

國立交通大學

物理研究所

碩士論文

訊息驅動的粒子能量學與馬克斯妖效率

The information driven particle energetics

and

the efficiency of Maxwell demon

研究生：劉賜得

指導教授：張正宏 副教授

中華民國一百零三年七月

訊息驅動的粒子能量學與馬克斯妖效率

The information driven particle energetics

and

the efficiency of Maxwell demon

研究生：劉賜得

Student : Tzu-Te Liu

指導教授：張正宏

Advisor : Cheng-Hung Chang

國立交通大學



Submitted to Institute of Physics College of Science

National Chiao Tung University

in partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of

Master

in

Physics

July 2014

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國一百零三年七月

訊息驅動的粒子能量學與馬克斯妖效率

學生：劉賜得

指導教授：張正宏

國立交通大學物裡研究所碩士班

摘要

在著名的熱力學假想實驗"Szilard engine"[2]，描述著一個等溫的循環中，在經過一次循環後我們將可以獲得一個" $+kbT\ln 2$ "的正功，但是此舉動明顯違反熱力學第二定律。熱力學第二定律指出，在只有一個熱庫情況下的等溫循環中，我們將不會獲得任何正功，否則將會有第二類永動機的產生。那麼，難道 Szilard engine 是所謂的第二類永動機嗎？其實不是的，在實驗與模擬的過程當中我們將引入 Information 量來解決這個矛盾，並且讓 information 可以轉換成為 free energy[5]-[9]。

在本篇論文中，我們將從 information 量轉換成能量的效率著手，利用 Sagawa 與 Toyabe 實驗的想法[4]，透過模擬的方式同樣製造出 Szilard-type engine，並計算此 engine information-to-energy 的效率將會是如何。而因為環境與實驗架設因素的關係，Information 量轉換成 free energy 的效率無法達到 100%，我們將試著改變環境的參數，製造出不同情況下，效率將會如何改變。

關鍵詞:妖、information、Sagawa、效率

The information driven particle energetics and the efficiency of Maxwell demon

Student : Tzu-Te Liu

Advisor : Dr. C.-H. Chang

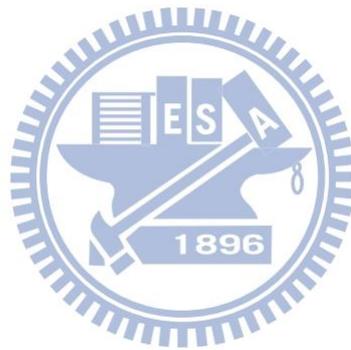
In the famous physical thought experiment "Szilard engine" [2], Szilard demonstrated how we can obtain a positive work $+k_B T \ln 2$ during an isothermal cycle, which apparently violates the second law of thermodynamics. This law declared that it is impossible to produce work during a cyclic process connected to a single heat reservoir. Unless we would have a Perpetual motion machine of the second kind. Thus, is the Szilard engine the Perpetual motion machine of the second kind? Well it is not. During the experiment and the simulation, we will introduce the information contents to solve this paradox, which will convert the information contents into free energy [5]-[9].

In this thesis, we will start from studying the information-to-energy efficiency discussed in Sagawa and Toyabe's experiment [4]. Then, by using simulation, we will construct the Szilard-type engine and calculate the information-to-energy efficiency. Because of the environment and the construction, the efficiency of our setup will not reach 100%. We will change the parameters of the environment to see how large the efficiency can reach.

Keywords: demon 、 information 、 Sagawa 、 efficiency

誌謝

非常感謝我的父母能栽培我來到交通大學物理所學習，在碩士生涯的兩年當中學習到了物理與模擬的相關知識。非常感謝物裡所師長們的栽培與教誨，也感謝我的同班同學，特別是冠智與禮帆，讓我過得非常充實，也非常快樂，我們一起度過各種考試、一起互相討論、相互激勵對方。或許我們研究的領域不盡然相同，但是非常感謝你們的樂意幫忙，讓我能順利畢業。在此我要特別感謝我的女朋友紫緹，謝謝她在我碩班兩年生涯的陪伴，一路上有她的鼓勵，使我不迷失方向，我很感恩。另外還要特別感謝所上的學長們，特別是邦杰、德明、宏慶、瑞辰學長們的協助，讓我研究上能順利，謝謝你們。



目次

中文摘要.....	I
英文摘要.....	II
誌謝.....	III
目次.....	IV
圖目錄.....	V
第一章緒論.....	1
第二章理論基礎.....	2
2.1 MAXWELL 妖.....	2
2.2 SZILARD ENGINE.....	3
第三章實驗與模擬方法.....	5
3.1 實驗.....	5
3.2 模擬架構.....	11
3.3 結果分析.....	21
3.3.1 正弦波.....	21
3.3.2 矩形波.....	26
3.3.3 鋸齒波.....	27
3.3.4 綜合比較.....	28
第四章結論.....	32
參考文獻.....	33



圖目錄

圖 2.1-1.....	2
圖 2.2-1.....	3
圖 3.1-1.....	5
圖 3.1-2.....	6
圖 3.1-3.....	7
圖 3.1-4.....	7
圖 3.1-5.....	8
圖 3.1-6.....	9
圖 3.1-7.....	9
圖 3.2-1.....	12
圖 3.2-2.....	13
圖 3.2-3.....	14
圖 3.2-4.....	15
圖 3.2-5.....	15
圖 3.2-6.....	16
圖 3.2-7.....	17
圖 3.2-8.....	17
圖 3.2-9.....	18
圖 3.2-10.....	19
圖 3.2-11.....	20
圖 3.3-1.....	21
圖 3.3-2.....	22
圖 3.3-3.....	23
圖 3.3-4.....	24
圖 3.3-5.....	24
圖 3.3-6.....	25
圖 3.3-7.....	26
圖 3.3-8.....	28
圖 3.3-9.....	29
圖 3.3-10.....	30
圖 3.3-11.....	30



第一章 緒論

縱使到了現在，人們依然對於永動機的存在，抱持著一線希望，雖然明白永動機本身的概念是違反了熱力學定律的。在 1871 年，James Clerk Maxwell 提出了一個為了說明違反熱力學第二定律的可能性的假想實驗[1]，在這個假想實驗中，準備一個絕熱的容器，我們用一扇"門"將它分成相同且相等的兩格，並派一隻"妖"看守這扇門。容器中的空氣分子作無規則熱運動時會向門上撞擊，這個時候，妖可以"選擇"將速度較快的分子放入一格，而較慢的分子放入另一格。如此一來，左右兩格的平均速度，即溫度，差值將會越差越大。接著，可以利用此溫差，驅動熱機做功，這是第二類永動機的一個範例。

從這個明顯違反熱力學第二定律的假想實驗中，有個非常值得注意的地方，那就是妖可以量測一個分子的行為，並利用測量後的結果，來決定開門與否(例:測量分子的速度是比平均快或慢等)，此舉暗示了妖可以執行 thermal fluctuation 的 feedback control。

而第一個基於 Maxwell 妖的假想模型出現在 1929 年，由 Leó Szilárd 提出，又稱為"Szilard Engine"[2]。這個模型定量地闡述了"information 量"的作用，詳盡說明了"information 量"如何被運用在 Szilard Engine，妖的幫忙，讓整個過程獲得了一個" $k_B T \cdot \ln 2$ "的正功，並轉換成 free energy，而且不違反熱力學第二定律的過程。"Szilard type Engine"在近幾年已經被一日本教授 Takahiro Sagawa 利用實驗的方式給重現了，計算出 information-to-energy 的效率[4]。

我們將藉由 Takahiro Sagawa 教授的實驗，利用模擬的方試探討這個轉換效率的情形。在我們的論文裡，首先在第二章我們會簡介 Takahiro Sagawa 教授的實驗背後的理論: Szilard Engine；在第三章我們將會簡介 Takahiro Sagawa 教授的實驗與我們的模擬架構，並藉由模擬的方式去計算系統中"information 量"轉換成 free energy 的效率，並進一步討論改變哪些環境參數後，效率改變的情形，再試著將位能的形狀改變，看看不同位能下效率變化的情形。

第二章 理論基礎

2.1 Maxwell 妖

試想我們在一盒子當中置入理想氣體，盒子與環境並無熱量交換，亦即絕熱。在初始態時，氣體處在熱平衡，溫度為 T 。接著，我們用一個附有一扇"門"的隔板插入盒子中，將盒子分成相同且相等的兩格，而這扇門有一隻妖看守著。容器中的空氣分子作無規則熱運動時會向門上撞擊，這個時候，妖可以"選擇"將速度較快的分子放入右邊那一格，而較慢的分子放入左邊那一格。藉由不斷重複此舉，最終左邊那一格的溫度將會比初始溫度還要來的低，右邊那一格的溫度將會比初始溫度還要來的高，換言之，我們透過放置一隻妖在箱子裡面，會造成箱子右邊摸起來是比左邊還要熱的(圖 2.1-1)。

如此一來，意謂著妖可以絕熱地製造溫度差，並利用此溫差，驅動熱機做功，這是第二類永動機的一個範例。換句話說，氣體的亂度會被妖減少，使得整個系統從無序走向有序，縱使這個盒子與外界是絕熱地被隔絕。此舉明顯違反了熱力學第二定律。

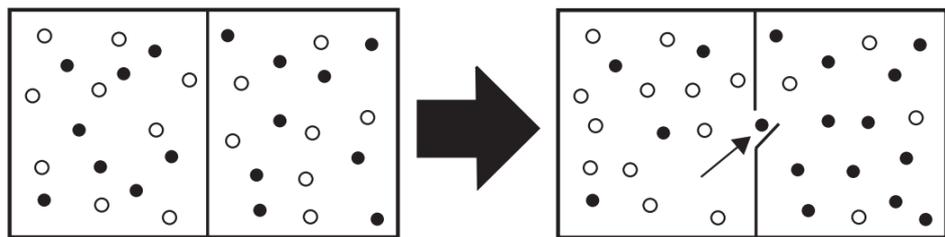


圖 2.1-2

從這個明顯違反熱力學第二定律的假想實驗中，有個非常值得注意的地方，那就是妖可以量測一個分子的行為，並利用測量後的結果，來決定開門與否(例: 測量分子的速度是比平均快或慢等)，如此暗示了妖可以執行 **thermal fluctuation** 的 **feedback control**。[3]

2.2 Szilard engine

部分物理學家對於熱力學定律的質疑從來沒少過，尤其是與永動機相關的第一與第二定律。在 Maxwell 妖假想實驗提出後，由於它明顯違反了封閉系統 entropy 變大的熱力學第二定律，對物理學家們造成了不小的困擾。1929 年，Leo Szilard 提出了他基於 Maxwell's 妖下的模型: Szilard Engine，此模型最關鍵的步驟，就在於妖的行為，圖 2.2-1 便是這個實驗的布置與步驟:

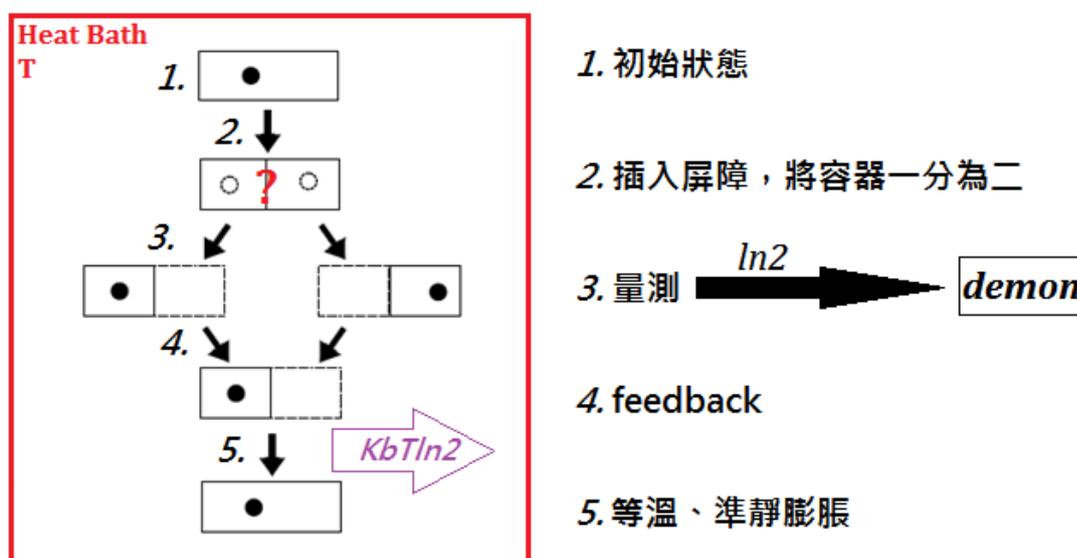


圖 2.2-2

容器裡安排的是一單分子理想氣體，整個過程為"isothermal cycle"，比之前 Fig.1 的絕熱條件寬鬆。其中，在步驟 2.時，屏障插入後我們並不知道分子在左半部或是右半部；在步驟 3.時，妖開始量測分子是在左半部或者是右半部，此時的量測是"沒有誤差"的，換言之即為精準量測，在量測的過程當中，妖測量並發現分子在左邊與在右邊的機率，皆是"1/2"，由 Information Theory 我們知道，妖將會獲得" $\ln 2$ "的"information"量，這在之後的步驟是非常重要的關鍵；在步驟 4.時，妖藉由量測的結果，執行"feedback control"，在此定義，如果分子是處在左半部，則妖不做任何動作，反之則把右半格準靜地移到左邊；接下來，在步驟 5.我們將格子等溫且準靜地，讓其膨脹成初始狀態的樣子，如此一來，我們將能獲得正功，為什麼呢？

由於單分子理想氣體須滿足

$$pV = k_B T$$

其中， p 為壓力， V 是指體積， k_B 是波茲曼常數。由於過程中體積的漲大，將能對外作功：

$$W = \int_{\frac{V_0}{2}}^{V_0} dV \cdot \frac{k_B T}{V} = k_B T \cdot \ln 2$$

其中， V_0 是盒子的初始體積。

由上述的過程可以知道，妖的幫忙，讓整個過程獲得了一個 " $k_B T \ln 2$ " 的正功，完全違反了熱力學第二定律裡所描述的，我們無法在單一熱庫下的 "isothermal cycle" 中提取任何正功。

我們可以從妖獲得的 information 量 $\ln 2$ 與 $k_B T \ln 2$ 中發現一些線索，兩者皆有一個 " $\ln 2$ " 項，其中後者多了一個 $k_B T$ 的參數。事實上，由步驟 2 ---> 步驟 4，妖利用了 $\ln 2$ 的 information 量，降低了 $k_B \ln 2$ 的 entropy，而此 entropy 對應到因為左半格或右半格而產生的 thermal fluctuation。在步驟 3 中測量完的瞬間，分子的狀態與測量而得到的結果是完全有相關的，如此暗示了妖對於被量測的狀態有非常完整的 "information 量" (即, "左" 或 "右")。

然而，在經過步驟 5 的膨脹之後，分子的狀態與測量的結果將不再有關連。因此，我們可以斷定，妖利用了它所獲得的 "information 量" 來當作一個可以減少系統 entropy 的來源。 [3]

第三章 實驗與模擬方法

我們將從 Sagawa 與 Toyabe 的實驗出發[4]，利用他們的構想，透過電腦模擬的方法，同樣創造出這個 Szilárd-type engine，將 information 量轉換成 free energy，由於模擬的方式比起實驗更能掌握環境，我們將試著改變一些參數來觀察在這些變化下，轉換的效率將發生什麼改變，並探討這個效率能不能達到 100%。

3.1 實驗

這個實驗主要是把 microscopic 的粒子，放在一個螺旋階梯狀位能井中，裡面的階梯高度的尺度大小都跟 $k_B T$ 不會相差太多，如圖 3.1-1:

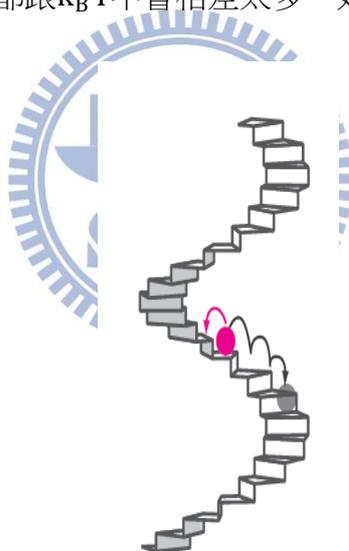


圖 3.1-1

縱使布朗粒子是呈現隨機運動的，但是由於處在螺旋階梯的關係，讓布朗粒子往下移動的機會是比往上還要來的大。

今天在實驗當中，將安排一隻妖在系統裡面，而這隻妖將拿著一塊擋板，這個妖將偵測布朗粒子的位置，觀察它是否有要往上跳的行為，一旦妖偵測到布朗粒子往上跳了，那麼妖便會在布朗粒子後面將其用擋板擋住，以避免布朗粒子往下跳，如圖 3.1-2。

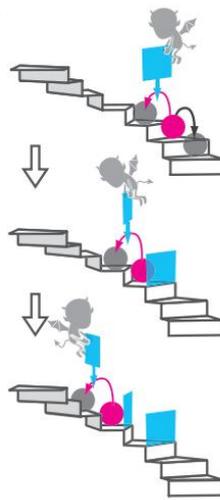


圖 3.1-2

如此一來，有了妖所做的 **feedback control**，透過不斷重複這個動作，布朗粒子將會反其道而行，沿著螺旋階梯往上爬，而非如一般想像的往下運動。通常，在理想的環境底下，放置擋板所需的能量可以忽略；這樣一來暗示了布朗粒子將可以在不注入其他能量的情況下，獲得 **free energy**。由理論可以知道，是因為量測了布朗粒子的位置，所獲得的 **information 量**[5][10]，驅使布朗粒子沿著螺旋階梯往上爬。

在 **microscopic** 系統中，諸如功、熱能、內能等熱力學物理量是 **fluctuate**[12][13]的，縱使如此，熱力學第二定律仍舊是成立的，平均而言：

$$\langle \Delta F - W \rangle \leq 0$$

其中， ΔF 是指狀態與狀態之間 **free energy** 的變化， W 是指功，若為外界對系統做功則為正，反之則為負， $\langle \cdot \rangle$ 是指 **ensemble average**。此公式告訴我們：系統 **free energy** 變化平均而言小於外力對系統作的功。

然而，**feedback control** 使我們能夠選擇性地操縱那些造成 $\Delta F - W > 0$ 的 **fluctuation**，像是利用系統的 **information 量**，使布朗粒子往上跳[14][15][16]。得先說明，**feedback** 指的是控制的參數由測量結果而決定，由上可知，需要先判斷布朗粒子是否有往上跳，再由這個結果，去控制妖用擋板擋住布朗粒子[17]。Sagawa 與 Toyabe 的實驗說明了，透過引入 **feedback control**，**information 量** 將能夠做為 **free energy** 的來源。事實上，在我們上一章的理論中說明了 Szilárd 的模型，轉換了系統裡 1bit 的 **information 量**，成為 $K_B T \ln 2$ 的自由能或功[1]。而熱力學第二定律將可以被推廣成[24]:

$$\langle \Delta F - W \rangle \leq K_B T I$$

其中，上式由於 feedback control 與 information 量的關係， $\langle \Delta F - W \rangle$ 將會大於零，而不等式若是 Szilard Engine 的話等號將會成立；I 是測量後而獲得的 "mutual information 量"[6][11]。

換句話說，這個 Szilard-type Maxwell 妖使我們能夠同時評估 feedback control 的輸入(information)與輸出(獲得的能量)，並將他們連上關係。如此一來，這樣的情況提供了一個理想的試驗性 "information-to-energy" 轉換。

那麼，在實驗上要如何做到可以成為 Szilard-type engine 呢?首先，Sagawa 與 Toyabe 用了兩塊玻璃，其中，將膠體粒子釘在上層的玻璃表面上，此時膠體粒子會存在一旋轉布朗 motion，如圖 3.1-3。

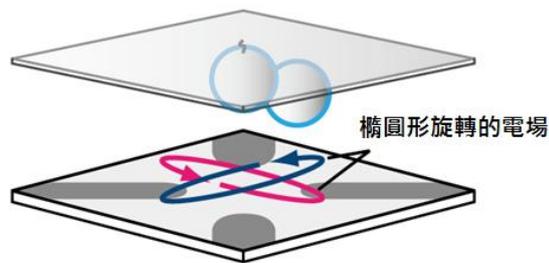


圖 3.1-3

接著，在底部玻璃上，建立四個電極，擺設如圖 3.1-4。

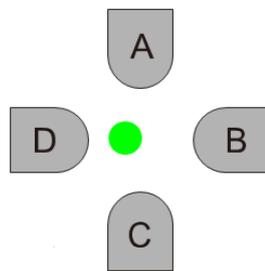


圖 3.1-4

利用這四個電極，加上外加的 1 MHz 電場，方能造出週期性位能井，與此同時也在粒子旋轉時對其施一定量常數的力矩。利用這樣的方式，粒子會處在一理想且傾斜的類似周期性正弦狀位能井中，猶如處在一螺旋階梯狀位能井(圖

3.1-5)。

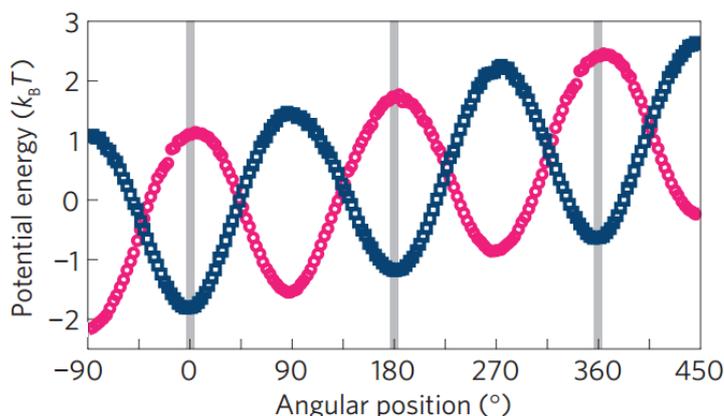


圖 3.1-5

而 feedback control 的執行，是利用一系列的影片拍攝、圖片分析、位能調控與資料儲存來達到。其中，以 44ms 為一個循環一直重複，而 feedback delay 為 1.1ms。值得注意的是，44ms 的大小比起切換後的 relaxation time (~10 ms) 是足夠大的，卻又比粒子自發性跳往下一個位能井所需的時間來的小 (~1s)。

步驟是這樣的，在 $t=0$ 的時候，偵測粒子的 angular position，此時，若粒子是處在區域 "region s" 的話，在經過 feedback delay 後，位能將會被切換，而切換後的位能與切換前恰為相反相位；若不是處在區域 "region s" 的話，將不會進行任何動作。在 $t=T$ 時，又將再一次的偵測粒子所處的位置，決定要不要切換。之後每經過時間 T 就量測一次，如此重複下去。region s 為在位能井中的某區域，此區域切換前的位能井總是高於切換後的(如圖 3.1-6 中的灰色區域)。

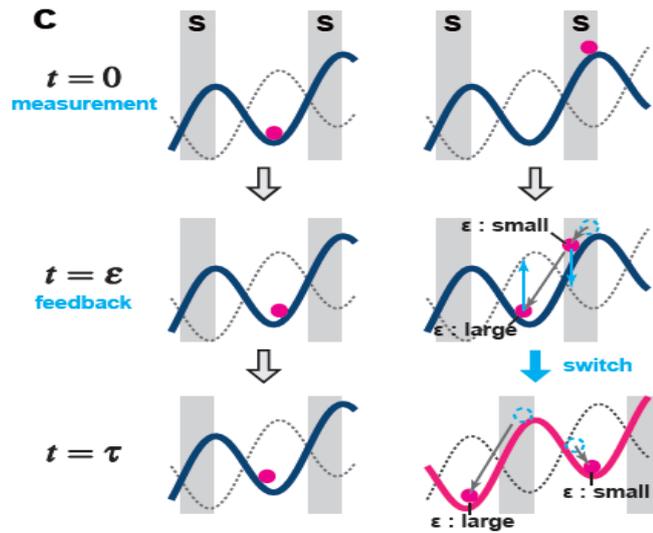


圖 3.1-6

feedback delay ϵ 為偵測到粒子的 angular position 後，回傳給電腦，到切換位能井所花費的時間。由於從偵測後到切換前，粒子還是在移動，若 ϵ 很小，那麼粒子將不會移動得太遠，不會遠離處在 region s 中的切換要求；若 ϵ 很大，那麼在切換前，粒子便遠離 region s，換句話說，就是妖的檔板檔得太慢，讓粒子溜走。

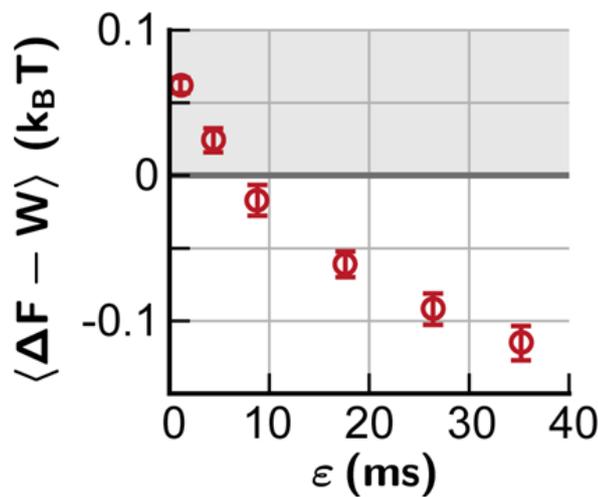


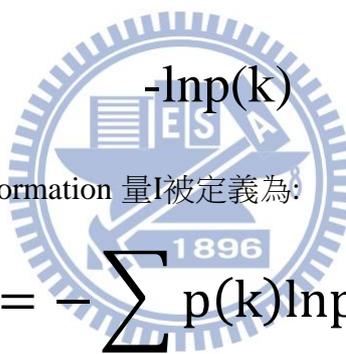
圖 3.1-7

圖 3.1-8 是 Feedback time delay 與 $\langle \Delta F - W \rangle$ 的關係圖，可以看到，當 Feedback time delay 愈小，表示妖一偵測到粒子便隨即切換，並無延遲，這樣方能使 $\langle \Delta F - W \rangle > 0$ ；一旦延遲時間愈長，那麼表示偵測與切換這件事，粒子並

不在一樣的位置，會造成 $W > 0$ ，即外界對系統做功，使的最終 $\langle \Delta F - W \rangle$ 將會 < 0 ，回歸熱力學第二定律的結果。

透過實驗發現， $\langle \Delta F - W \rangle < 0$ 發生在 feedback delay ϵ 很小的時候，切換的時機絕大部分都發生在粒子的 angular position 是處在 region S 中。在偵測粒子的位置之前，粒子吸收了等溫環境下的熱能，利用此熱能來達到 region s。切換時，粒子對環境做功，切換後成功的往右跳。這樣的結果透露了粒子切換前後，獲得的淨 free energy 是大於吸收熱能後對外所做的功 W ，這樣的行為，超出了傳統熱力學第二定律中所規定的極限，也就是 $\langle \Delta F - W \rangle < 0$ 。

其實，就算今天不使用 feedback control，粒子仍然有機率會自發性地往右跳，不過，由於熱力學第二定律的限制，此事件發生的機率是很小的[18][19][20]。然而，因為引入 feedback control 的關係，大大提升了這種事件發生的可能性。而這個多出來的 free energy，它的來源是測量後獲得的 information 量。在實驗中，該如何定義與使用 information 量是很重要的，一事件 k ，伴隨著發生機率為 $p(k)$ ，則與此事件有關聯的 Shannon information 量被定義為[21]:



而平均的 Shannon information 量 I 被定義為:

$$I_0 = - \sum_k p(k) \ln p(k)$$

由上式可知，一事件的 information 量是其發生機率的函數。

實驗中，測量的結果通常會伴隨著誤差，這些誤差的存在，讓獲得的 information 量減少。如前定義， I 是系統內所含的 information 量，假如 I 是 mutual information 量，則它是透過測量後，獲得的 information 量[11][23]:

$$I = \sum_{k,m} p(m|k)p(k) \cdot \ln p(m|k)/p(m)$$

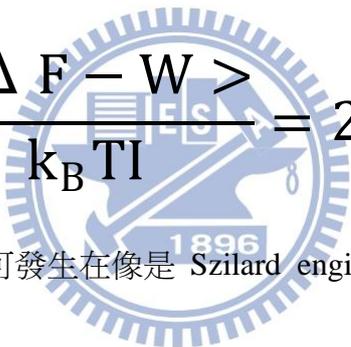
其中 $p(m|k)$ 為"在第 k 事件確切發生的條件下，測量的結果是第 m 事件"的條件機率。如果整個實驗的測量是"沒有誤差"發生，則:

$$p(m|k) = \delta_{k,m}$$

(若 $k=m$ ， $\delta_{k,m} = 1$ ， $k \neq m$ 則 $\delta_{k,m} = 0$)，在這樣的情況下， $I = I_0$ 。也就是說，如果我們偵測粒子時伴隨的誤差是可以忽略的話[21]，那麼測量後獲得的 information 量將會是 Shannon information 量。在我們的系統，只有兩事件，"粒子被偵測到處在 region s" 機率為 p ，"沒被偵測到" 機率為 $1-p$ 。因此

$$I = -p \ln p - (1-p) \ln(1-p)$$

在 Sagawa 與 Toyabe 的實驗中，在 feedback delay ε 很小的條件下，偵測到粒子處於 region s 的機率為 0.059，偵測而獲得的 information 量為 0.22， $\langle \Delta F - W \rangle$ 則為 $0.062 K_B T$ 。如此一來，提供了 information-to-energy 的轉換效率為：

$$\frac{\langle \Delta F - W \rangle}{k_B T I} = 28\%$$


其中，效率 100% 將可發生在像是 Szilard engine 的準靜 information heat engine.[1]

3.2 模擬架構

在顯微鏡下觀察懸浮在液體的微小顆粒(例如花粉所迸發出的微粒)，可以觀察到顆粒不停地在進行著不規則運動，這個首先由植物學家 Robert Brown 在 1827 年發現的現象，稱為布朗 motion。在布朗 motion 的過程中，粒子不斷受到液體介質分子的碰撞，在任一瞬間，粒子所受到的碰撞作用力一般說來是互不平衡的，因此粒子會沿著淨力的方向運動。由於分子運動的無規性，施加在顆粒上的淨力漲落不定，力的方向和大小都不斷發生變化，粒子就不停地進行著無規則的運動。

探討布朗粒子在外加力場下的隨機運動，通常會有兩種方法來描述，第一種方法是以 Fokker-Planck Equation 來描述布朗粒子在位能場中受到隨機力後，在時間 t 、位置 x 、速度 v 時的分布函數；第二種方法則是透過 Langevin Equation

來描述粒子隨著時間 t 改變的運動軌跡，在我們的模擬中，我們將會利用 Langevin Equation 來做為模擬的基礎。

而 Langevin Equation 的策略是採用類似牛頓力學的運動方程，直接描述布朗粒子的運動軌跡。為了克服熱擾動與粒子移動這兩者時間尺度的巨大差異，Langevin Equation 將流體對布朗粒子的影響簡化成兩部份，隨機熱擾動和流體造成的黏滯力[22]:

$$m \frac{d^2}{dt^2} x = - \frac{d}{dx} U(x) - \gamma \frac{d}{dt} x + \left(\sqrt{2m\gamma k_B T} \right) R(t)$$

其中， m 為 particle 的質量， $U(x)$ 是粒子作用的位能， γ 是摩擦係數，" $-\frac{d}{dx} U(x)$ "是外加力場對粒子造成的作用力，" $-\gamma \frac{d}{dt} x$ "是來自流體中介質分子對粒子的碰撞而造成的粘滯阻力， T 為溫度， K_B 為波茲曼常數，" $\left(\sqrt{2m\gamma K_B T} \right) R(x)$ "是隨機熱擾動力，並不受粒子的運動(i.e.粒子的位移)影響， $R(t)$ 是高斯白噪，滿足 $\langle R(t) \rangle = 0$ ， $\langle R(t)R(t') \rangle = \delta(t-t')$ 。上式就是我們模擬中主要的運動方程。

接下來，要如何創造出同樣具有螺旋階梯狀的位能呢?我們將利用"線性位能"與"正弦波位能"的疊加，得到如下傾斜週期性位能:

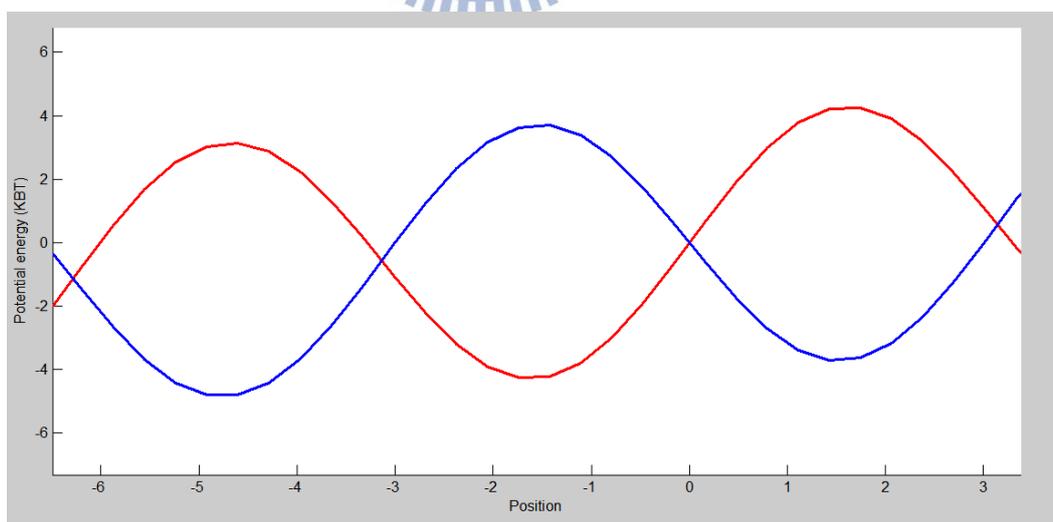


圖 3.2-1

其中，紅色與藍色兩個位能相差 π 的相位。有別於 Sagawa 與 Toyabe 是利用一顆粒子製作長時間的偵測與位能切換的實驗[4]，我們模擬上則是利用

ensemble average 的方式，讓一群粒子在位能井中偵測並做一次切換，換句話說這相當於讓大量粒子處在螺旋階梯上某一個階梯，如果往上跳，我們就讓妖用擋板把粒子擋住。

在我們的模擬中，妖如何作位能切換判斷是很關鍵的，粒子在相空間的初始位置是在 $x=-1.5\pi$ ，而 $y=0$ 的地方(y 為粒子速度)，此處為紅色位能的其中一個吸子，如圖 3.2-2 所示:

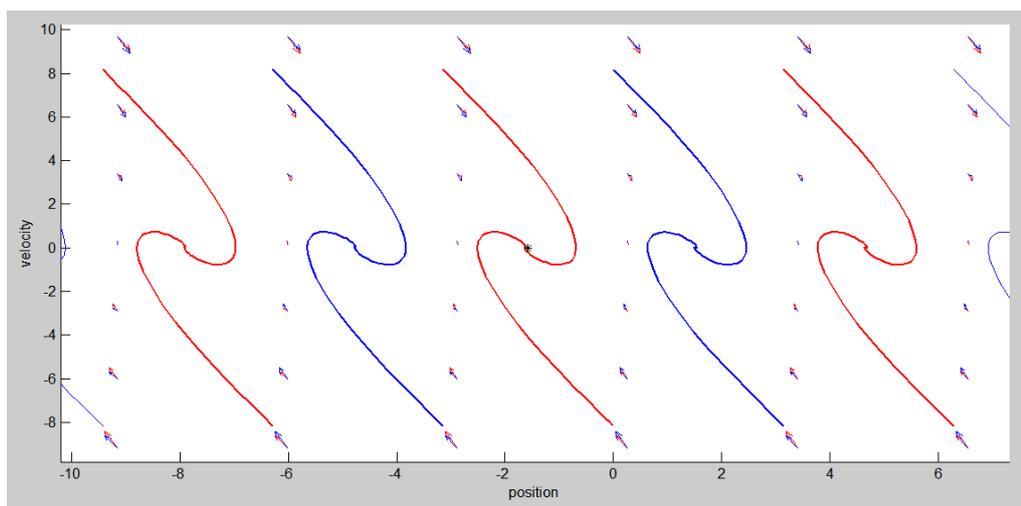


圖 3.2-2

圖 3.2-2 為粒子受流場作用的情況下隨著時間 t 改變的運動軌跡，箭頭部分即是流場。

縱使粒子一開始處在吸子裡，在隨機擾動下，粒子仍然會擴散並且在吸子附近擾動，由於位能是傾斜的，粒子會因為梯度的關係，有比較大的傾向往位能低的方向(左邊)跑，只有一小部分會往高的相反方向爬，這一小部分就是我們模擬的關鍵。為了掌握這一小部分粒子，我們在位能的右邊，在切換前的能量大於切換後的地方設為區域 s (如圖 3.2-3)。一旦妖發現粒子的位子是處在這個地方，妖會切換位能，使在這一區域的粒子最終落入藍色的某位能井中，這樣一來就達到了粒子往上爬，而妖成功的用擋板阻止粒子往下跳的目的。

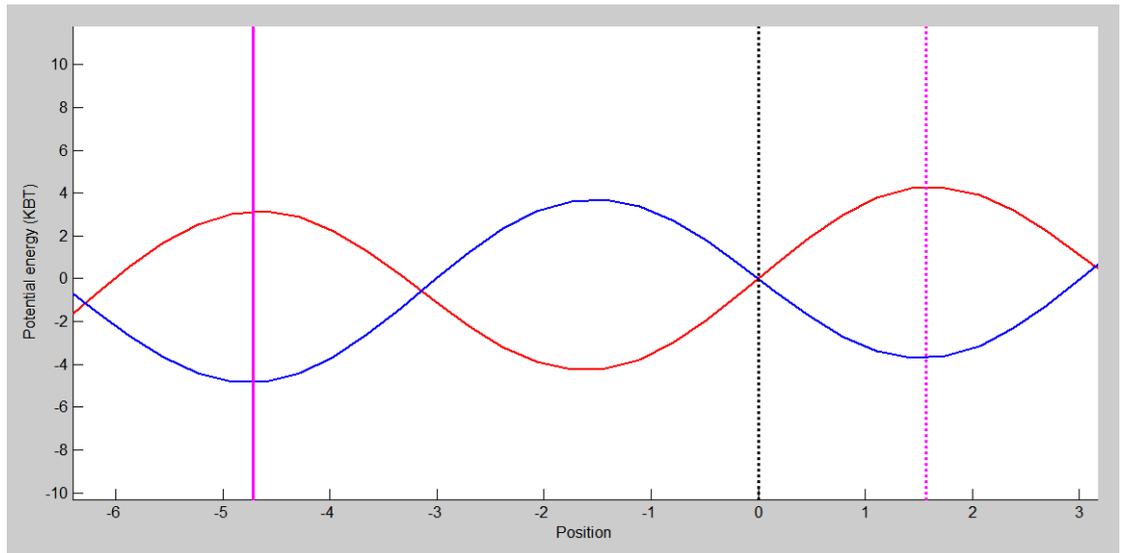


圖 3.2-3

上圖中黑色虛線與紫色虛線所構成的區域，就是我們這次模擬中的區域 S ，它滿足切換前的能量大於切換後的能量；而左邊的紫色實線，則是我們自行探測粒子跑出他們所處在的位能井，到隔壁位能井的界限。除了區域 S 裡頭的粒子之外，我們同要會記算跑出位能井的粒子，用以計算系統的 **free energy**。

值得一提的是，在實驗當中，會因為 **feedback time delay** 的關係，影響切換時粒子跳躍的情形，使得 $\langle \Delta F - W \rangle$ 的值有所不同。在模擬中，我們的 **feedback time delay** 是可以忽略的，也就是一偵測到，我們馬上就切換位能，讓處在區域 s 的粒子馬上掉進藍色某位能井。

而如何讓粒子分布在傾斜的某位能井中，不會因為擴散太快，造成偵測的那一刻粒子都跑到左邊去，也確保在偵測的那一刻粒子是處於 **local** 的平衡呢？我們是利用粒子的 **variance** 來檢驗的，如圖 3.2-4 所示：

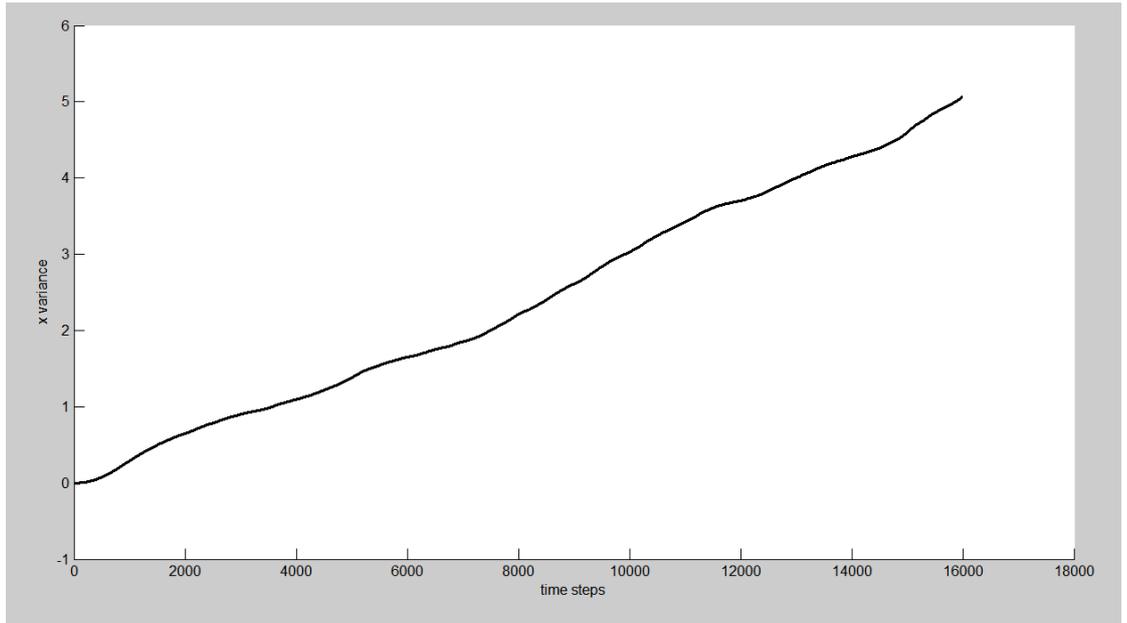


圖 3.2-4

讓我們先觀察一個不理想的模擬環境，當 \sin 位能振幅為 $k_B T$ 的 1.525 倍，斜率約為 $K_B T$ 的 $\frac{1.13}{2\pi}$ 倍，而 **damping coefficient** 為 2 時，遇到了一個問題，也就是粒子擴散得非常嚴重。此時，當妖在偵測粒子是否處在區域 s 時，有的粒子已跑超過 s 區域的，同時，也有很多粒子不停的往左跑，擴散的雲狀圖如圖 3.2-5:

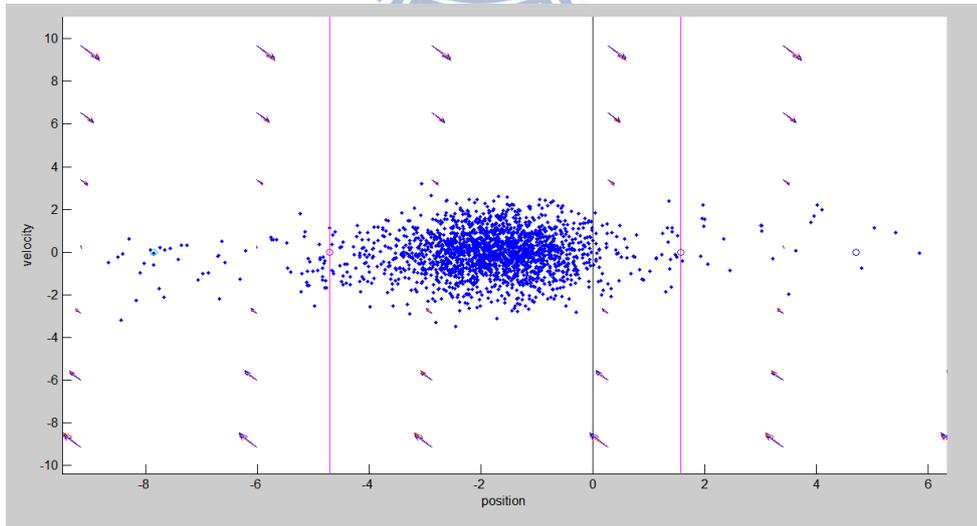


圖 3.2-5

在這樣的模擬環境下，當妖要偵測時，粒子是一直處在擴散的情況，而沒有被"暫時"困在某位能井當中，無法明顯看到粒子由一個態切換到另一個態(如

同由階梯一階移動到另一階)。於是我們提高 \sin 位能的振幅，讓粒子並不是這麼容易逃脫區域位能井，圖 3.2-6 是固定 $\text{damping coefficient}$ ，改變位能振幅，觀察 variance 的變化：

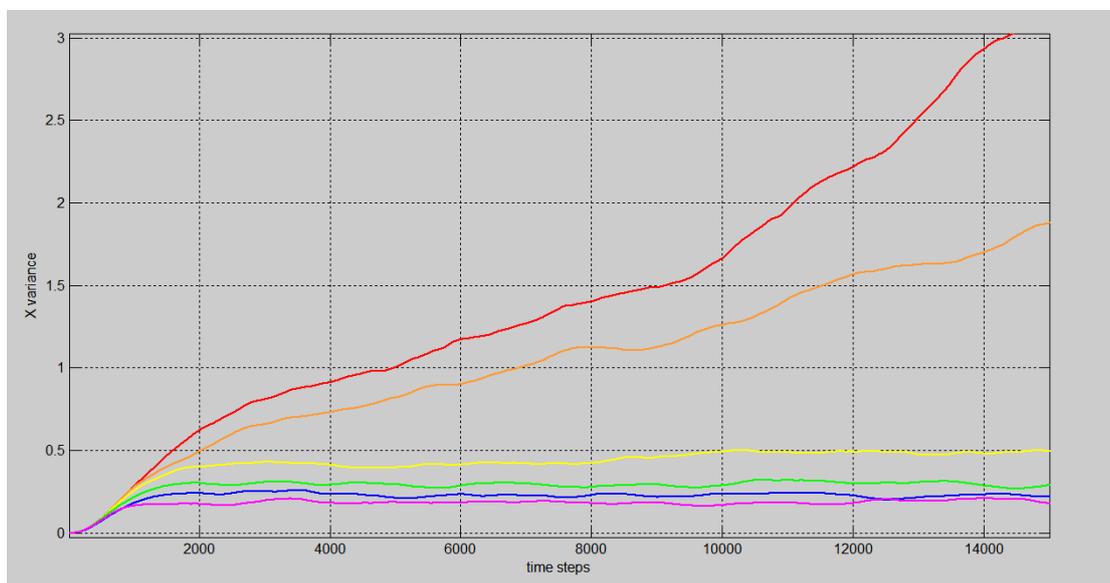


圖 3.2-6

我們希望粒子的 variance 能夠在短的 time step 下出現明顯的穩定，亦即粒子從 delta peak 的分佈出發，在短時間之內經由擴散在區域位能井達到 local 的暫時平衡(圖中曲線平坦處)，並且讓粒子自發性繼續跳往下一個位能井的時間，遠比達到 local 暫時平衡的時間要來的長。觀察不同曲線發現，黃色線是一個理想的模擬條件，其擴散與達到平衡的時間都非常剛好的，用來觀察粒子在區域 s 與否是蠻適合的，並且自發性的跳往下個位能井所需的時間(如圖 3.2-7 所示約在 $3 \times 10^5 \text{time steps}$)是很長的。

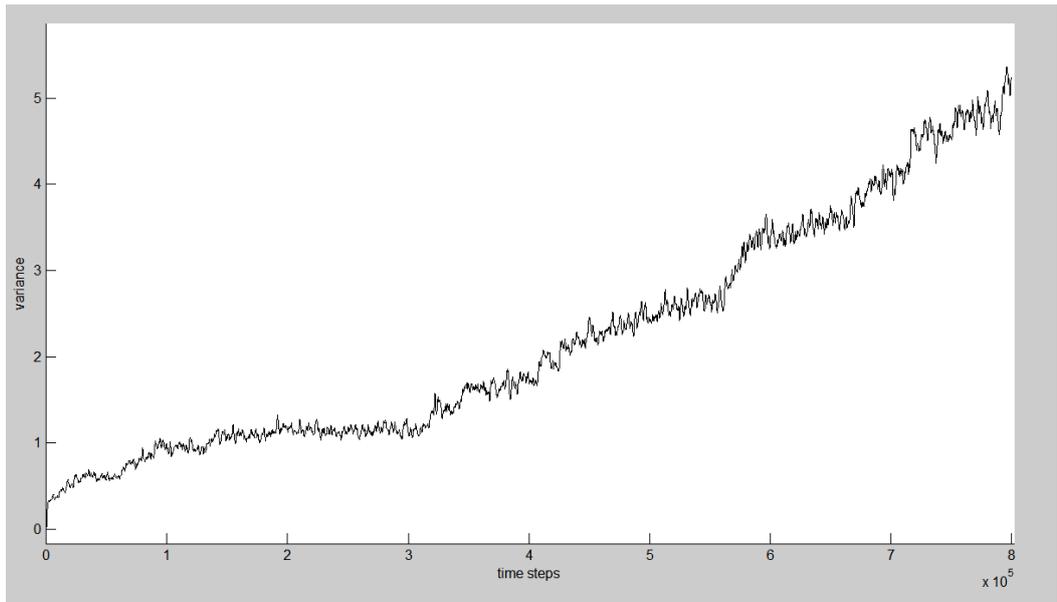


圖 3.2-7

而當妖在做偵測時，粒子狀態在相空間分佈也是蠻 localized 的:

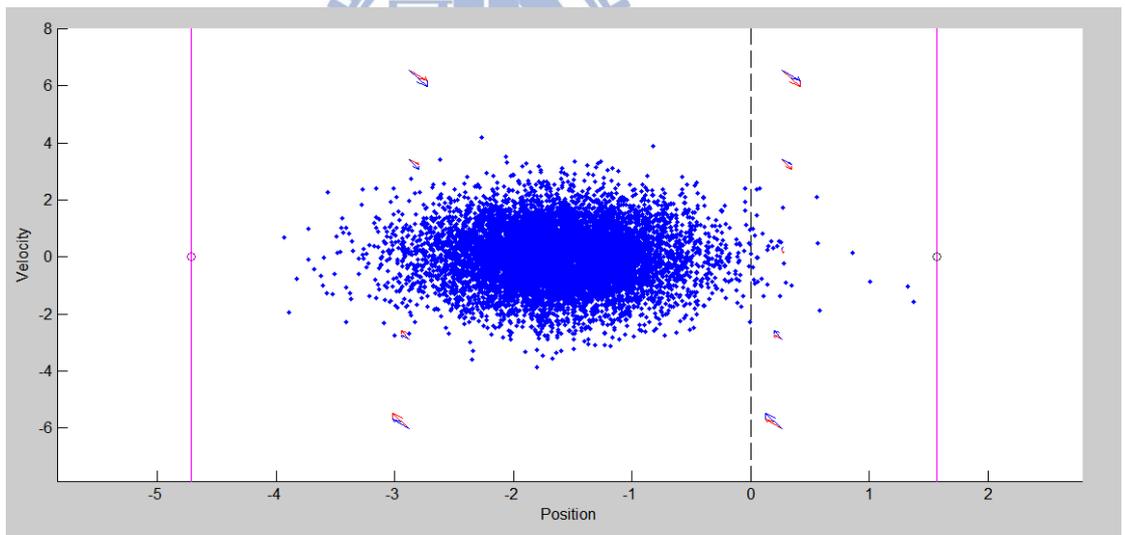


圖 3.2-8

為了探討 Langevin equation 電腦模擬時時間要切多細，，我們同樣觀察不同時間切割下的 variance:

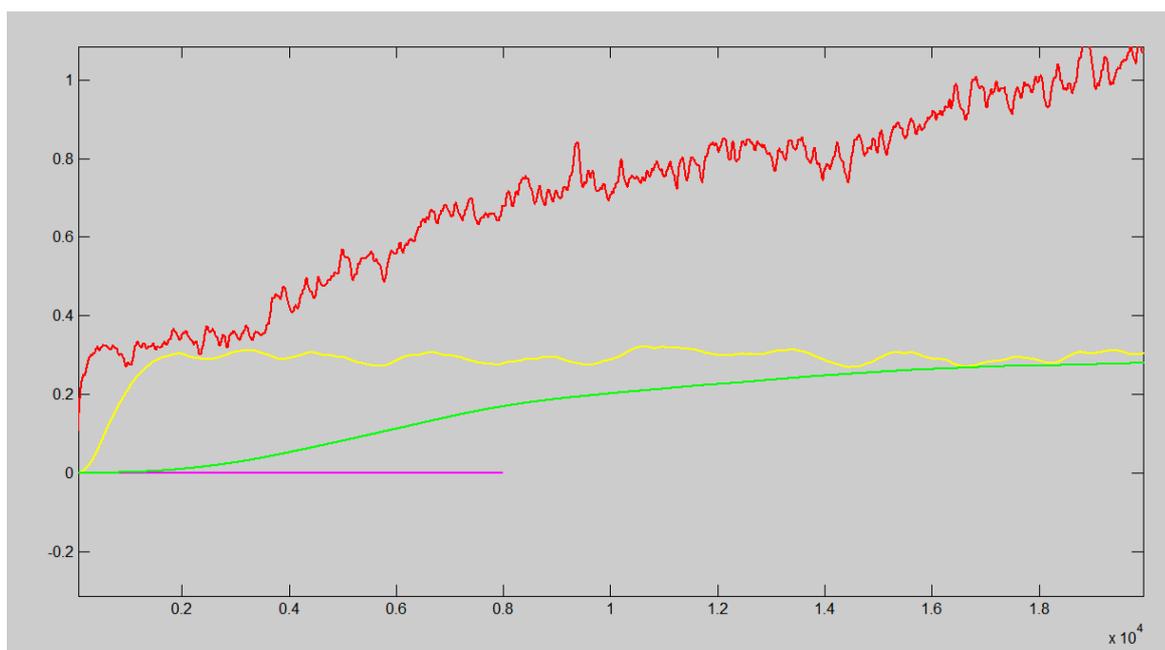


圖 3.2-9

其中曲線由紅到紫代表切割時間由大到小，分別是 0.01、0.001、0.0001、0.00001。切割時間大時每次撞擊力道大，但 **damping** 也大，導致 **fluctuation** 大 (紅線)。雖然它在很快的時間裡達到平衡，但是震盪幅度太過劇烈，如此一來，雖然系統達到平衡，但是平均動能的部分會造成很大的誤差，此種模擬無法真正刻劃一個由分子運動製造的小推動與小 **damping**。反觀綠色與紫色雖然是很平滑的，但計算時間切割太細，造成粒子的反映時間過久。因此我們取黃線的時間切割條件: 0.01。

環境設定完成之後，接著就是計算 $\langle \Delta F - W \rangle$ ，每個被波峰與波峰隔開的位能井，都被定義是一個 **state**，如圖 3.2-10 (state 間的 **barriers** 要夠高):

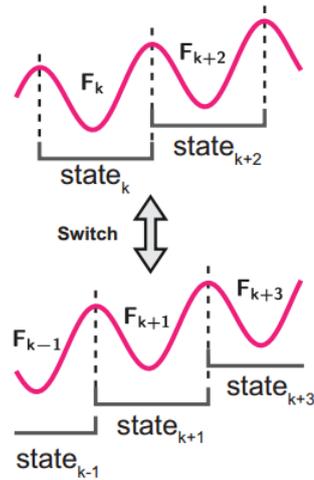


圖 3.2-11

而各 state 的 free energy 是根據:

$$F_k = -K_B T \ln \left[\int e^{-\frac{U(x)}{K_B T}} dx \right]$$

計算的[4]，其中 $U(x)$ 是 particle 在 x 時的位能。由於位能井的形狀幾乎是相同的，state 與 state 之間的 free energy 差，幾乎等於 state 與 state 的位能在局部極小值時的差值。而作用在粒子上的功， W ，是根據切換前與切換後而計算的，利用切換後的位能，減去切換前的位能，即是 W ，若粒子沒有切換，則 $W=0$ 。

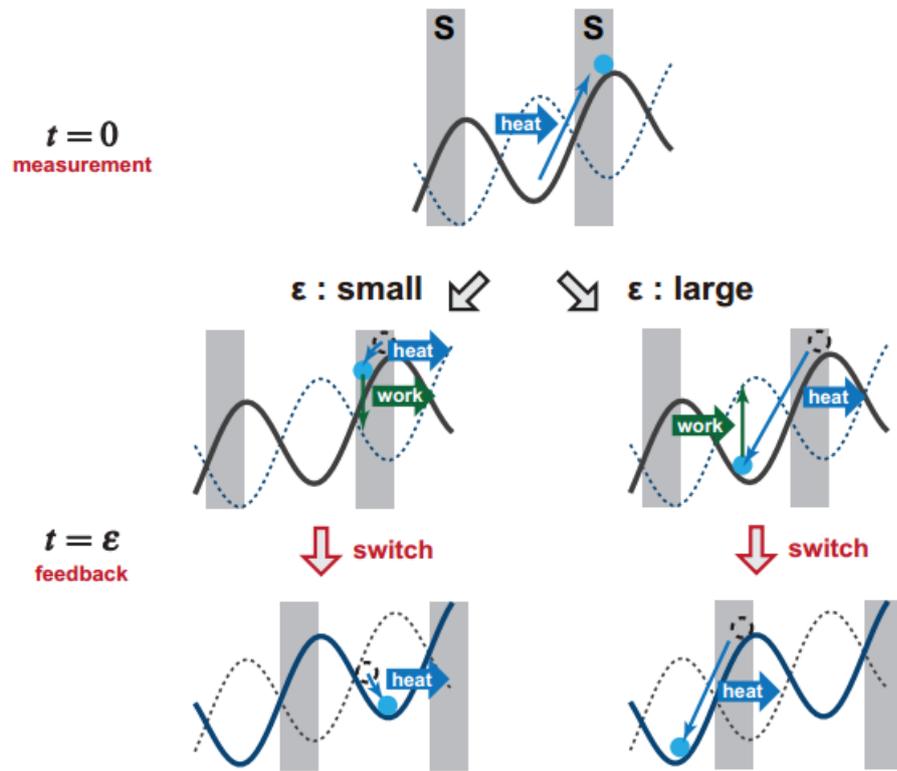


圖 3.2-12

在模擬的過程中，沒進入區域 s 的粒子，沒有切換位能，因此 $W=0$ 。而在模擬當中，我們的妖在偵測時是沒有誤差的，在這樣的條件下，information 量即是：

$$I = -p \ln(p) - (1-p) \ln(1-p)$$

其中 P 是我們發現粒子在區域 s 的機率。

而我們在前面的段落提到了 I 如何轉換成 free energy，有了環境設定與計算方式的討論之後，便可以開始蒐集 data 及計算 information-to-energy 的轉換效率了，我們會在下一節展示我們的成果。

3.3 結果分析

3.3.1 正弦波

在我們的環境下，我們位能井的振幅為 4 倍的 $K_B T$ ，而斜率約為 $\frac{1.13}{2\pi}$ 倍的 $K_B T$ ，當 feedback time delay 可忽略時，算出來的 Information 量為 0.0233，發現粒子在區域 s 的機率為 0.0035(35/10000)，平均的 W 為 -0.00711，平均的 ΔF 為 0.00198， $\langle \Delta F - W \rangle$ 為 $0.0091 K_B T$ ，而 information-to-energy 的效率為：

$$\frac{\langle \Delta F - W \rangle}{K_B T I} = \frac{0.0091}{0.0233} = 0.3906 \approx 39.1\%$$

那麼，如果我們將斜率調整得更加傾斜，結果會出現什麼樣的變化呢？

當我們把斜率調整成原本的三倍，約是 $\frac{3}{2\pi}$ 倍的 $K_B T$ 後，同樣的當 feedback time delay 可忽略時，算出來的 Information 量為 0.0072，發現粒子在區域 s 的機率為 0.0015(15/10000)。但是，斜率比較傾斜的同時，粒子亦有往左跳的部分，如圖 3.3-1 所示：

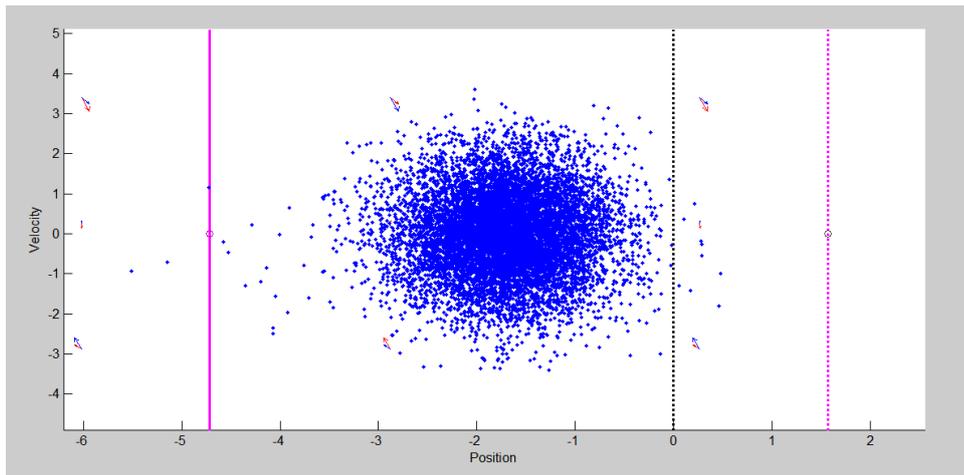


圖 3.3-1

由於跑到左邊部分的粒子，它們的 state 與初始狀態相比已經不同，free energy 的部分勢必要列入計算，這部分的粒子出現機率為 $0.0004(4/10000)$ 。 $\langle \Delta F - W \rangle$ 則為 $0.00198 K_B T$ ，而 information-to-energy 的效率為：

$$\frac{\langle \Delta F - W \rangle}{K_B T I} = \frac{0.00198}{0.0072} = 0.275 \approx 28\%$$

事實上，我們找了不一樣的斜率，來觀察對轉換效率的影響：

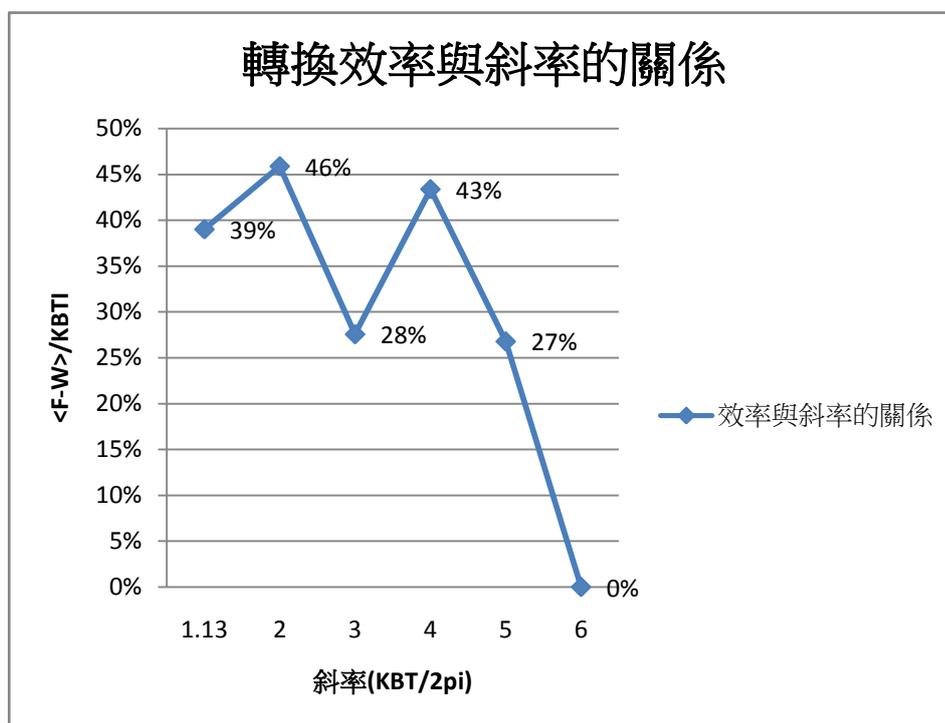


圖 3.3-2

上圖的環境參數和此節第一個結果的環境，除了斜率之外其他都是相同的。可以發現，隨著傾斜程度增加，轉換效率將隨之遞減，不過並不是的遞減；而當斜率為 $\frac{3}{2\pi}$ 倍與 $\frac{5}{2\pi}$ 倍的 $K_B T$ 時，轉換的效率是大幅下降的。

轉換效率的變化是由於斜率變得更加傾斜時，粒子跳到左邊位能井數目漸增，換句話說，(i)仍然處在初始狀態時的位能井裡的粒子數量、(ii)左位能井粒子的數量、及(iii)成功切換到藍色位能井裡粒子的數量，這三者的分布對 information-to-energy 轉換效率造成很大的影響。下圖是粒子跳過左邊位能井的機率與斜率的對應圖：

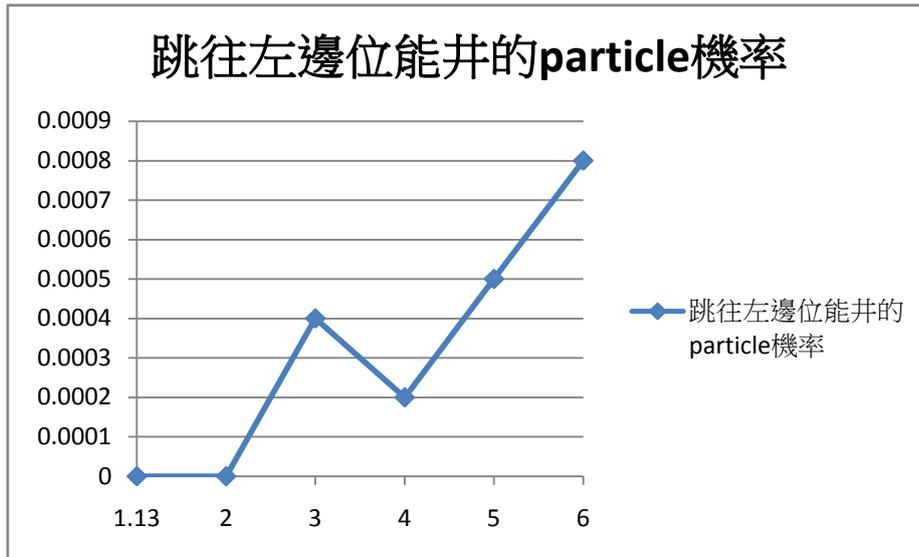


圖 3.3-3

由圖 3.3-3 可以知道，左邊位能井粒子的數量，是隨著斜率的傾斜程度而漸漸增加的，對比"轉換效率與斜率的關係"圖(圖 3.3-2)，效率也確實是遞減的，在此我們可以先得得到一個重要的結論：

**"跳往左邊位能井的粒子，會影響
information-to-energy 的轉換效率"**

如果在改變斜率的條件下，要提升效率的話，必須盡量保持粒子並沒有跑到左邊的位能井。

如果斜率的影響是如此的話，那麼，妖偵測粒子的區域 s 的寬窄，能否同樣的也會對轉換效率造成影響呢？我們接著改變區域 S 的寬度，由左往右漸窄，如圖 3.3-4:

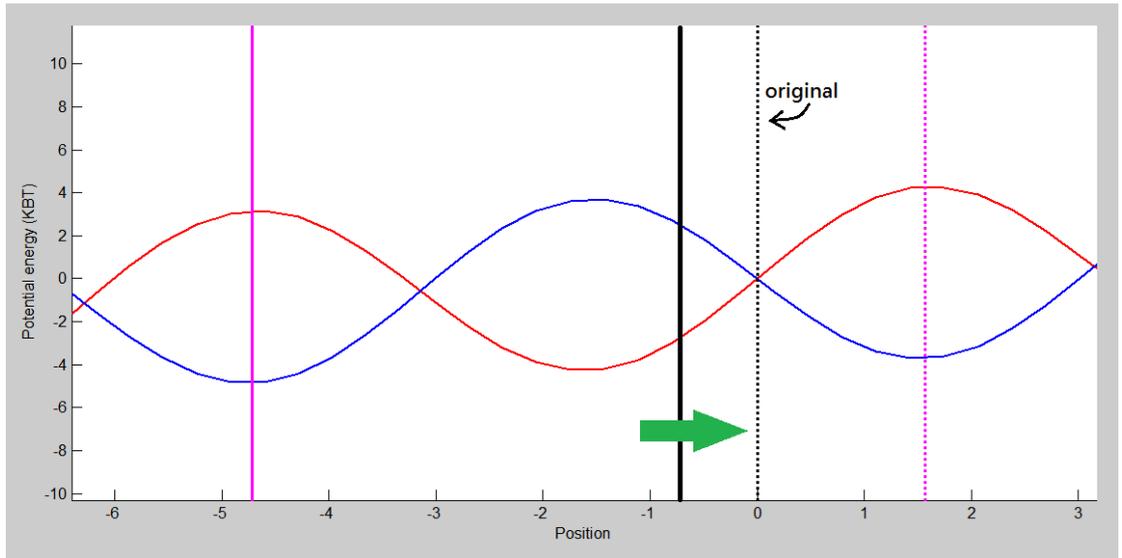


圖 3.3-4

其中，黑色虛線與紫色虛線所構成的區域，就是我們原本結果模擬中的區域 S ，紅色與藍色為兩個位能相差 π 的相位的位能，而黑色實線代表的是我們這次變動區域 S 下線起點，為 -0.35π 。

而下圖便是固定區域 s 的上限($x=0.5\pi$)，在改變區域 s 的下限下，轉換效率與區域 s 的關係圖：

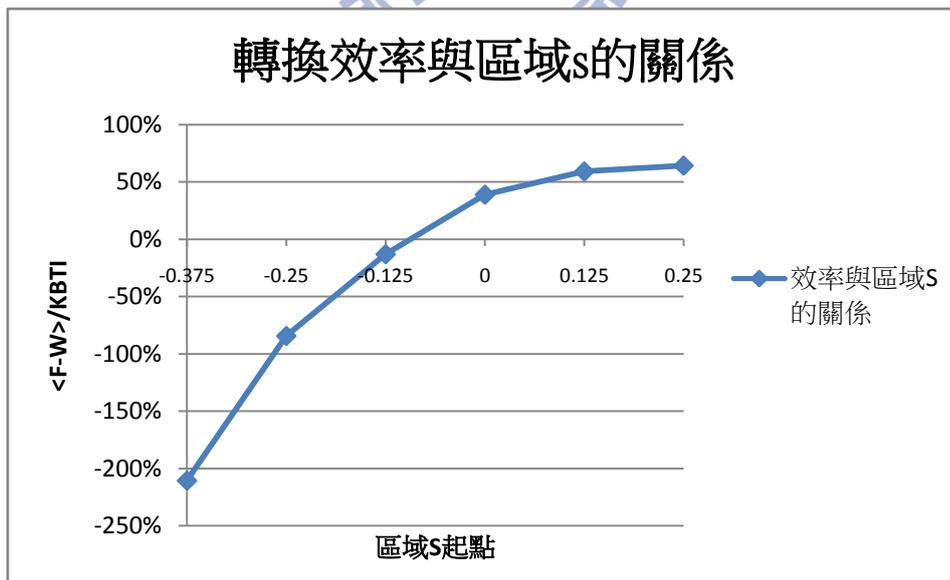


圖 3.3-5

可以發現，在下限 < 0 時， $\langle \Delta F-W \rangle$ 將會回歸為熱力學第二定律時要求的結果；改變區域 S 的寬窄，影響的是在區域 s 內偵測到粒子的多寡，下圖是隨著區域 s 的寬度變窄，在區域 s 中粒子的機率：

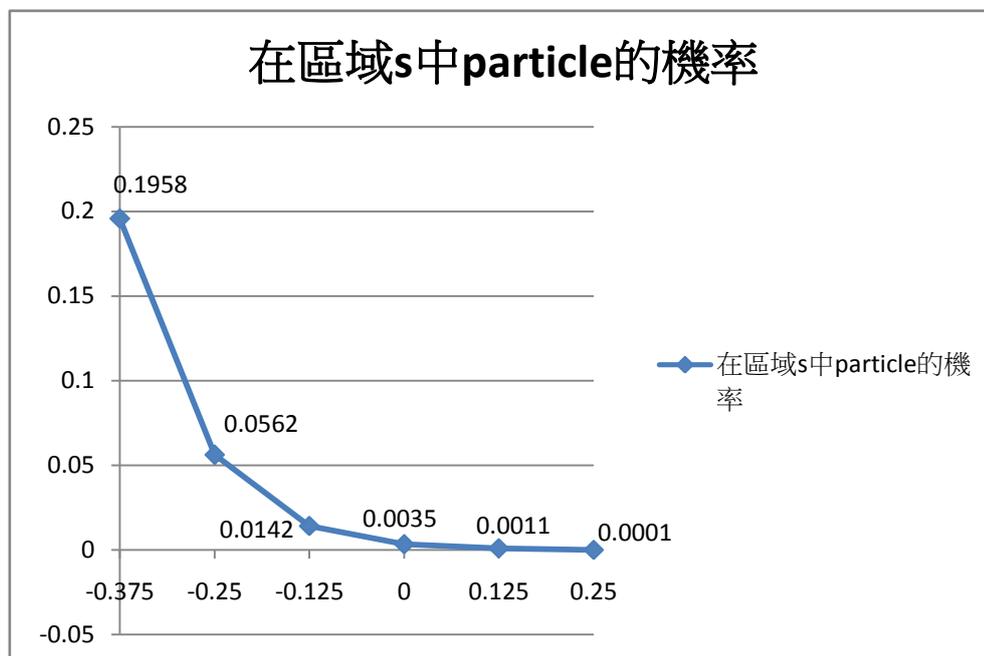


圖 3.3-6

隨著區域 s 愈窄，能偵測到了粒子將會愈少，但是對照轉換效率與區域 s 的關係圖，卻發現效率是愈來愈高的！我們在這裡可以猜測，如果要提升效率，或許最好的辦法是讓 information 量"不要爬升得這麼快"，也就是製造得讓能成功切換位能井的粒子機率很低，同時保持 $\langle \Delta F-W \rangle$ 不要下降得太多，這個便是我們模擬中，提升效率的關鍵！

所以，如果要有效的提升 information-to-energy 的效率，縮減區域 s 的寬度，讓它變窄，以至於能進入到區域 s 的機率變小，導致 information 上升較慢，這樣能讓效率有顯著的提升。不過，這樣的做法，有可能導致因為區域 s 切的寬度太窄，造成粒子不易被偵測到，像是當下限為 0.25π 時，粒子在區域 s 的機率為"1/10000"，也就是只有一顆成功切換的粒子。

以上是在傾斜的正弦波中，information-to-energy 隨參數改變的變化。如果今天傾斜週期位能不是 Sagawa 與 Toyabe 在文章中所提到的傾斜正弦波呢？我們是不是可以利用另一種形狀的位能，來分析改變形狀後效率是否會改變，而這個改變，是變得更有效率抑或是更無效率呢？我們接下來，將正弦波改變為方波。

3.3.2 矩形波

以下矩形波的合成，是利用數個正弦波的疊加：

$$\frac{4}{\pi} \cdot \left(\sin(x) + \frac{\sin(3x)}{3} + \frac{\sin(5x)}{5} + \frac{\sin(7x)}{7} + \frac{\sin(9x)}{9} + \frac{\sin(11x)}{11} + \frac{\sin(13x)}{13} + \frac{\sin(15x)}{15} \right)$$

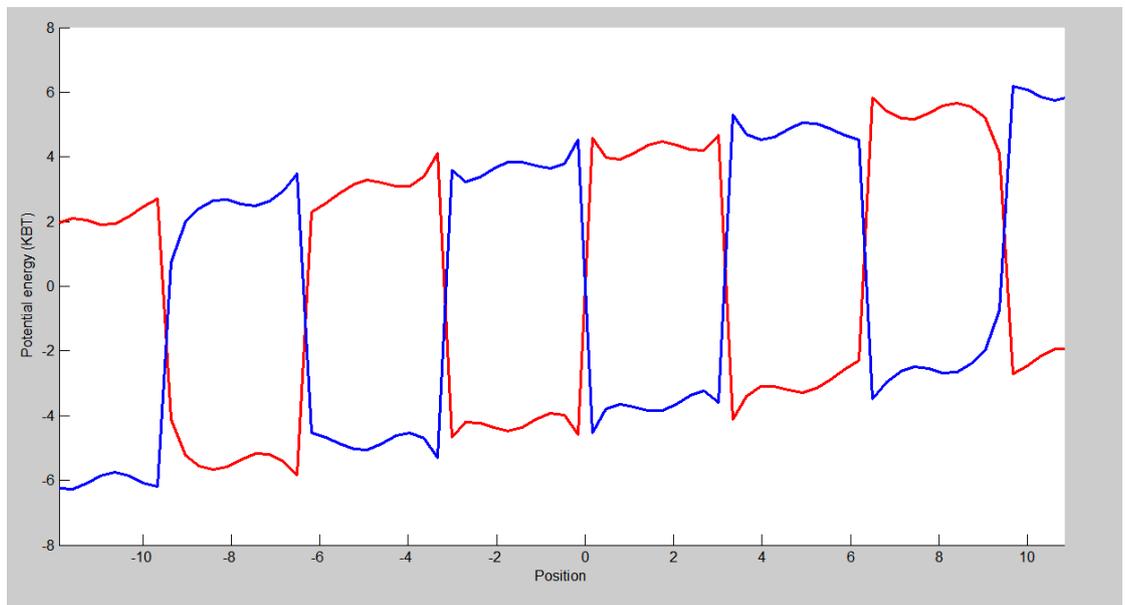


圖 3.3-7

透過方波，我們期望它的型狀能夠塑造出一個能夠使效率比原本的正弦波還要高的環境。為了能夠與原本的结果做比較，我們只改變位能井的形式，但是振幅依舊為 4 倍的 $K_B T$ ，而斜率仍為 $\frac{1.13}{2\pi}$ 倍的 $K_B T$ 。在這樣的環境下，算出來的 Information 量為 0.0043，發現粒子在區域 s 的機率為 0.0005 (5/10000)，但是，剛好有一顆(1/10000)跳離了位能井到了左邊區域， $\langle \Delta F - W \rangle$ 為 0.00137 $K_B T$ ，而 information-to-energy 的效率為：

$$\frac{\langle \Delta F - W \rangle}{K_B T I} = \frac{0.00137}{0.0043} = 0.3186 \approx 32\%$$

結果計算出來，效率是略微下降的，為什麼呢？首先由我們矩形波的圖可以知道，其實我們合成的矩形波，波形還不夠好，只能說形狀與矩形波相似，但是由於合成的數量不夠，導致其週期並不明顯。本來因為矩形波波形的關係，切在區域 S 的部分會使得切換後位能的改變上升，讓對外界做功上升，但是由於形狀其實並不够好，讓這樣的原因有可能會對 W 的結果產生影響。再來，在矩形波位能下，粒子能成功切換的數量很有限(5 顆)，雖然能讓 information 量"不要爬升得這麼快"，但是同樣對 W 造成了影響，導致系統對外界所做的功下降。除此之外，成功往左跳的粒子有一顆，這一顆亦系統造成了 ΔF 的降低，如此一來便讓整體的效率下降。

讓我們再來試看看另一種正弦波的變型，鋸齒波。

3.3.3 鋸齒波

同樣的，鋸齒波一樣是利用正弦波的疊加：

$$\frac{2}{\pi} \cdot \left(\sin(x) - \frac{\sin(2x)}{2} + \frac{\sin(3x)}{3} - \frac{\sin(4x)}{4} + \frac{\sin(5x)}{5} - \frac{\sin(6x)}{6} + \frac{\sin(7x)}{7} - \frac{\sin(8x)}{8} + \frac{\sin(9x)}{9} - \frac{\sin(10x)}{10} + \frac{\sin(11x)}{11} \right)$$

將正弦波位能井改變成鋸齒波位能井的目的，是希望藉由地形之利，讓粒子比起矩形波，更能往右跑進區域 S 中。同樣的為了能夠與原本的结果做比較，我們亦只改變位能井的形式，但是振幅依舊為 4 倍的 $K_B T$ ，而斜率仍為 $\frac{1.13}{2\pi}$ 倍的 $K_B T$ 。在這樣的環境下，算出來的 Information 量為 0.0272，發現粒子在區域 s 的機率為 0.0042 (42/10000)，但是，剛好有七顆(7/10000)跳離了位能井到了左邊區域， $\langle \Delta F - W \rangle$ 為 $0.0071 K_B T$ ，而 information-to-energy 的效率為：

$$\frac{\langle \Delta F - W \rangle}{K_B T I} = \frac{0.0071}{0.0272} = 0.2624 \approx 26.24\%$$

看來，鋸齒波並沒有讓效率提高，甚至還降低！造成如此的原因，恐怕是 information 量上升的比較高，而同時 $\langle \Delta F - W \rangle$ 下降了，讓效率降低。其實與正弦波的结果相比，information 量是差不多的，但是，由於往左邊跳的粒子數增加，再加上 W 的下滑(-0.0044)，讓 $\langle \Delta F - W \rangle$ 下降，使得结果比正弦波還要來的

低。

在有了正弦波、方波、鋸齒波的環境計算後，我們也好奇，若將這三者放在一起，一同觀察他們在改變斜率與區域 S 的寬度下，效率將會有何變化。我們將在下一小節中展示這個比較。

3.3.4 綜合比較

首先，我們先看斜率的改變對不同位能對效率的影響：

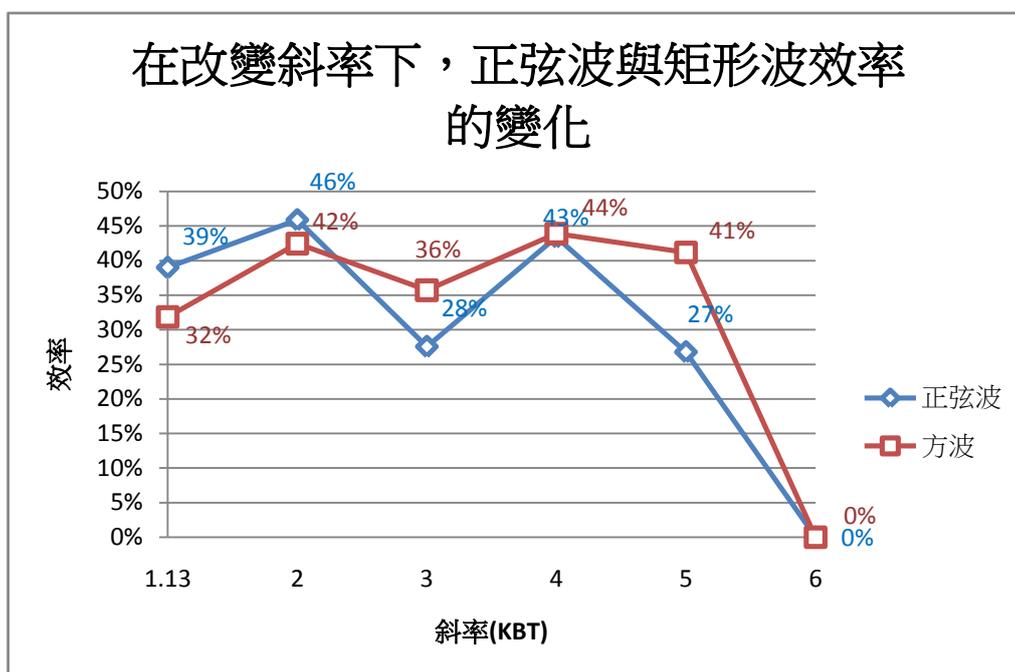


圖 3.3-8

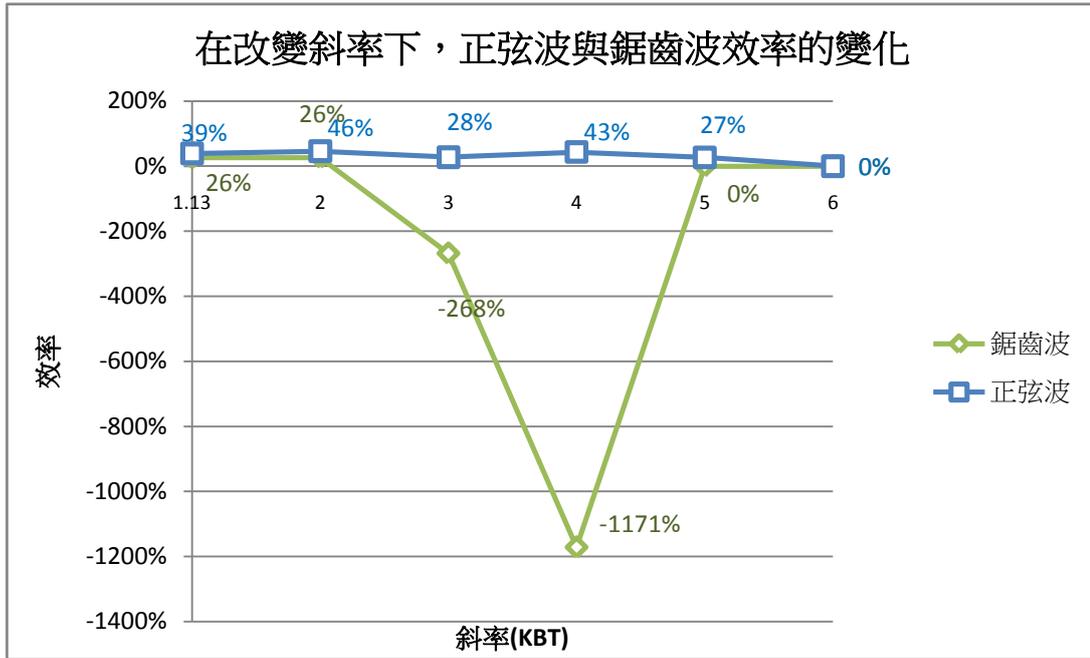


圖 3.3-9

由於樣本數偏少的關係，導致分析出來的曲線不夠平滑，我們同樣將。可以發現，假如矩形波想透過改變斜率來增加效率轉換的話(圖 3.3-10)，在斜率為 $\frac{4}{2\pi}$ 倍的 $K_B T$ ，表現會是最好的，接著便開始下滑；而鋸齒波的部分(圖 3.3-9)，表現與正弦波相比，其實效率是下降的。在模擬鋸齒波時，我們有發現一個問題，也就是比起正弦波，鋸齒波位能井的粒子，有更大的傾向會往左邊跳，造成 Free energy 的耗減。這是蠻有趣的現象，因為我們的鋸齒波位能井，創造的形狀是左邊有如有一道牆般，想隔絕住粒子往左跳，實際上，比起鋸齒波牆，緩步的牆正弦波會讓粒子較不好越過。由圖中可以看到鋸齒波的效率為負的，並且很劇烈，其實肇因是因為往左跳的粒子數上升所導致的，而在斜率到 $\frac{5}{2\pi}$ 倍的 $K_B T$ 與 $\frac{6}{2\pi}$ 倍的 $K_B T$ 時，因為沒有粒子被偵測到，所以效率皆為 0%。

既然改變斜率的情況下是如此，那麼，改變區域 S 的呢？

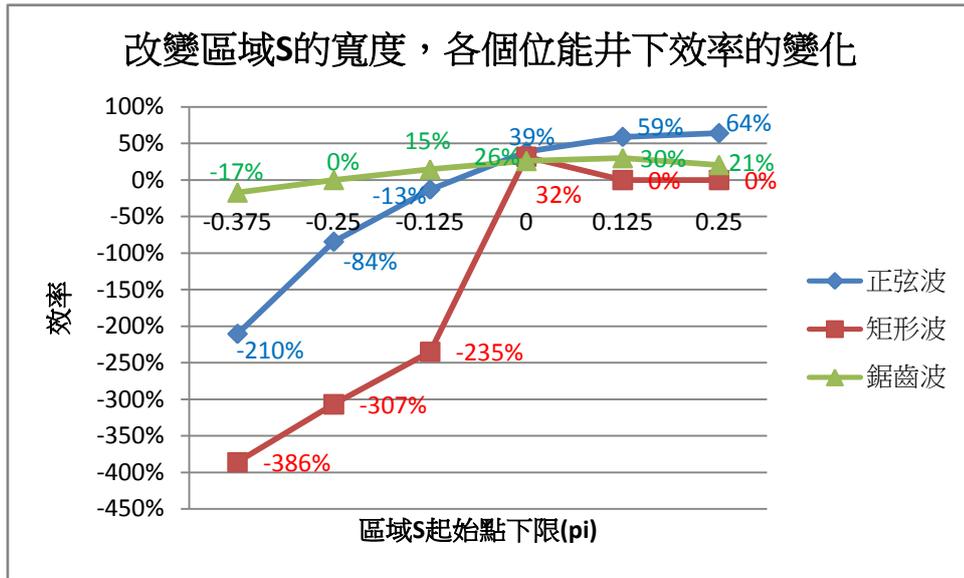


圖 3.3-11

可以發現，矩形波由於粒子成功切換的機率已經偏低，再縮減區域 S 的話恐怕真的會在樣本數少的情況下，偵測不到粒子，導致轉換的效率為 0%。而效率為負的部分，是因為區域 S 的變大，導致 W 由"系統對外界做功"變成"外界對系統做功"，如此一來 W 將會變為正值，而使 $\langle \Delta F - W \rangle$ 會小於零。

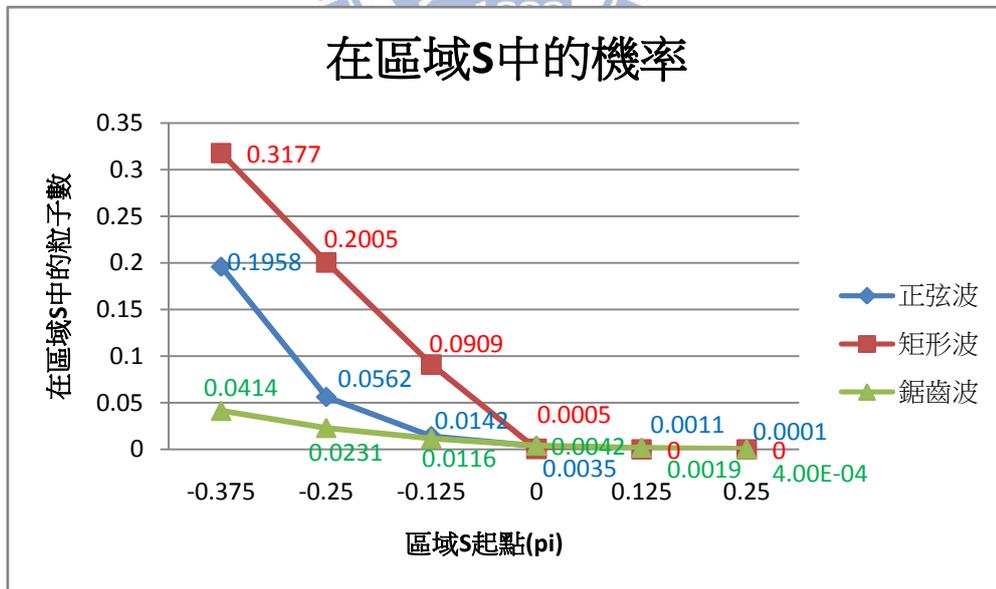
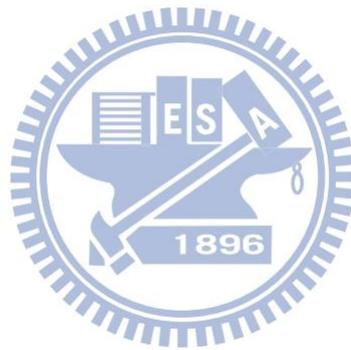


圖 3.3-12

而鋸齒波表現相對的平滑，但是效率仍然偏低，恐怕是因為粒子往左跳的機率，造成 ΔF 降低，讓 information 量爬升的比 $\langle \Delta F - W \rangle$ 相對得還要大所以

造成的效率低落。以上，就是我們針對三種不同位能井形式的 Szilard-type Engine 所做的討論。



第四章 結論

在第三章裡，我們嘗試了 Sagawa 與 Toyabe 實驗的想法，用模擬的方式建構出 Szilard-type engine，並計算其 information 轉換成 free energy 的效率。雖然和實驗的環境並不完全一樣，統計的方法也不同(實驗為長時間統計，電腦計算為 ensemble 統計)，但是可以看出來，其實結果還蠻一致的。我們改變了位能的斜率，改變區域 S 的寬度，更改變位能的形狀，試著觀察效率的變化，並尋找著哪種環境下，效率會提高。可以發現，在我們的模擬當中，仍是正弦波的效率，是比另外兩種型式的位能要來的高一些。

其實我們所做的，到頭來，回到了一個最根本的問題：

information 量轉換成 free energy 的效率，最高能夠達到多少？

Szilard 的假想模型告訴我們，效率能夠達到 100%，所謂 100%，當然就是指在最理想，也最完美的情況下，才能達成。實驗中，會遭遇很多不確定因素與量測誤差，造成效率值算出來偏低，這便是理想值與現實的差別。那麼，在 feedback delay time 幾乎是可以忽略的模擬中，計算出來的效率值卻仍舊只有約 40%，必須要改變區域 S 的寬度，才能逼近 60%。到此，我們不禁要問，我們還必須要如何改良，才能達到更高的效率？甚至，效率真的能達到 100% 嗎？

其實，模擬的部分仍有可以改進的地方，像是樣本數不夠多、環境的變因、 dt 切得不夠細、而另外兩種位能形式，由於合成的結果並不夠好，對結果照成了一些影響...等，都有很多地方是會造成我們模擬上的誤差，相信從這些地方去改善，或許結果會更加的理想。

再來，就是我們改變位能，嘗試著來觀察 information-to-energy 的效率，看看哪種位能的環境會讓效率比較好。然而，透過我們的模擬結果可以發現，其實另外兩種位能形式始終效率仍是差一些。事實上，我們只嘗試了三種不同形狀的位能製作 Szilard-type Engine，並不能斷定正弦波是最佳形式的位能，只能透過模擬的結果，說明在正弦波位能的情況下，轉換是比較有效率的。

雖然嘗試幾種可能後發現，效率漸遇到極限，無法再上升，不過，透過我們模擬的過程，發覺了一些提升效率有用的方向，將來可透過這些方向去修正，或許將會使我們更能理解控制 Szilard Engine 與熵轉換效率背後的關鍵機制。

參考文獻

一、英文文獻：

- [1]. J. C. Maxwell, "Theory of Heat," (Appleton, London, 1871)
- [2]. Szilárd, L. On the decrease of entropy in a thermodynamic system by the intervention of intelligent beings. *Z. Phys.* 53, 840 856 (1929).
- [3]. Sagawa, T. (2012). Thermodynamics of information processing in small systems. *Progress of Theoretical Physics*, 127(1), 1-56
- [4]. Toyabe, S., Sagawa, T., Ueda, M., Muneyuki, E., & Sano, M. (2010). Experimental demonstration of information-to-energy conversion and validation of the generalized Jarzynski equality. *Nature Physics*, 6(12), 988-992.
- [5]. Leff, H. S. & Rex, A. F. *Maxwell's Demon 2: Entropy, Classical and Quantum Information, Computing* (Institute of Physics Publishing, 2003)
- [6]. Maruyama, K., Nori, F. & Vedral, V. The physics of Maxwell's demon and information. *Rev. Mod. Phys.* 81, 1 23 (2009).
- [7]. Landauer, R. Irreversibility and heat generation in the computing process. *IBM J. Res. Dev.* 5, 183 191 (1961)
- [8]. Bennett, C. H. The thermodynamics of computation a review. *Int. J. Theor. Phys.* 21, 905 940 (1982).
- [9]. Sagawa, T. & Ueda, M. Minimal energy cost for thermodynamic information processing: Measurement and information erasure. *Phys. Rev. Lett.* 102, 250602 (2009)
- [10]. Serreli, V., Lee, C-F., Kay, E. R. & Leigh, D. A. A molecular information ratchet. *Nature* 445, 523 527 (2007)
- [11]. Cover, T. M. & Thomas, J. A. *Elements of Information Theory*. (John Wiley, 1991)
- [12]. Bustamante, C., Liphardt, J. & Ritort, F. The nonequilibrium thermodynamics

of small systems. *Phys. Today* 58, 43 48 (July, 2005)

- [13]. Sekimoto, K. in *Stochastic Energetics* (Lecture Notes in Physics, Vol. 799, Springer, 2010)
- [14]. Thorn, J. J., Schoene, E. A., Li, T. & Steck, D. A. Experimental realization of an optical one-way barrier for neutral atoms. *Phys. Rev. Lett.* 100, 240407 (2008)
- [15]. Lopez, B. J. et al. Realization of a feedback controlled flashing ratchet. *Phys. Rev. Lett.* 101, 220601 (2008)
- [16]. Jourdan, G., Torricelli, G., Chevrier, J. & Comin, F. Tuning the effective coupling of an AFM lever to a thermal bath. *Nanotechnology* 18, 475502 (2007)
- [17]. Doyle, J. C., Francis, B. A. & Tannenbaum, A. R. *Feedback Control Theory* (Prentice Hall, 1992).
- [18]. Evans, D. J., Cohen, E. G. D. & Morriss, G. P. Probability of second law violations in shearing steady states. *Phys. Rev. Lett.* 71, 2401 2404 (1993)
- [19]. Gallavotti, G. & Cohen, E. G. D. Dynamical ensembles in nonequilibrium statistical mechanics. *Phys. Rev. Lett.* 74, 2694 2697 (1995).
- [20]. Crooks, G. E. Entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation for free energy differences. *Phys. Rev. E* 60, 2721 2726 (1999)
- [21]. Shannon, C. E. A mathematical theory of communication. *Bell System Tech. J.*
- [22]. Schlick, Tamar (2002). *Molecular Modeling and Simulation*. Springer. p. 480. ISBN 0-387-95404-X
- [23]. Sagawa, T. & Ueda, M. Generalized Jarzynski equality under nonequilibrium feedback control. *Phys. Rev. Lett.* 104, 090602 (2010)
- [24]. Sagawa, T. & Ueda, M. Second law of thermodynamics with discrete quantum feedback control. *Phys. Rev. Lett.* 100, 080403 (2008).