# 活性粒子的随机Stirling热机的性能分析

BigChaoor

2022.06.13

## 1 报告梗概

本报告主要围绕Kumari等人在2020年对微观Stirling热机的研究工作[4]，将模型翻译成布朗运动驱动的随机微分方程 (SDE)，给出了论文中某些公式或结论的详细推导过程，也考虑了无活性粒子(没有粒子额外造成的噪声影响)的准静态微观Stirling热机的效率，此外，对连接在Stirling热机上的飞轮模型，给出了位置函数的解析表达式，并用Euler-Maruyama方法做了数值模拟，数值实验结果是和论文[4]中的结果是相符的。

## 2 对Kumari等人工作的介绍

### 2.1 背景简述

近二十年来，随机热力学一直是非平衡热力学和统计力学的基石，它规定了在小系统(尺寸$\leq 1\mu m$)上进行的单个实验的热力学量的定义，如功、热或熵。由于在如此小的规模下驱动机器需要相应的微观发动机，人们投入了大量的努力试图理解小型发动机的热力学。

Schmeidl和Seifert [7] 于2008年构想了一种随机Carnot热机，它被模拟成一个被困在谐波势阱中的布朗粒子，阱的刚度随时间缓慢变化，以模拟Carnot循环的等温膨胀和压缩过程，整个过程中没有热量传递。Blickle和Bechinger [2] 实验实现了介观粒子的Stirling热机，其中困在谐波势阱中的粒子受限于势阱刚度的准静态变化的影响，从而模拟了Stirling发动机的等温臂，等容臂是用浴液温度的瞬时变化来模拟的。

活性浴液由活性粒子组成，这些粒子可能像细菌一样生活，也可能像Janus粒子那样人工制备[1, 5]。近年来，Krishnamurthy等[3]的实验工作和Saha等[6]的理论工作对在细菌浴(活性浴液)中由被动胶体粒子(非活性粒子)形成的发动机的性能进行了探索。这两项工作都表明，在适当的参数范围内，发动机的效率可以超过利用热水浴的效率。

### 2.2 基本模型

Kumari等专家的研究基于[2]中的模型，所研究的系统是一个活性Ornstein-Uhlenbeck粒子浸没在热水浴中，其温度可取$T_h$或$T_c$值($T_h > T_c$)，粒子的活性和热浴的温度是周期性定时

调节的。其基本原理是一个循环分成四步：第一步是等温膨胀(温度为$T_h$，通过降低势阱刚度来实现)；第二步是等容放热，温度突降；第三步是等温压缩(温度为$T_c$，通过增大势阱刚度来实现)；第四步等容吸热，温度骤增至$T_h$。第一个周期$[0,\tau]$内的具体数学模型如下：

1. $0 \le t < \tau/2$，粒子处于高温度为$T_h$的热浴中，其活性可以忽略不计，看作非活性粒子，刚度常数$k_e(t) = k_0(1 - t/\tau)$随时间降低，因此粒子运动的体积膨胀，位置变化遵循Langevin方程

$$\gamma \dot{x} = -k_e(t)x + \sqrt{D_h}\xi, \tag{1}$$

其中$D_h = 2\gamma k_B T_h$，$k_B$是Boltzmann常数，$\xi$是零均值高斯分布的白噪声，满足$\langle \xi(t)\xi(t')\rangle = \delta(t-t')$。

2. 第二步，温度骤降为$T_c$，刚度常数保持为$k_0/2$。

3. $\tau/2 \le t < \tau$，粒子与温度为$T_h$的冷浴接触，变成活性，因此除浴液的白噪声外，粒子运动会引发相关噪声，从而对功的提取产生较大影响，但不同于[6]，这里不忽略浴液的白噪声的影响，此时粒子运动遵循的Langevin方程变为

$$\begin{aligned} \gamma \dot{x} &= -k_c(t)x + \sqrt{D_c}\xi + \sqrt{D_\eta/\tau_\eta}\eta, \\ \tau_\eta \dot{\eta} &= -\eta + \sqrt{2\tau_\eta}\xi_\eta, \end{aligned} \tag{2}$$

其中$\xi_\eta$是另一独立于$\xi$的均值为零的高斯白噪声，$\eta$是活性粒子引发的高斯分布指数相关的噪声，满足$\eta(0) = \delta(0)$，时间相关函数

$$\langle \eta(t)\eta(t')\rangle = e^{-|t-t'|/\tau_\eta}, \tag{3}$$

$\eta$的初始分布是一个$\eta = 0$ 处的$\delta$函数。刚度常数$k_c(t) = k_0 t/\tau$随时间增大，这是等温压缩，当时间到$\tau$时，刚度常数变回$k_0$。

4. 最后，第四步是等容吸热，温度突然升高到$T_h$，从而完成整个Stirling循环。

### 2.3 功的提取和效率

文章的第四部分考虑了基于模型(1)-(2)的Stirling热机的功。直接给出了粒子的位置$x(t)$在等温膨胀和压缩阶段的解析表达式分别为

$$x(t) = x_0 e^{-I_e(t)} + \frac{\sqrt{D_h}}{\gamma} e^{-I_e(t)} \int_0^t \xi(t') e^{I_e(t')} dt',\ 0 \le t < \frac{\tau}{2}, \tag{4}$$

$$x(t) = x(\tau/2) e^{-I_e(t)} + \frac{e^{-I_c(t)}}{\gamma} \int_{\frac{\tau}{2}}^t \left( \sqrt{D_c}\xi(t') + \sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta}}\eta(t') \right) e^{I_c(t')} dt',\ \frac{\tau}{2} \le t < \tau, \tag{5}$$

其中$I_e(t) = \int_0^t \frac{k_e(t')}{\gamma} dt'$，$I_c(t) = \int_{\frac{\tau}{2}}^t \frac{k_c(t')}{\gamma} dt'$ (**文章这里取的积分下限是0，但经推导我认为应**

**该是$\frac{\tau}{2}$，见第3部分(20)式**)，以及粒子的位置方差$\sigma_e(t)=\left\langle x^2(t)\right\rangle|_{0<t\le\frac{\tau}{2}}$和$\sigma_c(t)=\left\langle x^2(t)\right\rangle|_{\frac{\tau}{2}<t\le\tau}$所满足的动力学方程

$$\gamma\dot{\sigma}_e(t)=-2k_e(t)\sigma_e(t)+2\sqrt{D_h}\left\langle\xi(t)x(t)\right\rangle, \tag{6}$$

$$\gamma\dot{\sigma}_c(t)=-2k_c(t)\sigma_c(t)+2\sqrt{D_c}\left\langle\xi(t)x(t)\right\rangle+\sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta}}\left\langle\eta(t)x(t)\right\rangle, \tag{7}$$

从$\langle x(\tau/2)\xi(t)\rangle=0=\langle x(\tau/2)\eta(t)\rangle$ $(t>\frac{\tau}{2})$出发，得到

$$\langle\xi(t)x(t)\rangle=\begin{cases}\frac{\sqrt{D_h}}{2\gamma},\ 0<t\le\frac{\tau}{2},\\ \frac{\sqrt{D_c}}{2\gamma},\ \frac{\tau}{2}<t\le\tau,\end{cases} \tag{8}$$

原文中此处写成了$\sqrt{D_h}/2\gamma$，感觉这样写不是很好。由方程(5)得到

$$\langle\eta(t)x(t)\rangle=\sqrt{\frac{\pi\tau D_\eta}{2k_0\gamma\tau_\eta}}\exp\left(-\frac{(k_0t\tau_\eta+\gamma\tau)^2}{2k_0\gamma\tau\tau_\eta^2}\right)\left\{\mathrm{erfi}\left(\frac{k_0t\tau_\eta+\gamma\tau}{\tau_\eta\sqrt{2k_0\gamma\tau}}\right)-\mathrm{erfi}\left(\frac{\sqrt{\tau}(k_0\tau_\eta+2\gamma)}{2\tau_\eta\sqrt{2k_0\gamma}}\right)\right\} \tag{9}$$

其中$\mathrm{erfi}(z)\equiv-i\mathrm{erf}(iz)$是虚误差函数。限制粒子的初始位置固定在原点，文中得到了粒子位置方差的解析表达式

$$\sigma_e(t)=\left(\frac{D_h}{2\gamma^{3/2}}\sqrt{\frac{\pi\tau}{k_0}}\right)e^{\frac{k_0(t-\tau)^2}{\gamma\tau}}\left[\mathrm{erf}\left(\sqrt{\frac{k_0\tau}{\gamma}}\right)-\mathrm{erf}\left(\sqrt{\frac{k_0}{\gamma\tau}}(\tau-t)\right)\right], \tag{10}$$

$$\begin{aligned}\sigma_c(t)=&\frac{D_h}{2\gamma^{3/2}}\sqrt{\frac{\pi\tau}{k_0}}e^{-\alpha_1(t)+\frac{k_0\tau}{4\gamma}}\left(\mathrm{erf}\left(\sqrt{\frac{k_0\tau}{\gamma}}\right)-\mathrm{erf}\left(\sqrt{\frac{k_0\tau}{4\gamma}}\right)\right)\\&+e^{-\alpha_1(t)}\int_{\frac{\tau}{2}}^{t}e^{\alpha_1(s)}\left(\frac{D_c}{\gamma^2}+\kappa e^{-\frac{\alpha_1(s)}{2}-\frac{s}{\tau_\eta}}\left[\mathrm{erfi}\left(\alpha_2(s)\right)-\mathrm{erfi}\left(\alpha_2(\frac{\tau}{2})\right)\right]\right)ds\end{aligned} \tag{11}$$

其中

$$\alpha_1(t)=\frac{k_0\left(t^2-\left(\frac{\tau}{2}\right)^2\right)}{\gamma\tau},\ \alpha_2(t)=\frac{k_0t\tau_\eta+\gamma\tau}{\tau_\eta\sqrt{2k_0\gamma\tau}},\ \kappa=\frac{D_\eta}{\gamma^{3/2}\tau_\eta}\sqrt{\frac{\pi\tau}{2k_0}}\exp\left(\frac{k_0\tau}{8\gamma}-\frac{\gamma\tau}{2k_0\tau_\eta^2}\right).$$

根据随机热力学中的定义，一个周期内的平均功可以通过如下公式计算，

$$\langle W\rangle=\frac{1}{2}\int_0^{\frac{\tau}{2}}\dot{k}_e(t)\sigma_e(t)dt+\frac{1}{2}\int_{\frac{\tau}{2}}^{\tau}\dot{k}_c(t)\sigma_c(t)dt. \tag{12}$$

论文第五部分说明了活性粒子的噪声$\eta$对Stirling发动机的效率有正面影响：如下图所示(来自于论文中很有启发性的图5和6)，有活性粒子噪声的效率高于被动粒子情形；固定热浴与冷

浴的噪声强度，发动机效率

$$\eta_s = \frac{-\langle W\rangle}{-\langle W\rangle + \langle \Delta E\rangle}$$

随着活性粒子引发的噪声增强而增大；在活性粒子的噪声$\eta(t)$存在的情况下，如果增大热浴的噪声强度$D_h$，发动机效率反而会降低，当$D_h/D_c$很大时，效率逐渐趋于一个定值。

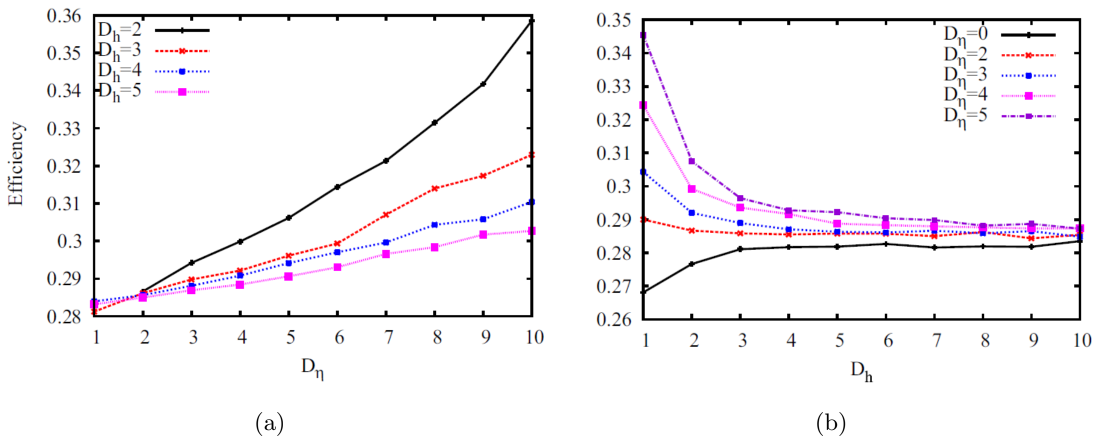



图 1: (a)：效率随粒子活性噪声强度的变化，固定参数值为$k_0 = 10$， $\tau_\eta = 1$，$D_c = 0.1$。(b)：效率随着热浴噪声强度的变化，固定参数值为$k_0 = 10$，$\tau_\eta = 1$，$D_c = 0.1$。

### 2.4 热机驱动的飞轮

论文第7部分考虑了与Stirling发动机相连的飞轮模型

$$\begin{cases} \gamma\dot{x}_1 = -\left(k_e(t) + K'\right)x_1 + K'x_2 + \sqrt{D_h}\xi, \\ \gamma\dot{x}_2 = K'x_1 - (K + K')x_2 + \sqrt{D_h}\xi,\ 0 < t \leq \frac{\tau}{2}; \end{cases} \tag{13}$$

$$\begin{cases} \gamma\dot{x}_1 = -\left(k_c(t) + K'\right)x_1 + K'x_2 + \sqrt{D_c}\xi + \sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta}}\eta, \\ \gamma\dot{x}_2 = K'x_1 - (K + K')x_2 + \sqrt{D_c}\xi,\ \frac{\tau}{2} < t \leq \tau, \end{cases} \tag{14}$$

其中$x_2$表示飞轮粒子的位置函数，$K$是连接弹簧的刚度常数，$K'$是飞轮粒子所在的谐波势阱的刚度常数。文中对耦合系统(13)-(14)进行了数值演化，并绘制出有无活性粒子噪声的飞轮位置的方差函数图像，显示出有活性粒子噪声的情况下飞轮粒子的位移方差更大，说明输出的功也更大。

## 3 个人的分析和补充

分析了文章中某些公式(报告第二部分中列出的)的详细推证过程，以及考虑了文中没展示的有无活性噪声的热机效率的对比，按论文中的参数做了数值模拟。

### 3.1 一些结论的详细推证过程

按照惯例记法，将模型方程写成一般的布朗运动驱动的随机微分方程。高斯白噪声可以视为布朗运动的形式导数，记方程(1)-(2)中的高斯白噪声$\xi := \frac{dB(t)}{dt}$，$\xi_\eta := \frac{dB_\eta(t)}{dt}$，其中$B(t)$和$B_\eta(t)$是定义于完备概率空间上的独立的标准布朗运动，那么模型方程(1)和(2)可以被写成等价的Itô随机微分方程

$$dx(t) = -\frac{k_e(t)}{\gamma}x(t)dt + \frac{\sqrt{D_h}}{\gamma}dB(t), \tag{15}$$

和

$$dx(t) = -\frac{k_c(t)}{\gamma}x(t)dt + \frac{\sqrt{D_c}}{\gamma}dB(t) + \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta}}\eta(t)dt, \tag{16}$$

$$d\eta(t) = -\frac{1}{\tau_\eta}\eta(t)dt + \sqrt{\frac{2}{\tau_\eta}}dB_\eta(t). \tag{17}$$

**等式(3)的分析**：$\eta(t)$所满足的随机微分方程(15)是一个常系数的Langvien方程，可以求出它的解析表达式为

$$\eta(t) = e^{-\frac{1}{\tau_\eta}t}\eta(0) + \sqrt{\frac{2}{\tau_\eta}}e^{-\frac{1}{\tau_\eta}t}\int_0^t e^{\frac{1}{\tau_\eta}s}dB_\eta(s) = \sqrt{\frac{2}{\tau_\eta}}e^{-\frac{1}{\tau_\eta}t}\int_0^t e^{\frac{1}{\tau_\eta}s}dB_\eta(s),$$

不妨设$t' < t$，那么

$$\eta(t)\eta(t') = \frac{2}{\tau_\eta}e^{-\frac{1}{\tau_\eta}(t+t')}\left(\int_0^{t'} e^{\frac{1}{\tau_\eta}s}dB_\eta(s) + \int_{t'}^t e^{\frac{1}{\tau_\eta}s}dB_\eta(s)\right)\int_0^{t'} e^{\frac{1}{\tau_\eta}s}dB_\eta(s),$$

根据$\left\langle \int_{t'}^t e^{\frac{1}{\tau_\eta}s}dB_\eta(s)\int_0^{t'} e^{\frac{1}{\tau_\eta}s}dB_\eta(s)\right\rangle = 0$和伊藤等距公式，对上式取期望可得

$$\langle\eta(t)\eta(t')\rangle = \frac{2}{\tau_\eta}e^{-\frac{1}{\tau_\eta}(t+t')}\int_0^{t'} e^{\frac{2}{\tau_\eta}s}ds = e^{-\frac{1}{\tau_\eta}(t-t')} - e^{-\frac{1}{\tau_\eta}(t+t')}, \tag{18}$$

比论文中的结果即(3)式多了$-e^{-\frac{1}{\tau_\eta}(t+t')}$这一项，经过几次计算检验没有发现问题，是否推导思路有问题，后面的相关计算还是基于(3)式。

**解析表达式(4)的推导**：令$f(t,x) = e^{I_e(t)}x$，那么

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{k_e(t)}{\gamma}e^{I_e(t)}x, \quad \frac{\partial f}{\partial x} = e^{I_e(t)}, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0.$$

根据方程(15)和Itô引理，

$$\begin{aligned} df(t,x(t)) &= \frac{\partial f}{\partial t}(t,x(t))dt + \frac{\partial f}{\partial x}(t,x(t))dx(t) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(t,x(t))\frac{\sqrt{D_h}}{\gamma^2}dt \\ &= \frac{k_e(t)}{\gamma}e^{I_e(t)}x(t)dt + e^{I_e(t)}\left(-\frac{k_e(t)}{\gamma}x(t)dt + \frac{D_h}{\gamma}dB(t)\right) \\ &= \frac{\sqrt{D_h}}{\gamma}e^{I_e(t)}dB(t), \end{aligned}$$

因此

$$e^{I_e(t)}x(t) = x_0 + \frac{\sqrt{D_h}}{\gamma}\int_0^t e^{I_e(t)}dB(t)\ (0 < t \le \frac{\tau}{2}), \tag{19}$$

两边同时乘以$e^{-I_e(t)}$即得(4)式。

**解析表达式(5)的推导：**求解方法完全类似(4)的推导，令$g(t,x) = e^{I_c(t)}x$，则有

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{k_c(t)}{\gamma}e^{I_c(t)}x, \quad \frac{\partial g}{\partial x} = e^{I_c(t)}, \quad \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} = 0.$$

由方程(16)和Itô引理，

$$\begin{aligned} dg(t,x(t)) &= \frac{\partial g}{\partial t}(t,x(t))dt + \frac{\partial g}{\partial x}(t,x(t))dx(t) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 g}{\partial x^2}(t,x(t))\frac{D_c}{\gamma^2}dt \\ &= \frac{k_c(t)}{\gamma}e^{I_c(t)}x(t)dt + e^{I_c(t)}\left(-\frac{k_c(t)}{\gamma}x(t)dt + \frac{\sqrt{D_c}}{\gamma}dB(t) + \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta}}\ \eta(t)dt\right) \\ &= \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta}}e^{I_c(t)}\eta(t)dt + \frac{\sqrt{D_c}}{\gamma}e^{I_c(t)}dB(t), \end{aligned}$$

因此

$$e^{I_c(t)}x(t) = x(\tau/2) + \frac{1}{\gamma}\int_{\frac{\tau}{2}}^t e^{I_c(t')}\left(\sqrt{D_c}dB(t) + \sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta}}\eta(t')dt\right)\ (\frac{\tau}{2} < t \le \tau), \tag{20}$$

两端同时乘以$e^{-I_c(t)}$得到解析式(5)。

**位置方差所满足的方程(6)和(7)的推证：**当$0 < t \le \frac{\tau}{2}$，由Itô乘积公式和方程(15)，可得

$$\begin{aligned} dx^2(t) &= 2x(t)dx(t) + (dx(t))^2 \\ &= -\frac{2k_e(t)}{\gamma}x^2(t)dt + \frac{2\sqrt{D_h}}{\gamma}x(t)dB(t) + \frac{D_h}{\gamma^2}dt \end{aligned}$$

同时除以$dt$乘以$\gamma$并取期望，得到位置方差$\sigma_e(t)$所满足的方程

$$\gamma\dot{\sigma}_e(t) = -2k_e(t)\sigma_e(t) + \frac{D_h}{\gamma}, \tag{21}$$

其中右边第二项消失是因为Itô型随机积分的期望为0。将(8)式代入(6)式立即发现，上述常微分方程(21)与(6)是等价的。类似地，当$\frac{\tau}{2} < t \le \tau$，应用Itô乘积公式得到

$$\begin{aligned} dx^2(t) &= 2x(t)dx(t) + (dx(t))^2 \\ &= -\frac{2k_c(t)}{\gamma}x^2(t)dt + \frac{2\sqrt{D_c}}{\gamma}x(t)dB(t) + \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta}}\eta(t)x(t)dt + \frac{D_c}{\gamma^2}dt, \end{aligned}$$

同样的，等式两边除以$dt$乘以$\gamma$并取期望得到

$$\gamma\dot{\sigma}_c(t) = -2k_c(t)\sigma_c(t) + \sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta}}\langle\eta(t)x(t)\rangle + \frac{D_c}{\gamma}, \tag{22}$$

等价于方程(7)。

**接着来推导等式(9)**：从SDEs (16)和(17)出发，依然利用Itô引理或随机微分的乘积公式可得

$$\begin{aligned} d(\eta(t)x(t)) &= \eta(t)dx(t) + x(t)d\eta(t) + d\eta(t)dx(t) \\ &= -\frac{\tau_\eta k_c(t) + \gamma}{\tau_\eta\gamma}\eta(t)x(t)dt + \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta}}\eta^2(t)dt \\ &\quad + \frac{\sqrt{D_c}}{\gamma}\eta(t)dB(t) + \sqrt{\frac{2}{\tau_\eta}}x(t)dB_\eta(t) + \sqrt{\frac{2D_c}{\tau_\eta\gamma^2}}dB(t)dB_\eta(t), \end{aligned}$$

两边同时取期望，并利用(3)式得

$$\begin{cases} d\langle\eta(t)x(t)\rangle = -\left(\frac{k_c(t)}{\gamma} + \frac{1}{\tau_\eta}\right)\langle\eta(t)x(t)\rangle dt + \sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta\gamma^2}}dt, \ \frac{\tau}{2} < t \le \tau, \\ \left\langle\eta(\frac{\tau}{2})x(\frac{\tau}{2})\right\rangle = 0, \end{cases} \tag{23}$$

由此便归结为常微分方程(23)的求解。用常数变易法求解，令$c(t) = -\left(\frac{k_c(s)}{\gamma} + \frac{1}{\tau_\eta}\right) = -\left(\frac{k_0 s}{\gamma\tau} + \frac{1}{\tau_\eta}\right)$，预设解析解为$\langle\eta(t)x(t)\rangle = h(t)e^{\int_{\frac{\tau}{2}}^{t} c(s)ds}$，代入方程(23)得

$$h'(t)e^{-\int_{\frac{\tau}{2}}^{t} c(s)ds} = \sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta\gamma^2}},$$

所以$h(t)=\sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta\gamma^2}}\int_{\frac{\tau}{2}}^{t}e^{-\int_{\frac{\tau}{2}}^{t'}c(s)ds}dt'+c$，其中$c$是积分常数，

$$\langle\eta(t)x(t)\rangle=\left[\sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta\gamma^2}}\int_{\frac{\tau}{2}}^{t}e^{-\int_{\frac{\tau}{2}}^{t'}c(s)ds}dt'+c\right]e^{\int_{\frac{\tau}{2}}^{t}c(s)ds},$$

由初始条件$\langle\eta(\frac{\tau}{2})x(\frac{\tau}{2})\rangle=0$确定积分常数$c=0$，且$\int_{\frac{\tau}{2}}^{t}c(s)ds=-\left(\sqrt{\frac{k_0}{2\gamma\tau}}t+\sqrt{\frac{\gamma\tau}{2k_0\tau_\eta^2}}\right)^2+C$，其中$C$是一个与时间$t$无关的常数，因此

$$\begin{aligned}\langle\eta(t)x(t)\rangle&=\sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta\gamma^2}}exp\left\{-\left(\sqrt{\frac{k_0}{2\gamma\tau}}t+\sqrt{\frac{\gamma\tau}{2k_0\tau_\eta^2}}\right)^2+C\right\}\int_{\frac{\tau}{2}}^{t}exp\left\{\left(\sqrt{\frac{k_0}{2\gamma\tau}}t'+\sqrt{\frac{\gamma\tau}{2k_0\tau_\eta^2}}\right)^2-C\right\}dt'\\&=\sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta\gamma^2}}exp\left[-\frac{(k_0\tau_\eta t+\gamma\tau)^2}{2k_0\gamma\tau\tau_\eta^2}\right]\int_{\frac{\tau}{2}}^{t}exp\left\{\left(\sqrt{\frac{k_0}{2\gamma\tau}}s+\sqrt{\frac{\gamma\tau}{2k_0\tau_\eta^2}}\right)^2\right\}ds,\end{aligned}$$

做变量代换$-iz=\sqrt{\frac{k_0}{2\gamma\tau}}s+\sqrt{\frac{\gamma\tau}{2k_0\tau_\eta^2}}$，则上式中的积分下、上限分别变为

$$\begin{cases}-iz_1=\sqrt{\frac{k_0}{2\gamma\tau}}\frac{\tau}{2}+\sqrt{\frac{\gamma\tau}{2k_0\tau_\eta^2}}=\frac{\sqrt{\tau}(k_0\tau_\eta+2\gamma)}{2\tau_\eta\sqrt{2k_0\gamma}},\\-iz_2=\sqrt{\frac{k_0}{2\gamma\tau}}t+\sqrt{\frac{\gamma\tau}{2k_0\tau_\eta^2}}=\frac{k_0\tau_\eta t+\gamma\tau}{\tau_\eta\sqrt{2k_0\gamma\tau}},\end{cases}$$

我们有

$$\begin{aligned}\langle\eta(t)x(t)\rangle&=\sqrt{\frac{\pi\tau D_\eta}{2k_0\gamma\tau_\eta}}exp\left[-\frac{(k_0\tau_\eta t+\gamma\tau)^2}{2k_0\gamma\tau\tau_\eta^2}\right]\times(-i)\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{i\frac{\sqrt{\tau}(k_0\tau_\eta+2\gamma)}{2\tau_\eta\sqrt{2k_0\gamma}}}^{i\frac{k_0\tau_\eta t+\gamma\tau}{\tau_\eta\sqrt{2k_0\gamma\tau}}}e^{-z^2}dz,\\&=\sqrt{\frac{\pi\tau D_\eta}{2k_0\gamma\tau_\eta}}exp\left[-\frac{(k_0\tau_\eta t+\gamma\tau)^2}{2k_0\gamma\tau\tau_\eta^2}\right]\left[-i\ \mathrm{erf}\left(i\frac{k_0\tau_\eta t+\gamma\tau}{\tau_\eta\sqrt{2k_0\gamma\tau}}\right)+i\ \mathrm{erf}\left(i\frac{\sqrt{\tau}(k_0\tau_\eta+2\gamma)}{2\tau_\eta\sqrt{2k_0\gamma}}\right)\right],\\&=\sqrt{\frac{\pi\tau D_\eta}{2k_0\gamma\tau_\eta}}exp\left[-\frac{(k_0\tau_\eta t+\gamma\tau)^2}{2k_0\gamma\tau\tau_\eta^2}\right]\left[\mathrm{erfi}\left(\frac{k_0\tau_\eta t+\gamma\tau}{\tau_\eta\sqrt{2k_0\gamma\tau}}\right)-\mathrm{erfi}\left(\frac{\sqrt{\tau}(k_0\tau_\eta+2\gamma)}{2\tau_\eta\sqrt{2k_0\gamma}}\right)\right],\end{aligned}$$

此即(9)式。

完全类似地，运用常数变易法求解微分方程(21)和(22)，可得到位置方差$\sigma_e(t)$和$\sigma_c(t)$的解析表达式(10)和(11)。第一个周期的平均功

$$\begin{aligned}\langle W\rangle&=\frac{1}{2}\int_0^{\frac{\tau}{2}}\dot{k}_e(t)\sigma_e(t)dt+\frac{1}{2}\int_{\frac{\tau}{2}}^{\tau}\dot{k}_c(t)\sigma_c(t)dt\\&=\frac{k_0}{2\tau}\left(\int_0^{\frac{\tau}{2}}\sigma_e(t)dt-\int_{\frac{\tau}{2}}^{\tau}\sigma_c(t)dt\right).\end{aligned}\tag{24}$$

### 3.2 无活性粒子的准静态Stirling热机的效率

另外，我们再考虑在无粒子活性的情况下准静态的Stirling发动机的效率，即在$\tau \longrightarrow +\infty$时的准静态驱动，文中附录A推证了其效率的计算公式

$$\eta_{stirling} = \frac{\eta_c}{1+\eta_c\left[\ln\left(\frac{k_{max}}{k_{min}}\right)\right]^{-1}},$$

其中$\eta_c = 1-\frac{T_c}{T_h}$是Carnot热机的效率。将$k_{max}=k_0, k_{min}=k_0/2, \frac{T_c}{T_h}=\frac{D_c}{D_h}$代入得到

$$\eta_{stirling} = \frac{(T_h-T_c)\ln 2}{(1+\ln 2)T_h-T_c} = \frac{(D_h-D_c)\ln 2}{(1+\ln 2)D_h-D_c},$$

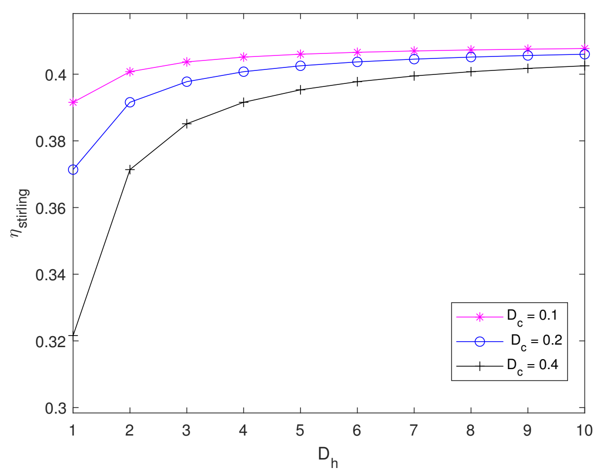



图 2: 无活性粒子的准静态Stirling热机的效率随热浴噪声强度增大而增大，最后趋于定值。

### 3.3 与发动机相连的飞轮

热机-飞轮的耦合系统(13)-(14)可以写成

$$\gamma\begin{bmatrix}\dot{x}_1\\ \dot{x}_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}-(k_e(t)+K') & K'\\ K' & -(K+K')\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\sqrt{D_h}\\ \sqrt{D_h}\end{bmatrix}\xi,\ 0<t\le\frac{\tau}{2},$$

$$\gamma\begin{bmatrix}\dot{x}_1\\ \dot{x}_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}-(k_c(t)+K') & K'\\ K' & -(K+K')\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\sqrt{D_c}\\ \sqrt{D_c}\end{bmatrix}\xi+\begin{bmatrix}\sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta}}\\ 0\end{bmatrix}\eta,\ \frac{\tau}{2}<t\le\tau,$$

记$x(t)=\begin{bmatrix}x_1(t) & x_2(t)\end{bmatrix}^T$，$b_h=\frac{1}{\gamma}\begin{bmatrix}\sqrt{D_h} & \sqrt{D_h}\end{bmatrix}^T$，$b_c=\frac{1}{\gamma}\begin{bmatrix}\sqrt{D_c} & \sqrt{D_c}\end{bmatrix}^T$，$d_\eta=\frac{1}{\gamma}\begin{bmatrix}\sqrt{\frac{D_\eta}{\tau_\eta}} & 0\end{bmatrix}^T$，

及

$$A_e(t)=\frac{1}{\gamma}\begin{bmatrix}k_0\left(1-\frac{t}{\tau}\right)+K' & -K'\\ -K' & K+K'\end{bmatrix},\quad A_c(t)=\frac{1}{\gamma}\begin{bmatrix}k_0\frac{t}{\tau}+K' & -K'\\ -K' & K+K'\end{bmatrix},$$

那么(13)-(14)可以写成如下的SDEs

$$dx(t)=-A_e(t)x(t)dt+b_hdB(t)\quad 0<t\le\frac{\tau}{2}, \tag{25}$$

$$dx(t)=-A_c(t)x(t)dt+b_cdB(t)+d_\eta\eta(t)dt\quad \frac{\tau}{2}<t\le\tau. \tag{26}$$

论文中是对系统(13)-(14)做数值模拟，我认为将其转化成等价的SDEs (25)-(26)后，类似于前面的求解可以得到形式上的解析表达式。对方程(25)应用多维的Itô引理有

$$d\left(e^{\int_0^t A_e(s)ds}x(t)\right)=e^{\int_0^t A_e(s)ds}b_hdB(t),$$

从而

$$x(t)=e^{-\int_0^t A_e(s)ds}x_0+e^{-\int_0^t A_e(s)ds}\int_0^t e^{\int_0^{t'} A_e(s)ds}b_hdB(t'),\ 0<t\le\frac{\tau}{2}. \tag{27}$$

类似地可得

$$x(t)=e^{-\int_{\frac{\tau}{2}}^t A_e(s)ds}x(\tau/2)+e^{-\int_{\frac{\tau}{2}}^t A_e(s)ds}\int_{\frac{\tau}{2}}^t e^{\int_{\frac{\tau}{2}}^{t'} A_e(s)ds}\left(b_hdB(t')+d_\eta\eta(t)dt\right),\ 0<t\le\frac{\tau}{2}, \tag{28}$$

然后可以依据(27)-(28)式，对其中的随机积分进行数值模拟，得近似解$\tilde{x}_1$和$\tilde{x}_2$，再近似计算位置方差。

同论文中的思路，我们直接对方程(13)-(14)做数值模拟，这里我用Euler法来数值求解(25)-(26)，再近似求解飞轮粒子的位置方差函数$\sigma_f(t)=\langle x_2(t)x_2(t)\rangle$。将周期区间$[0,\tau]$离散成均匀网格$t_n=n\Delta t,\ (n=0,1,\dots,N)$，$\Delta t=\frac{\tau}{2N}$，即把半个周期以步长$\Delta t$均分为N个小区间，随机Euler方法运用于SDEs (25)-(26)得到

$$x_{n+1}=x_n-A_e(t_n)x_n\Delta t+b_h\Delta B(t_n)\qquad 0\le n<N, \tag{29}$$

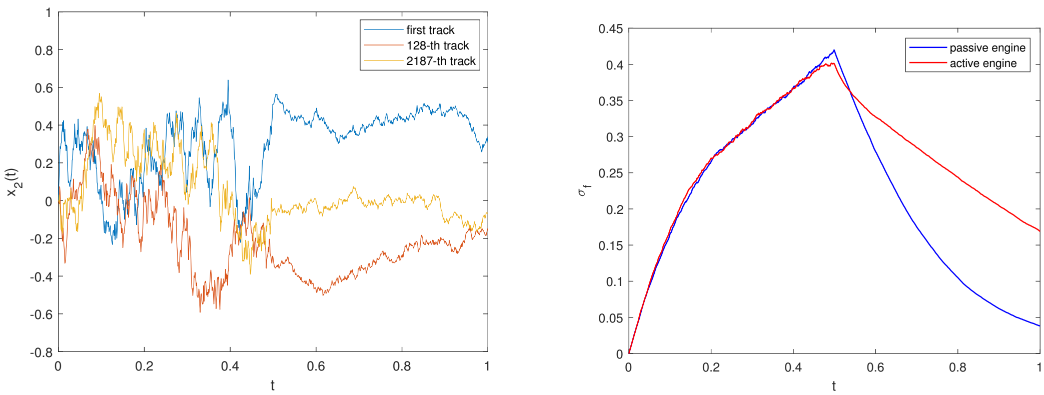
$$\begin{cases} x_{n+1}=x_n-A_c(t_n)x_n\Delta t+b_c\Delta B(t_n)+d_\eta\eta_n\Delta t,\\ \eta_{n+1}=\eta_n-\frac{1}{\tau_\eta}\eta_n\Delta t+\sqrt{\frac{2}{\tau_\eta}}\Delta B(t_n)\qquad N\le n\le 2N,\end{cases} \tag{30}$$

其中$\Delta B(t_n):=B(t_{n+1})-B(t_n)\sim N(0,\Delta t)$。如若随机模拟了$M$条样本轨道，那么可以近似计算出飞轮粒子的位置方差

$$\sigma_f(t_n)\approx\frac{\sum_{m=1}^M(x_{2,n}^m)^2}{M},\quad 0\le n\le 2N+1, \tag{31}$$

其中$x_{2,n}^m$表示第$m$条模拟轨道的$x_2(t_n)$的Eluer方法的数值近似。

取$M = 5000$，$N = 500$做了数值模拟，下图展示了第一个周期内飞轮的位置方差的演化，可以看出，有粒子活性的时候飞轮的位置函数下方的面积更大，说明发动机输出的功更大。




(a) (b)

图 3: 参数值为$\tau = 1$，$k_0 = 10$，$\tau_\eta = 1$，$D_c = 0.1$，$D_h = 2$，$D_\eta = 10$，$K = 0.1$，$K' = 10$。(a)：随机模拟的飞轮粒子的3条轨道 (b)：飞轮粒子的位置方差在第一个周期内的演化。

读完这篇论文，个人有一些浅短的想法：模型中的白噪声$\xi$和$\xi_\eta$是否可以看作是同一白噪声？如果是活性粒子置于活性浴液如细菌浴中会不会有更好的效果。

## 参考文献

[1] Clemens Bechinger, Roberto Di Leonardo, Hartmut Löwen, Charles Reichhardt, Giorgio Volpe, and Giovanni Volpe. Active particles in complex and crowded environments. *Reviews of Modern Physics*, 88(4):045006, 2016.

[2] Valentin Blickle and Clemens Bechinger. Realization of a micrometre-sized stochastic heat engine. *Nature Physics*, 8(2):143–146, 2012.

[3] Sudeesh Krishnamurthy, Subho Ghosh, Dipankar Chatterji, Rajesh Ganapathy, and AK Sood. A micrometre-sized heat engine operating between bacterial reservoirs. *Nature Physics*, 12(12):1134–1138, 2016.

[4] Aradhana Kumari, PS Pal, Arnab Saha, and Sourabh Lahiri. Stochastic heat engine using an active particle. *Physical Review E*, 101(3):032109, 2020.

[5] M Cristina Marchetti, Jean-François Joanny, Sriram Ramaswamy, Tanniemola B Liverpool, Jacques Prost, Madan Rao, and R Aditi Simha. Hydrodynamics of soft active matter. *Reviews of modern physics*, 85(3):1143, 2013.

[6] Arnab Saha and Rahul Marathe. Stochastic work extraction in a colloidal heat engine in the presence of colored noise. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2019(9):094012, sep 2019.

[7] T. Schmiedl and U. Seifert. Efficiency at maximum power: An analytically solvable model for stochastic heat engines. *EPL (Europhysics Letters)*, 81(2):20003, dec 2007.

**Algorithm 1** Matlab code for Euler method (29)-(30)

**Input:** $D_h, D_\eta, D_c, \tau, \tau_\eta, K, K', k_0, \gamma$
**Output:** $x_{2,n}^m$, $\sigma_\mathrm{f}$

**Code** :
```
global Dh Deta Dc tau taueta K Ks k0 gamma
Dh = 2; Deta = 10; Dc = 0.1; tau = 1; taueta = 1;
K = 0.1; Ks = 10; k0 = 10; gamma = 1; M = 5000; N = 500; h = 0.5/N; t = 0:h:tau;
bh = [sqrt(Dh); sqrt(Dh)]/gamma; bc = [sqrt(Dc); sqrt(Dc)]/gamma;
deta = [sqrt(Deta/taueta); 0]/gamma; W = sqrt(h)*randn(2*N,M);
x = zeros(2,2*N+1, M); eta = zeros(2*N+1, M);
for m = 1:M
  for n = 1:N-1
    x(:,n+1,m) = x(:,n,m) - Ae(t(n))*x(:,n,m)*h + bh*W(n,m);
    eta(n+1,m) = eta(n,m) - 1/taueta*eta(n,m)*h + sqrt(2/taueta)*W(n,m);
  end
  for n = N:2*N
    x(:,n+1,m) = x(:,n,m) - Ac(t(n))*x(:,n,m)*h + bc*W(n,m) + deta*eta(n,m)*h;
    eta(n+1,m) = eta(n,m) - 1/taueta*eta(n,m)*h + sqrt(2/taueta)*W(n,m);
  end
end
sigmaf = sum(x(2,:,:).^2,3)/M;
hold on
plot(t, sigmaf, 'r', 'LineWidth',1)
```
**Ae.m**
```
function Ae = Ae(tn)
global tau K Ks k0 gamma
Ae = [ k0*(1-tn/tau)+Ks -Ks; -Ks K+Ks ]/gamma;
```
**Ac.m**
```
function Ac = Ac(tn)
global tau K Ks k0 gamma
Ac = [ k0*tn/tau+Ks -Ks; -Ks K+Ks ]/gamma;
```