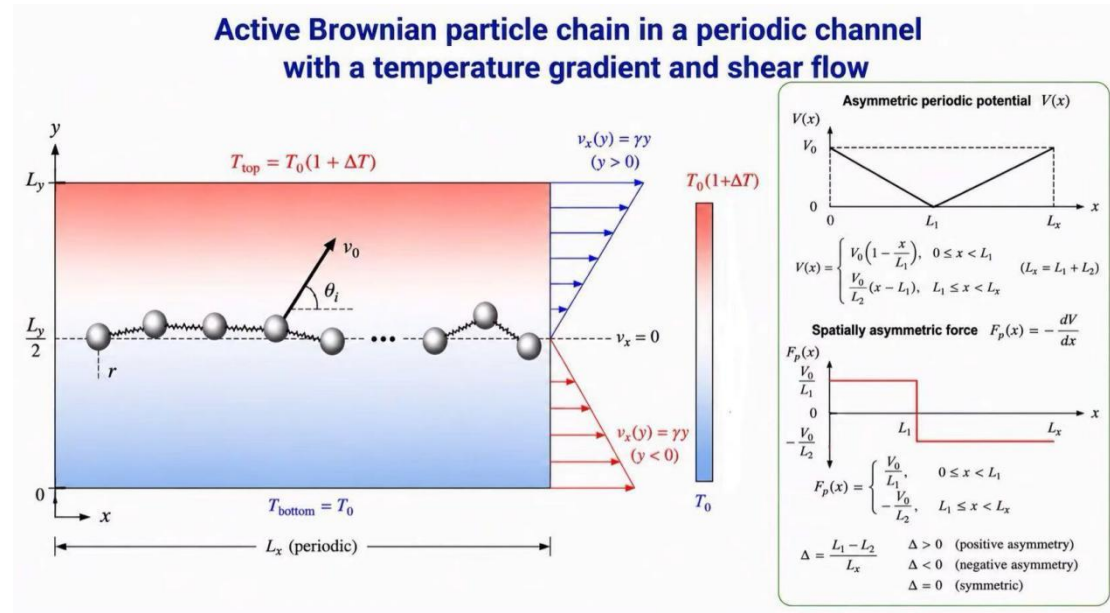
In the absence of a temperature difference, shear flow alone cannot generate directed transport when the periodic potential is spatially symmetric. Once spatial asymmetry is introduced, however, the coupling between the asymmetric periodic potential and shear flow produces pronounced rectification, and the average transport velocity exhibits a nonmonotonic dependence on the shear rate. This behavior results from the competition between shear-induced particle motion and the directional selectivity imposed by the asymmetric potential. When a temperature gradient is introduced, the resulting spatially inhomogeneous thermal fluctuations substantially modify the transport behavior. The temperature-gradient effect competes with the asymmetric potential and shear flow, thereby suppressing or enhancing the original rectification depending on the parameter regime and, more importantly, producing transitions between positive and negative transport. The calculated parameter maps further demonstrate that the transport-reversal boundary can be continuously shifted by tuning the relative temperature difference, shear rate, and potential asymmetry, indicating that the transport direction is not controlled by a single driving mechanism but by their combined competition.

The base temperature provides an additional means of regulating the transport by changing the overall level of thermal fluctuations. Increasing the thermal scale

generally weakens the directional selectivity associated with barrier crossing, although its influence depends on the potential asymmetry and other driving parameters. Activity introduces another competing mechanism. Moderate self-propulsion can facilitate barrier crossing and enhance directed transport, whereas sufficiently strong self-propulsion can weaken the original rectification mechanism and even induce transport reversal. Thus, the transport behavior arises from a balance among shear-induced advection, spatially asymmetric barrier crossing, inhomogeneous thermal fluctuations, and persistent active motion. Calculations for different chain lengths and system sizes show that the principal transport characteristics and reversal behavior remain qualitatively robust within the parameter ranges considered.

These results establish a physical picture in which the asymmetric periodic potential provides directional selectivity, shear flow controls the ability of the chain to explore and cross potential barriers, the temperature gradient redistributes thermal fluctuations spatially, and self-propulsion modifies both barrier-crossing dynamics and the competition among the other transport mechanisms. Their interplay enables not only continuous regulation of the transport efficiency but also controllable reversal of the transport direction. The present study therefore provides insight into the nonequilibrium transport of elastically coupled active particles in thermally inhomogeneous environments and may offer a theoretical basis for controlling collective transport in micro- and nanoscale active-matter systems.

Keywords: active Brownian particle chain; temperature gradient; asymmetric periodic potential; shear flow



*Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12075090, 12475036) and the Guangdong Provincial Basic and Applied Basic Research Foundation, China

(Grant No. 2024A1515012575).

These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: hey1@m.scnu.edu.cn

The first author. E-mail: 1849121469@qq.com