

Run-and-Tumble 粒子浴中活性对探针扩散动力学的影响*

栗静 赵华芮 田冉冉 边玉坤[†]

(兰州理工大学, 理学院, 兰州 730050)

摘要

活性物质是由定向自驱动粒子构成的非平衡系统, 研究分子在活性流体中的扩散是理解许多生命过程的基础。本文通过朗之万方程引入活性噪声, 研究细菌浴中惰性粒子的扩散动力学。活性噪声被建模为一系列作用力的脉冲以描述细菌 run-and-tumble 运动模式。推导 Smoluchowski 方程, 得到粒子均方位移 (MSD) 和有效扩散系数 D_{eff} 的解析表达式。理论从活性力的大小 f_A 、持续时间 $\Delta\tau$ 及平均间隔时间 τ 三个方面分析了活性噪声对粒子扩散的促进作用。粒子在活性条件下均呈现出短时的超扩散和长时的增强扩散特征。 τ 减小意味细菌转向变频繁, 导致粒子增强扩散行为受到抑制, 增强扩散模式由 D_{eff} 在 $\Delta\tau$ - τ 参数空间的等值线图给出。理论被应用于大肠杆菌溶液中聚苯乙烯和二氧化硅的扩散实验分析, 拟合了不同活性条件下探针的均方位移。在合理的参数下, 理论与实验结果具有较好的一致性, 理解了活性效应导致的超扩散现象及扩散系数随细菌浓度的线性增长关系, 揭示了活性流体中异常扩散行为的形成机制。

关键词: 活性物质; 朗之万方程; 非平衡涨落; 扩散动力学

PACS: 05.45.-a, 87.10.Mn, 87.15.Vv, 87.18.Tt

基金: 国家自然科学基金(批准号: 12165011)和甘肃省自然科学基金(批准号: 21JR7RA215)资助的课题。

[†] 通信作者. E-mail: bianyk@lut.edu.cn

第一作者. E-mail: lj15386940109@126.com

1 引言

活性物质广泛存在于自然界中, 包含从纳米尺寸的分子马达、藻类、细菌到宏观尺度的鸟群、鱼群等^[1, 2]。这类物质能够从环境中获取能量并转化为定向自驱动运动, 从而使体系偏离平衡态。实验和理论研究中, 通常采用能动微生物或人造泳子的悬浮液作为活性流体模型^[3-7]。由于活性物质与环境之间存在流体力学、空间位阻等复杂相互作用^[8, 9], 活性体系表现出一系列惰性体系所不具备的

动力学特征，例如超扩散现象^[10]、相分离^[11]、特殊流变行为^[12]等。生物大分子的扩散在代谢、信号传导以及物质输运等生命过程中发挥着至关重要的作用，并且提供了一种有效的途径探索细胞内物理性质。因此，活性体系的扩散动力学研究长期受到物理、生物、化学和医学等领域的广泛关注^[13-16]。

不同于惰性体系中的扩散，活性流体中分子的扩散表现出与活性粒子种类、尺寸、浓度以及活性机制等密切相关的新规律。Wu 等首次从实验上揭示了活性体系中的异常扩散现象，即大肠杆菌溶液中聚苯乙烯球呈现出短时的超扩散(均方位移 $MSD \propto t^\mu$, $\mu > 1$) 和长时的增强扩散行为^[17]。后续研究表明，活性涨落效应导致的增强扩散不仅随细菌浓度的增加而线性增加^[18, 19]，还与探针粒子的自身尺寸密切相关^[20]。Gomez-Solano 等研究聚合物溶液中自驱动 Janus 粒子的扩散发现，随着粒子速度的增加 Janus 粒子比惰性粒子的转动扩散增加超过 2 倍^[21]。活性效应还会显著影响活性流体的流变特性，甚至导致流体的“粘度消失”现象^[22]。除此之外，最近的实验观测到活性浴中探针粒子位移的概率分布函数(probability distribution functions, PDFs)具有非高斯的统计特征^[23-25]，且该非高斯性随着体系活性的增加而愈发明显^[24]。

活性体系的多尺度和非平衡特征，为理解上述扩散实验现象的理论和模拟研究带来了挑战。Reichert 等基于模耦合理论研究了惰性探针为什么在活性介质中会经历增强扩散过程^[26, 27]。Hou 等采用平均场近似并将线性 Dean 方程扩展至非平衡环境，计算了探针粒子的长时扩散系数和迁移率，发现它们均随活性呈非线性的增加^[28]。布朗运动理论作为处理非平衡体系动力学问题最简单的入口，也被广泛用于研究活性环境中惰性粒子的异常扩散动力学^[29-33]。Chen 等采用混合分子动力学-多粒子碰撞动力学方法研究了自扩散泳机制驱动的合成马达动力学，发现具有空间结构的化学图样可抑制化学驱动马达的转动布朗运动并引导其沿特

定路径迁移，从而通过趋化效应影响其聚集行为^[34]。近期连续介质理论和分子模拟研究表明，化学燃料驱动的逻辑门能够使活性胶体感知不同的化学输入，并相应地调节自身动力学状态^[35]。在活性体系迁移、扩散等动态输运过程研究中，有效温度的概念在理论上常被引入以阐述活性体系的增强扩散现象和非平衡涨落^[30, 36-40]，且在实验中得到了证实^[20, 38]。尽管活性体系的扩散动力学研究取得了重要进展，但关于细菌和马达蛋白溶液中非高斯活性涨落影响扩散动力学的理论研究相对较少。同时，活性浴中分子的长时扩散系数如何定量地依赖于活性涨落特征仍旧缺乏系统的研究。

本文基于布朗动力学方法，采用 run-and-tumble 粒子 (RTPs) 模型，引入非高斯的散粒噪声，描述惰性粒子在活性环境下的随机运动。为了定量地理解活性噪声对扩散动力学的影响，将描述探针位置的朗之万方程转化为位置涨落的概率密度所满足的活性 Smoluchowski 扩散方程。解析计算了能够直接与实验结果相比较的探针含时均方位移、长时有效扩散系数等物理量，并成功应用于活性细菌溶液中探针的扩散实验研究，恰当地阐释了活性涨落效应导致的异常扩散动力学的实验规律和产生机理。

2 理论模型和方法

2.1 布朗运动方程的扩展

研究单个惰性粒子在由牛顿溶剂和活性粒子(细菌)组成的溶液中扩散，如图1所示。假设粒子受限于谐振势场，这归因于单分子实验常采用光镊来捕获操控微小粒子。对于悬浮在活性溶液中，坐标为 $\mathbf{r}$ 的单个惰性粒子，其动力学可用过阻尼的朗之万方程描述

$$\gamma \frac{d\mathbf{r}}{dt} = -\nabla_{\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) + \xi_{\text{T}}(t) + \xi_{\text{A}}(t) \quad (1)$$

其中， γ 为摩擦系数， $U(\mathbf{r}) = k\mathbf{r}^2/2$ 为外部势场函数， k 为陷阱刚度。在谐振势场

中，系统的特征弛豫时间 $\tau_k = \gamma/k$ 。 $\xi_T(t)$ 和 $\xi_A(t)$ 分别是示踪粒子所受到的热涨落随机力和活性随机力。假定 $\xi_T(t)$ 为高斯随机变量，其均值为零，时间关联与摩擦内核遵循涨落-耗散定理

$$\langle \xi_{T,\alpha}(t) \xi_{T,\beta}(t') \rangle = 2\gamma k_B T \delta_{\alpha\beta} \delta(t-t') \quad (2)$$

其中， α 和 β 表示各自的笛卡尔分量， k_B 为玻尔兹曼常数， T 为绝对温度， $\delta(t-t')$ 为 Dirac 函数。

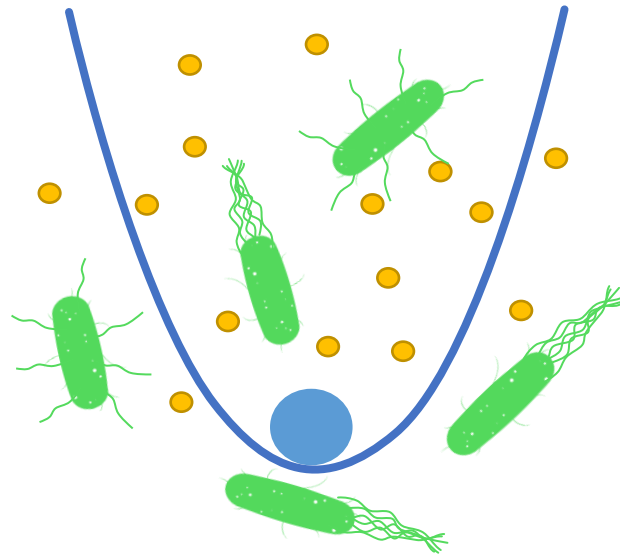


图 1 活性溶液中受限于谐振势场的单个惰性粒子的扩散示意图(蓝色表示示踪粒子，黄色表示溶剂分子，绿色表示活性分子)。

Fig. 1. Schematic of a particle (blue) subjected to harmonic potential in a bath consisting of solvent molecules (yellow) and bacteria (green).

为了表征活性粒子持续运动导致的活性随机力 $\xi_A(t)$ 特性，借鉴现有细菌运动的实验发现^[41, 42]，细菌的自驱动运动采用典型的 RTPs 模型描述。在该模型中，细菌朝一个方向直线运动，施加一个持续时间为 $\Delta\tau$ 的活性力 $f(t)$ 作用于示踪粒子，然后随机转动朝另外一个方向继续运动。假设 $f(t)$ 具有以下形式

$$f(t) = f_A [\Theta(t) - \Theta(t - \Delta\tau)] \quad (3)$$

其中， f_A 为活性力的大小， $\Theta(t)$ 为单位阶跃函数。活性随机力可以视为一系列持续时间为 $\Delta\tau$ 的随机脉冲，并被建模为散粒噪声

$$\xi_A(t) = \sum_i h_i f(t - t_i) \quad (4)$$

式中 $h_i = \pm 1$ 是第 i 个脉冲的符号以描述活性力的方向， $\langle h_i h_j \rangle = \delta_{ij}$ 。 t_i 是第 i 个脉冲出现的随机时间。除非另有说明，否则假设脉冲以泊松过程随机开启，平均间隔时间为 τ (一个脉冲结束到下一个脉冲开始的静止时段的平均值)，并取恒定的脉冲长度 $\Delta\tau$ 。研究表明，分子马达的驱动过程也具有这样一种相对明确定义的脉冲长度^[43]。上述假设下，相邻两次脉冲的时间间隔 $t_{i+1} - t_i$ 与 $\Delta\tau$ 和 τ 服从指数分布的统计规律，即 $P(t_{i+1} - t_i) = \frac{1}{\Delta\tau + \tau} \exp\left[-\frac{t_{i+1} - t_i}{\Delta\tau + \tau}\right]$ 。因此，含有 N_m 个活性细菌的溶液中，作用在探针粒子上的活性力的频率为 $\nu = N_m/(\tau + \Delta\tau)$ 。应用 Campbell 定理，可得活性噪声的均值为零，以及如下时间自相关函数^[44]

$$\langle \xi_{A,\alpha}(t) \xi_{A,\beta}(t') \rangle = \nu f_A^2 \delta_{\alpha\beta} (\Delta\tau - |t - t'|) \Theta(\Delta\tau - |t - t'|) \quad (5)$$

在 RTPs 模型描述下，受散粒噪声驱动的动力学过程，如果在每一时刻都没有足够数量的随机脉冲作用，就会导致中心极限定理的失效，从而系统呈现非高斯的统计特性^[45]。当活性粒子浓度较低或局域弛豫时间 τ_k 大于活性噪声关联时间 $\Delta\tau$ 时， $\xi_A(t)$ 可被视为均值为零、相关性呈指数衰减的高斯随机变量^[35]。根据 Volpe 等预测，如果活性噪声引入了较大的关联时间 $\Delta\tau$ ，高斯型活性噪声将向非高斯型转变^[23]。

在上述理论框架下，作用于扩散粒子的活性随机力由四个特征参数决定：活性力的大小 f_A 、持续时间 $\Delta\tau$ 、平均间隔时间 τ ，以及活性粒子数量 N_m 。每个参数代表实际活性力的某种特征性质。 τ 与活性粒子的浓度相关^[46]，活性粒子的浓度越大，活性力平均间隔时间就越短，意味着活性粒子转向越频繁，在给定的时间内对探针随机冲击的频率 ν 就越高。 $\Delta\tau$ 表示活性粒子和示踪粒子相互作用的关联时间，对于它们的每次碰撞，活性粒子都会对示踪粒子施加一个持续时间为 $\Delta\tau$ 的力。 f_A 与随机冲击的平均强度相关，活性粒子的移动性越大，随机冲击的作用

力也就越大。此外，活性粒子产生的非平衡涨落受局域化学环境和反应动力学调控，上述建立的理论模型实际上是将“环境调控”转化为可操作的活性随机力参数： f_A 对应活性粒子消耗能量的大小，它受局域化学势和能量供给速率控制； $\Delta\tau$ 对应活性粒子维持自驱动的时间尺度，这与反应动力学中的持久时间相关； τ 则对应间歇性驱动或外部调控的周期。

2.2 均方位移和有效扩散系数

假设系统在 $t=0$ 时刻处于热平衡状态，且活性力自该时刻起作用于系统，探针的初始位置 $\mathbf{r}(0)$ 服从玻尔兹曼分布，其均值 $\langle \mathbf{r}(0) \rangle = 0$ 。探针在 $t > 0$ 时段内的运动 $\mathbf{r}(t)$ 可理解为对活性力的响应过程。应用拉普拉斯变换方程(1)的解

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}(0)e^{-\frac{k}{\gamma}t} + \frac{1}{\gamma} \int_0^t [\xi_T(t') + \xi_A(t')] e^{-\frac{k}{\gamma}(t-t')} dt' \quad (6)$$

结合热噪声和活性噪声的统计特征(假设两者彼此独立)，可得示踪粒子在 x (或 y) 方向上含时的均方位移

$$\sigma^2(t) = \langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = \frac{2k_B T}{k} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_k}} \right) + \frac{v f_A^2}{k^2} F(t, \tau_k, \Delta\tau) \quad (7)$$

其中

$$F(t, \tau_k, \Delta\tau) = \Theta(\Delta\tau - t) \left[2(t - \Delta\tau) e^{-\frac{t}{\tau_k}} + \tau_k e^{-\left(\frac{2t}{\tau_k} - \frac{\Delta\tau}{\tau_k}\right)} - \tau_k e^{-\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} \right] \\ + (\Delta\tau + \tau_k) e^{-\frac{2t}{\tau_k}} + \tau_k e^{-\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} - \tau_k e^{-\left(\frac{2t}{\tau_k} - \frac{\Delta\tau}{\tau_k}\right)} + \Delta\tau - \tau_k \quad (8)$$

详细的推导过程在附录 A 中给出。式(7)中两项分别对应于热涨落和活性涨落对粒子均方位移的贡献。在短时间极限下，考虑 $t < \Delta\tau < \tau_k$ ，此时 $\Theta(\Delta\tau - t) \rightarrow 1$ ，可得粒子均方位移为

$$\sigma^2(t) = \langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = \frac{2k_B T}{\gamma} t + \frac{2v f_A^2 \Delta\tau}{\gamma^2} t^2 \quad (9)$$

可以看出，粒子的均方位移呈现出从短时的超扩散向长时增强扩散的转变。当

$t > k_B T \gamma / (v f_A^2 \Delta \tau)$ 时, 粒子表现为超扩散特征; 当 $t < k_B T \gamma / (v f_A^2 \Delta \tau)$ 时, 系统经历热扩散过程。自由粒子在 x (或 y) 方向的 MSD 可以通过式(7), 取 $k \rightarrow 0$, 即 $\tau_k \rightarrow \infty$ 得到

$$\langle [x(t) - x(0)]^2 \rangle = \frac{2k_B T t}{\gamma} + \frac{v f_A^2 \left((\Delta \tau - t)^3 \Theta(\Delta \tau - t) + \Delta \tau^2 (3t - \Delta \tau) \right)}{3\gamma^2} \quad (10)$$

在短时间极限下 ($t < \Delta \tau$), 可得

$$\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = \frac{2k_B T t}{\gamma} + \frac{v f_A^2 \Delta \tau}{\gamma^2} t^2 \quad (11)$$

接下来, 计算活性浴中示踪粒子的含时和长时扩散系数。引入 t 时刻在位置 x (或 y) 找到示踪粒子的概率密度 $P(x, t) = \langle \rho(x, t) \rangle = \langle \delta(x(t) - x) \rangle$, 概率流被定义为 $J(x, t) = \rho(x, t) \dot{x}(t)$, 则连续性方程表示为

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = - \frac{\partial J(x, t)}{\partial x} \quad (12)$$

由上述连续性方程, 可得到 $P(x, t)$ 的运动方程,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{k}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} x P(x, t) + [D_T + D_A(t)] \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \quad (13)$$

上式为活性条件下的Smoluchowski方程 (active Smoluchowski equation, ASE)。为保证完整性, 详细推导过程已在附录B中给出。需要指出的是, 这里的ASE是散粒噪声下的近似结果, 而非普遍成立的严格方程, 在其推导过程中采用了高斯近似和Novikov关系。该处理方法有助于获得解析的扩散系数表达式, 以分析活性涨落与探针粒子扩散动力学的内在关联。如2.1节中所述, 在活性粒子浓度较低或者体系局域弛豫时间 τ_k 大于活性持续时间 $\Delta \tau$ 时, 散粒噪声可被视为高斯随机变量。因此, 式(13)的适用范围限定于低活性粒子浓度, 近似所需参数条件为 $\Delta \tau < \tau_k$ 。从ASE和朗之万方程(1)出发计算粒子均方位移的结果一致, 说明采用ASE计算二阶动力学观测量扩散系数是可行的。上式中, $D_T = k_B T / \gamma$ 为热扩散系

数, $D_A(t)$ 为活性扩散系数, 其时间依赖性来源于活性噪声的non-Markovian特性。

因此, 惰性粒子在run-and-tumble活性粒子浴中的含时扩散系数为

$$D(t) = D_T + D_A(t) = \frac{k_B T}{\gamma} + \frac{A(t)}{\gamma} \quad (14)$$

其中

$$A(t) = \frac{v f_A^2}{k} \left\{ \Theta(\Delta\tau - t) \left[\tau_k e^{-\frac{t}{\tau_k}} + (t - \Delta\tau) e^{-\frac{t}{\tau_k}} - \tau_k e^{-\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} \right] + \tau_k e^{-\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} + \Delta\tau - \tau_k \right\} \quad (15)$$

在长时极限下, 活性噪声相关性的持续性几乎可以忽略不计, 系统达到非平衡的稳态, 粒子的长时有效扩散系数为

$$D_{\text{eff}} = \frac{k_B T}{\gamma} + \frac{k_B T_A}{\gamma} \quad (16)$$

这里的 $T_A = [v f_A^2 / (k_B k)] (\tau_k e^{-\Delta\tau/\tau_k} + \Delta\tau - \tau_k)$ 被定义为“活性温度”, 它定量地描述了活性噪声如何增强示踪粒子的移动性。结合扩展的Stokes-Einstein关系:

$T_{\text{eff}} = \gamma D_{\text{eff}} / k_B$, 活性浴的有效温度则表示为

$$T_{\text{eff}} = T + T_A \quad (17)$$

3 结果和讨论

基于上一节推导的理论公式, 本节定量地分析活性涨落效应对示踪粒子扩散动力学的影响。为了得到一般性的规律, 设定 $\gamma = 1$ 、 $\tau_k = 1$ 、 $k_B = 1$ 、 $T = 1$ 、 $N_m = 1$ 为无量纲单位, 同时将活性力特征参数: 活性力的大小 f_A 、持续时间 $\Delta\tau$ 及平均间隔时间 τ 设为变量。上述无量纲参数与实际体系物理量的对应关系如下: $\gamma = 1$ 对应纯水中的摩擦系数, 即 $6.37 \times 10^{-12} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$; $k_B T = 1$ 对应于 300 K 时系统的热力学能量; $f_A = 1$ 对应于 1 pN; τ 与 $\Delta\tau$ 在秒的量级。从式(7)出发, 将探针粒子均方位移以初始位置方差 $\langle x(0)^2 \rangle$ 为归一化尺度, 从而得到无量纲化的均方位移 $\tilde{\sigma}^2(t/\tau_k) = \sigma^2(t/\tau_k) / \langle x(0)^2 \rangle$, 以表示粒子相对初始状态的“相对扩散幅度”, 从而消除粒子初始分布范围差异的影响。以下定量计算图中, 用灰色虚线表示

$\tilde{\sigma}^2(t/\tau_k)$ 在纯热浴中的值，彩色实线表示不同活性条件下的结果。

首先，讨论活性力的大小 f_A 对扩散动力学的影响。图 2 显示了不同活性力大小下均方位移 $\tilde{\sigma}^2(t/\tau_k)$ 随时间的变化。可以看到，示踪粒子的均方位移在有活性粒子存在时 ($f_A > 0$) 高于纯热浴中 ($f_A = 0$) 的数值，且 MSD 随活性力大小 f_A 的增大而显著增加。如图 2 插图所示，在活性力比较大的情况下 ($f_A = 10$)，示踪粒子的 MSD 增长超过了一个数量级，说明了活性涨落对扩散动力学具有显著促进作用。另外，在长时极限下，体系逐渐趋于非平衡的稳态，因此粒子的均方位移达到饱和。

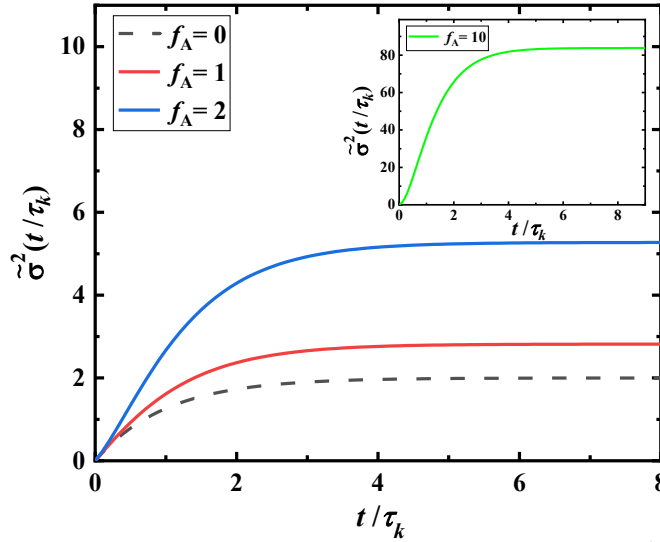


图 2 不同活性力大小 f_A 下均方位移 $\tilde{\sigma}^2(t/\tau_k)$ 随时间 t/τ_k 的变化，其中 $\tau = 1, \Delta\tau = 10$ ，插图 为 $f_A = 10$ 时的均方位移。

Fig. 2. The MSD of the tracer particles $\tilde{\sigma}^2(t/\tau_k)$ against t/τ_k at different active force amplitude $f_A = 0, 1, 2$ with $\tau = 1, \Delta\tau = 10$. The MSD under $f_A = 10$ is also given in the inset.

图 3 给出了短时间区域示踪粒子的均方位移随时间变化的双对数曲线。结果表明，在活性力大小 $f_A = 10$ 时，粒子的均方位移随时间的变化(红色实线)显著偏离纯热浴中 MSD 对时间的线性依赖关系(灰色虚线)。通过拟合粒子在短时区域的均方位移，得到 $\text{MSD} \propto (t/\tau_k)^\mu$ 和指数因子 $\mu = 1.58$ ，这表明活性浴中粒子的扩散不再遵循正常扩散，而是呈现出显著的超扩散特征。图 3 的插图定量显示了指

数因子 μ 随活性力大小 f_A 的变化。在 $f_A \in [0, 50]$ 的变化区间，指数因子 μ 随着活性力的增大呈单调递增趋势，取值范围为 1~1.96。图 2 和图 3 理论上证明了活性效应与粒子短时超扩散和长时增强扩散密切相关，这与已发表的相关扩散实验结果具有定性的一致性^[17,20,21]。这是因为当细菌靠近示踪粒子时，细菌自身运动(鞭毛马达驱动旋转)产生的流场(Stokeslet 或 Force Dipole 场)会对粒子施加流体动力学力，导致粒子的运动不再仅仅遵循布朗运动，而是表现出超扩散或增强的均方位移，即粒子获得了“额外动能”。而且活性力的大小 f_A 越大，细菌传递给示踪粒子的额外动能就越多，从而导致粒子运动能力的增强。

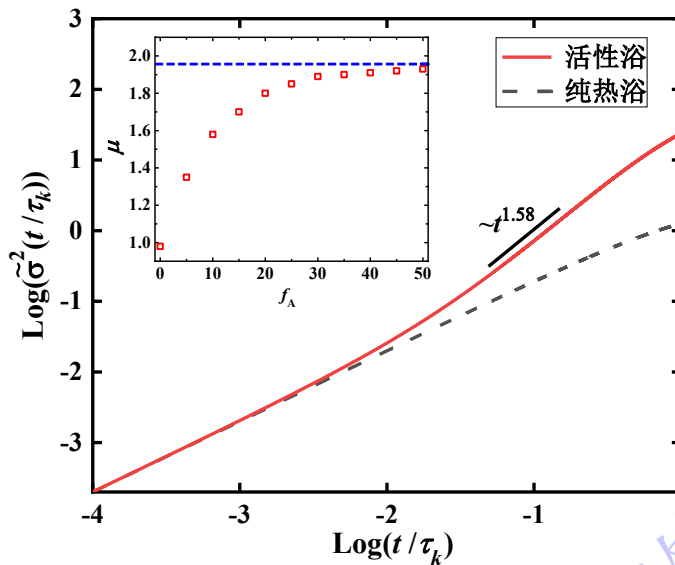


图 3 示踪粒子均方位移 $\tilde{\sigma}^2(t/\tau_k)$ 随时间 t/τ_k 变化的 Log-Log 图, 其中 $f_A=10$, $\tau=1$, $\Delta\tau=10$ 。插图为指数因子 μ 随 f_A 的变化。

Fig. 3. The Log-Log plot of the MSD of tracer particles $\tilde{\sigma}^2(t/\tau_k)$ against time t/τ_k with the parameters $f_A=10$, $\tau=1$, $\Delta\tau=10$. The exponent μ with f_A is also given in the inset.

除了活性力的大小，活性力的两个特征时间 $\Delta\tau$ 和 τ 也是影响扩散动力学的重要因素。图 4 给出了活性力大小 $f_A=3$ 保持不变的条件下，示踪粒子的均方位移在不同 $\Delta\tau$ 和 τ 下随时间的变化规律。从图 4 可以看出，有活性力存在时的 MSD 要明显高于纯热浴中的数值(虚线)。除此之外，随着活性力持续时间 $\Delta\tau$ 的增加，粒子的 MSD 呈显著增加趋势(图 4(a))；相反地，随着活性力平均间隔时间 τ 的

增加，粒子的 MSD 会呈现显著下降特征(图 4(b))。

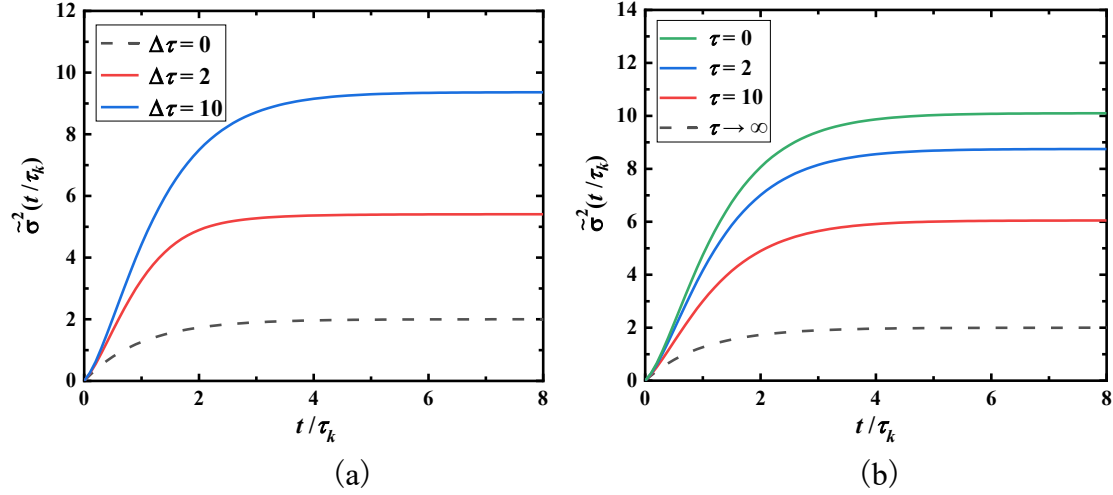


图 4 (a) 不同活性力持续时间下均方位移 $\tilde{\sigma}^2(t/\tau_k)$ 随时间 t/τ_k 的变化，其中 $\tau=1$, $f_A=3$;

(b) 不同活性力平均间隔时间下 $\tilde{\sigma}^2(t/\tau_k)$ 随时间 t/τ_k 的变化，其中 $\Delta\tau=10$, $f_A=3$ 。

Fig. 4. (a) The MSD of tracer particles $\tilde{\sigma}^2(t/\tau_k)$ against t/τ_k at different $\Delta\tau$ with $\tau=1, f_A=3$;

(b) $\tilde{\sigma}^2(t/\tau_k)$ against t/τ_k at different τ with $\Delta\tau=10, f_A=3$.

基于式(16)，图 5 给出了活性力大小 $f_A=2$ 时长时有效扩散系数 D_{eff}/D_T 在活性力特征时间参数空间的等值线图。可以看出，在 $\tau-\Delta\tau$ 参数空间，活性效应导致有效扩散系数存在一个显著的增强区域(红色区域)，它分布在较大的 $\Delta\tau$ 值区域以及较小的 τ 值区域。由此，可以大致估算活性体系中的扩散达到某一增强程

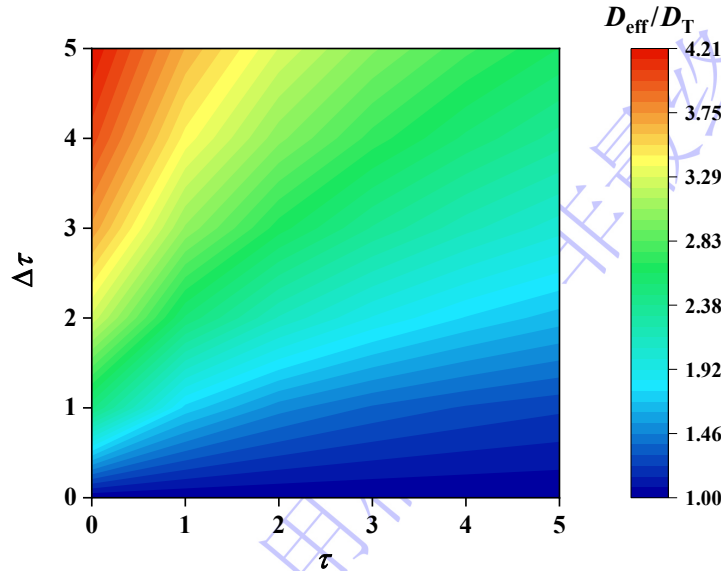


图 5 长时间尺度下有效扩散系数 D_{eff}/D_T 在 $\tau-\Delta\tau$ 参数空间的等值线图。

Fig. 5. Contour plot of the effective diffusion coefficient D_{eff}/D_T in the parameter space $\tau-\Delta\tau$.

度，活性力特征参数 $\Delta\tau$ 和 τ 需要满足的条件。由扩展的 Stokes-Einstein 关系引入有效温度 T_{eff} (式(17))，图 4 和图 5 中活性效应导致的增强扩散行为可以理解为粒子实际上是在一个温度更高的流体中运动。活性力持续时间 $\Delta\tau$ 保持不变而平均间隔时间 τ 减小，意味着活性细菌的转向变频繁，单位时间内示踪粒子-细菌碰撞次数增加，从而粒子的移动性和有效扩散系数增加。而 τ 固定不变下，示踪粒子-细菌间碰撞持续作用力时间越长，则粒子动量变化量越大，最终导致了粒子的扩散增强。

4 与实验数据比较

在第 3 节一般性的理论分析中，阐明了活性效应的存在可能是导致示踪粒子异常扩散动力学的重要原因。为了验证这一点，本节将建立的理论应用于 Patteson 和 Maggi 等人的大肠杆菌溶液扩散动力学实验分析^[20,38]。实验数据表明，大肠杆菌溶液中聚苯乙烯球和二氧化硅球的均方位移与时间具有明显的非线性指数关系，且聚苯乙烯的长时有效扩散系数随细菌浓度的增大呈线性增加趋势^[20]。下面，将理论结果与两类典型的实验数据进行比较，检验理论的有效性，并获得活性体系的特征信息。

首先，应用理论式(10)并将其推广至二维情况，分析大肠杆菌溶液中聚苯乙烯的自由扩散实验^[20]。由实验给出的纯热浴中的均方位移，可以估算热扩散系数 $D_T = 0.2 \mu\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ，并根据 Stokes-Einstein 关系估算摩擦系数 $\gamma = 2 \times 10^{-8} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ 。仍有三个未知参数：活性力的大小 f_A 、持续时间 $\Delta\tau$ 和活性作用力频率 ν ，可以进一步通过拟合实验数据而得到。图 6 给出了理论计算(折线)和实验观测(散点)得到的不同细菌浓度下 $2 \mu\text{m}$ 聚苯乙烯球的均方位移随时间的变化关系。在给定的拟合参数 $\Delta\tau \approx 0.21 \text{ s}$ 、 $f_A \approx 0.1 \text{ pN}$ 、 $\nu \approx 0.4、1、1.5、2.5 \text{ s}^{-1}$ (对应细菌浓度由小到 大)下，理论结果与实验数据在整个时间范围内吻合得非常好。在细菌浓度

$c = 7.5 \times 10^9 \text{ cells/mL}$ 下, 由幂律函数 $\text{MSD} \propto t^\mu$ 的拟合结果, 得到指数因子 $\mu \approx 2.0$, 这表明了超扩散动力学特征。此外, 得到的拟合参数均在比较合理的范围内, 例如鞭毛类细菌单次游动的特征时间通常为 0.1 s 至 1 s ^[5], 活性力的大小 f_A 也与文献报道的结果相接近^[47]。重要的是, 对于这样一个具体的体系, 通过拟合实验结果估算了体系的活性力特征参数, 定量揭示了活性涨落效应与探针粒子异常扩散机制的内在关联。

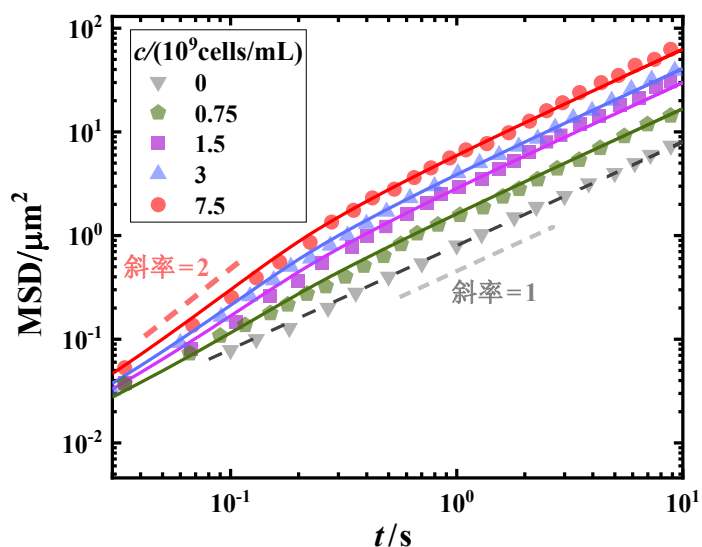


图 6 大肠杆菌溶液中聚苯乙烯球的均方位移随时间变化的实验数据(散点)^[20]和理论结果(折线)对比, 灰色对应无细菌热浴情况。

Fig. 6. Comparison of experimental data (symbols)^[20] and theoretical results (lines) of the MSD over time of spherical polystyrene particles in *Escherichia coli* solution, the MSD of the colloid in the absence of bacteria (grey).

由上述拟合实验^[20]得到的活性噪声特征参数代入式(16)和式(17)中, 理论计算了探针有效扩散系数 D_{eff} 和体系有效温度 T_{eff} 随细菌浓度的变化, 如图 7 所示。插图为作用在探针粒子上的活性力频率 ν 与细菌浓度 c 的关系。可以看到, 在有活性的体系中, 活性随机力会带来扩散系数和有效温度的增加。在细菌浓度低于 $7.5 \times 10^9 \text{ cells/mL}$ 时, D_{eff} 和 T_{eff} 均随细菌浓度的增大近似呈现出线性递增趋势。当细菌浓度增至 $7.5 \times 10^9 \text{ cells/mL}$ 时, D_{eff} 和 T_{eff} 随浓度变化的曲线斜率开始减小。这是由于在低细菌浓度的悬浮液中, 体系可以近似为均一环境, 细菌-探针相互作用

主导阶为二元，且细菌没有集体行为，这些特性导致 D_{eff} 和 T_{eff} 与浓度呈线性依赖关系。此外，在低浓度时，细菌-探针相互作用所导致的动量通量与细菌浓度呈正比。但在高浓度时，细菌-探针间并非完全二元相互作用，由于空间位阻效应的增加，流体中的动量传递受到限制，导致有效扩散系数和有效温度的增长变缓并趋于饱和。

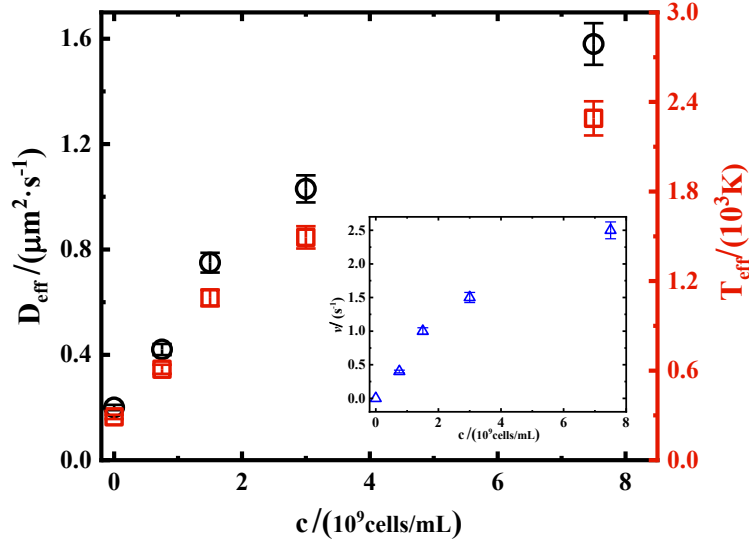


图 7 聚苯乙烯球在不同细菌浓度下的有效扩散系数(黑色)和系统有效温度(红色)，插图为拟合实验得到活性力频率 ν 随细菌浓度的变化。

Fig. 7. The effective diffusion coefficient D_{eff} (black) and the effective temperature T_{eff} (red) of spherical polystyrene particles under different bacterial concentrations c . The active force frequency ν with c is also given in the inset.

接下来，应用理论公式(7)和(10)分析大肠杆菌溶液中二氧化硅球的扩散实验^[38]。实验中将二氧化硅(半径 $3.5 \mu\text{m}$)-细菌(浓度约 10^{10} cells/mL)溶液加载到半径 $R = 25 \mu\text{m}$ 的毛细玻璃管中，该过程会在毛细管边缘形成两个气泡。实验研究了距离其中一个气泡约 30 和 230 微米处的两个探针粒子在 x 方向上的自由扩散(沿毛细管轴向)和 y 方向上受限于谐振势场的扩散(垂直于毛细玻璃管轴向)。由实验给出的探针在纯热浴中的扩散系数 $D_T = 0.03 \mu\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ (x 方向)和 $D_T = 0.033 \mu\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ (y 方向)，结合 Stokes-Einstein 关系估算出摩擦系数分别为 $\gamma = 1.37 \times 10^{-7} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ (x 方向)和 $\gamma = 1.25 \times 10^{-7} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ (y 方向)。剩余四个未知参数：

v 、 τ_k 、 f_A 和 $\Delta\tau$ ，可以进一步通过拟合实验数据得到。图 8(a) 和图 8(b) 展示了 2 种情况下探针粒子均方位移随时间变化的理论计算和实验数据对比。沿 x 轴方向，在拟合参数 $v \approx 1 \text{ s}^{-1}$ 、 $\Delta\tau \approx 0.17 \text{ s}$ 、 $f_A \approx 0.56 \text{ pN}$ (红色) 和 $f_A \approx 0.39 \text{ pN}$ (蓝色) 下，理论结果与两组实验数据在给定的时间范围内吻合得很好，如图 8(a) 所示。沿 y 轴方向，在拟合参数 $v \approx 1 \text{ s}^{-1}$ 、 $\Delta\tau \approx 0.41 \text{ s}$ 、 $\tau_k \approx 3.2 \text{ s}$ 、 $f_A \approx 0.31 \text{ pN}$ (红色) 和 $f_A \approx 0.19 \text{ pN}$ (蓝色) 下，理论结果与两组实验数据也均能保持较好的一致性，如图 8(b) 所示。实验与理论结果均表明，探针粒子的均方位移在短时区域表现为超扩散特征，随后在较长的时间尺度上转变为正常扩散。注意到，沿 y 轴方向，粒子运动因受到弯曲毛细管表面的约束，其均方位移在某一恒定值处趋于饱和。此外，当探针粒子远离气泡时，由于细菌活性的降低，两个方向上的 MSD 均会降低。理论拟合数据表明，在活性力持续时间 $\Delta\tau$ 相同的情况下，活性力大小 f_A 随着探针与气泡距离的增加而减小。 f_A 越大，细菌在一定时间内传递给探针的额外动能会越多，因而导致粒子运动能力会更强。

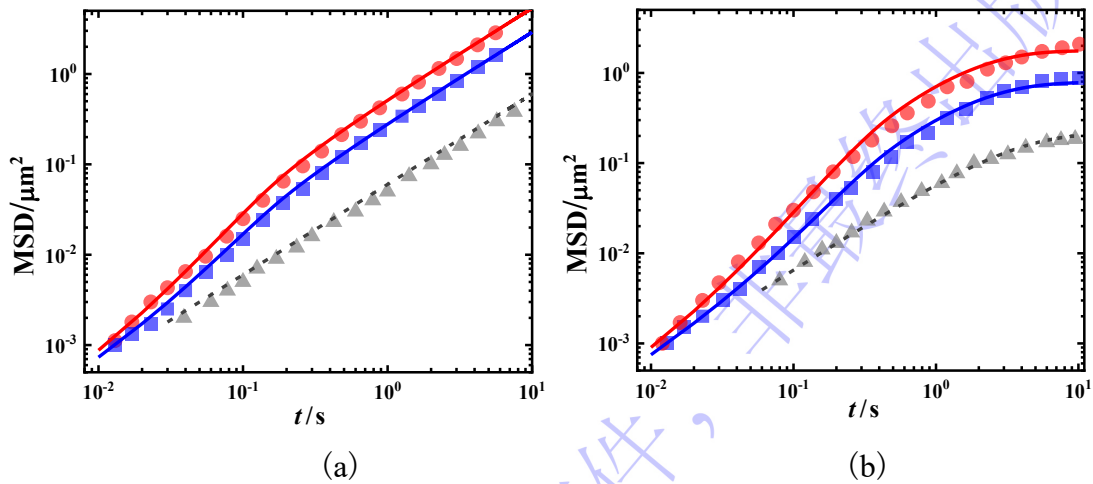


图 8 二氧化硅球沿 x 方向自由扩散 (a) 和沿 y 方向受限扩散 (b) 的均方位移随时间变化的实验数据 (散点)^[38] 和理论结果 (折线) 对比，其中胶体分别位于气泡 $30 \mu\text{m}$ 处 (红色) 和 $230 \mu\text{m}$ 处 (蓝色)，无细菌存在时胶体的均方位移 (灰色)。

Fig. 8. Comparison of experimental data (symbols)^[38] and theoretical results (lines) of the MSD over time of free diffusion (a) and confined diffusion (b) of silica bead located at $30 \mu\text{m}$ (red) and at $230 \mu\text{m}$ (blue) from the air bubble, the MSD of the colloid in the absence of bacteria (grey).

5 结 论

本文基于布朗动力学理论,通过扩展布朗运动方程,引入非平衡活性随机力,建立可以描述活性细菌溶液中惰性粒子的扩散动力学数学模型。理论着重从三个方面表征细菌自驱动运动产生的活性涨落:活性力的大小 f_A 、持续时间 $\Delta\tau$ 和平均间隔时间 τ (或活性力的频率 ν),并建立了示踪粒子含时均方位移和有效扩散系数 D_{eff} 与活性特征参数间的定量关系。理论研究表明,热浴中有能动细菌存在时,活性涨落效应导致示踪粒子获得“额外动能”而偏离布朗运动,呈现出超扩散和增强扩散特征。且 f_A 越大、 $\Delta\tau$ 越长、 τ 越短、 ν 越高,粒子偏离热扩散的行为就越明显。本文建立的理论框架被成功应用于大肠杆菌溶液中聚苯乙烯球和二氧化硅球的两类扩散实验研究。在合理的参数下,理论能够在时间的全部取值区域很好地拟合探针均方位移的实验数据,解释了两类扩散实验中观测到的超扩散行为以及低细菌浓度下有效扩散系数 D_{eff} 随活性粒子浓度的近似线性增长关系。与实验结果的比较分析表明,恰当地考虑活性涨落效应是正确分析活性体系扩散实验的重要因素。这些发现有助于加深理解不同活性物质对分子探针迁移、扩散等动态输运过程的影响机制,也为复杂系统非平衡态动力学过程提供新的研究思路和方法。

附录 A 均方位移的计算

结合式(6)和均方位移的定义,可得探针粒子的含时均方位移为

$$\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = \langle x_0^2 \rangle \left(e^{\frac{t}{\tau_k}} - 1 \right)^2 + \frac{e^{\frac{2t}{\tau_k}}}{\gamma^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{\frac{t'+t''}{\tau_k}} [\xi_T(t')\xi_T(t'') + \xi_A(t')\xi_A(t'')] \quad (\text{A1})$$

当 $t < \Delta\tau$ 时,

$$\begin{aligned}
& \langle (x(t) - x(0))^2 \rangle \\
&= \langle x_0^2 \rangle \left(e^{-\frac{t}{\tau_k}} - 1 \right)^2 + \frac{e^{-\frac{2t}{\tau_k}}}{\gamma^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' e^{\frac{t'+t''}{\tau_k}} [\xi_T(t') \xi_T(t'') + \xi_A(t') \xi_A(t'')] \\
&= \langle x_0^2 \rangle \left(e^{-\frac{t}{\tau_k}} - 1 \right)^2 + \frac{e^{-\frac{2t}{\tau_k}}}{\gamma^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' (2\gamma k_B T \delta(t' - t'') + v f_A^2 (\Delta\tau - |t' - t''|) \Theta(\Delta\tau - |t' - t''|)) e^{\frac{t'+t''}{\tau_k}} \\
&= \langle x_0^2 \rangle \left(e^{-\frac{t}{\tau_k}} - 1 \right)^2 + \frac{k_B T}{k} \left(1 - e^{-\frac{2t}{\tau_k}} \right) + \frac{2v f_A^2 e^{-\frac{2t}{\tau_k}}}{\gamma^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' (\Delta\tau - t' + t'') \Theta(\Delta\tau - t' + t'') e^{\frac{t'+t''}{\tau_k}} \\
&= \frac{k_B T}{k} \left(2 - 2e^{-\frac{t}{\tau_k}} \right) + \frac{2v f_A^2 e^{-\frac{2t}{\tau_k}}}{\gamma^2} \int_0^t dt' \left[\frac{\gamma}{k} \Delta\tau e^{\frac{2t'}{\tau_k}} - \frac{\gamma^2}{k^2} e^{\frac{2t'}{\tau_k}} - \frac{\gamma}{k} (\Delta\tau - t') e^{\frac{t'}{\tau_k}} + \frac{\gamma^2}{k^2} e^{\frac{t'}{\tau_k}} \right] \\
&= \frac{k_B T}{k} \left(2 - 2e^{-\frac{t}{\tau_k}} \right) + \frac{2v f_A^2 e^{-\frac{2t}{\tau_k}}}{\gamma^2} \left[\frac{\gamma^2}{2k^2} \Delta\tau e^{\frac{2t}{\tau_k}} - \frac{\gamma^3}{2k^3} e^{\frac{2t}{\tau_k}} - \frac{\gamma^2}{k^2} \Delta\tau e^{\frac{t}{\tau_k}} + \frac{\gamma^2}{k^2} t e^{\frac{t}{\tau_k}} + \frac{\gamma^2}{2k^2} \Delta\tau + \frac{\gamma^3}{2k^3} \right] \\
&= \frac{2k_B T}{k} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_k}} \right) + \frac{v f_A^2 e^{-\frac{2t}{\tau_k}}}{k^3} \left[(k\Delta\tau - \gamma) e^{\frac{2t}{\tau_k}} + 2k(t - \Delta\tau) e^{\frac{t}{\tau_k}} + k\Delta\tau + \gamma \right]
\end{aligned} \tag{A2}$$

当 $t > \Delta\tau$ 时,

$$\begin{aligned}
& \langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = \langle x_0^2 \rangle \left(e^{-\frac{t}{\tau_k}} - 1 \right)^2 + \frac{e^{-\frac{2t}{\tau_k}}}{\gamma^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' e^{\frac{t'+t''}{\tau_k}} [\xi_T(t') \xi_T(t'') + \xi_A(t') \xi_A(t'')] \\
&= \langle x_0^2 \rangle \left(e^{-\frac{t}{\tau_k}} - 1 \right)^2 + \frac{k_B T}{k} \left(1 - e^{-\frac{2t}{\tau_k}} \right) \\
&\quad + \frac{2v f_A^2 e^{-\frac{2t}{\tau_k}}}{\gamma^2} \left[\int_0^{\Delta\tau} dt' \int_0^{t'} dt'' (\Delta\tau - t' + t'') e^{\frac{t'+t''}{\tau_k}} + \int_{\Delta\tau}^t dt' \int_{t'-\Delta\tau}^{t'} dt'' (\Delta\tau - t' + t'') e^{\frac{t'+t''}{\tau_k}} \right] \\
&= \frac{k_B T}{k} \left(2 - 2e^{-\frac{t}{\tau_k}} \right) + \frac{v f_A^2 e^{-\frac{2t}{\tau_k}}}{k^3} \left[(k\Delta\tau - \gamma) e^{\frac{2\Delta\tau}{\tau_k}} + k\Delta\tau + \gamma + \left(k\Delta\tau + \gamma e^{-\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} - \gamma \right) \left(e^{\frac{2t}{\tau_k}} - e^{\frac{2\Delta\tau}{\tau_k}} \right) \right] \\
&= \frac{2k_B T}{k} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_k}} \right) + \frac{v f_A^2 e^{-\frac{2t}{\tau_k}}}{k^3} \left[k\Delta\tau + \gamma - \gamma e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} + (k\Delta\tau - \gamma) e^{\frac{2t}{\tau_k}} + \gamma e^{\frac{(2t-\Delta\tau)}{\tau_k}} \right]
\end{aligned} \tag{A3}$$

合并得式 (A2) 和式 (A3), 可得

$$\begin{aligned} \langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = & \frac{2k_B T}{k} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_k}} \right) + \frac{v f_A^2}{k^2} \left\{ \Theta(\Delta\tau - t) \left[2(t - \Delta\tau) e^{-\frac{t}{\tau_k}} + \tau_k e^{\frac{\Delta\tau - 2t}{\tau_k}} - \tau_k e^{-\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} \right] \right. \\ & \left. + \Delta\tau - \tau_k - \tau_k e^{\frac{\Delta\tau - 2t}{\tau_k}} + (\Delta\tau + \tau_k) e^{-\frac{2t}{\tau_k}} + \tau_k e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} \right\} \end{aligned} \quad (A4)$$

附录 B 活性 Smoluchowski 方程的推导

根据连续性方程 $\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x, t)}{\partial x}$, 对两边取期望值并结合朗之万方程 (式

(1)), 可推导出粒子概率密度随时间的演化方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = & -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \langle (-kx + \xi_T(t) + \xi_A(t)) \delta(x(t) - x) \rangle \\ = & \frac{k}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \langle x \delta(x(t) - x) \rangle - \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \langle \xi_T(t) \delta(x(t) - x) \rangle \\ & - \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \langle \xi_A(t) \delta(x(t) - x) \rangle \end{aligned} \quad (B1)$$

第一项

$$\frac{k}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \langle x \delta(x(t) - x) \rangle = \frac{k}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} x P(x, t) \quad (B2)$$

接下来, 为了解析计算式 (B1) 后两项, 将活性噪声视为高斯随机变量 (活性粒子浓度较低或者 $\tau_k > \Delta\tau$), 并采用 Novikov 定理处理。对于热噪声项, 可得

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \langle \xi_T(t) \delta(x(t) - x) \rangle \\ = & -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t dt' \langle \xi_T(t) \xi_T(t') \rangle \left\langle \frac{\delta[\delta(x(t) - x)]}{\delta \xi_T(t')} \right\rangle \\ = & -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t dt' \langle \xi_T(t) \xi_T(t') \rangle \left\langle -\frac{\partial}{\partial x} \delta(x(t) - x) \frac{\delta x(t)}{\delta \xi_T(t')} \right\rangle \\ = & \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t dt' 2\gamma k_B T \delta(t - t') \left\langle \delta(x(t) - x) \frac{1}{\gamma} e^{-\frac{k}{\gamma}(t-t')} \right\rangle \\ = & \frac{k_B T}{\gamma} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (B3)$$

其中泛函导数

$$\frac{\delta}{\delta\theta(t')}\delta(x(t)-x)=\delta'(x(t)-x)\frac{\delta x(t)}{\delta\theta(t')}=-\frac{\partial}{\partial x}\delta(x(t)-x)\frac{\delta x(t)}{\delta\theta(t')} \quad (\text{B4})$$

对于活性噪声项，可得

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\gamma}\frac{\partial}{\partial x}\langle\xi_A(t)\delta(x(t)-x)\rangle \\ & =-\frac{1}{\gamma}\frac{\partial}{\partial x}\int_0^t dt'\langle\xi_A(t)\xi_A(t')\rangle\left\langle\frac{\delta[\delta(x(t)-x)]}{\delta\xi_A(t')}\right\rangle \\ & =\frac{1}{\gamma}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}\int_0^t dt'\langle\xi_A(t)\xi_A(t')\rangle\left\langle\delta(x(t)-x)\frac{\delta x(t)}{\delta\xi_A(t')}\right\rangle \\ & =\frac{1}{\gamma^2}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}\int_0^t dt'v_A^2(\Delta\tau-|t-t'|)\Theta(\Delta\tau-|t-t'|)\left\langle\delta(x(t)-x)e^{\frac{k}{\gamma}(t-t')}\right\rangle \\ & =\frac{v_A^2}{\gamma k}\left\{\Theta(\Delta\tau-t)\left[\tau_k e^{\frac{t}{\tau_k}}+(t-\Delta\tau)e^{\frac{t}{\tau_k}}-\tau_k e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}}\right]+\tau_k e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}}+\Delta\tau-\tau_k\right\}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} \\ & =\frac{A(t)}{\gamma}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (\text{B5})$$

这里 $A(t)=\frac{v_A^2}{k}\left\{\Theta(\Delta\tau-t)\left[\tau_k e^{\frac{t}{\tau_k}}+(t-\Delta\tau)e^{\frac{t}{\tau_k}}-\tau_k e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}}\right]+\tau_k e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}}+\Delta\tau-\tau_k\right\}$ 。整理

可得到活性环境下粒子扩散所遵循的 Smoluchowski 方程：

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}=\frac{k}{\gamma}\frac{\partial}{\partial x}xP(x,t)+\left(\frac{k_B T}{\gamma}+\frac{A(t)}{\gamma}\right)\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} \quad (\text{B6})$$

从该活性 Smoluchowski 方程出发，可进一步计算探针粒子位置的均方涨落。计算结果表明，由式(B6)得到的均方位移结果与附录 A 计算一致。由此说明 ASE 推导过程中采用的近似处理是合理的。计算过程如下：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\langle x^2(t)\rangle & \equiv \frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 P(x,t) = \frac{k}{\gamma}\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \frac{\partial}{\partial x} xP(x,t) + (D_T + D_A(t))\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t) \\ & = \frac{k}{\gamma}\left[x^3 P(x,t)\right]_{-\infty}^{\infty} - \frac{k}{\gamma}\int_{-\infty}^{\infty} dx 2x^2 P(x,t) + (D_T + D_A(t))\left[x^2 \frac{\partial}{\partial x} P(x,t)\right]_{-\infty}^{\infty} \\ & \quad - (D_T + D_A(t))\int_{-\infty}^{\infty} dx 2x \frac{\partial}{\partial x} P(x,t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{2k}{\gamma} \langle x^2(t) \rangle - 2(D_T + D_A(t)) [xP(x,t)]_{-\infty}^{\infty} + 2(D_T + D_A(t)) \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x,t) \\
&= -\frac{2k}{\gamma} \langle x^2(t) \rangle + 2(D_T + D_A(t))
\end{aligned} \tag{B7}$$

将上式两边同时乘以 $e^{\frac{2k}{\gamma}t}$ ，并进行积分

$$\begin{aligned}
e^{\frac{2k}{\gamma}t} \langle x^2(t) \rangle &= 2D_T \int_{-\infty}^t dt' e^{\frac{2k}{\gamma}t'} + 2 \int_0^t dt' e^{\frac{2k}{\gamma}t'} D_A(t') \\
&= \frac{k_B T}{k} e^{\frac{2t}{\tau_k}} + \frac{vf_A^2}{k^3} \left\{ \Theta(\Delta\tau - t) \left[2k(t - \Delta\tau) e^{\frac{t}{\tau_k}} + \gamma e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} - \gamma e^{\frac{2t - \Delta\tau}{\tau_k}} \right] \right. \\
&\quad \left. + k\Delta\tau + \gamma - \gamma e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} + (k\Delta\tau - \gamma) e^{\frac{2t}{\tau_k}} + \gamma e^{\frac{2t - \Delta\tau}{\tau_k}} \right\}
\end{aligned} \tag{B8}$$

因此，可得

$$\begin{aligned}
\langle x^2(t) \rangle &= \frac{k_B T}{k} + \frac{vf_A^2}{k^3} e^{-\frac{2t}{\tau_k}} \left\{ \Theta(\Delta\tau - t) \left[2k(t - \Delta\tau) e^{\frac{t}{\tau_k}} + \gamma e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} - \gamma e^{\frac{2t - \Delta\tau}{\tau_k}} \right] \right. \\
&\quad \left. + k\Delta\tau + \gamma - \gamma e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} + (k\Delta\tau - \gamma) e^{\frac{2t}{\tau_k}} + \gamma e^{\frac{2t - \Delta\tau}{\tau_k}} \right\}
\end{aligned} \tag{B9}$$

进而得到粒子的均方位移为

$$\begin{aligned}
\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle &= \langle x_0^2 \rangle - 2\langle x(t)x(0) \rangle + \langle x^2(t) \rangle \\
&= \frac{k_B T}{k} - \frac{2k_B T}{k} e^{-\frac{t}{\tau_k}} + \frac{k_B T}{k} + \frac{vf_A^2}{k^3} e^{-\frac{2t}{\tau_k}} \left\{ \Theta(\Delta\tau - t) \left[2k(t - \Delta\tau) e^{\frac{t}{\tau_k}} + \gamma e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} - \gamma e^{\frac{2t - \Delta\tau}{\tau_k}} \right] \right. \\
&\quad \left. + k\Delta\tau + \gamma - \gamma e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} + (k\Delta\tau - \gamma) e^{\frac{2t}{\tau_k}} + \gamma e^{\frac{2t - \Delta\tau}{\tau_k}} \right\} \\
&= \frac{2k_B T}{k} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_k}} \right) + \frac{vf_A^2}{k^3} e^{-\frac{2t}{\tau_k}} \left\{ \Theta(\Delta\tau - t) \left[2k(t - \Delta\tau) e^{\frac{t}{\tau_k}} + \gamma e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} - \gamma e^{\frac{2t - \Delta\tau}{\tau_k}} \right] \right. \\
&\quad \left. + k\Delta\tau + \gamma - \gamma e^{\frac{\Delta\tau}{\tau_k}} + (k\Delta\tau - \gamma) e^{\frac{2t}{\tau_k}} + \gamma e^{\frac{2t - \Delta\tau}{\tau_k}} \right\}
\end{aligned} \tag{B10}$$

参考文献

- [1] Bechinger C, Di Leonardo R, Löwen H, Reichhardt C, Volpe G, Volpe G 2016 *Rev. Mod. Phys.* **88** 045006

- [2] Zhang H P, Shi X Q, Yang M C 2021 *Physics* **51** 217 (in Chinese) [张何朋, 施夏清, 杨明成 2021 物理 **51** 217]
- [3] Berner J, Müller B, Gomez-Solano J R, Krüger M, Bechinger C 2018 *Nat. Commun.* **9** 999
- [4] Chen J X, Yang M C 2017 *Chin. Sci. Bull.* **62** 209 (in Chinese) [陈江星, 杨明成 2017 科学通报 **62** 209]
- [5] Wilson L G, Martinez V A, Schwarz-Linek J, Tailleur J, Bryant G, Pusey P N, Poon W C K 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 018101
- [6] Miño G L, Dunstan J, Rousselet A, Clément E, Soto R 2013 *J. Fluid Mech.* **729** 423
- [7] Kurtuldu H, Guasto J S, Johnson K A, Gollub J P 2011 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **108** 10391
- [8] Underhill P T, Hernandez-Ortiz J P, Graham M D 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 248101
- [9] Ning L H, Zhang X, Yang M C, Zheng N, Liu P, Peng Y 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 158202 (in Chinese) [宁鲁慧, 张雪, 杨明成, 郑宁, 刘鹏, 彭毅 2024 物理学报 **73** 158202]
- [10] Liu Y, Li D, Feng W, Luo H, Liu Y, Jing G 2025 *New J. Phys.* **27** 033023
- [11] Zhang R, Mozaffari A, de Pablo J 2021 *Nat. Rev. Mater.* **6** 437
- [12] Mussler M, Rafai S, Peyla P, Wagner C 2013 *Europhys. Lett.* **101** 54004
- [13] Goswami K, Cherstvy A G, Godec A, Metzler R 2024 *Phys. Rev. E* **110** 044609
- [14] Perakis F, Kawasaki T, Saito S 2026 *Phys. Rev. Res.* **8** L012015
- [15] Bamb R D, Walimbe P C, Kulkarni S D, Kulkarni P S 2025 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27** 6212
- [16] Romano J, Gambassi A 2026 *Phys. Rev. Lett.* **136** 107102
- [17] Wu X L, Libchaber A 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 3017
- [18] Mino G, Mallouk T E, Darnige T, Hoyos M, Dauchet J, Dunstan J, Soto R, Wang Y, Rousselet A, Clement E 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 048102
- [19] Chen X, Yan Y 2024 *Materials* **17** 5013
- [20] Patteson A E, Gopinath A, Purohit P K, Arratia P E 2016 *Soft Matter* **12** 2365
- [21] Gomez-Solano J R, Blokhuis A, Bechinger C 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 138301

- [22] López H M, Gachelin J, Douarche C, Auradou H, Clément E 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 028301
- [23] Argun A, Moradi A R, Pinçe E, Bağcı G B, Imperato A, Volpe G 2016 *Phys. Rev. E* **94** 062150
- [24] Krishnamurthy S, Ghosh S, Chatterji D, Ganapathy R, Sood A K 2016 *Nat. Phys.* **12** 1134
- [25] Großmann R, Bort L S, Moldenhawer T, Stange M, Panah S S, Metzler R, Beta C 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 088301
- [26] Feng M, Hou Z 2017 *Soft Matter* **13** 4464
- [27] Reichert J, Granz L F, Voigtmann T 2021 *Eur. Phys. J. E* **44** 27
- [28] Feng M, Hou Z 2021 *arXiv:2110.00279* [cond-mat]
- [29] Fier G, Hansmann D, Buceta R C 2018 *Soft Matter* **14** 3945
- [30] Ye S, Liu P, Ye F, Chen K, Yang M 2020 *Soft Matter* **16** 4655
- [31] Kim Y, Kim W K, Jeon J H 2024 *Macromolecules* **57** 7735
- [32] Sandev T, Kocarev L, Metzler R 2026 *Chaos* **36** 010401
- [33] Wang C, Jiang H 2020 *J. Chem. Phys.* **152** 184907
- [34] Chen J X, Chen Y G, Kapral R 2018 *Adv. Sci.* **5** 1800028
- [35] Chen J X, Hu J Q, Kapral R 2024 *Adv. Sci.* **11** 2305695
- [36] Chaki S, Chakrabarti R 2019 *Physica A* **530** 121574
- [37] Xu X F, Zhang D, Cheng Y, Liu F X, Wei W, Liu Z J 2022 *J. Eng. Thermophys.* **43** 1041 (in Chinese) [许晓飞, 张达, 程阳, 刘凤霞, 魏炜, 刘志军 2022 工程热物理学报 **43** 1041]
- [38] Maggi C, Paoluzzi M, Pellicciotta N, Lepore A, Angelani L, Di Leonardo R 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 238303
- [39] Solon A, Horowitz J M 2022 *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **55** 184002
- [40] Shea J, Jung G, Schmid F 2022 *Soft Matter* **18** 6965
- [41] Padmanabha P, Busiello D M, Maritan A, Gupta D 2023 *Phys. Rev. E* **107** 014129
- [42] Liu C, Fu X, Liu L, Ren X, Chau C K L, Li S, Xiang L, Zeng H, Chen G, Tang L-H, Lenz P, Cui X, Huang W, Hwa T, Huang J-D 2011 *Science* **334** 238

- [43] Tyska M J, Warshaw D M 2002 *Cell Motil. Cytoskeleton* **51** 1
- [44] Goswami K, Chaki S, Chakrabarti R 2022 *J. Phys. A: Math. Theor.* **55** 423002
- [45] Sevilla F J, Arzola A V, Cital E P 2019 *Phys. Rev. E* **99** 012145
- [46] Fodor É, Hayakawa H, Tailleur J, van Wijland F 2018 *Phys. Rev. E* **98** 062610
- [47] Meng L, Jin Y, Guan Y, Xu J, Lin J 2023 *Phys. Rev. Res.* **5** L032018

Activity effect on the diffusion dynamics of a passive tracer in bath of run-and-tumble particles^{*}

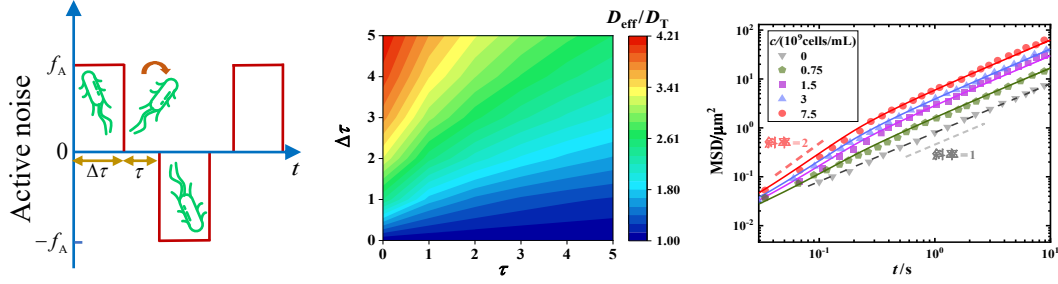
Li Jing Zhao Huarui Tian Ranran Bian Yukun[†]

(School of Science, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China)

Abstract

Active matter is a novel class of non-equilibrium systems composed of self-propelled particles such as swarming bacteria and motile colloids. Understanding the diffusion of a passive tracer in active fluids is key to **comprehending** numerous fundamental biological processes. However, active fluids exhibit exotic properties different from conventional equilibrium materials. In this study, we explore from a theoretical perspective the intriguing enhanced translational diffusion, orders of magnitude stronger than its intrinsic Brownian motion. A theoretical framework based on Langevin equation supplemented with an additional noise term apart from the thermal noise is **adopted** to study the effects of active fluctuations on **particle** diffusion. The second noise is referred to as “active noise” arising from the **persistent** motion of active particles, which is represented by a series of random pulses and described as shot noise for characterizing the run-and-tumble strategy of bacterial motion. The Smoluchowski equation is derived from the Langevin-like model, which allows us to analyze the **non-equilibrium** evolution of the positions distribution of tracer. Within this approach, the explicit expressions for the mean-square displacement (MSD) and the effective diffusion coefficient D_{eff} are presented. Our results show how the active noise boosts the mobility of the tracer in terms of the magnitude of active force f_A , the duration time $\Delta\tau$ and the average interval time τ . It is found that in the presence of active particles, the tracer exhibits short-time superdiffusion and long-time enhanced diffusion. These **anomalous** diffusion behaviors become more significant as the augmentation of f_A and $\Delta\tau$, and the superdiffusion factor μ can reach approximately 2. When τ is decreased while f_A and $\Delta\tau$ are fixed, the number of active kicks per unit time increases, so the MSD and D_{eff} of tracer increases. The enhanced diffusion regime is identified in the parameter space diagram. More importantly, we apply our theory to analyze the dynamics of polystyrene and silica bead in suspensions of *Escherichia coli*. The model proposed in the work successfully reproduces the experimental results with

reasonable fitting parameters. Such good agreement demonstrate the validity of our theory which has appropriately addressed the subtle roles of activity to the relevant dynamics.



Keywords: active system; Langevin equation; non-equilibrium fluctuation; diffusion dynamics

PACS: 05.45.-a, 87.10.Mn, 87.15.Vv, 87.18.Tt

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12165011), the Natural Science Foundation of Gansu Province, China (Grant No. 21JR7RA215).

† Corresponding author.E-mail: bianyk@lut.edu.cn
The first author.E-mail: lj15386940109@126.com