利用机器学习深入洞察量子热力学熵

斯里尼瓦萨·拉奥·P.

∇×V Techno Labs，印度海得拉巴
er.p.srinivas@gmail.com

摘要。我们所分析的发动机以单个量子粒子作为其工作介质，其设计类似于 Szilard 的经典单粒子发动机。Szilard 通过创造一个物理恶魔来操控他的发动机，从而解决了 Maxwell 第二定律悖论。我们的量子发动机设计以具有经典混沌特性的 Szilard 映射为模型，该映射执行一个涉及测量、热能提取和记忆重置的热力学循环。我们的分析重点在于研究利用单个量子粒子作为工作介质的发动机，其设计与 Szilard 构建的经典单粒子发动机相似。所提出的量子发动机遵循具有经典混沌特性的 Szilard 映射模式，该模式涉及由测量、热能提取和记忆重置构成的热力学循环。研究重点在于考察观测和控制粒子所涉及的热力学成本，并比较量子极限与经典极限下的这些成本。通过本研究，我们旨在揭示由 Lindauer 原理所引起的热力学权衡，该原理涉及量子和经典机制下信息处理所导致的热力学耗散。我们证明，通过采用机器学习方法，可以开展能量分析并模拟量子发动机，同时考虑基于 Szilard 发动机的热力学第二定律在其工作条件下的适用性。然而，量子发动机的运行机制与其经典对应物存在显著差异。在经典实现中，热力学特性由测量和擦除过程决定。相比之下，在量子实现中，插入隔板的成本起着至关重要的作用。

关键词：西拉德发动机、信息、熵、麦克斯韦妖。

1 引言

1.1 量子热力学本质

量子热力学系统的研究是一门蓬勃发展的领域，在量子计算、量子通信和能量转换等多个方面都具有重要意义。[1] 此外，该领域对于理解小型系统的行为至关重要，例如纳米技术和量子材料中的系统。著名物理学家詹姆斯·克拉克·麦克斯韦通过一项思想实验，对热力学第二定律所提出的不可逆性概念提出了质疑。

被称为麦克斯韦妖。[2][3] 在这一实验中，他提出，假如气体混合物中存在一个能够完全掌握粒子信息的妖或某种实体，那么它就能够将运动速度较快的粒子从冷储库转移到热储库，这似乎违背了支配这些粒子行为的基本原理。[3] 麦克斯韦妖的重要意义在于，它有助于揭示熵与信息之间的内在联系。通过妖利用信息操纵气体中粒子的能力，人们逐渐认识到，系统与其周围环境之间能量交换所受到的第二定律限制可能存在放宽的空间。[4] 由此得出的结论推动了熵与信息关系方面的突破性发现，标志着这两个领域的重要里程碑，即热力学基本原理的理解以及计算机科学领域的发展。[5] 克劳修斯、开尔文和普朗克最初提出的热力学第二定律表述中并未涉及信息，但以一种更为隐晦的方式包含了信息，即体现为麦克斯韦妖所掌握的知识。[6][9] 在这种情况下，主要面临两项挑战：一是制定一个明确纳入信息作用的第二定律详细版本；二是必须清晰理解信息的物理属性，以便能够以具体的方式将其纳入第二定律，而不是仅仅将其视为抽象概念。[7][11] 必须明确理解信息的物理层面，以便将其作为一种具体实体而非抽象概念，明确纳入第二定律。这将使测量、擦除、复制和反馈等信息操作能够被视为需要付出热力学代价的物理过程。[8][9][14]

A quantum thermodynamic system is a physical system that combines the principles of quantum mechanics and thermodynamics. It is a system that can undergo changes in energy, work, and entropy, while being described by quantum mechanical states and operations. A quantum thermodynamic system is characterized by particles whose energy levels are quantized and discrete, and whose interactions are governed by quantum mechanics. [10][11] The system's thermodynamic attributes, including its heat capacity, entropy, and temperature, are determined by the quantum states and actions of the particles within the system. Although a complete and precise understanding of how an engine works necessitates consideration of its fundamental dynamics, we focus on two key aspects of a quantum Szilard engine. [13][15] One is to recognize the significance of the information processing and provide a thorough, detailed analysis of the "demon" by endowing it with a physical representation. Furthermore, improve the explanation of the expenses incurred in each stage of the engine's thermodynamic cycle, which includes the measurement, thermal-energy extraction, and reset phases using computational setup.

1.2 量子发动机的设计

量子 Szilard 发动机（QSE）是研究热力学变化过程中信息处理重要性的一个合适系统。该发动机由两部分组成：所研究的系统（SUS）和一个量子恶魔或

控制器。这些组件被一个非相干环境所包围，该环境使复合系统在某一逆温度下保持热平衡。

首先，定义系统，包括粒子数量以及决定其行为的参数，例如能级和相互作用。随后制定一个控制系统动力学并从中提取有用功的方案。该方案通常将系统分为两部分，并通过外部操作控制粒子在两部分之间移动。成本包括实施该方案所需的能量和其他资源，这通常依据朗道尔原理来计算；该原理将擦除一比特信息所需的功与系统熵的增加联系起来。最后，对发动机的性能进行分析，包括其效率、输出功率及其他相关指标。可采用数值模拟或机器学习算法等优化技术，寻找发动机设计的最佳参数。为便于分析，首先需要掌握长度为 L 的一维势箱中量子粒子热力学的基本原理。这一系统常被用作简单模型，用于研究材料科学和量子力学等领域中受限粒子的行为。

2 数学建模

盒中粒子系统由盒子的尺寸和粒子的能量决定，这些参数进一步决定了系统的熵、温度和热容。由于受到空间限制，粒子的能量是量子化的，且能级数量随盒子尺寸的增大而增加。因此，系统的热力学性质高度依赖于盒子的尺寸和粒子的能量。目前，已有多种解析和数值方法被开发出来，用于计算盒中粒子系统的热力学性质。其中两种方法分别是求解粒子波函数的薛定谔方程，以及应用统计力学确定系统的热力学性质。然而，由于系统的复杂性，对于大型或复杂系统，准确计算可能较为困难。因此，研究人员开发了用于预测盒中粒子系统热力学性质的机器学习模型。这些模型利用模拟和实验数据，学习输入参数与系统热力学性质之间的关系，从而为理解系统行为提供了一种新的工具。

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ml^2} \tag{1}$$

其中，n 为正整数，m 为粒子的质量，ħ 为约化普朗克常数。

配分函数给出了系统在温度 T 下处于某一给定状态的概率，其表达式为

$$Z = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_n} \quad (2)$$

$\beta = {}^{1}\,k_B T/$ 其中，k_B 为玻尔兹曼常数，T 为温度。

$$\langle E \rangle = \frac{\partial \ln(Z)}{\partial \beta} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{6ml^2} \coth\left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2 k_B T}\right) \quad (3)$$

粒子的热容为

$$C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{3k_B ml^2} \operatorname{csch}^2\left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2 k_B T}\right) \quad (4)$$

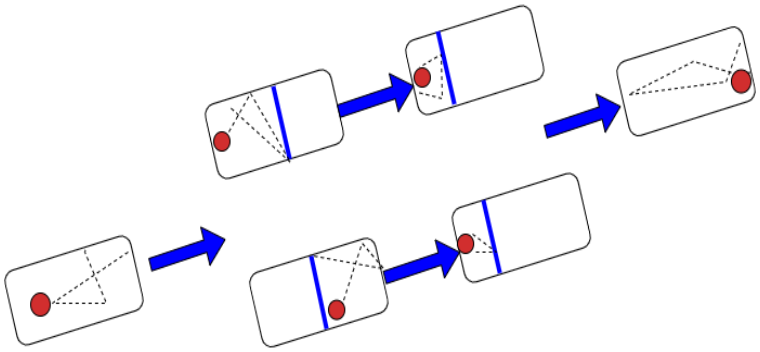

图 1. 盒中电子及活塞运动示意图。

该函数的定义方式如下：首先设置模拟的初始条件，并根据粒子的位置将盒子分成两部分（x_A 和 x_B）；然后根据粒子在盒子中的位置调整其动量，进行准静态压缩/膨胀。压缩/膨胀后，该函数使用粒子的最终动量计算发动机所做的功，并绘制粒子的最终位置和动量。最后，该函数以焦耳为单位返回发动机所做的功。

准静态薛定谔发动机的模拟被定义为一种理论发动机，它利用信息从系统中提取功。随后，将其建模为一个与恒温热浴接触的谐振子。发动机所做的功将被计算出来，并以发动机中活塞位置的概率分布形式绘制出来。然而，如图2所示的位置直方图是根据概率分布获得的，该概率分布显示了出现频率。

不同活塞位置下的情况，这可以反映系统在这些位置处的稳定性。

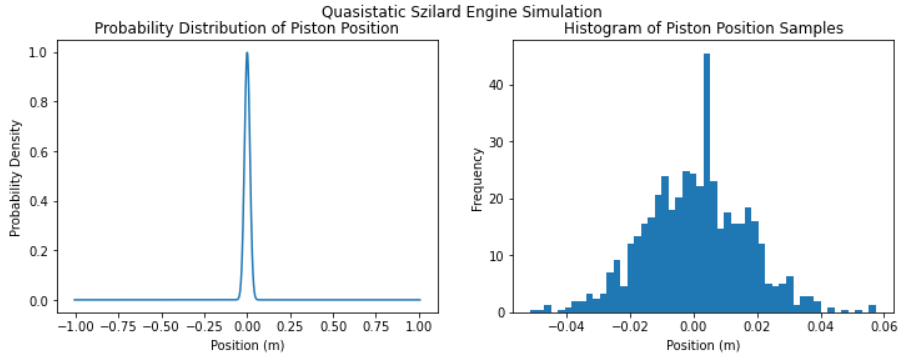

图2. 按时间归一化的准静态薛定谔发动机。

如图 3 所示，经过归一化后，可以很容易地理解该分布，它清晰地表明了系统的活塞稳定性及其运行精度。

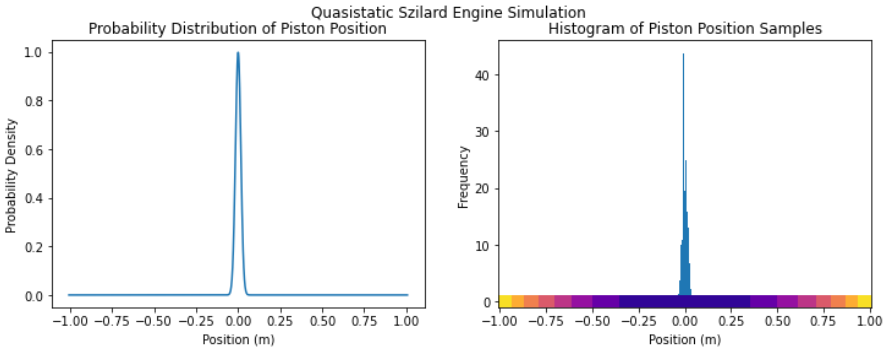

图 3. 按时间归一化的准静态薛定谔发动机。

如图4所示，直方图较为狭窄且集中在某一特定位置附近，这表明活塞在该位置保持稳定，且发动机运行效率较高。

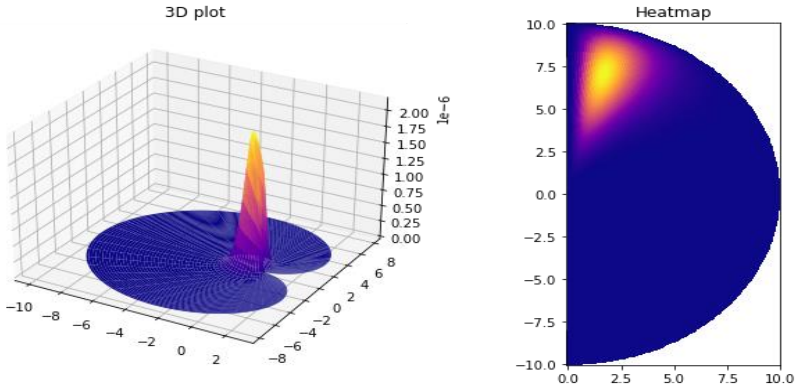

图 4. 频率的直方图表示。

它已被用作研究信息处理热力学以及热力学定律所施加的信息处理极限的模型系统。该发动机还被用于研究麦克斯韦妖思想实验中信息所发挥的作用。该实验涉及一个妖，它利用信息选择性地打开和关闭两个不同温度气体之间的隔板，从而违反热力学第二定律。通过检查塞拉德发动机模型中热力学熵的残差图，并在使用机器学习算法对模型进行模拟后进行分析，可以识别模型中存在的任何系统性误差或偏差。

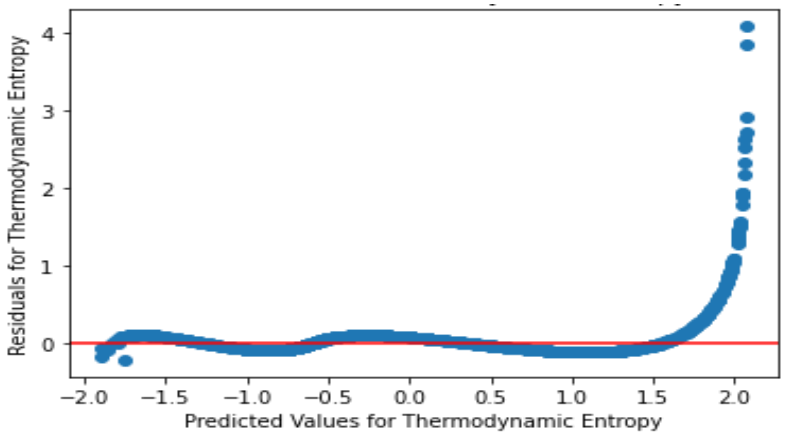

图 5. 热力学熵。

这有助于优化模型并提高仿真结果的准确性。此外，残差图可用于比较不同仿真模型的性能，从而帮助确定对西拉德发动机进行建模时最准确、最可靠的方法，并通过残差追踪熵变化的本质。

热力学熵和预测值如图 5 所示。良好的残差图应显示数据点在零值周围随机散布，这表明模型与数据拟合良好。残差图中存在一种模式，这表明模型可能未能捕捉所有导致熵随时间变化的潜在因素。为了全面了解仿真模型预测熵随时间变化的性能，重要的是结合 R 平方和 p 值等其他统计指标来分析残差图，如图 6 所示。

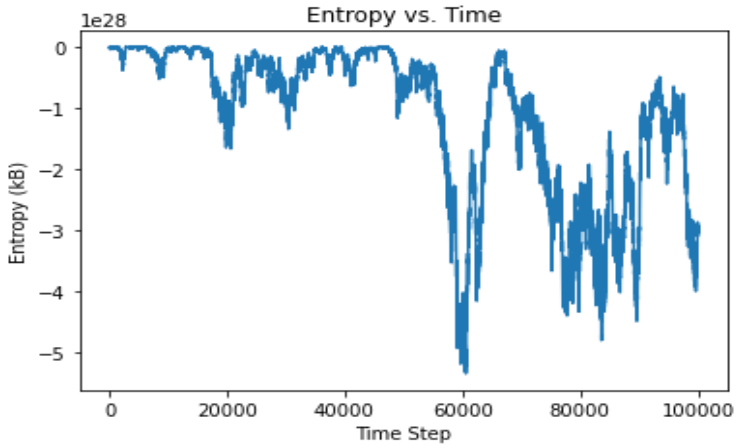

图 6. 热力学熵与时间

利用机器学习分析并优化发动机性能的发动机优化技术，可用于预测发动机在不同条件下的行为，并确定最佳运行参数，例如工作流体的温度和压力。

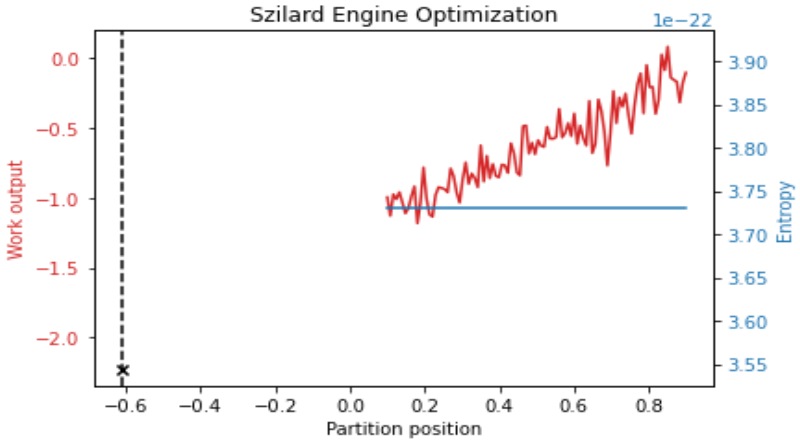

图 7. 使用强化学习优化 Szilard 发动机

这使发动机的效率和性能得到提升，同时减少了排放和能源消耗。通过神经网络进行仿真，并利用数据对其进行训练，以预测发动机在不同工况下的性能；同时，采用强化学习技术优化发动机的控制策略，如图7所示。

结论

这项研究基于 Szilard 的经典单粒子发动机，对一种以单个量子粒子作为工作流体的量子发动机进行了分析。所提出的量子发动机的设计遵循经典混沌 Szilard 映射的模式，涉及由测量、热能提取和记忆重置组成的热力学循环。研究还重点关注与盒中粒子相关的热力学能量，并利用机器学习方法比较量子与经典体系中的相应能量。值得注意的是，量子发动机的运行机制与其经典对应物存在显著差异。在经典发动机中，插入隔板的成本在引入麦克斯韦妖的量子实现过程中发挥着关键作用。本研究揭示了量子和经典体系中由 Landauer 原理所产生的热力学权衡，即信息处理引起的热力学耗散，并探讨了机器学习方法如何从基本原理的角度帮助理解这一概念。

参考文献

1. Scully, M. O., Zubairy, M. S., Agarwal, G. S., & Walther, H. (2003). 通过量子相干性的消失从单一热浴中提取功。《科学》，299(5608)，862-864。2. Sagawa, T., & Ueda, M. (2008). 离散量子反馈控制下的热力学第二定律。《物理评论快报》，100(8)，080403。3. Kosloff, R., & Levy, A. (2014). 量子热机与制冷机：连续型装置。《物理化学年度评论》，65，365-393。4. Pekola, J. P., & Koski, J. V. (2015). 麦克斯韦妖与信息的物理学。《新物理学杂志》，17(1)，015011。5. Srinivasa Rao. P，《斯齐拉德发动机真的失效了吗？》arxiv.org/abs/2111.12300。6. A. Datta, A. Shaji, and C. M. Caves，《量子热力学：一种统计场论方法》，《物理评论快报》，第100卷，第5期，第1-4页，2008年。7. S. Deffner，《量子热力学：该领域综述》，arXiv: 1708.05041，2017年。8. E. G. Rieper and V. Vedral，《量子热力学：热力学第二定律的新工具》，arXiv: 1508.06099，2015年。9. H. T. Quan, Y.-X. Liu, C. P. Sun, and F. Nori，《量子热力学》，《物理评论E》，第76卷，第3期，第1-20页，2007年。10. J. Goold, M. Huber, A. Riera, L. del Rio, and P. Skrzypczyk，《量子信息在热力学中的作用——专题综述》，《物理学A辑：数学与理论》，第49卷，第14期，第1-36页，2016年。

11. Carleo, G. 和 Troyer, M.（2017）。利用人工神经网络求解量子多体问题。《科学》，355(6325)，602-606。12. Zhang, J.、Han, J. 和 Car, R.（2018）。多体物理学中的机器学习：安德森局域化转变案例。《物理评论快报》，120(26)，266601。13. Carrasquilla, J. 和 Melko, R. G.（2017）。物质相的机器学习。《自然通讯》，8(1)，1-8。14. Deng, D. L.、Li, X. 和 Sarma, S. D.（2017）。神经网络态中的量子纠缠。《物理评论X》，7(2)，021021。15. Huang, L.、Wang, J. 和 Carrasquillo, J.（2020）。量子热力学中的机器学习。arXiv 预印本 arXiv:2009.12265。