arXiv:2601.04358v1 [cond-mat.stat-mech] 7 Jan 2026

热力学计算中的能量—时间—精度权衡

Alberto Rolandi, [1,2] Paolo Abiuso, [2] Patryk Lipka-Bartosik, [3,4] Maxwell Aifer, [5] Patrick J. Coles, [5,*] 以及 Martí Perarnau-Llobet[6,†]

[1]*Atominstitut*，维也纳工业大学，*1020* 维也纳，奥地利[2]奥地利科学院维也纳量子光学与量子信息研究所（*IQOQI Vienna*），*Boltzmanngasse 3*，*A-1090* 维也纳，奥地利[3]波兰科学院理论物理中心，华沙，波兰[4]雅盖隆大学理论物理研究所，*30-348* 克拉科夫，波兰[5]*Normal Computing Corporation*，美国纽约州纽约市[6]理论物理：信息与量子现象，巴塞罗那自治大学物理系，*08193* 贝拉特拉（巴塞罗那），西班牙

在热力学计算这一范式中，硬件并非以确定性方式运行，而是经历随机过程，以便从感兴趣的分布中采样。尽管有研究假设热力学计算机可能实现更高的能源效率和性能，但目前仍缺乏对热力学计算资源成本的理论刻画。本文分析热力学计算中计算精度、能量耗散与时间之间的基本权衡。利用熵产生的几何界，我们推导出能量–延迟–缺陷乘积（EDDP）的一般极限；EDDP 是传统能量–延迟乘积（EDP）的一种随机泛化。原则上，这些极限可以达到，但相应的最优驱动方案需要充分了解最终的平衡分布，也就是问题本身的解。为克服这一局限，我们开发了无需预先掌握解的信息的准最优控制方案，并展示了其在过阻尼二次系统中进行矩阵求逆的性能。所得界限不仅适用于这一情形，也适用于更一般的势能，并与近期基于非平衡朗之万动力学的方案直接相关。

I. 引言

计算时间、准确度和系统规模长期以来一直是计算架构、算法和硬件发展的重要指引。然而，随着人工智能技术迅速扩展，功耗正成为现代计算设备的核心瓶颈。衡量功耗与计算速度之间平衡的一项基本指标是能量–延迟乘积（熵产生，EDP），其定义为能量消耗与一次计算的执行时间之积 [1]。阐明EDP的基本极限，不仅对优化现有平台至关重要，也有助于评估基于新物理原理的方法 [2], ，例如热力学计算 [3, 4], ，其旨在利用物理原理实现超低能耗计算。

EDP 的极限可追溯至兰道尔原理，该原理确立了不可逆计算的最低能量成本。具体而言，擦除一个比特的信息至少会耗散 $k_{\mathrm{B}}T\ln(2)$ 焦耳，其中 k_{B} 是玻尔兹曼常数，T 是系统温度 [5]。实际实现通常存在显著的额外开销，例如精确时序控制 [6] 和电压切换 [7], 的能量代价、由标度关系 [8], 引起的漏电流，或错误数据—存储器传输 [9] 的代价。这些贡献加在一起，通常会使计算的能耗比兰道尔极限值高出许多个数量级。即使不存在这类实际限制，要达到朗道尔极限，系统必须始终保持在平衡态，因此，任何在有限时间内执行的（理想）计算都必然高于朗道尔极限。为弥合这一差距，随机热力学领域近期的进展 [10–12] 引入了朗道尔界的有限时间扩展 [13–16] 并刻画了逻辑门最小模型的能量学特性 [17–24], 这些研究均揭示，更快的计算（即更短的延迟）会带来更高的能量成本。此外，关于在胶体粒子、纳米磁性系统和量子分子磁体中验证兰道尔原理的概念验证实验也已经实现 [25–30]。

近期进展进一步揭示了不同平台上的EDP特性。在计算架构方面，尤其是基于互补金属氧化物半导体的系统，相关进展表明，通过缩小晶体管尺寸和优化微架构（例如采用可变流水线深度），可以在物理约束下调节 EDP [31]。与此同时，可逆计算、自旋电子学和神经形态系统等新兴技术有望通过最大限度地减少或绕过比特擦除的能量成本 [32], 、在低能态中编码信息 [33], 以及消除高代价的数据移动 [34], 使EDP更接近基本极限。然而，噪声、互连开销和热管理等实际挑战，仍使理论界限与可实现的性能之间存在差距。

热力学计算是加速人工智能工作负载的有力候选方案，适用范围从贝叶斯推断到生成式人工智能 [3, 4, 35–39]。此外，它也为探索能量-时间权衡及熵产生的基本界限提供了明确的契机，

* patrick@normalcomputing.ai
† marti.perarnau@uab.cat

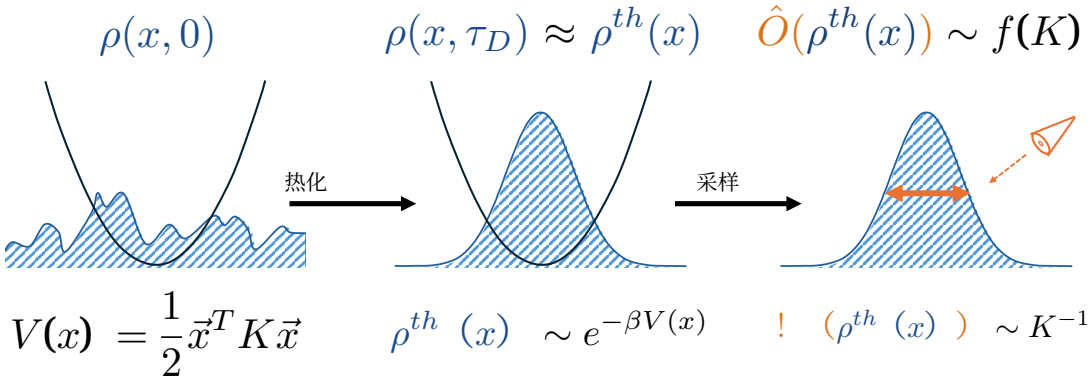

图 1. **用于计算** $f(K)$。在此示意图中，当施加势能 $V(x) = \frac{1}{2}\vec{x}^T K\vec{x}$（黑色）时，状态的概率密度（蓝色）处于某种任意的初始分布。状态的概率密度自然演化至热平衡（步骤 **1**），之后观察者便可开始对系统的性质进行采样，以直接测量 $f(K)$ (步骤 **2**）。例如，热分布中位置的相关矩阵 Σ 对应于 K 的逆矩阵。

即熵产生的基本界限。针对矩阵求逆和线性方程组 [40]，矩阵指数 [41]，贝叶斯推断 [42]，二次规划 [43]，以及二阶优化 [44]，人们已经开发出热力学计算算法。这些算法通常包含一个关键步骤：先淬火，再弛豫至热平衡。然而，从熵产生的角度看，这种协议并非最优；近期研究结果表明，采用其他驱动方案可以大幅降低能量代价函数 [45–48]，甚至可能达到熵产生的极限。

在此背景下，我们在本文中推导了热力学计算机熵产生（EDP）的基本界限，并构造了在现实假设下可逼近这些界限的驱动方案。我们重点研究二次势能和基于平衡的方案 [46]，，例如高斯采样和线性代数应用中采用的方案，不过我们的结果自然也可推广至任意势能和非平衡计算，包括近期提出的非平衡热力学计算方案 [36, 49]。

本文结构如下。首先，在第**II**节中，我们介绍本文的一个关键量，它是 EDP 的自然推广，明确纳入了热力学计算的概率性质。由此得到的能量–延迟–缺陷乘积（EDDP）将能量、时间和可靠性结合为一个指标，用于衡量热力学算法。在第**III**节中，我们刻画驱动协议的 EDDP，并借助 Wasserstein 测地线这一几何概念推导其基本下界 [50, 51]。在第**IV**节中，我们构造可逼近这些下界的实际驱动协议，并将其应用于求解线性方程组。最后，我们在第**V**节讨论扩展，并在第**VI**节总结。

II. 热力学计算中的能量-延迟-缺陷乘积（EDDP）

我们先概述这项工作的主要思想。考虑一个与温度为的热环境接触的受驱动系 $k_B T = \beta^{-1}$统。通过适当控制系统的势能 $V(x,\ t)$，耗散动力学会使系统达到一种能够编码给定计算解的状态。这构成了一种热力学算法，由两个基本步骤组成（另见图**1**）：

1. 系统的势能 $V(x,\ t)$ 在固定时间 τ_D内由[1] 驱动V_0 从$x(= V:\ x,\ 0)$ 到 $V_1(x):\ = V(x,\ \tau_D)$，因此系统从分布 $\rho_0(x)$ 演化为目标分布 $\rho_1(x)$，后者编码了问题的解。通常， $\rho_1(x)$ 对应于吉布斯态，即

$$\rho_1(x) \propto e^{-\beta V_1(x)} \ . \tag{1}$$

2. 在固定时长内对系统进行测量并收集样本 τ_S。算法的结果为

$$\langle f(x)\rangle = \frac{1}{\tau_S}\int_{\tau_D}^{\tau_D+\tau_S} dt'\ f(x(t'))\ . \tag{2}$$

在马尔可夫区制下，我们预计 第 **2** 步中估算的误差通常会按 $\sim 1/\tau_S$ 衰减，而执行 第 **1**步所需的不可恢复能则会按 $\sim 1/\tau_D$ 衰减（见下文）。这清楚地表明，计算的准确度、能量与总时间之间存在权衡$\tau:\ = \tau_D + \tau_S$ 因此，为了考虑所有相关资源，我们将通过对广为人知的能量-延迟乘积（EDP）的扩展来衡量热力学算法的性能，即一种形如以下形式的量： [52]，

$$\boxed{\text{EDDP} := W_{\text{diss}}\tau(1-\mathcal{Q})} \tag{3}$$

[1]我们考虑任何可能的时间控制协议，包括连续协议，也包括突然淬火（随后进行平衡过程，其中 $V(x)$ 保持不变）。

这里，$W_{\rm diss}$ 是不可恢复能（耗散功），而 $0 \le \mathcal{Q} \le 1$ 是适当定义的品质因数。我们将把式（3）中的量称为能量-延迟-缺陷乘积（EDDP）。

接下来，我们将针对基于受驱动的过阻尼经典系统的热力学硬件 [4, 40, 53]，量化这种权衡，并指出其他物理平台也存在类似的权衡。具体而言，我们将推导 EDDP 的基本下界，并设计性能良好但并非最优的简单驱动方案。我们的证明中的关键步骤借鉴了近期随机热力学领域的技术成果 [47]这些成果给出了在系统任意两个状态之间进行热力学驱动所需能量的下界。

III. 朗之万系统中的热力学计算及 EDDP 的界

本文的核心内容是，将动力学可由所谓的（过阻尼）朗之万方程 [54]充分描述的物理系统，作为优化热计算方案的基础研究对象。用粒子位置向量 x 和能量势$V(x, t)$表示时，该方程写作

$$\dot{x} = -\frac{1}{\gamma}\nabla V(x,t) + \sqrt{\frac{2}{\gamma\beta}}\eta(t)\ , \tag{4}$$

其中，γ 是摩擦系数，而 $\eta(t)$ 是满足 $\langle \eta_i(t)\eta_j(t')\rangle = \delta_{ij}\delta(t-t')$的白噪声向量。该方程描述了粒子动量快速弛豫的系统，例如黏性介质中的胶体粒子。不过请注意，已有研究表明，多个系统都可以由同一动力学方程 [55],充分描述，例如噪声光学陷阱中的粒子 [56]，以及过阻尼 RLC电路 [40, 55]。

对于固定的势能 $V(x,\ t) \equiv V(x)$，系统的概率分布趋向于由吉布斯-玻尔兹曼分布表示的热态

$$\rho^{\rm th}(x) = \frac{1}{Z}e^{-\beta V(x)}, \tag{5}$$

其中 Z 仅对应于指数分布 $Z \equiv \int dx\ e^{-\beta V(x)}$的归一化。这类及更一般随机系统的热力学特性已得到充分表征 [57, 58]。具体而言，进入系统的内能 U、功 δW 和热 δQ 可表示为

$$E = \int dx\ \rho(x)V(x)\ , \tag{6}$$

$$\delta W = \int dx\ \rho(x)\delta V(x)\ , \tag{7}$$

$$\delta Q = \int dx\ \delta\rho(x)V(x)\ , \tag{8}$$

其中 $\delta E = \delta W + \delta Q$ 是热力学第一定律。

步骤 1 热力学算法的第一步是进行势能变换 $V_0(x) \to V_1(x)$，且周围温度保持恒定 $k_{\rm B}T = \beta^{-1}$。此类变换的总功成本为

$$W^{(0)\to(1)} = \Delta F + W_{\rm diss}^{(0)\to(1)}\ , \tag{9}$$

其中 $\Delta F = F_{(1)} - F^{(0)}$ 是自由能的变化$F = U - \beta^{-1}S$，其中 $S = -\int dx\ \rho(x)\ln\rho(x)$ 为熵。由此可知，$W^{(0)\to(1)}{}_{\rm diss}$ 根据热力学第二定律为非负。热力学算法的第 2 步是对粒子的位置进行采样 x，这不会改变系统的能量学性质。因此，此步骤不做功，且控制参数保持不变。请注意，通过在协议中补充一个（足够缓慢的）可逆复位变换，将 ΔF变为 $V_1(x) \to V_0(x)$，总能恢复自由能的变化。原则上，也可以考虑更一般的顺序协议：在前一次运行中产生的 $\{\rho_1^{\rm th}, V_1\}$ 可作为下一次运行的新初始状态，依此类推；执行 m这类热力学算法所需的总功，对应于各步骤的功之和，即

$$\sum_{i=1}^{m} W^{(i-1)\to(i)} = \sum_{i=1}^{m}\Delta_i F + \sum_{i=1}^{m} W_{\rm diss}^{(i-1)\to(i)} \tag{10}$$

$$= F^{(m)} - F^{(0)} + \sum_{i=1}^{m} W_{\rm diss}^{(i-1)}, \tag{11}$$

其中 $\Delta_i F := F^{(i)} - F_{(i-1)}$。再次强调，全局项 $F_{(m)} - F^{(0)}$（其正负皆可）在 $V_0 \equiv V_m$ 的情况下为零，或者可以通过在最后进行可逆变换使其为零。最后，如果不允许无限缓慢的重置（例如由于时间限制），仍然可以通过反转正向协议，在有限时间内执行 $V_1 \to V_0$ 重置。可以证明（参见 式 (23)），在这种情况下，$W^{(0)\to(1)}_{\text{耗散}} = W_{(1)\to(0)\text{ 耗散}}$，因此整个协议的总能量消耗为 $2W^{(0)\to(1)}_{\text{耗散}}$。

基于上述所有原因，接下来我们将考察步骤 1期间的耗散，即

$$W_{\rm diss} := W_{\rm diss}^{(0)\to(1)}, \tag{12}$$

作为与热力学算法相关的基本能量成本。

A. Wasserstein几何与EDDP的基本界限

现在，我们介绍推导最优EDP类权衡所需的主要技术工具。能量成本$W_{\rm diss}$ 通常取决于协议，且需要完整求解动力学方程才能进行估算。不过，借助几何仍然可以获得有价值的见解：参考文献 [50, 51]中的一项关键结果表明，对于由朗之万方程支配的系统

根据公式 (4)，耗散 W_{diss} 可由初始分布与最终分布之间的 Bures-Wasserstein距离的平方 $\mathcal{W}$ 界定为 ρ_0 ：$=\rho_0(x)$ 以及ρ_1 ：$=\rho_1(x)$，该距离定义为

$$\mathcal{W}^2(\rho_0,\rho_1):=\inf_{\pi\in\Pi(\rho_0,\rho_1)}\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}|x-y|^2 d\pi(x,y), \tag{13}$$

其中 $\Pi(\rho_0,\ \rho_1)$ 是所有概率密度函数（即所谓的传输计划）的集合，它们具有 ρ_0 和 ρ_1 作为边缘分布 [59]。根据参考文献 [50, 51], ，过阻尼朗之万系统的等温变换普遍满足

$$W_{\mathrm{diss}}\geq\frac{1}{\beta\gamma\tau_D}\mathcal{W}^2(\rho_0,\rho_1). \tag{14}$$

这个不等式揭示了一项关键的物理洞见：协议越快，必然产生越大的耗散。原则上，耗散 W_{diss} 甚至可以在极限下趋于零$\tau_D\ \to\ \infty$，这反映了无限缓慢过程的可逆性。关键的是，公式（14）可由这样的协议达到等号：瞬时分布 ρ_t 沿着以 Bures-Wasserstein距离定义的测地线，在 ρ_0 和 ρ_1 [50, 51]之间演化。

上述联系将寻找耗散最小协议这一热力学任务转化为一个几何问题。具体而言，公式（14）立即给出了受限于步骤 1的熵产生极限——即 $W_{\mathrm{diss}}\tau_D$——其表达仅涉及温度、摩擦系数以及所需计算所覆盖的距离 $\mathcal{W}$。此外，现在考虑采样步骤 2。可以合理地假设（例如，当采样率远高于 γ^{-1}时），计算结果 $\langle f(x)\rangle$ 在有限时间τ_S 内会具有一定的估计误差

$$\varepsilon^2:=\left(\frac{1}{\tau_S}\int_{\tau_D}^{\tau_D+\tau_S}dt' f(x(t'))-\int dx\ f(x)\rho_1(x)\right)^2\propto\frac{1}{\tau_S}\,. \tag{15}$$

对于给定的总时间 $\tau=\tau_D+\tau_S$，由此可得

$$\frac{\tau_S}{\tau_D+\tau_S}=\frac{\varepsilon^2_{\min}}{\varepsilon^2}=:\mathcal{Q}\,, \tag{16}$$

其中，$\varepsilon^2_{\min}$ 对应于将协议的全部时间 τ 用于步骤 2——发送 $\tau_D\to 0$ 原则上是可行的，但代价是品质因数会趋于无穷大 W_{diss}。因此，$0\leq\mathcal{Q}\leq 1$ 可视为计算的品质因数。

利用 公式（16），可知 步骤 1 的熵产生与整个算法的 EDDP 相同，即$W_{\mathrm{diss}}\tau_D=W_{\mathrm{diss}}\,\tau(1-\mathcal{Q})$。结合这一观察与公式（14）中的界，我们现在可以将主要结果表述为热力学计算的类熵产生界：

$$\boxed{\mathrm{EDDP}\geq\frac{\mathcal{W}^2(\rho_0,\rho_1)}{\beta\gamma}\,.} \tag{17}$$

也就是说，随着计算质量 $\mathcal{Q}$ 的提高，耗散能或总时间必须增加。在本文余下部分，我们将针对相关的方案类别估算 $\mathcal{W}$，并寻找实际的热力学计算，使其接近饱和基本界限 （17）。

B. $\mathcal{W}$ 的下界与二次系统

如 $\mathcal{W}(\rho_0,\rho_1)$ 所定义的两个任意分布之间的 Wasserstein距离（式 (13)）通常难以估计，尤其是在维度较高时，因此，只利用前两个矩对其进行界定很有用。为此，我们定义

$$\mu_i=\int dx\ x\rho_i(x)\ , \tag{18}$$

$$\Sigma_i=\int dx\ (x-\mu_i)(x-\mu_i)^T\rho_i(x)\ . \tag{19}$$

然后，按照参考文献 [60], ，可以将 Wasserstein距离下界限定为

$$\mathcal{W}(\rho_0,\rho_1)^2\geq|\mu_0-\mu_1|^2+\mathcal{BW}(\Sigma_0,\Sigma_1)^2\ , \tag{20}$$

$$\mathcal{BW}(\Sigma_0,\Sigma_1)^2:=\mathrm{Tr}\Big[\Sigma_0+\Sigma_1-2(\Sigma_1^{1/2}\Sigma_0\Sigma_1^{1/2})^{1/2}\Big]\ .$$

其中，记号 $\mathcal{BW}(\Sigma_0,\Sigma_1)$ 表示对两个协方差矩阵 Σ_0 和 Σ_1 计算得到的*Bures-Wasserstein*距离 [61]。

界等式 (20)在高斯分布沿相应的 Wasserstein 测地线运动时达到饱和。在热平衡的情境下，高斯分布恰好是由以下形式的二次势产生的分布：

$$V(x)=\frac{1}{2}x^TKx+b^Tx \tag{21}$$

由此得到平衡分布

$$\rho^{\mathrm{th}}(x)=\frac{e^{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)}}{\sqrt{(2\pi)^N\det\Sigma}} \tag{22}$$

其中 $\Sigma=(\beta K)^{-1}$，且 $\mu=-K^{-1}b$。这里 K 是一个描述两两相互作用的半正定矩阵，而 b 是一个描述线性能量项的向量。参考文献 [46]对二次过阻尼系统的热力学进行了刻画。

相应的熵产生可以表示为 μ 的欧几里得度量和 Σ 的 $\mathcal{BW}$ 度量在时间上的积分，即

$$\beta W_{\mathrm{diss}}=\int_0^\tau dt\ |\dot{\mu}(t)|^2 \\ +\frac{1}{2}\int_0^\tau dt\,\mathrm{Tr}\left[\int_0^\infty d\nu\ e^{-\nu\Sigma(t)}\dot{\Sigma}(t)e^{-\nu\Sigma(t)}\dot{\Sigma}(t)\right]. \tag{23}$$

在我们的应用中，通常假设 μ为常数，因为它只会使分布产生无关紧要的平移。此外，通常还可以假设 $\Sigma_0\ \propto\ \mathbb{1}$,

这简化了分析。特别是，当 Σ_0和 Σ_1 对易，即 $[\Sigma_0, \Sigma_1] = 0$时，平方 $\mathcal{BW}$距离可分解为对 Σ_i的特征值 $\sigma_{i,\alpha}$ 求和，从而得到闭式公式 $\mathcal{BW}(\Sigma_0, \Sigma_1)^2 = \sum_\alpha (\sqrt{\sigma_{0,\alpha}} - \sqrt{\sigma_{1,\alpha}})^2$。

C. 一般优化原则：对称性与慢驱动

耗散 $W_{\rm diss}$ (23) 及其可实现的最小值 $\mathcal{BW}$ (20) 的表达式，因而是设计高斯热力学计算最优及近最优协议的核心。在深入探讨具体协议之前，值得先讨论几点考量。

首先，由于 β^{-1} 自然地设定了问题的能量尺度，很容易注意到，变换$\beta^{-1} \to \lambda\beta^{-1}$ 会得到 $\Sigma(t) \to \lambda\Sigma(t)$ 代入 式（23）后，立即可得 $W_{\rm diss} \to \lambda W_{\rm diss}$。因此，$W_{\rm diss}$ 与温度呈线性关系，这正如预期。

其次，我们可以注意到，式（23）自然导出了耗散的尺度不变性：对于给定的有限时间协议 $K(t)$，在变换 $K(t) \to K'(t) = \lambda K(\lambda t)$ （其中 $\tau_D \to \tau_D/\lambda$ 和 $\lambda > 0$）下，耗散保持不变；也就是说，将其幅度放大 λ 倍，同时以相同倍数加速，耗散仍然不变。事实上可以看到，给定与驱动 $K(t)$ 相关的动力学解 $\Sigma(t)$，重新缩放后的 $\Sigma'(t) = \lambda^{-1}\Sigma(\lambda t)$ 对应于 $K'(t)$ 的一个解。将其代入式（23），同一变换得到 $W_{\rm diss} \to W_{\rm diss}$，因此该量在这种时间-强度缩放下保持不变（更多详情见附录 B）。这种对称性意味着，将协议的强度放大 λ 倍，同时将其持续时间压缩至 τ/λ，会产生等价的热力学结果。这种标度对称性在具有相同 EDDP 的协议族中定义了一个等价类。由此直接可知，原则上应使用现有物理硬件所允许的 λ 最高值。事实上，任何由 $\rho_0(x)$ 得到并编码在 $\rho_1(x)$ 中的计算，都等价于由 $\rho'_0(x) \propto \rho_0(\sqrt{\lambda}x)$ 得到并编码在 $\rho'_1(x) \propto \rho_1(\sqrt{\lambda}x)$ 中的计算，且两者属于同一等价类中的协议。然而，任何物理设备的 λ 值都会存在上限，这既是因为能量势 K 的可实现强度有限，也因为从展宽为 Σ 的分布中采样时分辨率有限。

最后需要指出，在我们的分析中，通常会考虑 τ_D 和 τ_S 远大于热化速率 γ^{-1}的情形。事实上，要使计算误差 ε^2较小，就需要较大的 τ_S；而根据式（14），较大的 τ_D 则使耗散较小成为可能。从动力学驱动的角度来看，这通常称为慢驱动机制 [62–64]，其假设是，$V(x, t)$ 随时间的变化速率足够慢，从而使状态 $\rho(x, t)$ 始终接近与 $V(x, t)$ 对应的热 $\rho^{\rm th}(x)$。更具体地说，可以展开

$$\Sigma(t) = \beta^{-1}K^{-1}(t) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\tau_D}\right) \tag{24}$$

并将其代入式（23），以表示 $W_{\rm diss}$，精确到$\mathcal{O}\left(\tau_D^{-2}\right)$ 阶修正 [46]。也就是说，在慢驱动机制下，我们不需要求解 ρ（x，t）和 Σ（t）的动力学方程，而可以直接用驱动 K（t）来表示热力学性能。

IV. 控制和可用信息受限时协议的 EDDP

到目前为止，我们的分析一直聚焦于对系统分布 ρ（x，t）随时间的受控演化。然而在实践中，我们无法直接操纵系统的状态，只能操纵其能量势 V（x，t）。本节将聚焦于刻画和优化高斯热力学计算中算法第1步过程中产生的熵产生，并据此刻画和优化算法整体的 EDDP。我们将采用不同方法和不同类别的方案。

A. 淬火

我们先来考虑所需控制和知识最少的方案：淬火。淬火是指势能 $V(x,0) = V_0(x)$ 立即、瞬时地转变为 $V(x,0^+) = V_1(x)$，并设定一个固定的等待时间，使系统在我们开始步骤2时足够接近平衡态。这些淬火的耗散能由协议的边界条件决定，与平衡化的等待时间无关，因为我们假设最终状态接近平衡态（参见附录C）

$$W^Q_{\rm diss} = \frac{1}{2}k_BT\left(\mathrm{Tr}\left[K_1K_0^{-1} - \mathbb{1}\right] + \ln\left[\frac{\det K_0}{\det K_1}\right]\right), \tag{25}$$

这使得能量-延迟-缺陷乘积随 τ_D 线性增长：EDDP $^Q = W^Q$ 耗散τ_D。

B. 测地线

然而，由Bures-Wasserstein距离给出的最优可达EDDP并不随 τ_D缩放：$\min_{(K(t),\Sigma(t))}$ EDDP $= \mathcal{BW}(\Sigma_0, \Sigma_1)/(\beta\gamma)$。从这个最小EDDP可以看出，常数 $\beta\gamma$ 决定了问题的尺度，这是上一节所讨论的对称性的结果。由于重新缩放这些常数不会影响最小化问题，因此在本节余下部分我们将设定 $\beta = 1$ 和 $\gamma = 1$，以简化记号。最小EDDP由测地线[2] 状态轨迹实现

$$\Sigma_{\rm geo}(t) = \left(\frac{t}{\tau_D}\sqrt{\Sigma_1} + \frac{\tau_D - t}{\tau_D}\sqrt{\Sigma_0}\right)^2. \tag{26}$$

[2] 之所以称其为测地线，是因为这条轨迹的长度使 Bures-Wasserstein距离最小。

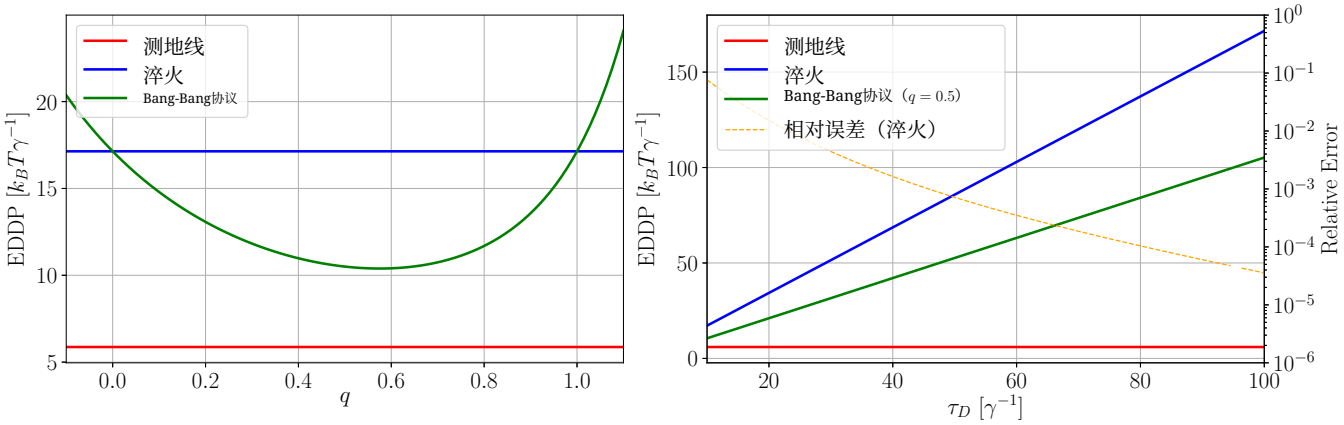

图 2. 从 Wishart 分布中抽取的 K_1 矩阵的 500 个样本的平均 EDDP，其期望值为 $K_0 = \mathbb{1}$，自由度为 20。（左）比较测地线、淬火和 Bang-Bang 协议的 EDDP 随插值参数 q 的变化情况，驱动时间为 $\tau_D = 10\gamma^{-1}$。定性而言，随着驱动时间增加，Bang-Bang EDDP 曲线的形状保持不变。（右）比较测地线、淬火和 Bang-Bang 协议的 EDDP 随驱动时间 τ_D 的变化情况，其中 Bang-Bang 协议的参数为 $q = 0.5$。此外，还展示了淬火协议的相对误差（$\sqrt{\mathrm{Tr}\left[(\Sigma(\tau_D) - K_1^{-1})^2\right]/\mathrm{Tr}\left[K_1^{-2}\right]}$）随驱动时间的变化情况。Bang-Bang 协议的相对误差略大（且取决于 q），但处于同一数量级。

该轨迹可以通过以下控制得到（参见附录C）

$$K_{\mathrm{geo}}(t) = \left[\mathbb{1} - \frac{\chi_{(0,\tau_D)}(t)}{\tau_D}\Delta_{\mathrm{geo}}(t)\right]\Sigma_{\mathrm{geo}}(t)^{-1}, \quad (27)$$

$$\Delta_{\mathrm{geo}}(t) := \frac{t}{\tau_D}\Sigma_1 + \frac{\tau_D - 2t}{\tau_D}\sqrt{\Sigma_1} - \frac{\tau_D - t}{\tau_D}\mathbb{1} \quad (28)$$

其中 $\chi_{(0,\tau_D)}(t)$ 是开区间 $(0, \tau_D)$ 的示性函数。此外，与朴素淬火相比，该协议还有另一项优势：它能在 τ_D 时精确达到所需状态，其协方差矩阵为 Σ_1。测地线协议通过“超调”最终控制量 K_1 来实现这一性质，使得状态在 $t = \tau_D$ 时能够达到 Σ_1（而非渐近收敛到该状态），然后再淬火“回到” K_1。

然而，这条测地线控制轨迹的连续部分和淬火都需要了解Σ_1。通常，算法的目标恰恰是从分布 ρ_1中提取信息。因此，我们必须假设并不预先了解该分布，也就不了解 Σ_1，因而无法在步骤 1中实施测地线协议。

C. Bang-Bang 协议

接下来，我们将研究如何改进淬火方案，并通过只需对矩阵进行插值的方案，使其接近最小 EDDP K_0 和 K_1。为了说明我们能够利用什么、又无法利用什么，我们将通过一个具体算法的案例研究来评估这些方案的 EDDP：矩阵求逆。在此情况下，输入为矩阵 K_1，目标是计算其逆矩阵。由于热态的协方差矩阵为 $\Sigma_{th} = K^{-1}$，要在步骤1 中计算逆矩阵，我们将控制从 K_0 驱动至 K_1，然后在步骤2期间对胶体粒子的位置进行采样，从而重建协方差矩阵。利用代价函数的尺度对称性（见第IIIC 节，详见附录B），我们注意到，经过对整个问题进行标量重整化后，可以令 $K_0 = \mathbb{1}$。此外，关于 K_1 所采样的矩阵集合的部分信息，也可用于优化初始化尺度 $K_0 = \mathbb{1} \to K_0 = \lambda\mathbb{1}$，见附录D。

通过淬火能够实现的最简单改进之一，是将淬火分为两个步骤；已有研究表明，快速驱动系统的能量最优协议是“Bang-Bang协议” [65]。该过 $t = 0$ 程首先在 K_0 时刻将控制量从初始值 K_*淬火至中间值，然后让系统热化 $\tau_D/2$，再进行第二次淬火，将控制量调至最终值 K_1，并让系统在剩余时间内弛豫 $\tau_D/2$。我们得到耗散功为（参见 附录C）

$$W_{\mathrm{diss}}^{\text{Bang-Bang}} = W_{\mathrm{diss}}^{Q} - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left[(K_1 - K_*)(K_0^{-1} - \Sigma_*)\right], \quad (29)$$

其中 $\Sigma_* = e^{-K_*\tau_D/2}\Sigma_0 e^{-K_*\tau_D/2} + (\mathbb{1} - e^{-K_*\tau_D})K_*^{-1}$ 是状态在 $t = \tau_D/2$时的协方差。由于我们只能访问 K_0 和 K_1 的插值，因此可以自然地将中间控制写为 $K_* = qK_1 + (1-q)K_0$，其中 q 是插值参数。为评估该协议的性能，我们计算从均值为 $K_0 = \mathbb{1}$的 Wishart 分布中采样得到的 K_1 实例所对应的 EDDP。在图 2 中，我们展示了 Bang-Bang 协议、淬火协议和测地线协议的平均 EDDP，分别作为插值参数 q 和驱动时间 τ_D的函数。我们只考虑大于 $10\gamma^{-1}$ 的驱动时间，因为对于淬火协议和 Bang-Bang 协议，我们需要 $\Sigma(\tau_D)$ 相对接近目标热态 K^{-1}（而对于测地线协议，误差为零）。我们使用希尔伯特–施密特范数来量化相对误差

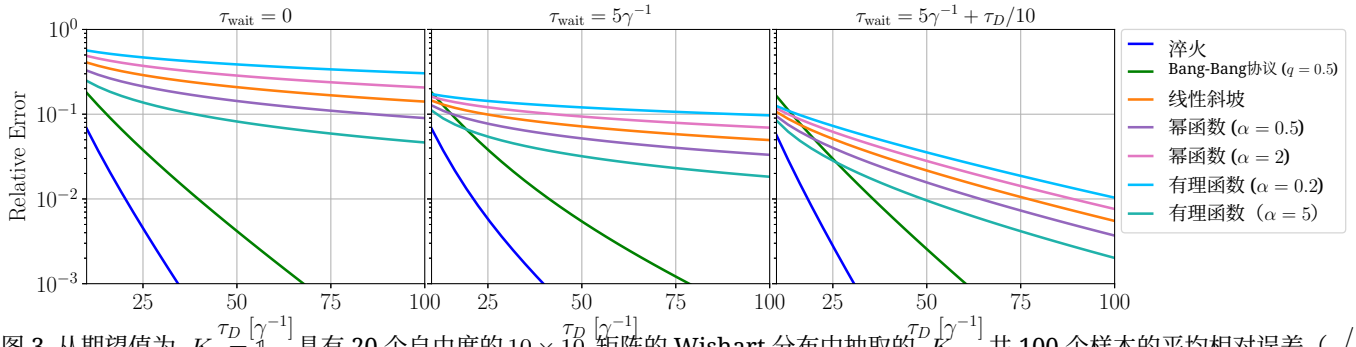

图 3. 从期望值为 $K_0 = \mathbb{1}$、具有 20 个自由度的 10×10 矩阵的 Wishart 分布中抽取的 K_1，共 100 个样本的平均相对误差（$\sqrt{\text{Tr}\left[(\Sigma(\tau_D) - K_1^{-1})^2\right]/\text{Tr}\left[K_1^{-2}\right]}$）。图中展示了不同协议的相对误差随 τ_D ($\tau_D \in [10\gamma^{-1}, 100\gamma^{-1}]$) 变化的情况，对应多个 τ_{wait} 值：（左）无弛豫时间；（中）固定等待时间；（右）自适应等待时间。

总体而言，我们可以观察到，当插值参数约为$q \approx 0.5$时，Bang-Bang 协议带来了显著改进。然而，EDDP 相对于 τ_D 的标度关系仍为线性。

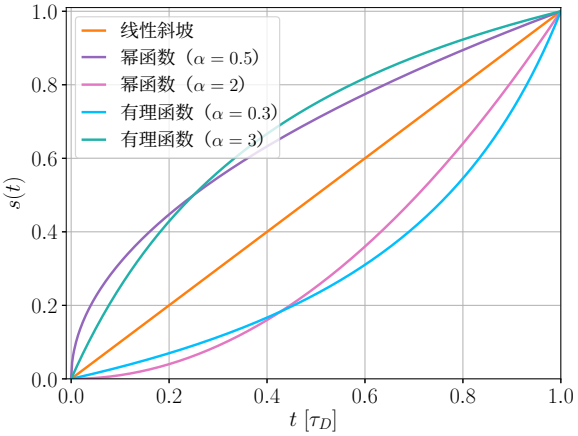

图 4. 幂函数族和有理函数族的连续驱动函数示例。

D. 连续协议

我们可以通过考虑使控制从 K_0 连续变化到 K_1的方案，进一步进行更精细的改进。由于我们仅考虑边界条件的插值，因此可以将这类方案写成 $K(t) = s(t)K_1 + (1 - s(t))K_0$，其中 $s(t)$是一个双射且非递减的[3] 映射，从 $[0, \tau_D]$ 到 $[0, 1]$。这里，我们将考虑 $s(t)$的两类函数：

$$s_{\text{Powers}}(t) = \frac{t^\alpha}{\tau_D^\alpha}\ , \tag{30}$$

$$s_{\text{Rationals}}(t) = \frac{\alpha t}{\tau_D + (\alpha - 1)t}\ , \tag{31}$$

[3] 鉴于该问题的几何性质，显然无需在此问题中考虑非双射映射，因为对于任意非双射映射，都可以轻易构造出一个耗散更小的双射映射。

其中 $\alpha > 0$ 是一个自由参数。当 $\alpha = 1$ 时，这些函数与线性斜坡重合：$K(t) = \frac{t}{\tau_D} K_1 + \frac{\tau_D - t}{\tau_D} K_0$。我们在图4中展示了这两类方案的若干示例。值得注意的是，这些方案都无法普遍地很好地逼近测地线。事实上，若考察 $K_{\text{geo}}(t)$ 在式（27）中对于标量情形（即取 1×1 矩阵的平凡情形）的最优控制的凹性，我们可以看到它在内部始终是凸的。而对于这些插值方案，当 $K_0 - K_1$ 改变符号时，凸性会转为凹性（反之亦然）。

正如上文讨论中所提到的，除非驱动时间 τ_D 相对于热化时间尺度 γ^{-1} 足够长，否则系统在步骤 1 结束时的状态将无法充分接近热分布，因而无法在步骤 2中开始采样。因此，在分析连续协议的 EDDP 之前，我们先分析它们在步骤 1结束时产生的相对误差。根据 公式 (24)，对于连续驱动协议，$\Sigma(\tau_D)$的相对误差按 $(\gamma\tau_D)^{-1}$ 缩放。不过值得注意的是，一旦将控制固定在K_1，系统状态便会以指数速度收敛至热分布。因此，对于淬火和 Bang-Bang 协议，误差按 $e^{-\gamma\tau_D}$缩放。基于同样的推理，在步骤 2开始时存在的任何误差，也会在采样过程中以指数速度减小，因为采样期间状态会持续热化。

为了尽可能减小误差，我们也可以利用这种指数弛豫来处理连续驱动协议，将部分驱动时间专门用于热化。更具体地说，我们可以将连续驱动协议的步骤1分为两部分：a. 从 K_0 （在 $t = 0$时）连续驱动系统至 K_1 （在 $t = \tau_D - \tau_{\text{wait}}$时）；b. 让系统热化，持续时间为 τ_{wait} （从 $t = \tau_D - \tau_{\text{wait}}$ 到 $t = \tau_D$）。在图3 中，我们展示了 Σ（τ_D）的相对误差随 τ_D 的变化情况，并比较了不同等待时间的影响。左图显示，由于连续驱动协议的误差衰减较慢（与淬火和 Bang-Bang 协议相比），在没有等待时间时，需要相当长的协议才能获得合理的相对误差。加入恒定等待时间

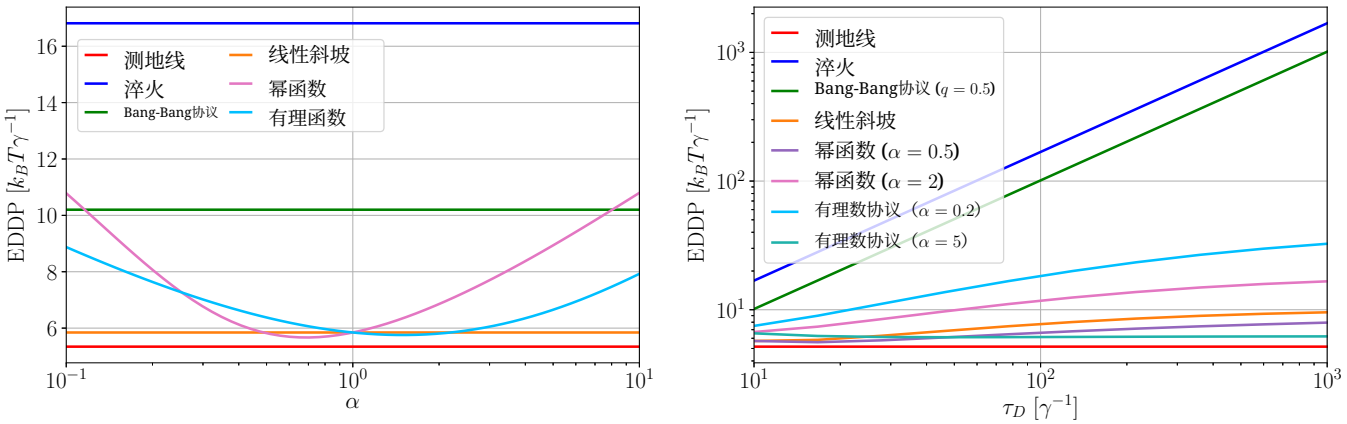

图5. 从 Wishart 分布中抽取的 K_1 个样本的平均 EDDP；该分布对应于期望值为 $K_0 = \mathbb{1}$ 、具有 20 个自由度的 10×10 矩阵。（左）Powers 幂函数协议族和有理数协议族的 EDDP 随自由参数 α 的变化，其中 $\tau_D = 10\gamma^{-1}$ 和 $\tau_{\text{wait}} = 5\gamma^{-1}$。将其与测地线、淬火、Bang-Bang协议（$q = 0.5$）以及线性斜坡协议的 EDDP 进行比较。（右）比较一组协议的 EDDP 随 τ_D 的变化。

（中图）后，情况得到了一定改善，但标度关系保持不变。若采用一个随 τ_{wait} 变化的 τ_D（右图），则可以改善标度关系，并像淬火和 Bang-Bang 协议那样使误差呈指数衰减。下文中，我们将仅讨论等待时间恒定的情形，因为对于我们的分析而言，只要在步骤1结束时具有足够小的相对误差即可。

在 图5 中，我们研究这些连续协议的 EDDP 如何随自由参数 α 变化，并将其与测地线、淬火和 Bang-Bang 协议的性能进行比较。可以看到，对于相对较快的协议（$\tau_D = 10$ 在左图中），连续协议的表现远优于淬火和 Bang-Bang 协议，因为它们的表现非常接近测地线。此外，线性斜坡协议也是对连续协议最直观的猜测，对于这两个协议族而言都已接近最优。就相对于 τ_D 的标度关系而言，连续协议的表现显著优于淬火和 Bang-Bang 协议。从右图可以清楚地看到，连续协议的 EDDP 与 τ_D呈次线性标度关系。然而，我们还可以进一步证明，在慢驱动极限下，它会收敛到一个常数：将 式（24）代入式（23），并利用沿这些协议有 $[K(t)\ K(t')] = 0$ 这一事实（因为我们选择了 $K_0 = \mathbb{1}$），可得

$$\text{EDDP} = \frac{\tau_D}{4} \int_0^{\tau_D} dt\ \text{Tr}\left[\frac{\dot{K}(t)^2}{K(t)^3}\right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\tau_D}\right). \qquad (32)$$

根据构造，插值满足 $\dot{s}(t) \propto \tau_D^{-1}$，因此我们可以证明，公式（32）的主阶与 τ_D无关。此外，由于 τ_S 在步骤2 中的采样时间需要远大于 γ^{-1}，我们可以假设 τ_D 也满足这一条件，并进入慢驱动机制（同时仍能使其相对于 τ_S 保持较小，并维持较大的品质因数 Q）。在这种情况下，我们可以忽略等待时间，因为在慢驱动机制下，系统状态始终接近 to 整个过程中的热分布 议。

E. 慢驱动方案

由于淬火和 Bang-Bang 协议的 EDDP 随 τ_D变化，因此在慢驱动机制下会发散。因此，我们无法将其与连续协议的 EDDP 进行比较。在图6 中，我们研究了慢驱动机制下不同连续协议的 EDDP 如何随自由参数 α 和矩阵维数变化。总体而言，我们可以发现，所考虑的大多数连续协议的表现都相对接近由测地线给出的最优 EDDP。例如，参数为 $\alpha \approx 4$ 的有理数协议与理论最优值非常接近。还值得注意的是，我们可以通过采用线性斜坡协议，以牺牲 EDDP 为代价换取简便性；该协议的 EDDP 约为测地线的两倍。我们还研究了 EDDP 对矩阵维数 d的依赖关系，观察到随着矩阵维数增加，会出现线性标度关系，且该关系高度依赖于具体协议。事实上，这可以由式（32）证明：由于该协议满足 $[K(t)\ K(t')] = 0$，我们可以将其改写为特征值 $k_i(t)$ 的 $K(t)$之和。

$$\text{EDDP} = \frac{\tau_D}{4} \sum_{i=1}^{d} \int_0^{\tau_D} dt \frac{\dot{k}_i(t)^2}{k_i(t)^3} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\tau_D}\right). \qquad (33)$$

由于特征值服从相同的分布，我们可以证明，随着d 增大，EDDP 与维数呈线性标度关系（参见附录C）。因此，我们可以分析慢驱动 EDDP 随自由参数 α变化的标度关系，如图7所示。我们观察到的结果与之前对 $d = 10$ 的发现非常相似，不过，最接近理论最优值的协议变成了满足$\alpha \approx 3.2$的有理协议。

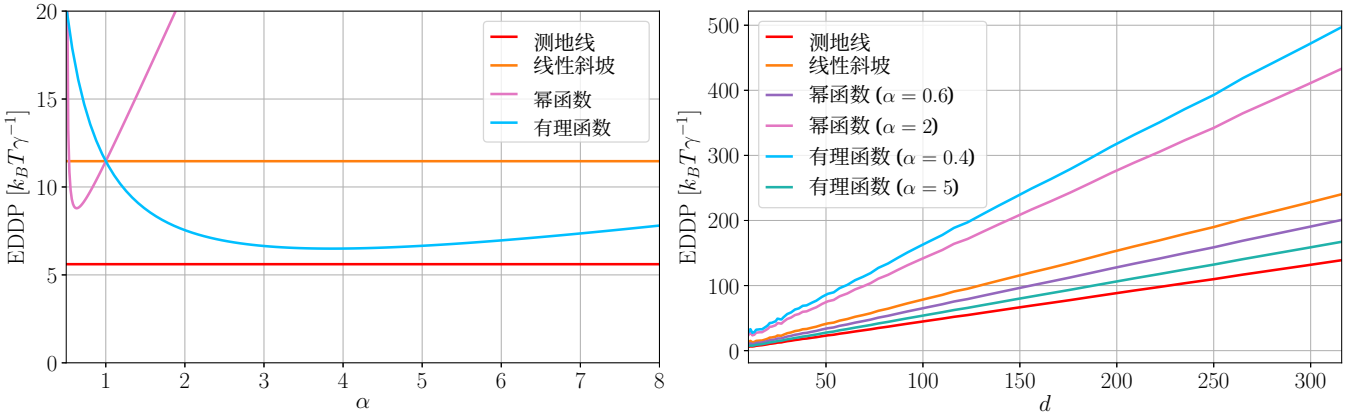

图 6. 对从 Wishart 分布中抽取的 200 个 K_1 样本，在具有期望值 $K_0 = \mathbb{1}$ 和 $2d$ 个自由度的 $d \times d$ 矩阵上，慢驱动机制下的平均 EDDP。（左）幂函数和有理函数协议族的 EDDP 随自由参数 α 变化的情况，其中 $d = 10$。并将其与测地线和线性斜坡协议的 EDDP 进行比较。（右）一组协议的 EDDP 随矩阵维数 d变化的比较。

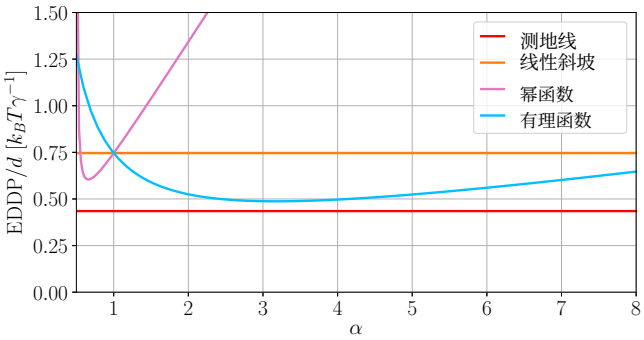

图 7. 对从 Wishart 分布中抽取的 150 个 K_1 样本，在具有期望值 $K_0 = \mathbb{1}$ 和 $2d$ 个自由度的 $d \times d$ 矩阵上，慢驱动 EDDP 随矩阵维数 d （即 EDDP/d）变化的平均标度关系。我们比较幂函数和有理函数协议族的 EDDP 标度关系随自由参数 α变化的情况，并将其与测地线和线性斜坡协议的 EDDP 标度关系进行比较。

V. 任意时变势能与热力学神经网络的 EDDP 界

现在，我们总结一下，用于量化 EDDP 权衡的几何方法如何扩展到二次势中的过阻尼布朗粒子之外。同一种几何方法，即通过输运距离衡量熵产生，适用于任意势能、欠阻尼（相空间）朗之万动力学，甚至离散马尔可夫跳跃过程，不过在可计算性和紧致性方面有重要限制。下面我们将更详细地讨论这些扩展。

在此参数范围内，我们保留式（4）中的过阻尼朗之万模型，但现在允许任意势能函数 $V(x,t)$。由此得到的熵产生下界具有相同的结构，即，

$$W_{\mathrm{diss}} \geq \frac{1}{\beta\gamma\tau_D}\mathcal{W}^2(\rho_0,\rho_1), \tag{34}$$

在实践中，对于一般（非高斯） $\mathcal{W}$ ，输运距离$\rho_{0,\ 1}$。重要的是，从式（20）得到的 Bures-Wasserstein 距离界适用于任意势能，且仅使用分布的前两个矩，即

$$\mathcal{W}^2(\rho_0,\rho_1) \geq \|\mu_0-\mu_1\|^2 + \operatorname{Tr}\Sigma_0 + \operatorname{Tr}\Sigma_1 - 2\operatorname{Tr}\left[(\Sigma_0^{1/2}\Sigma_1\Sigma_0^{1/2})^{1/2}\right], \tag{35}$$

其中 $\mu_{0,\ 1}$ 和 $\Sigma_{0,\ 1}$ 分别是$\rho_{0,\ 1}$的均值和协方差。即使协议端点并非简单的高斯态（当驱动协议为非二次型时就会出现这种情况），我们也可以据此界定 EDDP 乘积。

事实上，并非所有热力学算法都需要访问吉布斯态。近期相关研究，尤其是文献 [36, 49, 66], ，展示了一种有趣的方法：利用任意势能下的朗之万动力学进行计算，并在选定的观测时刻进行采样，也就是说，无需完全平衡。下面我们将在介绍本研究结果时简要讨论这种方法。

热力学神经网络是有用的基于朗之万动力学的计算的一个例子，它既不需要完全平衡，也不依赖二次势能 [49]。单个热力学神经元是一个受高阶势能约束的标量自由度，其表达式为

$$U_J(x,I) = -Ix + J_2x^2 + J_3x^3 + J_4x^4, \tag{36}$$

其中， $J = (J_2,\ J_3,\ J_4)$ 指定耦合参数， I 表示输入（偏置）信号。网络通过以下方式构成：

通过双线性项耦合这类神经元，使器件的总势能表示为

$$V(x,I)=\sum_i U_J(x_i,b_i)+\sum_{<i,j>} J_{ij}x_ix_j+\sum_{i,j} W_{ij}I_ix_j. \tag{37}$$

此类设备的时间演化由式（4）中的过阻尼朗之万动力学所支配。在这一范式中，人们会在数字设备上使用例如基于梯度的方法训练网络，使热力学设备在规定的测量时间 τ_M产生所需的输入函数。该输出的获取方式与本文讨论的方案类似，即在测量时间τ_M 对网络进行采样，然后取平均值。

在我们的结果背景下，这类有限时间计算也遵循与式（17）中类似的 EDDP，在采样时间、耗散和计算质量之间进行权衡。唯一的区别在于，现在式（14）给出的耗散下界必须用驱动协议初始点和终点处表征该设备的实际分布之间的距离来表示。若能进一步了解第IV节中讨论的驱动方案（例如有理数协议）是否也接近由测地线所规定的最优协议，将会很有意思。

最后，我们指出，所讨论的界也可以推广至欠阻尼动力学和离散系统。在前一种情况下，可以将式（34）中的过阻尼界应用于相空间密度的位置边缘分布。这会得到耗散的有效下界，但动量自由度通常会使相应的界无法取紧。文献 [67]讨论了离散系统中类似的几何界。值得注意的是，这些界可以通过操作度量（例如总变差或相对熵界）得到实用的下界，从而为离散热力学算法的最小耗散提供与模型无关的估计。

VI. 结论与展望

在本研究中，我们刻画了基于朗之万动力学的热力学算法的能量–延迟乘积（EDP）。在这类算法中，耗散演化会自然地驱动系统趋向计算结果。首先，我们利用耗散的几何界，推导出了能量–延迟–缺陷乘积（EDDP）的一般界限——EDDP 是 EDP 的推广，将热力学计算的随机性纳入其中 [50, 51]。尽管这些界限原则上可以通过物理演化达到饱和，但相应的最优驱动方案需要知道最终平衡态，即问题的解。这促使我们开发了仅使用部分信息和有限控制的准最优方案，并在矩阵求逆的背景下进行了验证。所推导的方案不需要先验信息，并且能够逼近基本热力学极限。

尽管我们的分析聚焦于过阻尼二次系统的线性反演问题，EDDP界仍可推广至一般势能和欠阻尼动力学——不过，只有在二次哈密顿量和高斯态下，这些界才是紧的 [46]。具体而言，这些界可直接应用于文献 [49]中最近提出的热力学网络框架。

展望未来，自然可以进一步探讨朗之万系统以外的其他热力学计算模型中的类似权衡，例如，参见 [68, 69], ；也可以更广泛地研究基于物理的计算。最小热力学逻辑门 [17–19] 以及基于能量的机器学习模型 [70]中，已经观察到相关的能量约束。广义 EDDP 提供了一种自然的度量来刻画此类权衡；我们预计，类似热力学不确定关系的统一原理最终或可为广泛的物理计算架构中的 EDDP 给出普适界限。这些成果有望为设计更接近基本能量极限运行的计算硬件和算法提供切实可行的指导。

致谢

我们衷心感谢 Nicolas Brunner、Sadra Boreiri、Jake Xuereb、Sam Duffield 和 Denis Melanson 富有成效且富有见地的讨论。

A.R. 感谢瑞士国家科学基金会（Postdoc.Mobility 资助项目“CATCH”P500PT225461）以及欧洲研究委员会（Consolidator 资助项目“Cocoquest”101043705）的资助。P.A. 感谢奥地利科学基金（FWF）项目 I-6004 和 ESP2889224 的资助。P.L.-B. 感谢波兰国家科学中心通过 Sonata 项目 2023/51/D/ST2/02309 提供的资助。M.P.-L. 感谢由西班牙 MICIU/AEI/10.13039/501100011033 资助的 ATR2024-154621 项目提供的支持。M.A. 和 P.J.C. 感谢先进研究与发明局（ARIA）的 Scaling Compute 项目提供的资助。

[1] J. Burr 和 A. Peterson，爱达荷大学，《*1991* 年第三届美国国家航空航天局超大规模集成电路设计研讨会》，技术报告（美国国家航空航天局，1991 年）。

[2]D. Marković、A. Mizrahi、D. Querlioz 和 J. Grollier，《神经形态计算的物理学》，《自然综述：物理学》**2**，499（2020年）。

[3] T. Conte、E. DeBenedictis、N. Ganesh、T. Hylton、J. P. Strachan、R. S. Williams、A. Alemi、L. Altenberg、G. Crooks、J. Crutchfield、L. del Rio、J. Deutsch、M. De-Weese、K. Douglas、M. Esposito、M. Frank、R. Fry、P. Harsha、M. Hill、C. Kello、J. Krichmar、S. Kumar、S.-C. Liu、S. Lloyd、M. Marsili、I. Nemenman、A. Nugent、N. Packard、D. Randall、P. Sadowski、N. Santhanam、R. Shaw、A. Stieg、E. Stopnitzky、C. Teuscher、C. Watkins、D. Wolpert、J. Yang 和 Y. Yufik，热力学计算（2019年）。[4] P. J. Coles、C. Szczepanski、D. Melanson、K. Donatella、A. J. Martinez 和 F. Sbahi，热力学人工智能与涨落前沿，载于《2023 IEEE 重启计算国际会议》（ICRC），IEEE（IEEE，2023年），第 1–10 页。[5] R. Landauer，计算过程中的不可逆性与热量产生，《IBM 研究与开发杂志》5，183（1961年）。[6] E. Friedman，同步数字集成电路中的时钟分配网络，《IEEE 会刊》89，665（2001年）。[7] A. Chandrakasan、S. Sheng 和 R. Brodersen，低功耗互补金属氧化物半导体数字设计，《IEEE固态电路期刊》27，473（1992年）。[8] K. Roy、S. Mukhopadhyay 和 H. Mahmoodi-Meimand，深亚微米CMOS电路中的漏电流机制与漏电降低技术，《IEEE 会刊》91，305（2003年）。[9] M. Horowitz，1.1 计算的能耗问题（以及我们能采取的措施），载于《2014 IEEE 固态电路国际会议技术论文摘要》（ISSCC），IEEE（IEEE，2014年），第 10–14 页。[10] D. H. Wolpert、J. Korbel、C. W. Lynn、F. Tasnim、J. A. Grochow、G. Kardeş、J. B. Aimone、V. Balasubramanian、E. De Giuli、D. Doty、N. Freitas、M. Marsili、T. E. Ouldridge、A. W. Richa、P. Riechers、E. Roldán、B. Rubenstein、Z. Toroczkai 和 J. Paradiso，随机热力学是理解计算能耗的关键吗？《美国国家科学院院刊》121，2321112121（2024年）。[11] P. Chattopadhyay、A. Misra、T. Pandit 和 G. Paul，兰道尔原理与计算热力学，《Reports on Progress in Physics》88，086001（2025年）。[12] P. Chattopadhyay 和 G. Paul，理解计算热力学：教学性综述，《量子信息处理》24，305（2025年）。[13] K. Proesmans、J. Ehrich 和 J. Bechhoefer，有限时间兰道尔原理，《物理评论快报》125，100602（2020年）。[14] T. Van Vu 和 K. Saito，有限时间量子兰道尔原理与量子相干性，《物理评论快报》128，010602（2022年）。[15] A. Rolandi 和 M. Perarnau-Llobet，超越弱耦合的有限时间兰道尔原理，《量子》7，1161（2023年）。[16] P. Taranto、F. Bakhshinezhad、A. Bluhm、R. Silva、N. Friis、M. P. Lock、G. Vitagliano、F. C. Binder、T. De-barba、E. Schwarzhans、F. Clivaz 和 M. Huber，兰道尔还是能斯特：冷却量子系统的真正代价是什么？《PRX Quantum》4，010332（2023年）。[17] D. H. Wolpert 和 A. Kolchinsky，利用电路进行计算的热力学，《新物理学杂志》22，063047（2020年）。[18] N. Freitas、J.-C. Delvenne 和 M. Esposito，随机非线性电子电路的热力学：一种在 kT 附近进行计算的现实框架，Physical Review X 11, 031064（2021年）。[19] C. Y. Gao 和 D. T. Limmer，基于随机电路模型的低耗散计算原理，Phys. Rev. Res. 3, 033169（2021年）。[20] M. Konopik、T. Korten、E. Lutz 和 H. Linke，可并行化计算的有限时间基本能量成本，Nature Communications 14, 10.1038/s41467-023-36020-2（2023年）。[21] F. Meier、M. Huber、P. Erker 和 J. Xuereb，自主量子处理单元：自主热计算机及其物理限制（2024年）。[22] A. Auffèves，量子技术需要一项量子能源倡议，PRX Quantum 3, 020101（2022年）。[23] G. Manzano、G. Kardeş、E. Roldán 和 D. H. Wolpert，具有绝对不可逆性、单向跃迁和随机计算时间的计算热力学，Phys. Rev. X 14, 021026（2024年）。[24] T. Van Vu 和 K. Saito，热力学中的时间—代价—误差权衡关系：第三定律及其延伸，Physical Review X 15, 10.1103/l6b9-rg1j（2025年）。[25] A. Bérut、A. Arakelyan、A. Petrosyan、S. Ciliberto、R. Dillenschneider 和 E. Lutz，连接信息与热力学的兰道尔原理的实验验证，Nature 483, 187（2012年）。[26] Y. Jun、M. Gavrilov 和 J. Bechhoefer，在反馈陷阱中对兰道尔原理进行高精度检验，Phys. Rev. Lett. 113, 190601（2014年）。[27] J. Hong、B. Lambson、S. Dhuey 和 J. Bokor，在纳米磁性存储比特上执行单比特操作的兰道尔原理实验检验，Science Advances 2, 10.1126/sciadv.1501492（2016年）。[28] L. Martini、M. Pancaldi、M. Madami、P. Vavassori、G. Gubbiotti、S. Tacchi、F. Hartmann、M. Emmerling、S. Höfling、L. Worschech 和 G. Carlotti，对不同尺寸纳米磁性开关中的兰道尔擦除进行实验与理论分析，Nano Energy 19, 108（2016年）。[29] R. Gaudenzi、E. Burzurí、S. Maegawa、H. S. J. van der Zant 和 F. Luis，利用分子纳米磁体实现量子兰道尔擦除，Nat. Phys. 14, 565（2018年）。[30] M. Scandi、D. Barker、S. Lehmann、K. A. Dick、V. F. Maisi 和 M. Perarnau-Llobet，通过热力学长度在量子点中实现最小耗散的信息擦除，Phys. Rev. Lett. 129, 270601（2022年）。[31] M. Horowitz、E. Alon、D. Patil、S. Naffziger、R. Kumar 和 K. Bernstein，互补金属氧化物半导体的标度关系、功耗与未来，载于 IEEE 国际电子器件会议（2005年），IEDM 技术文摘（IEEE，2005年），第 9–15 页。[32] M. P. Frank，可逆计算导论：动机、进展与挑战，载于第二届计算前沿会议论文集 CF05（计算机协会，纽约，纽约州，美国，2005年），第 385–390 页。[33] J. Puebla、J. Kim、K. Kondou 和 Y. Otani，用于节能数据存储和能量采集的自旋电子器件，Communications Materials 1, 24（2020年）。[34] G. Indiveri 和 S.-C. Liu，神经形态系统中的存储器与信息处理，IEEE 会刊 103, 1379（2015年）。[35] D. Melanson、M. Abu Khater、M. Aifer、K. Donatella、M. Hunter Gordon、T. Ahle、G. Crooks、A. J. Martinez,

F. Sbahi 和 P. J. Coles，面向人工智能应用的热力学计算系统，Nature Communications 16, 10 1038 41467 025 59011 2025 . /s - - -x ( )。[36] S. Whitelam，生成式热力学计算（2025年）。[37] T. Hylton，热力学神经网络，Entropy 22, 256 2020( )。[38] A. B. Boyd、J. P. Crutchfield、M. Gu 和 F. C. Binder，热力学过拟合与泛化：预测智能的能量学，《新物理学杂志》27, 063901 2025( )。[39] H. Zhang、X. Zhang、H. Liu 和 Y. Zheng，高性能近场辐射热逻辑计算，《应用物理快报》127, 10.1063/5.0278815（2025年）。[40] M. Aifer、K. Donatella、M. H. Gordon、S. Duffield、T. Ahle、D. Simpson、G. Crooks 和 P. J. Coles，热力学线性代数，《npj非常规计算》1, 13（2024年）。[41] S. Duffield、M. Aifer、G. Crooks、T. Ahle 和 P. J. Coles，热力学矩阵指数与热力学并行性，Phys. Rev. Res. 7, 013147（2025年）。[42] M. Aifer、S. Duffield、K. Donatella、D. Melanson、P. Klett、Z. Belateche、G. Crooks、A. J. Martinez 和 P. J. Coles，热力学贝叶斯推断（2024年）。[43] P. Lipka-Bartosik、K. Donatella、M. Aifer、D. Melanson、M. Perarnau-Llobet、N. Brunner 和 P. J. Coles，二次规划的热力学算法，载于2024年 IEEE 国际重启计算会议（ICRC）（IEEE，2024年），第 1–13 页。[44] K. Donatella、S. Duffield、D. Melanson、M. Aifer、P. Klett、R. Salega me、Z. Belateche、G. Crooks、A. J. Martinez 和 P. J. Coles，可扩展热力学二阶优化（2025年）。[45] E. Aurell、C. Mejía-Monasterio 和 P. Muratore-Ginanneschi，随机热力学中的最优协议与最优传输，Phys. Rev. Lett. 106, 250601 2011( )。[46] P. Abiuso、V. Holubec、J. Anders、Z. Ye、F. Cerisola 和 M. Perarnau-Llobet，多维二次布朗系统的热力学与最优方案，《物理学通讯杂志》6, 063001（2022年）。[47] T. Van Vu 和 K. Saito，最优传输的热力学统一：热力学不确定关系、最小耗散与热力学速度极限，Physical Review X 13, 011013（2023年）。[48] S. Whitelam，通过添加噪声提高热力学计算机的时钟速度，《npj非常规计算》2, 10.1038/s44335-025-00038-0（2025年）。[49] S. Whitelam 和 C. Casert，非平衡态热力学计算（2024年）。[50] A. Dechant 和 Y. Sakurai，Wasserstein距离的热力学解释（2019年）。[51] M. Nakazato 和 S. Ito，基于Wasserstein距离的随机热力学熵产生的几何方面，Phys. Rev. Res. 3, 043093（2021年）。[52] J. M. Rabaey、A. P. Chandrakasan 和 B. Nikolić，数字集成电路，第2版，Prentice Hall 电子与超大规模集成电路丛书（Pearson Education，上萨德尔里弗，纽约州，2003年），含索引。前版：1996年。[53] M. Aifer、S. Duffield、K. Donatella、D. Melanson、P. Klett、Z. Belateche、G. Crooks、A. J. Martinez 和 P. J. Coles，《热力学贝叶斯推断》（2024年）。[54] H. Risken，《福克–普朗克方程》（Springer Berlin Heidelberg，1996年），第 63–95 页。[55] S. Ciliberto，《随机热力学实验：简史与展望》，Phys. Rev. X 7，021051（2017年）。[56] D. Gao、W. Ding、M. Nieto-Vesperinas、X. Ding、M. Rah- man、T. Zhang、C. Lim 和 C.-W. Qiu，《从微米尺度到纳米尺度的光学操控：基础、进展与展望》，Light: Science &; Applica- tions 6，17039（2017年）。[57] K. Sekimoto，《朗之万方程与热力学》，Progress of Theoreti- cal Physics Supplement 130，17（1998年），电子版：https://academic.oup.com/ptps/article-pdf/doi/10.1143/PTPS.130.17/5213518/130-17.pdf。[58] U. Seifert，《随机热力学、涨落定理与分子机器》，Reports on Progress in Physics 75，126001（2012年）。[59] C. Villani，《最优传输》，第 338 卷（Springer Berlin Heidelberg，2009年）。[60] M. Gelbrich，《关于欧几里得空间和希尔伯特空间上测度之间的 l2 Wasserstein度量公式》，Mathematische Nachrichten 147，185（1990年）。[61] R. Bhatia、T. Jain 和 Y. Lim，《关于正定矩阵之间的 Bures–Wasserstein距离》，Expositiones Mathematicae 37，165（2019年）。[62] D. A. Sivak 和 G. E. Crooks，《热力学度量与最优路径》，Phys. Rev. Lett. 108，190602（2012年）。[63] V. Cavina、A. Mari 和 V. Giovannetti，《开放量子系统的慢动力学与热力学》，Phys. Rev. Lett. 119，050601（2017年）。[64] P. Abiuso、H. J. D. Miller、M. Perarnau-Llobet 和 M. Scandi，《量子热力学过程的几何优化》，Entropy 22，1076（2020年）。[65] A. Rolandi、M. Perarnau-Llobet 和 H. J. D. Miller，《快速驱动系统中耗散与功涨落的最优控制》，《新物理学杂志》25，073005 2023( )。[66] G. Tsormpatzoglou、F. Sabo 和 A. Todri-Sanial，《利用振荡神经网络进行逆矩阵计算的热力学启发计算》（2025年）。[67] T. Van Vu 和 Y. Hasegawa，《马尔可夫系统中不可逆性的几何界》，Phys. Rev. Lett. 126，010601（2021年）。[68] P. Lipka-Bartosik、M. Perarnau-Llobet 和 N. Brunner，《通过自主量子热机实现热力学计算》，Science Advances 10，10.1126/sci- adv.adm8792（2024年）。[69] I. V. Vovchenko、A. A. Zyablovsky、A. A. Pukhov 和 E. S. Andrianov，《基于开放量子系统、计算时间与输入规模无关的线性运算热力学协处理器》（2025年）。[70] J. Hnybida 和 S. Verret，《基于能量的模型的最小耗散学习》（2025年）。[71] I. Bengtsson 和 K. Zyczkowski，《量子态的几何：量子纠缠导论》（剑桥大学出版社，2009年）。

A. 二次系统

1. 动力学

我们考虑由 N 布朗粒子构成的系统，其位置向量为 x ，粒子间通过任意二次时变势能 $V(x,\ t)$相互作用，即

$$V(x,t)=\frac{1}{2}x^{T}K(t)x\ . \tag{A1}$$

对称半正定矩阵 K 描述了粒子之间的相互作用。系统的动力学由势能 $V(x,t)$ 以及随机随机力 η 所支配，后者被建模为高斯白噪声，即 $\langle\eta\rangle=0$ 其中 $\langle\eta_i(t)\eta_j(t')\rangle=\delta_{ij}\delta(t-t')$。因此，我们使用以下形式的一组过阻尼朗之万方程来描述系统的演化

$$\dot{x}=-\frac{1}{\gamma}\nabla_x V(x,t)+\sqrt{\frac{2}{\gamma\beta}}\eta=-\frac{1}{\gamma}K(t)x+\sqrt{\frac{2}{\gamma\beta}}\eta. \tag{A2}$$

我们假设系统初始时刻处于高斯态，即时间为 $t=0$，因此它在所有时刻 $t>0$都保持高斯态。因此，其状态可以用概率密度函数描述:

$$\rho(x,t)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N\det\Sigma(t)}}\exp\left(-\frac{1}{2}x^{T}\Sigma(t)^{-1}x\right)\ , \tag{A3}$$

其中，协方差矩阵 $\Sigma(t)\ =\langle xx^{T}\rangle(t)$，完整描述了时间 t的状态。值得注意的是，此概率密度函数的均值为零 $\langle x\rangle=0$，不过很容易将其推广到分布均值非零的情形。通过观察 $\dot{\Sigma}=\langle x\dot{x}^{T}\rangle+\langle\dot{x}x^{T}\rangle$并使用 方程 (A2)

$$\dot{\Sigma}(t)=-K(t)\Sigma(t)-\Sigma(t)K(t)+\frac{2}{\beta}\mathbb{1}\ , \tag{A4}$$

其中我们设定 $\gamma=1$。对于给定的控制轨迹 $K(t)$，该方程的解为

$$\Sigma(t)=e^{-\int_0^t dsK(s)}\Sigma(0)e^{-\int_0^t dsK(s)}+\frac{2}{\beta}\int_0^t ds\ e^{-2\int_s^t drK(r)}\ . \tag{A5}$$

如果我们转而考虑一个固定的 状态轨迹 $\Sigma(t)$，则可以求出实现该轨迹的控制 $K(t)$

$$K(t)=\beta^{-1}\Sigma(t)^{-1}-\int_0^\infty d\nu\ e^{-\nu\Sigma(t)}\dot{\Sigma}(t)e^{-\nu\Sigma(t)}. \tag{A6}$$

此处得到的表达式将在后文寻找最优协议时用到。此外，我们将把$K(t)$ 称为在某个时间内实现的有限时间协议 $\tau>0$。由于当 $t>\tau$ 时，控制保持恒定，因此由 公式 (A5) 可知，状态会收敛至其热态，其协方差矩阵为 $\Sigma_{th}=\beta^{-1}K(\tau)^{-1}$。

2. Thermodynamics

系统在 公式 (A1) 所示势能下的平均内能为

$$E(t)=\int dx\ \rho(x,t)V(x,t)=\frac{1}{2}\sum_{i,j}K_{ij}(t)\langle x_ix_j\rangle(t)=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}[K(t)\Sigma(t)]\ . \tag{A7}$$

在随机热力学中，系统的功 W 和热 Q 流 通常定义为 [58]:

$$\dot{W}(t):=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\Big[\dot{K}(t)\Sigma(t)\Big],\qquad \dot{Q}(t):=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\Big[K(t)\dot{\Sigma}(t)\Big]. \tag{A8}$$

对功通量随时间积分，并利用式（A6）可得

$$W=\frac{1}{2}\int_0^\tau dt\ \ \mathrm{Tr}\Big[\dot{K}(t)\Sigma(t)\Big]\ , \tag{A9}$$

$$=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}[K(t)\Sigma(t)]\Big|_0^\tau-\frac{1}{2\beta}\ln\det\Sigma(t)\Big|_0^\tau+\frac{1}{2}\int_0^\tau dt\,\mathrm{Tr}\left[\int_0^\infty d\nu\ e^{-\nu\Sigma(t)}\dot{\Sigma}(t)e^{-\nu\Sigma(t)}\dot{\Sigma}(t)\right]\ . \tag{A10}$$

现在我们来做两点观察。首先，注意到该量

$$\frac{1}{2}\ln\det\Sigma(t)\Big|_0^\tau = -\left[\int dx\ \rho(x,t)\ln\rho(x,t)\right]_0^\tau = \Delta S \tag{A11}$$

是系统冯·诺依曼熵的变化。其次，注意到该项

$$\frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}[K(t)\Sigma(t)]|_0^\tau = E(\tau) - E(0) = \Delta E, \tag{A12}$$

是系统在协议期间的能量变化。因此，我们可以将前两项识别为非平衡自由能的差值（$F = E - \beta^{-1}S$）。由此可知，最后一项对应于耗散功$W_{\mathrm{diss}} := W - \Delta F$

$$W_{\mathrm{diss}} = \frac{1}{2}\int_0^\tau dt\,\mathrm{Tr}\left[\int_0^\infty e^{-\nu\Sigma(t)}\dot{\Sigma}(t)e^{-\nu\Sigma(t)}\dot{\Sigma}(t)\ \mathrm{d}\nu\right]. \tag{A13}$$

上述积分恰好是对 Bures-Wasserstein（BW）二次型关于时间的积分。更具体地，定义 $\mathcal{BW}(\Sigma,\ \Sigma+d\Sigma)^2 := g_\Sigma(d\Sigma,\ d\Sigma)$, 其中

$$g_\Sigma(A,B) = \frac{1}{2}\int_0^\infty \mathrm{Tr}\left[e^{-\nu\Sigma}Ae^{-\nu\Sigma}B\right]d\nu, \tag{A14}$$

可将熵产生表示为 式 (A13) 中的形式

$$W_{\mathrm{diss}} = \int_0^\tau g_\Sigma(\dot{\Sigma},\dot{\Sigma})\,dt. \tag{A15}$$

现在考虑一个端点为 $\Sigma_0 = \Sigma(0)$ 和 $\Sigma_1 = \Sigma(\tau)$ 的有限时间协议。对于这类过程，我们可以通过计算相对于 Bures-Wasserstein 二次型的测地线，得到 W_{diss} 的一个可达下界。在当前语境下，该下界为

$$W_{\mathrm{diss}} \geq \frac{\mathcal{BW}(\Sigma_0,\Sigma_1)^2}{\tau}, \tag{A16}$$

其中 $\mathcal{BW}$ 是 Bures-Wasserstein距离 [71] 定义为

$$\mathcal{BW}(\Sigma_0,\ \Sigma_1)^2 :\ = \mathrm{Tr}[\Sigma_0] + \mathrm{Tr}[\Sigma_1] - 2\,\mathrm{Tr}\left[(\Sigma_0^{1/2}\Sigma_1\Sigma_0^{1/2})^{1/2}\right]. \tag{A17}$$

对于我们的应用场景，值得注意的是，我们可以自由选择 $\Sigma_0 \propto \mathbb{1}$，因此，考虑式 (A17)在 $[\Sigma_0,\Sigma_1] = 0$时很有用。特别地，若记 $\sigma_i^{(j)}$ 为 Σ_i 的特征值，我们发现该距离可分解为矩阵特征值上的求和

$$\mathcal{BW}(\Sigma_0,\Sigma_1)^2 = \sum_\alpha \left(\sqrt{\sigma_{0,\alpha}} - \sqrt{\sigma_{1,\alpha}}\right)^2\ . \tag{A18}$$

B. 驱动协议中的对称性

利用熵产生 W_{diss}的两种互补对称性，可以简化熵产生（EDP）最优驱动方案的设计：温度重标度会使熵产生线性增加，而时间-强度缩放则使 EDP 保持不变。

温度重标度。 由协方差矩阵的演化方程 $\Sigma(t)$（公式 (A5)) 可知$\Sigma(t) \propto \beta^{-1}$（因为初始态为热分布）。因此，变换 $\beta^{-1} \longrightarrow \lambda\beta^{-1}$ 得出

$$\Sigma(t) \longrightarrow \lambda\Sigma(t), \qquad \dot{\Sigma}(t) \longrightarrow \lambda\dot{\Sigma}(t), \tag{B1}$$

将其代入不可逆功的定义（式（23））后，得到

$$W_{\mathrm{diss}} \longrightarrow \frac{\lambda^2}{2}\int_0^\tau dt\,\mathrm{Tr}\left[\int_0^\infty d\nu\ e^{-\nu\,\lambda\,\Sigma(t)}\,\dot{\Sigma}(t)\,e^{-\nu\,\lambda\,\Sigma(t)}\,\dot{\Sigma}(t)\right]\ =\ \lambda\,W_{\mathrm{diss}}\ , \tag{B2}$$

其中我们对 ν 进行了变量替换。因此， $W_{\rm diss}$ 与温度 β^{-1} 呈线性关系。

时间–强度 度重新缩放。 考虑持续时间为 $t\in[0,\tau]$ 的有限时间协议 $K(t)$。该变换 n

$$K(t)\;\longrightarrow\;K'(t)=\lambda K(\lambda t)\;,\qquad t\in\left[0,\tau/\lambda\right]\;, \tag{B3}$$

同时将控制强度放大 λ ，并将其持续时间压缩至 τ/λ。由此可得，新的协方差 $\Sigma'(t)$ 的演化为

$$\Sigma'(t)=e^{-\int_0^t\mathrm{d}s\,\lambda K(\lambda s)}\,\lambda^{-1}\Sigma(0)\,e^{-\int_0^t\mathrm{d}s\,\lambda K(\lambda s)}+\frac{2}{\beta}\int_0^t\mathrm{d}s\,e^{-2\int_s^t\mathrm{d}r\,\lambda K(\lambda r)}=\lambda^{-1}\Sigma(\lambda t)\;. \tag{B4}$$

这得出如下重新缩放关系

$$\Sigma(t)\;\longrightarrow\;\lambda^{-1}\,\Sigma\big(\lambda t\big)\;,\qquad\dot{\Sigma}(t)\;\longrightarrow\;\dot{\Sigma}\big(\lambda t\big)\;. \tag{B5}$$

将其代入式（23）可得

$$W_{\rm diss}\;\longrightarrow\;\frac{1}{2}\!\int_0^{\tau/\lambda}\!dt\,\mathrm{Tr}\Big[\int_0^\infty\!d\nu\;e^{-\nu\,\lambda^{-1}\Sigma(\lambda t)}\,\dot{\Sigma}(\lambda t)\,e^{-\nu\,\lambda^{-1}\Sigma(\lambda t)}\,\dot{\Sigma}(\lambda t)\Big]=W_{\rm diss}\;, \tag{B6}$$

因此， $W_{\rm diss}$ 在式（B3）所示变换作用下保持不变。这一对称性意味着，将协议的强度放大λ ，同时将其持续时间压缩至 τ/λ ，会得到等价的热力学结果。形式上，这些变换构成李群$(\mathbb{R}^+,\cdot)$，其作用于协议空间 $\mathcal{F}$。协议 $K(t)$的轨道 $\{\lambda K(\lambda t)\;|\;\lambda\in\mathbb{R}^+\}$定义了一个熵产生恒定的等价类。这种尺度对称性通过允许我们在商空间 $\mathcal{F}/\mathbb{R}^+$内搜索最优协议，降低了优化问题的复杂度。

对优化的启示。时间-强度对称性 $K(t)\;\to\;\lambda K(\lambda t)$ 将协议空间$\mathcal{F}$ 划分为不可逆功恒定的轨道（等价类）。因此，可以将熵产生最优协议的搜索限制在商空间 $\mathcal{F}/\mathrm{R}^+$ 中。最后，关于熵产生所讨论的两种对称性同样适用于Bures-Wasserstein距离，因为测地线协议能够实现该距离。

C. 协议的更多细节

1. 淬火与Bang-Bang协议

在淬火协议（参见文献 [40]）中，系统势能从 $V_0(x)$瞬间驱动至 $V_1(x)$，这意味着形式上 $\tau_D=0$。因此，该过程可写为

$$(\Sigma_0,K_0)\xrightarrow[(a)]{\text{quench}}(\Sigma_0,K_1)\xrightarrow[(b)]{\text{thermalization}}(\Sigma_1,K_1). \tag{C1}$$

在子过程（a）中，我们有：

$$W_a=\frac{1}{2}\,\mathrm{tr}[(K_1-K_0)\Sigma_0],\qquad\Delta E_a=\frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}[(K_1-K_0)\Sigma_0],\qquad\Delta S_a=0. \tag{C2}$$

在子过程（b）中，我们有：

$$W_b=0,\qquad\Delta E_b=\frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}[K_1(\Sigma_1-\Sigma_0)],\qquad\Delta S_b=\frac{1}{2}(\ln\det\Sigma_1-\ln\det\Sigma_2). \tag{C3}$$

因此， 整个由步骤（a）和（b）组成的协议中的熵产生为

$$W_{\rm diss}^{Q}=\sum_{x\in\{a,b\}}W_x-(\Delta E_x-T\Delta S_x)=\frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}[K_1(\Sigma_0-\Sigma_1)]+\frac{1}{2}T\ln\left(\frac{\det\Sigma_1}{\det\Sigma_0}\right), \tag{C4}$$

那么，我们只需令 Σ_0 和 Σ_1 分别为它们各自的热态。

采用同样的方法，我们可以考虑 Bang-Bang 协议：在 $t=0$ 时刻淬火至中间控制参数 K_* ，并在 $t=\tau_D/2$ 时刻再次淬火至 K_1 。

$$W_{\rm diss}^{\text{Bang-Bang}}=W_{\rm diss}^{Q}-\frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\big[(K_1-K_*)(TK_0^{-1}-\Sigma_*)\big]\;, \tag{C5}$$

在这里，我们可以利用 Σ_* 和公式 (A5)进行计算

$$\Sigma_*=e^{-K_*\tau_D/2}\Sigma_0e^{-K_*\tau_D/2}+(\mathbb{1}-e^{-K_*\tau_D})TK_*^{-1}\;. \tag{C6}$$

2. 测地线

一般来说，所有方案都会向环境耗散一些能量。可以证明，对于当前系统，我们可以将其描述为状态空间中轨迹长度的一种性质，其中状态空间配备了 Bures-Wasserstein度量 [46]。这意味着，我们可以采用与该空间中的测地线相匹配的协议来将其最小化

$$\Sigma_{\text{geo}}(t) = (1-s)^2\Sigma_0 + s^2\Sigma_1 + s(1-s)(\sqrt{\Sigma_0\Sigma_1} + \sqrt{\Sigma_1\Sigma_0}) \tag{C7}$$

其中 $s = t/\tau_D$。状态所对应的控制可通过将测地线状态轨迹代入 公式 (A6) 得到

$$K(t) = T\Sigma_{\text{geo}}(t)^{-1} - \frac{1}{\tau_D}\left(s\Sigma_1 + (1-2s)\sqrt{T\Sigma_1} - (1-s)T\mathbb{1}\right)\Sigma_{\text{geo}}(t)^{-1} \ , \tag{C8}$$

对于 $0 < t < \tau_D$。值得注意的是，由于在协议的两端我们有 $K(0) = T\Sigma_0^{-1}$和 $K(\tau) = T\Sigma_1^{-1}$公式 (C8) 意味着在协议开始和结束时会出现跳变：

$$K(0^+) - K(0) = \frac{1}{\tau}\left(\mathbb{1} - \sqrt{\Sigma_1/\Sigma_0}\right) \ , \tag{C9}$$

$$K(\tau) - K(\tau^-) = \frac{1}{\tau}\left(\mathbb{1} - \sqrt{\Sigma_0/\Sigma_1}\right) \ . \tag{C10}$$

该协议将耗散

$$W_{\text{diss}}^{(\text{opt})} = \frac{\mathcal{BW}(\Sigma_0, \Sigma_1)^2}{\tau_D} \ . \tag{C11}$$

3. 慢驱动方案

公式 (A15) 中的度量取决于系统状态（由 $\Sigma(t)$表示），而非外部控制的 $K(t)$。这意味着，对于系统的给定协议，耗散功取决于动力学 (A4)的精确解。然而，在慢驱动极限 [46]（一阶近似下），这种依赖关系会大大简化。在此极限下，我们只考虑对轨迹的控制。通过将分析限定在慢驱动机制内，并通过 公式 (A15) 按照 $\Sigma(t) = K^{-1}(t) + \mathcal{O}(\tau^{-1})$展开，我们可以简化不同方案的比较：

$$W_{\text{diss}} = \int_0^\tau g_{K^{-1}}(K^{-1}\dot{K}K^{-1}, K^{-1}\dot{K}K^{-1})\, dt \ + \mathcal{O}(\tau^{-2}) \tag{C12}$$

在可交换情形下，此表达式可进一步简化 $[K_1, K_0] = 0$,

$$W_{\text{diss}} = \frac{1}{4}\int_0^\tau \text{Tr}\left[\frac{\dot{K}(t)^2}{K(t)^3}\right] + \mathcal{O}(\tau^{-2}) \ , \tag{C13}$$

或者等价地，用 K 的特征值表示

$$W_{\text{diss}} = \frac{1}{4}\int_0^\tau dt \sum_i \frac{\dot{\kappa}_i^2}{\kappa_i^3} \ . \tag{C14}$$

如果我们根据边界条件的特征值 $k^{(i)}$ 对其进行分解，就会得到

$$W_{\text{diss}} = \sum_i f(k_i^{(0)}, k_i^{(1)}) \ , \tag{C15}$$

其中 $f(x, y) = \frac{T(x-y)^2}{4}\int_0^\tau dt \frac{\dot{s}(t)^2((())x+s(t)y)^3}{1-s(t)}$。如果矩阵 K_0和 K_1来自某个分布，则平均值 $\langle W_{\text{diss}}\rangle$及其涨落都将取决于该分布。在此，我们先做出两点观察。为简单起见，假设 $K_0 \propto \mathbb{1}$，因此 $k_i^{(0)} \equiv \bar{\kappa}$。我们有

$$\langle W_{\text{diss}}\rangle = \sum_i \langle f(\bar{\kappa}, k_i^{(1)})\rangle \tag{C16}$$

当 K_1 的样本分布是各向同性时，我们可以预期特征值具有相同的分布。这意味着耗散的期望值为

$$N\langle f(\bar{\kappa}, k_1)\rangle \,. \tag{C17}$$

一般而言，我们没有 $f(x,y)$ 的显式形式；不过在某些情况下，形式足够简单，我们可以用该表达式计算期望值。例如，在线性斜坡的情况下，我们有 $f(x,y) = {}^{T}_{(x-y)^2(x+y))}{}^{8x^2y^2}$。其次，如果特征值 k_i 也彼此不相关，~~我们将有~~——

$$\mathrm{Var}(W_{\mathrm{diss}}) = N\mathrm{Var}(f(\bar{\kappa}, k_1)) \tag{C18}$$

这解释了当 N 很大时 W_{diss} 的集中现象。请注意，只要特征值 k_i 并非“完全相关”，同样的情况就会发生；也就是说，只要 $\mathrm{Var}[\sum_i f(\bar{\kappa}, k_i)] = \mathcal{O}(N^\alpha)$，其中 $\alpha < 2$。

D. 自然压缩与 $W^{(\mathrm{opt})}$ diss 的部分优化

考虑标准情形：初始协方差矩阵或最终协方差矩阵（以及相应的二次势）是各向同性的，例如边界条件具有如下形式

$$\Sigma_0 = \alpha\mathbb{1}\,, \quad \Sigma_1 = K^{-1}\,, \tag{D1}$$

与之对应的最小耗散由以下 $\mathcal{BW}$ 距离 (A17)-(A18)

$$\mathcal{BW}^2 = \mathrm{Tr}\Big[(\sqrt{\alpha}\mathbb{1} - K^{-1/2})^2\Big]\,. \tag{D2}$$

假设例如初始（空闲模式）压缩 α^{-1} 处于实验控制之下，我们现在将为 $\mathcal{BW}$的最小化提供有用的界。当 K 的压缩可以调节时，也可作类似考虑。

1. Tuning α

当能够调节 α时，二次表达式 (D2) 在满足以下条件的 α^* 处取得最小值

$$N\sqrt{\alpha^*} = \mathrm{Tr}\Big[K^{-1/2}\Big]\,, \tag{D3}$$

N 是我们所考虑矩阵的维数。显然，一般而言我们无法假定已知 $\mathrm{Tr}\big[K^{-1/2}\big]$，因为这需要对矩阵 K进行对角化/求逆。不过，我们可以给出下界，作为选择 α的经验法则。

例如，根据均值不等式可知，对于正特征值 λ_i，有

$$\left(\frac{1}{N}\sum_i \lambda_i^{-1/2}\right)^{-2} \le \left(\prod_i \lambda_i\right)^{\frac{1}{N}} \le \frac{1}{N}\sum \lambda_i\,. \tag{D4}$$

因此，同一不等式可改写为

$$\alpha^* \ge (\det K)^{-\frac{1}{N}} \ge \frac{N}{\mathrm{Tr}[K]}\,. \tag{D5}$$

请注意，只有在不进行“昂贵”的计算时，才能对 α^* 给出下界，因为 K 总可能存在足够小的特征值，从而使最优 α^* 增大。然而，如果我们将半定规划（SDPs）也纳入“计算成本不高”的函数集合，就可以求得 K 的 $\lambda_{\min}$，并给出界

$$\alpha^* \le \frac{1}{\lambda_{\min}}\,. \tag{D6}$$

2. 固定 α，重新缩放 K

现在假设 α 固定，但我们可以重新缩放 K （这对应于这样一种情况：我们无法对热力学机器空闲模式的压缩进行实验控制，但可以通过重新缩放 ρ（x）的坐标，重新映射所关注的问题）。因此我们考虑

$$\mathcal{BW}^2 = \mathrm{Tr}\Big[(\sqrt{\alpha}\mathbb{1} - \eta^{-1/2}K^{-1/2})^2\Big] \tag{D7}$$

并改变 η。不难看出，最小值在以下情况下取得

$$\sqrt{\alpha}\,\mathrm{Tr}\left[K^{-1/2}\right] = \eta^{*\,-1/2}\,\mathrm{Tr}\left[K^{-1}\right]\,. \tag{D8}$$

再次，可以利用不等式为 η^*给出界。例如，注意到

$$\frac{\mathrm{Tr}\left[K^{-1}\right]}{\mathrm{Tr}\left[K^{-1/2}\right]} \leq \lambda_{\min}^{-1/2}\,, \tag{D9}$$

可得

$$\eta^* \leq \frac{\lambda_{\min}^{-1}}{\alpha}\,. \tag{D10}$$

类似地，根据柯西-施瓦茨不等式，我们有

$$\frac{\mathrm{Tr}\left[K^{-1}\right]}{\mathrm{Tr}\left[K^{-1/2}\right]} \geq \frac{\mathrm{Tr}\left[K^{-1/2}\right]}{N} \geq \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{\mathrm{Tr}[K]}}\,, \tag{D11}$$

因此

$$\eta^* \geq \frac{N}{\alpha\,\mathrm{Tr}[K]}\,. \tag{D12}$$

注意，为 η^* 得到的这些不等式与上文为 α^* 得到的不等式互为对偶。