arXiv:2301.02146v2 [quant-ph] 6 Mar 2024

寻找满足局域守恒定律并呈现热化的 Lindblad 算子

Devashish Tupkary, [1], * Abhishek Dhar, [2], † Manas Kulkarni, [2], ‡ 和 Archak Purkayastha[3], [4,5], §

[1] *Institute for Quantum Computing and Department of Physics and Astronomy,University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada, N2L 3G1* [2] *International Centre for Theoretical Sciences, Tata Institute of Fundamental Research, Bangalore 560089, India* [3] *Department of Physics, Indian Institute of Technology, Hyderabad 502285, India*

[4] *Centre for complex quantum systems, Aarhus University, Nordre Ringgade 1, 8000 Aarhus C, Denmark* [5] *School of Physics, Trinity College Dublin, College Green, Dublin 2, Ireland*

我们研究马尔可夫量子主方程（QME）能否一致地描述一个有限维系统，其中一部分与热浴弱耦合。为了保持完全正性和迹，这种 QME 必须具有 Lindblad形式。出于物理一致性的考虑，它还应保持局域守恒定律并能够呈现热化。我们寻找满足这些附加条件的林德布拉德方程。首先，我们表明，除非处于极其特殊的情形，微观推导得到的 Bloch-Redfield方程（Redfield 方程）会违反完全正性。接着我们证明，同时要求完全正性并保持局域守恒定律，会迫使林德布拉德算符和兰姆位移哈密顿量具有“局域”性质，即仅作用于与热浴直接耦合的那部分系统。随后，我们将寻找能够呈现热化的“局域” Lindblad QME 问题转化为半定规划（SDP）。我们将其称为热化优化问题（TOP）。给定系统参数和温度，TOP 的解能够明确判定所需类型的 QME 是否能达到指定精度。在可行的情况下，它还会给出此类 QME 的形式。对于由少数量子比特构成的 XXZ链，在设定相当高的精度后，我们发现，当只有第一个量子比特与热浴耦合时，在相当宽的参数范围内，这种 QME 都不可能存在。值得注意的是，我们发现，当前两个量子比特连接到热浴时，在大致相同的参数范围（包括宽广的温度范围）内，这种 QME 都有可能实现。

I. 引言

一个小型有限维量子系统，其中一部分与宏观热浴弱耦合，预期会热化至热浴的温度。描述这种动力学与量子科学与技术的多个领域息息相关，包括量子信息与热力学 [1], 量子光学 [2],量子化学 [3], 工程学 [4] 以及生物学 [5]。在不与宏观热浴耦合时，系统密度矩阵的动力学由海森堡运动方程支配。这种幺正演化是马尔可夫的。与宏观热浴耦合后，动力学变为非幺正，并由量子主方程（QME） [6–8]描述。我们研究在什么条件下，可以用物理上一致的马尔可夫量子主方程描述这种动力学。为此，我们引入“热化优化问题”（TOP）。这是一个半定规划（SDP），其输出可明确判定：对于给定的系统参数和温度，在给定精度下，这样的量子主方程是否存在。若存在，输出还会给出一种可能的量子主方程形式。若不存在，则意味着对于这些参数，即使在弱耦合下，动力学也无法由任何马尔可夫量子主方程描述

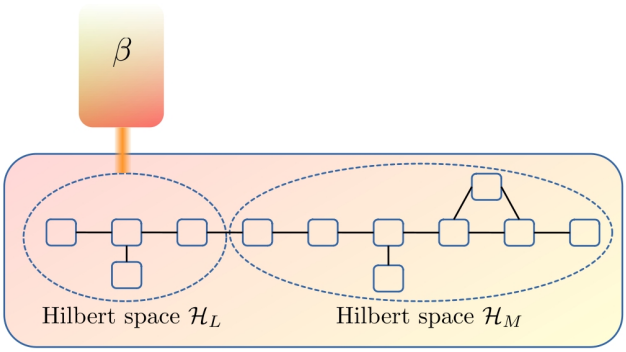

图 1. 我们所考虑的装置示意图：一个由哈密顿量 H_S 描述的任意有限维系统，其中一部分以弱耦合方式连接到逆温度为 β 的热浴。系统的希尔伯特空间 $\mathcal{H}_S$ 分为两部分：一部分 $\mathcal{H}_L$ 与热浴直接耦合，其余部分为 $\mathcal{H}_M$。

系统-热浴耦合，因此必然具有某种非马尔可夫特性。可以使用高级计算中的标准软件包求解半定规划。我们注意到，尽管半定规划广泛应用于量子信息与通信的许多领域 [9, 10], , 也应用于量子化学 [11, 12], , 但此前只有少数研究将其与开放量子系统技术结合起来 [13–15],, 且研究背景大不相同。

Gorini、Kossakowski、Sudarshan 和 Lindblad（GKSL） [16–18] 已证明，任何保持

* djtupkary@uwaterloo.ca
† abhishek.dhar@icts.res.in
‡ manas.kulkarni@icts.res.in§
archak.p@phy.iith.ac.in

密度矩阵的完全正性和迹，并描述马尔可夫动力学的量子主方程，都必须具有以下形式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = i[\rho, H_S + H_{LS}] + \mathcal{D}(\rho),$$
$$\mathcal{D}(\rho) = \sum_{\lambda=1}^{d^2-1} \gamma_\lambda \Big(L_\lambda \rho L_\lambda^\dagger - \frac{1}{2}\{L_\lambda^\dagger L_\lambda, \rho\} \Big), \quad \gamma_\lambda \geq 0, \tag{1}$$

这通常被称为 Lindblad 方程。在方程（1）中， ρ 是系统的密度矩阵， d是系统的希尔伯特空间维数， H_S 是系统哈密顿量， H_{LS} 是兰姆位移哈密顿量，L_λ 是林德布拉德算符， γ_λ 是速率，并且$\mathcal{D}$（ρ）被称为“耗散子”项。通过要求 $\gamma_\lambda \geq 0$来确保完全正性条件。Lindblad 方程已被广泛用于理论和实验研究中 [6–8、19–22]。

鉴于其广泛的应用范围，评估这种马尔可夫描述在何种条件下能够从更微观的理论中涌现，具有至关重要的意义。微观地获得马尔可夫量子主方程的标准方法，是考虑与热浴弱耦合的系统全局哈密顿量，并对热浴进行微扰处理，保留到最低阶。从这一微观视角出发可以清楚地看出，仅仅具有 Lindblad形式的方程并不足够；为了满足物理一致性，还需要一些额外的基本要求 [23]。特别是，必须保持局域守恒定律；如果稳态是唯一的、系统不受驱动且所有热浴具有相同温度，那么系统必须热化至热浴的温度。若能构造出一种量子主方程，使其天然具有 Lindblad形式并满足这些额外要求，将会十分有用。本文系统地研究了如何为这样一种设置寻找合适的量子主方程：系统的一部分与单热浴耦合（见图1）。这一过程分为三个步骤，每一步都具有重要影响：

1. 微观推导的、对系统-热浴耦合取最低阶的量子主方程，即所谓的 Bloch-Redfield方程（RE）[6, 24, 25]。已有研究表明，RE 能够保持局域守恒定律并实现热化 [23]。在此，我们给出一个明确且与模型无关的证明：除非雷德菲尔德耗散子恰好以“局域”的方式作用——即在系统中未与热浴直接耦合的部分上为单位算符——否则 RE 必然违反完全正性。此前关于 RE 违反完全正性的论证，大多基于具体实例 [26–32]。文献 [33], 表明，RE 通常会违反完全正性，但并未提出关于雷德菲尔德耗散子“局域性”的论断。此外，我们考虑了最一般形式的系统-热浴耦合，而文献 [33]并未如此处理。

2. 随后我们证明，满足完全正性条件 $\gamma_\lambda \geq 0$ 并保持局域守恒定律，必然要求 Lindblad 算符和兰姆位移哈密顿量具有“局域性”。也就是说，它们只能作用于与热浴耦合的系统部分，并且在未与热浴连接的系统部分上为单位算符。这直接排除了所谓“全局”林德布拉德方程与局域守恒定律相容的可能性，例如本征基林德布拉德方程 [6, 8]，和统一林德布拉德方程 [34] 。

3. 在要求耗散子和兰姆位移哈密顿量具有“局域”形式的条件下，我们设计了一种基于半定规划（SDP）的数值方法，可逐个情形确切检验特定情况下此类量子主方程是否能够实现热化。我们将其称为 TOP。我们使用该方法研究了这样一种情形：一条由少数几个量子比特组成的 XXZ 链，其中一部分与热浴耦合。如果热浴只与第一个量子比特耦合，我们的方法确切表明，在很大范围的系统参数和温度下，不存在此类量子主方程。然而，值得注意的是，如果热浴与链上的两个量子比特耦合，那么在选定的精度范围内，我们的方法表明，在相当广泛的参数范围（包括广阔的温度范围）内，一个满足所有条件的马尔可夫量子主方程是可能存在的。请注意，即使只有一个量子比特与热浴相连，XXZ 链的 Redfield 方程（RE）也确实能够实现热化并保持局域守恒律 [23], ，但它完全违反了完全正性。

本文的结构安排如下。在第 II 节中，我们说明本文研究的设定，推导该设定下的 Redfield 方程，并表明除非 Redfield 耗散子恰好以“局域”方式作用，否则它必然会违反完全正性。在第 III 节中，我们考察保持完全正性且遵守局域守恒定律的量子主方程，并表明这类方程的耗散子和兰姆位移算符只能作用于与热浴耦合的系统部分。在第 IV节中，我们讨论兼顾完全正性、局域守恒定律且能够实现热化的量子主方程的可能性。我们介绍 TOP，并将其应用于一个具体情形：只有少数格点的 XXZ 链，其中一个或两个格点与热浴相连。在第 V节中，我们总结研究结果并讨论未来的研究方向。某些细节见附录。

II. 模型与 Redfield 描述

我们的设置示意如图 1 所示。总哈密顿量为

$$H = H_S + \epsilon H_{SB} + H_B, \tag{2}$$

其中， H_S 和 H_B 分别是系统和热浴的哈密顿量，$\epsilon \ll 1$ 是控制系统-热浴耦合强度的小无量纲参数，H_{SB} 是系统-热浴耦合哈密顿量。在初始时刻，系统被认为处于任意初态 $\rho(0)$，而热浴处于逆温度为 β的热态

$$\rho_{\rm tot}(0) = \rho(0) \otimes \rho_B, \quad \rho_B = \frac{e^{-\beta H_B}}{Z_B}. \tag{3}$$

从这一初始态出发，系统与热浴的整个组合在完整哈密顿量H的作用下演化，并对热浴自由度取迹，从而得到系统的状态，

$$\rho(t) = {\rm Tr}_B \left(e^{-iHt} \rho_{\rm tot}(0) e^{iHt} \right), \tag{4}$$

其中 ${\rm Tr}_B(\ldots)$ 表示对热浴自由度取迹。式（4）按构造是一个从 $\rho(0)$ 到$\rho(t)$ [6, 7]的完全正迹保持（CPTP）映射。不失一般性，我们假设 ${\rm Tr}_B(H_{SB}\rho_B) = 0$，其中 ${\rm Tr}_B(\ldots)$ 表示对热浴自由度取迹 [6, 7]。系统密度矩阵的有效运动方程在系统-热浴耦合强度的最低阶近似下 ϵ 即为 RE，写作： [6],

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} =& i[\rho(t), H_S] \\ &+ \epsilon^2 \int_0^\infty dt' \, {\rm Tr}_B [H_{SB}, [H_{SB}(-t'), \rho(t) \otimes \rho_B]], \end{aligned} \tag{5}$$

其中

$$H_{SB}(t) = e^{i(H_S+H_B)t} H_{SB} e^{-i(H_S+H_B)t} \tag{6}$$

而 ρ_B 是热浴的状态。一般情况下，我们可以将系统-热浴耦合哈密顿量写为

$$H_{SB} = \sum_l (S_l B_l^\dagger + S_l^\dagger B_l), \tag{7}$$

其中 S_l 和 B_l 分别是作用于系统和热浴的算符，而 l 可根据需要对任意多个指标求和，以 H_{SB}。将式（7）代入式（5）并化简，得到

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} =& i[\rho(t), H_S] + \epsilon^2 \Big\{ \sum_l \left[S_l^\dagger, S_l^{(1)} \rho(t) \right] - \left[S_l^\dagger, \rho(t) S_l^{(2)} \right] \\ &+ {\rm H.c} \Big\}, \end{aligned} \tag{8}$$

其中

$$\begin{aligned} S_l^{(1)} =& \sum_m \int_0^\infty dt' \, {\rm Tr} \left[B_l B_m^\dagger(-t') \rho_B \right] S_m(-t') \\ &+ \sum_m \int_0^\infty dt' \, {\rm Tr} \left[B_l B_m(-t') \rho_B \right] S_m^\dagger(-t') \\ S_l^{(2)} =& \sum_m \int_0^\infty dt' \, {\rm Tr} \left[B_m^\dagger(-t') B_l \rho_B \right] S_m(-t') \\ &+ \sum_m \int_0^\infty dt' \, {\rm Tr} \left[B_m(-t') B_l \rho_B \right] S_m^\dagger(-t'). \end{aligned} \tag{9}$$

由于实际的微观演化由一个 CPTP 映射给出 [参见方程（3）、（4）], 人们可能会天真地认为，从微观推导出的 Redfield 方程所描述的演化保持完全正性。然而，正如我们将在下一小节一般性地证明的那样，除非处于极其特殊的情形，否则 Redfield 方程会违反完全正性。

A. Redfield 方程中完全正性的破坏

1. *Choosing an operator Basis*

如图 1所示，我们只考虑系统中与热浴耦合的一部分。记 $\mathcal{H}_L$ 为系统中与热浴耦合部分的希尔伯特空间，记 $\mathcal{H}_M$ 为系统其余部分的希尔伯特空间。从数学上说，这意味着希尔伯特空间 $\mathcal{H}_M$中的任意算符 O_M 都与系统-热浴耦合哈密顿量H_{SB}对易，

$$[O_M, H_{SB}] = 0. \tag{10}$$

于是，系统哈密顿量可以写为

$$H_S = H_L + H_{LM} + H_M, \tag{11}$$

其中，哈密顿量 H_L 属于希尔伯特空间 $\mathcal{H}_L$，哈密顿量 H_M 属于希尔伯特空间 $\mathcal{H}_M$，而 H_{LM} 表示两个希尔伯特空间之间的耦合。注意，我们不认为这种耦合很弱。

设 $\mathcal{H}_L$ 和 $\mathcal{H}_M$ 的维数分别为 d_L 和 d_M。于是，可以分别在 $\mathcal{H}_L$ 和 $\mathcal{H}_M$ 上选取正交归一的算符基 $\{f_i\}$ 和 $\{g_j\}$，其中 $1 \le i \le d_L^2$ 和 $1 \le j \le d_M^2$；正交性根据希尔伯特-施密特内积定义，即 $\langle A, B \rangle = {\rm Tr}[A^\dagger B]$。总可以选择这样的基，使得 $f_{d_L^2} = I_L/\sqrt{d_L}$ 和 $g_{d_M^2} = I_M/\sqrt{d_M}$，其中 I_M和 I_L 分别是这些空间上的单位算符。GKSL 定理 [6, 7, 16, 18]要求使用这样的基。对这两个基取张量积，可以得到 $\mathcal{H}_S$上算符的正交归一基 $\{F_k\} = \{f_i\} \otimes \{g_j\}$，其中$F_{d_L^2 d_M^2} = I_S/\sqrt{d}$，而 $d = d_L d_M$ 是系统希尔伯特空间的维数。不失一般性，林德布拉德方程 [公式（1）] 在该基下可写为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = i[\rho, H_S + H_{LS}] + \sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=1}^{d^2-1} \Gamma_{\alpha\tilde{\alpha}} \Big(F_{\tilde{\alpha}} \rho F_\alpha^\dagger - \frac{\{F_\alpha^\dagger F_{\tilde{\alpha}}, \rho\}}{2} \Big), \tag{12}$$

其中， ρ 的完全正性得以保持，当且仅当 Γ 是半正定的 [6, 7]。式（12）可通过对矩阵1进行对角化，转化为式（ Γ。

通过将 Redfield 方程改写为与式（12）相同的形式，并检查相应的 Γ 是否为半正定，可以检验 Redfield 方程是否满足完全正性。为此，

我们重新标记指标，使得 $F_i = f_i \otimes I_M/\sqrt{d_M}$ 对于 $1 \le i \le d_L^2 - 1$成立。这样，我们便可以将式（8）中的系统算符展开为:

$$
\begin{aligned}
S_l &= \sum_{\alpha=1}^{d^2} a_{l\alpha} F_\alpha, \quad S_l^\dagger = \sum_{\alpha=1}^{d^2} a'_{l\alpha} F_\alpha, \\
S_l^{(1)} &= \sum_{\alpha=1}^{d^2} b_{l\alpha} F_\alpha, \quad S_l^{(1)\dagger} = \sum_{\alpha=1}^{d^2} b'_{l\alpha} F_\alpha, \\
S_l^{(2)} &= \sum_{\alpha=1}^{d^2} c_{l\alpha} F_\alpha, \quad S_l^{(2)\dagger} = \sum_{\alpha=1}^{d^2} c'_{l\alpha} F_\alpha,
\end{aligned} \tag{13}
$$

其中 $a_{l\alpha} = a'_{l\alpha} = 0,\ \forall\ \ d_L^2 \le \alpha \le d^2 - 1$因为 S_l和 $S_l^\dagger$ 在 $\mathcal{H}_M$上是单位算符。将式（13）代入式（8），得到

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} = i[\rho, H_S] - \epsilon^2 \sum_l \sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=1}^{d^2} \Big\{ & a^*_{l\alpha} b_{l\tilde{\alpha}} [F_\alpha^\dagger, F_{\tilde{\alpha}} \rho] \\
+ c'^*_{l\alpha} a'_{l\tilde{\alpha}} [\rho F_\alpha^\dagger, F_{\tilde{\alpha}}] + b^*_{l\alpha} a_{l\tilde{\alpha}} [\rho F_\alpha^\dagger, F_{\tilde{\alpha}}] + a'^*_{l\alpha} c'_{l\tilde{\alpha}} [F_\alpha^\dagger, F_{\tilde{\alpha}} \rho] \Big\}.
\end{aligned} \tag{14}
$$

经过一些直接的代数运算（见附录A），式（14）可简化为

$$
\frac{\partial \rho}{\partial t} = i[\rho, H_S + H_{LS}] + \sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=1}^{d^2-1} \Gamma_{\alpha\tilde{\alpha}} \left(F_{\tilde{\alpha}} \rho F_\alpha^\dagger - \frac{\{F_\alpha^\dagger F_{\tilde{\alpha}}, \rho\}}{2} \right), \tag{15}
$$

其中 $\Gamma_{\alpha\tilde{\alpha}}$是一个给定如下的 $(d^2-1)\times(d^2-1)$ 厄米矩阵

$$
\Gamma_{\alpha\tilde{\alpha}} = \epsilon^2 \sum_l (a^*_{l\alpha} b_{l\tilde{\alpha}} + c'^*_{l\alpha} a'_{l\tilde{\alpha}} + b^*_{l\alpha} a_{l\tilde{\alpha}} + a'^*_{l\alpha} c'_{l\tilde{\alpha}}), \tag{16}
$$

其中 x^* 在式（16）中表示 x的复共轭，而式（ H_{LS} ）中出现的表达式可见附录 A。由于式（16）具有式（12）的形式，保持 ρ 完全正性的条件等价于 Γ为半正定。

2. *The dissipator*

现在来看 $\Gamma_{\alpha\tilde{\alpha}}$ ，它来自式（16）。回顾第 IIA 1节，若 $\alpha \ge d_L^2$，则 $a_{l\alpha} = a'_{l\alpha} = 0$。因此，当 $\Gamma_{\alpha\tilde{\alpha}} = 0$在 α时，$\tilde{\alpha} \ge d_L^2$具有以下结构:

$$
\Gamma = \left[\begin{array}{c|c} \Gamma_{\alpha,\tilde{\alpha} < d_L^2} & \Gamma_{\alpha < d_L^2, \tilde{\alpha} \ge d_L^2} \\ \hline \Gamma_{\alpha \ge d_L^2, \tilde{\alpha} < d_L^2} & 0 \end{array} \right]. \tag{17}
$$

一般而言，非对角块 $\Gamma_{\alpha<d_L^2,\ \tilde{\alpha}\ge d_L^2}$ 和 $\Gamma_{\alpha\ge d_L^2,\ \tilde{\alpha}<d_L^2}$ 不会恒为零。当且仅当矩阵Γ 是半正定矩阵时，Redfield 方程才会保持完全正性。为继续讨论，我们需要以下关于半正定矩阵的引理。

引理 1 设 M 为任意一个满足 $M_{jj} = 0$的半正定矩阵。那么， $\forall i$ 必有$M_{ij} = M_{ji} = 0$。因此，如果一个半正定矩阵的第 j 个对角元素为零，那么其第 j 行和第 j 列的所有元素都必须为零。

证明：要使矩阵 M 为半正定矩阵，每个形如以下形式的 2×2 矩阵（M'）都必须是半正定的

$$
M' = \left[\begin{array}{c|c} M_{ii} & M_{ij} \\ \hline M_{ji} & M_{jj} \end{array} \right] \tag{18}
$$

否则，就存在一个向量 $|v'\rangle$，使得 $\langle v'|\, M' \,|v'\rangle < 0$。于是，存在一个向量 $|v\rangle$ ，它仅在第 i个和第j个分量上非零，并且满足 $\langle v|\, M \,|v\rangle = \langle v'|\, M' \,|v'\rangle < 0$。若$M_{jj} = 0$，则通过求解特征方程可得 M' 的特征值:
$\lambda^2 - M_{ii}\lambda - M_{ij}M_{ji} = 0$。由于$M$ 是厄米矩阵，要使两个特征值都非负，必须有 $M_{ij} = M_{ji} = 0$。

将引理1 应用于方程（17），可知 Γ为半正定矩阵的必要条件是非对角块$\Gamma_{\alpha<d_L^2,\ \tilde{\alpha}\ge d_L^2}$ 和$\Gamma_{\alpha\ge d_L^2,\ \tilde{\alpha}<d_L^2}$ 均为零。由于对于 Redfield 方程而言，这种情况通常并不成立，因此我们证明了：对于热浴仅与系统一部分耦合的任意一般设置，Redfield 方程都会违反完全正性。一个重要的例外是，Redfield 方程中的 Γ 非对角块恰好恒为零。在这种情况下，Redfield 耗散子由形如 $f_i \otimes I_M/\sqrt{d_M}$的算符构成，且仅作用于与热浴相连的系统部分。然而，预计只有在极为特殊的情况下才会出现这种情形。即使在这种情况下，Redfield 方程是否保持完全正性，仍取决于$\Gamma_{\alpha<d_L^2,\ \tilde{\alpha}<d_L^2}$。因此，我们严格证明了，对于热浴仅与系统一部分耦合的设置，除非其耗散子是“局域”的，且仅作用于与热浴相连的系统部分，否则 Redfield 方程将违反完全正性。我们还从方程（16）看出， Γ矩阵的正、负特征值可以与系统-热浴耦合处于同一阶，即 $O(\epsilon^2)$ 。

我们强调，尽管人们已知 RE 不保持完全正性，但以往大多数研究都是通过具体例子（例如， [26, 27, 32, 35]）来展示这一点。对于系统-热浴耦合由单个 $H_{SB} = \epsilon SB$ 形式的项构成这一情形，参考文献 [33]，给出了一个与模型无关的证明，表明 RE 通常会违反完全正性；不过，这并非系统-热浴耦合最一般的形式。我们的证明完全一般，并着重指出了系统-热浴耦合的局域性以及雷德菲尔德耗散子所起的作用，而参考文献 [33] 并未涉及这一点。

在附录 B中，我们给出了一个具体例子：一个双量子比特 XXZ 系统，其中第一个量子比特与热浴相连。我们确实发现，对于这一具体例子，矩阵 Γ 具有式（17）所预期的结构，且存在负特征值。

一个自然的问题是：如何通过对 Redfield 方程作适当近似来恢复完全正性?

Redfield 方程。要恢复完全正性，必须~将 $\Gamma_{\alpha\tilde{\alpha}}$ 改为某个 $\Gamma_{\alpha\tilde{\alpha}}$ 半正定的量。根据上述讨论，对于任意 $\tilde{\alpha} \geq d_L^2$，这就要求要么（i）使 $\widetilde{\Gamma}_{\alpha\alpha} > 0$，$\forall \alpha > d_L^2$ 要么（ii）使 $\widetilde{\Gamma}_{\alpha\tilde{\alpha}} = 0 \; \forall \alpha < d_L^2$。我们将在下一节（第 III 节）看到，任何满足条件（i）的方程都会违反局域守恒定律。

III. 遵循局域守恒定律的 LINDBLAD 描述

A. 局域守恒定律

下面我们来明确说明，何谓保持局域守恒定律。对于我们的设置，由于热浴只作用于 $\mathcal{H}_L$ 系统的一部分，因此作用于$\mathcal{H}_M$ 的任意算符都与系统-热浴耦合哈密顿量 H_{SB} 对易（见式（10）、图1）。因此，写出关于完整哈密顿量 H [式（2）], 的海森堡运动方程，并利用式（10），可知 O_M 上任意可观测量 $\mathcal{H}_M$ 的期望值满足如下动力学方程:

$$\frac{d}{dt}\langle I_L \otimes O_M \rangle = -i \langle [I_L \otimes O_M, H_S] \rangle \tag{19}$$

其中 $\langle X \rangle = \mathrm{Tr}[X\rho]$。消去热浴自由度后得到的任何有效量子主方程都应满足这一性质。我们称满足这一性质的量子主方程保持局域守恒定律。若考察 $\mathcal{H}_M$ 中的一个算符，那么即使存在与 $\mathcal{H}_L$的耦合，该算符仍会保持守恒；如果式（ H_{LM}11）中的为零，便可清楚地看出这一名称的由来。这样的算符之一是哈密顿量H_M。其期望值H_M 的动力学方程给出能量连续性方程:

$$\frac{d}{dt}\langle H_M \rangle = J_{L\to M}, \quad J_{L\to M} = -i \langle [H_M, H_{LM}] \rangle . \tag{20}$$

这里，$J_{L\to M}$ 可解释为从区域 L 流向区域 M 的能量流（见图1）。在稳态下，任何系统算符的变化率都为零。由上式可得，$J_{L\to M} = 0$ 在稳态下成立。因此，稳态时系统内部的能量流为零。这是能量局域守恒的表述，也是系统耦合到单热浴时的一项基本物理要求；这一要求可由更一般的要求式（19）推出。

重要的是，可以证明 RE，即式（5），满足式（19）[23]，从而保持局域守恒定律。我们可以将任意量子主方程按系统-热浴耦合的阶数展开至首阶，写为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{L}_0(\rho) + \epsilon^2 \mathcal{L}_2(\rho), \tag{21}$$

其中 $\mathcal{L}_0(\rho) = i[\rho, H_S]$ 和 $\mathcal{L}_2(\rho)$ 同时包含耗散子和兰姆位移哈密顿量。利用公式（19）和公式（21）计算公式（19）的左端，并与其右端进行比较，可得 [23],

$$\mathrm{Tr}[(I_M \otimes O_M)\mathcal{L}_2(\rho)] = 0. \tag{22}$$

这是满足局域守恒定律的必要条件。如果我们现在进一步将量子主方程限制为 Lindblad形式，即公式（1）的形式，从而满足完全正性，则可得到以下定理。

定理2 任何 *Lindblad*形式的量子主方程（式 (1)）（因此满足完全正性），若同时满足局域守恒定律，则其林德布拉德算符和兰姆位移哈密顿量必须仅作用于系统中与热浴相连的部分。也就是说，$L_\lambda = L_\lambda^L \otimes I_M$，$H_{LS} = H_{LS}^L \otimes I_M$ L_λ^L H_{LS}^L，其中，作用于希尔伯特空间 $\mathcal{H}_L$ 的算符通过系统-热浴耦合哈密顿量 H_{SB}与热浴耦合，而 I_M 则是在系统希尔伯特空间其余部分上的单位算符 $\mathcal{H}_M$。

在下一个小节中，我们给出该定理的证明。

B. 定理2的证明

我们首先在第 IIA 1 节的基下写出最一般的 Lindblad 方程，

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = i[\rho, H_S + \widetilde{H}_{LS}] + \sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=1}^{d^2-1} \widetilde{\Gamma}_{\alpha\tilde{\alpha}} \left(F_{\tilde{\alpha}} \rho F_\alpha^\dagger - \frac{\{F_\alpha^\dagger F_{\tilde{\alpha}}, \rho\}}{2} \right) \tag{23}$$

~ ~其中 H_{LS} 是某个兰姆位移哈密顿量，而 Γ 是一个半正定矩阵。如前所述，通过变换到矩阵 ~为对角形式的基下，该形式可以化为式（1）的形式。因此，只需使用这种形式即可。由于 $F_i = f_i \otimes I_M$ 对于 $1 \leq i < d_L^2$，林德布拉德算符仅作用于~$\mathcal{H}_L$ 的条件便转化为矩阵 Γ 具有如下形式

$$\widetilde{\Gamma} = \left[\begin{array}{c|c} \widetilde{\Gamma}_{\alpha,\tilde{\alpha}<d_L^2} & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array} \right]. \tag{24}$$

下面我们证明，为了保持局域~守恒律，矩阵 Γ 必须具有这种形式。

1. The restriction on $\widetilde{\Gamma}$

写出任意可观测量 $I_L \otimes O_M$关于方程（23）的演化，我们有

$$\begin{aligned}\frac{d\langle I_L\otimes O_M\rangle}{dt} &= -i\langle[I_L\otimes O_M, H_S]\rangle - i\langle[I_L\otimes O_M, \widetilde{H}_{LS}]\rangle \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{d_L^2-1}\sum_{\tilde{\alpha}=d_L^2}^{d^2-1}\frac{\widetilde{\Gamma}_{\alpha\tilde{\alpha}}}{2}\langle[I_L\otimes O_M, F_\alpha^\dagger F_{\tilde{\alpha}}]\rangle \\ &+ \sum_{\alpha=d_L^2}^{d^2-1}\sum_{\tilde{\alpha}=1}^{d_L^2-1}\frac{\widetilde{\Gamma}_{\alpha\tilde{\alpha}}}{2}\langle[F_\alpha^\dagger F_{\tilde{\alpha}}, I_L\otimes O_M]\rangle \\ &+ \sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=d_L^2}^{d^2-1}\Big(\widetilde{\Gamma}_{\alpha\tilde{\alpha}}\Big(\langle F_\alpha^\dagger(I_L\otimes O_M)F_{\tilde{\alpha}}\rangle - \frac{1}{2}\langle(I_L\otimes O_M)F_\alpha^\dagger F_{\tilde{\alpha}}\rangle \\ &- \frac{1}{2}\langle F_\alpha^\dagger F_{\tilde{\alpha}}(I_L\otimes O_M)\rangle\Big)\end{aligned} \tag{25}$$

其中 $\langle X\rangle$ 表示 X 的期望值，由 $\mathrm{Tr}[X\rho]$给出；我们利用了当 $i < d_L^2$ 时， $[F_i, I_L\otimes O_M] = 0$ 这一事实。我们可以将上述方程中的所有对易子合并为一个与有效的、类似兰姆位移的哈密顿量的对易子，记为 $\widetilde{H}_{LS}^{(2)}$。由此得到

$$\begin{aligned}\frac{d\langle I_L\otimes O_M\rangle}{dt} &= -i\langle[I_L\otimes O_M, H_S + \widetilde{H}_{LS}^{(2)}]\rangle \\ &+ \sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=d_L^2}^{d^2-1}\widetilde{\Gamma}_{\alpha\tilde{\alpha}}\Big(\langle F_\alpha^\dagger(I_L\otimes O_M)F_{\tilde{\alpha}}\rangle - \frac{1}{2}\langle(I_L\otimes O_M)F_\alpha^\dagger F_{\tilde{\alpha}}\rangle \\ &- \frac{1}{2}\langle F_\alpha^\dagger F_{\tilde{\alpha}}(I_L\otimes O_M)\rangle\Big)\end{aligned} \tag{26}$$

其中 $\widetilde{H}_{LS}^{(2)}$ 是某个厄米算符。与方程（19）比较，并注意到 $\mathrm{Tr}[M\rho] = 0 \quad \forall\rho$ 意味着 $M = 0$，我们得到满足方程（19）的条件：

$$\begin{aligned}&-i[I_L\otimes O_M, \widetilde{H}_{LS}^{(2)}] + \sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=d_L^2}^{d^2-1}\widetilde{\Gamma}_{\alpha\tilde{\alpha}}\Big(F_\alpha^\dagger(I_L\otimes O_M)F_{\tilde{\alpha}} \\ &- \frac{1}{2}(I_L\otimes O_M)F_\alpha^\dagger F_{\tilde{\alpha}} - \frac{1}{2}F_\alpha^\dagger F_{\tilde{\alpha}}(I_L\otimes O_M)\Big) = 0 \\ &\qquad\qquad \forall O_M.\end{aligned} \tag{27}$$

为方便起见，我们现在重新标记指标 α、$\tilde{\alpha}$。回顾第 II A1节， α、$\tilde{\alpha}$ 出现在上述表达式中的这些项，也可以等价地写成 $\alpha \to (\alpha_L, \alpha_M)$ $\tilde{\alpha} \to (\tilde{\alpha}_L, \tilde{\alpha}_M)$，反之亦然，其中 $F_\alpha = f_{\alpha_L}\otimes g_{\alpha_M}$。因此， $\sum_{\alpha=1}^{d^2-1}$ 等价于 $\sum_{\alpha_M=1}^{d_M^2-1}\sum_{\alpha_L=1}^{d_L^2}$。我们还可以将 $\widetilde{H}_{LS}^{(2)}$ 展开为

$$\widetilde{H}_{LS}^{(2)} = \sum_{\alpha=1}^{d^2}\nu_\alpha F_\alpha = \sum_{\alpha_L=1}^{d_L^2}\sum_{\alpha_M=1}^{d_M^2}\nu_{\alpha_L,\alpha_M}(f_{\alpha_L}\otimes g_{\alpha_M}). \tag{28}$$

这个基有助于对系统的 L 部分进行偏迹。执行这一步偏迹并利用的正交归一性 f_i 算符，我们可以将式（27）改写为

$$\begin{aligned}&-i\sum_{\alpha_M=1}^{d_M^2}\nu_{d_L^2,\alpha_M}[O_M, g_{\alpha_M}] + \sum_{\alpha_M,\tilde{\alpha}_M=1}^{d_M^2-1}\widetilde{\Lambda}_{\alpha_M,\tilde{\alpha}_M} \\ &\Big(g_{\alpha_M}^\dagger O_M g_{\tilde{\alpha}_M} - \frac{1}{2}O_M g_{\alpha_M}^\dagger g_{\tilde{\alpha}_M} - \frac{1}{2}g_{\alpha_M}^\dagger g_{\tilde{\alpha}_M}O_M\Big) = 0, \\ &\qquad\qquad \forall O_M.\end{aligned} \tag{29}$$

其中

$$\widetilde{\Lambda}_{\alpha_M,\tilde{\alpha}_M} = \sum_{\alpha_L,\tilde{\alpha}_L=1}^{d_L^2}\delta_{\alpha_L,\tilde{\alpha}_L}\widetilde{\Gamma}_{(\alpha_L,\alpha_M),(\tilde{\alpha}_L,\tilde{\alpha}_M)} \tag{30}$$

我们在附录 C中证明，式（29）意味着

$$\sum_{\alpha_M=1}^{d_M^2-1}\widetilde{\Lambda}_{\alpha_M,\alpha_M} = \sum_{\alpha_M=1}^{d_M^2-1}\sum_{\alpha_L=1}^{d_L^2}\widetilde{\Gamma}_{(\alpha_L,\alpha_M),(\alpha_L,\alpha_M)} = 0 \tag{31}$$

由于我们要求 $\widetilde{\Gamma}$ 为半正定，因此其对角线上不能有负值。因此，式（31）意味着 $\widetilde{\Gamma}_{(\alpha_L,\alpha_M),(\alpha_L,\alpha_M)} = 0$ 对 $1 \le \alpha_L \le d_L^2$ 和 $1 \le \alpha_M \le d_M^2 - 1$ 成立。等价地，$\widetilde{\Gamma}_{\alpha\alpha} = 0$ 对 $\alpha \ge d_L^2$成立。将引理 1 应用于此情形，我们发现 $\Gamma_{\alpha,\tilde{\alpha}}$ 只有在 $\alpha, \tilde{\alpha} < d_L^2$同时成立时才可能非零，因此 $\widetilde{\Gamma}$ 是式（24）所示形式的矩阵。这就完成了证明的第一部分。

2. The restriction on $\widetilde{H}_{LS}$

根据式（24）中的这种结构，我们现在考察兰姆位移 Hamiltonian H_{LS}的限制。由于 $\widetilde{\Gamma}$ 必须满足式（24），我们得到$\widetilde{H}_{LS} = \widetilde{H}_{LS}^{(2)} = \sum_{\alpha_L,\alpha_M}\nu_{\alpha_L,\alpha_M}(f_{\alpha_L}\otimes g_{\alpha_M})$ 在式（27）中。于是，由式（27）得到满足局域守恒定律的条件为：

$$-i\sum_{\alpha_L=1}^{d_L^2}\sum_{\alpha_M=1}^{d_M^2}\nu_{\alpha_L,\alpha_M}[I_L\otimes O_M, (f_{\alpha_L}\otimes g_{\alpha_M})] = 0 \quad \forall O_M. \tag{32}$$

这进一步意味着

$$-i\sum_{\alpha_L=1}^{d_L^2}\sum_{\alpha_M=1}^{d_M^2}\nu_{\alpha_L,\alpha_M}f_{\alpha_L}\otimes[O_M, g_{\alpha_M}] = 0 \quad \forall O_M. \tag{33}$$

两边乘以 $f_{\alpha_L}^\dagger\otimes I_M$，并对系统的$L$ 部分进行迹运算，我们得到

$$-i\sum_{\alpha_M=1}^{d_M^2}\nu_{\alpha_L,\alpha_M}[O_M, g_{\alpha_M}] = 0 \quad \forall\alpha_L, O_M. \tag{34}$$

这只有在.....时才会发生

$$\sum_{\alpha_M=1}^{d_M^2} \nu_{\alpha_L,\alpha_M} g_{\alpha_M} \propto I_M \quad \forall \alpha_L \tag{35}$$

~将式（35）代入式（28），并回忆 $H_{LS} = \widetilde{H}_{LS}^{(2)}$，我们得到 $\widetilde{H}_{LS} = \widetilde{H}_{LS}^{(L)} \otimes I_M$。至此，证明的第二部分完成。

C. 定理 2 的评论

定理2 指出，要使量子主方程保持完全正性并遵守局域守恒定律，兰姆位移哈密顿量和耗散子都必须仅作用于与热浴相连的那部分系统。这种林德布拉德方程通常称为“局域林德布拉德方程”。定理 2 因此指出，只有局域林德布拉德方程才与局域守恒定律相容。RE 无需具有局域耗散子便能保持局域守恒定律，但代价是失去完全正性。任何形式的全局林德布拉德方程，例如本征基林德布拉德方程 [6, 8] 和普适林德布拉德方程 [34], 都会违反局域守恒定律，同时保持完全正性。全局形式的林德布拉德方程常在各种近似下推导出来，其中一个主要原因是可以证明它们能够展现热化。然而，通常很难对局域林德布拉德方程中的热化作出一般性论断。在下一节中，我们将讨论一种数值方法，可用于研究在给定设置下，是否存在一种与定理2 相容且也能展现热化的量子主方程。

IV. 局域耗散子实现热化的可能性

A. 满足热化的条件

我们首先明确热化的含义。回到式（21）中的量子主方程形式，若满足以下条件，则称该设置能够实现热化：

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left(\lim_{t\to\infty} e^{t(\mathcal{L}_0+\epsilon^2\mathcal{L}_2)}\rho(0)\right) = \rho_{th}, \quad \rho_{th} = \frac{e^{-\beta H_S}}{\mathrm{Tr}[e^{-\beta H_S}]}, \tag{36}$$

无论系统的初始态如何 $\rho(0)$。从物理上说，这意味着，如果系统与热浴弱耦合足够长时间，然后缓慢关闭系统与热浴之间的耦合，那么无论系统的初始态如何，系统的状态最终都会是处于热浴温度下的吉布斯态。如果哈密顿量没有显式的时间依赖性，如式（2）所示，则可以从以下内容出发证明这一结论：式（3）中完整装置的初始态，并假设稳态是唯一的 [23]。给定式（21）形式的量子主方程，我们在文献 [23], 中证明了，要保证热化，必须满足以下条件：

$$\langle E_i|\,\mathcal{L}_2(\rho_{th})\,|E_i\rangle = 0 \quad \forall\, i. \tag{37}$$

其中，$|E_i\rangle$是系统哈密顿量H_S 对应本征值 E_i的本征向量。该条件的推导也见附录D。给定系统哈密顿量 H_S、热浴的逆温度 β，以及系统希尔伯特空间的一个划分：一部分$\mathcal{H}_L$ 与热浴相连，其余部分为希尔伯特空间 H_M（见图1），我们希望找到一个满足定理2中的限制且满足式（37）的量子主方程。稍后我们将通过实例看到，这样的量子主方程未必存在。在下一小节中，我们将给出一种数值方法，以确切判断在给定设置下此类量子主方程是否存在。

B. 热化优化问题

对于图 1所示的设置，满足完全正性和局域守恒定律要求的、最一般的量子主方程形式为定理2 中的限制

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t} &= i[\rho, H_S + \epsilon^2 H_{LS}^{(L)}\otimes I_M] + \epsilon^2 \sum_{\alpha_L,\tilde{\alpha}_L=1}^{d_L^2-1} \Gamma^{(L)}_{\alpha_L,\tilde{\alpha}_L} \\ &\Bigg((f_{\tilde{\alpha}_L}\otimes I_M)\rho(f_{\alpha_L}\otimes I_M)^\dagger \\ &- \frac{\{(f_{\alpha_L}\otimes I_M)^\dagger(f_{\tilde{\alpha}_L}\otimes I_M),\rho\}}{2}\Bigg).\end{aligned} \tag{38}$$

这里 $H_{LS}^{(L)}$ 是作用于系统$\mathcal{H}_L$ 部分的兰姆位移哈密顿量，$\Gamma^{(L)}$ 是一个 $(d_L^2-1)\otimes(d_L^2-1)$ 矩阵，且必须为半正定矩阵；d_L 是与热浴直接耦合的希尔伯特空间 $\mathcal{H}_L$ 的维数。我们显式地在 ϵ^2 和 $\Gamma^{(L)}$ 前面$H_{LS}^{(L)}$ 加入因子。假设系统哈密顿量 H_S 和希尔伯特空间 $\mathcal{H}_L$ 已知。于是，任务是求出 $H_{LS}^{(L)}$ 和 $\Gamma^{(L)}$，使得在给定逆温度 β下，式（37）以给定精度成立。为此，我们引入如下量：

$$\tau = \sum_i \left|\langle E_i|\,\mathcal{L}_2(\rho_{th})\,|E_i\rangle\right|, \tag{39}$$

其中 $\mathcal{L}_2$ 由方程（38）中所有乘以 ϵ^2的项组成，即除去与系统哈密顿量的对易子之外的所有项。于是，我们可以将该任务表述为如下优化问题：

$$\begin{aligned}\text{minimize}: &\quad \tau \text{ by varying } H_{LS}^{(L)},\ \Gamma^{(L)}, \\ \text{subject to}: &\quad H_{LS}^{(L)} \text{ is hermitian}, \\ &\quad \mathrm{Tr}(\Gamma^{(L)}) = 1,\ \ \Gamma^{(L)} \geq 0,\end{aligned} \tag{40}$$

其中我们使用 $\Gamma^{(L)} \geq 0$ 表示 $\Gamma^{(L)}$ 是半正定的。施加条件 $\mathrm{Tr}(\Gamma^{(L)}) = 1$ 是为了避免平凡解 $H_{LS}^{(L)}$，$\Gamma^{(L)} = 0$ 该解会平凡地给出全局最小值 $\tau = 0$。由于我们希望 $\Gamma^{(L)}$是一个非零半正定矩阵，因此它必须具有正的迹。我们将该迹固定为任意选定能量单位下的 1。这不会造成一般性的损失，因为系统-热浴耦合的强度由方程（38）中的 ϵ^2 显式控制。我们将方程（40）中的优化问题称为“热化优化问题”（TOP）。令 τ_{opt} 为求解 TOP 得到的最优值。给定容差 δ,

$$\begin{array}{ll} \text{if } \tau_{opt} < \delta, & \text{the desired QME is possible,} \\ \text{else,} & \text{the desired QME is impossible,} \end{array} \tag{41}$$

精确到 δ。

最有趣的是，我们发现，式（40）中的 TOP 可以写成一个半定规划（SDP）。附录 E1讨论了半定规划的背景和理论框架。附录 E2证明了 TOP 是一个半定规划。特别地，式（$H_{LS}^{(L)}$ 和 $\Gamma^{(L)}$（40）中的任意取值，都可以用来得到 τ_{opt}的上界。随后，可以利用半定规划的理论框架，为式（40）中的优化问题构造一个“对偶”问题，再通过这个对偶问题得到 τ_{opt}的下界。如果上下界相等，就能保证已找到 τ 的全局最优值。我们上述的方法透明且简单易用，因为式（40）中的优化问题可以直接输入 CVX MATLAB 软件包 [36]等规范凸优化标准软件包中。特别是，CVX 会自动构造对偶问题，输出 τ_{opt}，并给出一组 $H_{LS}^{(L)}$ 和 $\Gamma^{(L)}$，它们会产生输出值 τ_{opt}。因此，如果 $\tau_{opt} < \delta$，这不仅表明所需类型的量子主方程是可行的，还会给出一个这样的量子主方程的候选实例。如果 $\tau_{opt} \geq \delta$，则所需类型的量子主方程是不可能的。

这里需要指出，在微观推导中，给定热浴的温度后，$H_{LS}^{(L)}$ 和$\Gamma^{(L)}$ 仅取决于热浴谱函数以及系统-热浴耦合哈密顿量。因此，可以将 TOP 视为遍历所有可能的热浴谱函数和系统-热浴耦合哈密顿量，以寻找 τ_{opt}。因此，若 $\tau_{opt} \geq \delta$，我们便可以断定：对于所选的系统参数和温度，无论选择何种热浴谱函数和系统-热浴耦合哈密顿量，都无法推导出一个能同时满足完全正性、局域守恒定律并在所选精度范围内表现出热化的马尔可夫量子主方程。下一小节中，我们将考察开放 XXZ量子比特链中的 TOP。

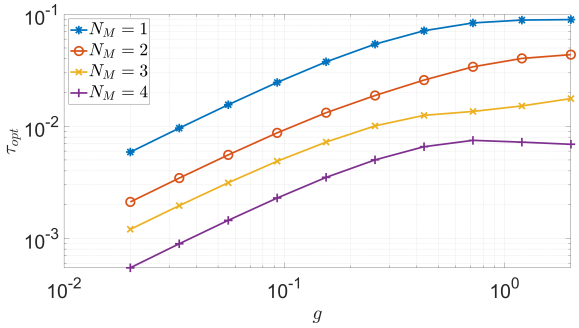

图2. 对于所有 ℓ，在 $N_L = 1$条件下，τ_{opt} 与 g的比较，其中 $\omega_0^{(\ell)} = 1$、$\Delta_\ell = 1$、$\beta = 1$ 和 $g_\ell = g$。所选容差为 $\delta = 10^{-6}$。我们发现 $\tau_{opt} \gg \delta$，这有力地表明，对于此类设置，不存在任何量子主方程能够同时保持完全正性、遵守局域守恒定律并实现达到容差所设定精度的热化。

C. 开放 XXZ 量子比特链示例

我们研究在一个开放的 XXZ量子比特链系统中实现 Lindblad 描述的可能性，该描述需满足局域守恒定律并表现出热化；其中部分量子比特与热浴相连。该设置下的系统哈密顿量为

$$H_S = \sum_{\ell=1}^{N} \frac{\omega_0^{(\ell)}}{2} \sigma_z^{(\ell)} - \sum_{\ell=1}^{N-1} g_\ell \big(\sigma_x^{(\ell)} \sigma_x^{(\ell+1)} + \sigma_y^{(\ell)} \sigma_y^{(\ell+1)} + \Delta_\ell \sigma_z^{(\ell)} \sigma_z^{(\ell+1)} \big), \tag{42}$$

其中，$\sigma_x^{(\ell)}$、y、z 表示作用于第ℓ^{th} 个量子比特的泡利矩阵，而 $\omega_0^{(\ell)}$、g_ℓ和 $g_\ell \Delta_\ell$ 分别表示磁场、量子比特间的总耦合强度和各向异性。前 N_L 个量子比特连接到热浴，而其余 $N_M = N - N_L$个量子比特则不与任何热浴连接。我们采用第四节 B 小节的形式体系，研究在不同 N_L 和 N_M取值下这一设置中的热化。为此，我们首先需要构造前 N_L 个量子比特希尔伯特空间中算符的基，从而可以将所需量子主方程的一般形式写成公式（38）的形式。对于第 ℓ个量子比特，我们选择基 $\{-\sigma_z^{(\ell)}/\sqrt{2}, \sigma_+^{(\ell)}, \sigma_-^{(\ell)}, I_2^{(\ell)}/\sqrt{2}\}$，其中 $\sigma_+^{(\ell)} = (\sigma_x^{(\ell)} + i\sigma_y^{(\ell)})/2$、$\sigma_-^{(\ell)} = (\sigma_x^{(\ell)} - i\sigma_y^{(\ell)})/2$，而 $I_2^{(\ell)}$ 是该量子比特希尔伯特空间的恒等算符。前 N_L 个量子比特的基由各量子比特的基直积得到。我们在此基下构造 TOP [公式（40）]，并将其直接输入 CVX MATLAB 软件包以获得 τ_{opt}。我们将容差 $\delta = 10^{-6}$ [设为一个人为选定的值（参见公式（41）]）。在典型的弱系统-热浴耦合量子主方程计算中，忽略高阶项所导致的误差通常会大于这样低的容差值。

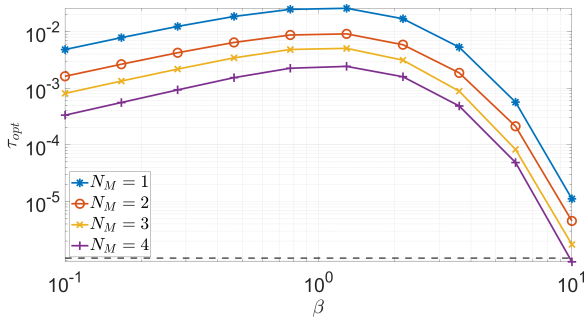

图 3. τ_{opt} 与 β的关系，针对 $N_L = 1$，其中 $\omega_0^{(\ell)} = 1$、$\Delta_\ell = 1$、$g_\ell = 0.1$ ℓ $\delta = 10^{-6}$ 对所有均成立。所选容差为，并以水平虚线表示。我们发现 $\tau_{opt} \gg \delta$，这表明，对于此类设置，不可能构造一个量子主方程，使其同时保持完全正性、遵循局域守恒定律，并在容差所设定的精度范围内实现热化。

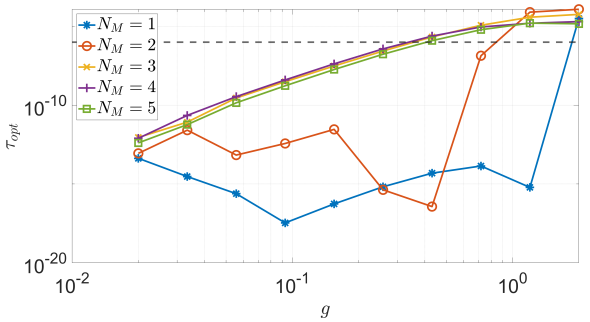

图 4. τ_{opt} 与 g的关系，针对 $N_L = 2$，其中 $\omega_0^{(\ell)} = 1$、$\Delta_\ell = 1$、$g_\ell = g$ 对所有 ℓ 和 $\beta = 1$均成立。所选容差为 $\delta = 10^{-6}$，并以水平虚线表示。我们发现，对于较小的 g，$\tau_{opt} \ll \delta$，这表明，对于此类设置，可以构造一个量子主方程，使其同时保持完全正性、遵循局域守恒定律，并在容差所设定的精度范围内实现热化。

1. *Single qubit attached to bath*

首先考虑链的第一个量子比特与热浴耦合的情形，即 $N_L = 1$。在图 2 中，我们绘制了 τ_{opt} 随 g 变化的关系，其中 $N_M = 1$取 2、3，且对所有 ℓ 和 $\beta = 1$固定 $\omega_0^{(\ell)} = 1$、$\Delta_\ell = 1$。我们发现，当 $N_L = 1$时，$\tau_{opt} \gg \delta$，且$N_M = 1$取 2、3。因此，在所选参数范围内，这类设置不存在能够同时保持完全正性、遵守局域守恒定律并满足热化要求的马尔可夫量子主方程。这个具体例子也直接排除了存在某种一般形式的马尔可夫量子主方程、能够保证满足所有基本要求的可能性。从图 2 可以看出，τ_{opt} 随 g增大。这与先前的研究结果一致：系统量子比特之间的耦合较弱时，这类局域林德布拉德方程能够很好地描述系统。此外，我们还发现，对于给定的 g，τ_{opt} 会随 N_M 增大而减小。有趣的是，这似乎表明，对于较长的链，仅在一个量子比特上作用耗散子的局域林德布拉德方程，或许能够以相当高的精度描述热态。不过，要对此作出确定结论，还需要开展更为详细的研究。

直观而言，记忆效应以及由此决定的开放系统动力学的马尔可夫性取决于温度。因此，我们可能会预期，在不同温度下，τ_{opt} 会小于 δ。在图（3）中，我们绘制了 τ_{opt} 与 β 的关系，其中$N_L = 1$，并固定 $\omega_0^{(\ell)} = 1$、$\Delta_\ell = 1$、$g_\ell = 0.1$，适用于所有 ℓ。我们发现，$\tau_{opt} \gg \delta$在所选 β 的几乎整个取值范围内都成立，这表明对于这些参数，不存在任何马尔可夫量子主方程能够同时保持完全正性、遵守局域守恒律并满足热化条件。不过，我们也观察到一些有趣的特征。首先，与之前一样，我们看到 τ_{opt} 随 N_M 增大而减小。其次，我们看到 τ_{opt} 随 β呈非单调变化。在极低温下，τ_{opt} 减小，并趋于低于 δ。在图（3）中，对于 $N_M = 4$ 和 $\beta = 10$，$\tau_{opt} < \delta$。在高温下，τ_{opt} 也会减小。这表明，在极低温和极高温下，有可能得到能够实现热化的局域林德布拉德方程。可以通过独立验证确认这一点。在这些极端温度下，对于某些热浴和系统-热浴耦合的选择，可以从微观理论推导出局域林德布拉德方程 [37, 38]。这解释了 τ_{opt} 对β的非单调依赖。由于极高温和极低温下都可能适用局域林德布拉德描述，因此很容易理解，当 β 与系统时间尺度处于同一量级时，偏离这种行为的程度最大。事实上，在图（β，即 $\beta \sim \omega_0^{(\ell)} = 1$时，$\tau_{opt}$ 的值最高，见图（3）。

我们在此想指出，$\tau_{opt} \geq \delta$ 并不意味着在这些参数下，与热浴耦合的系统无法热化。除非是在极其特殊的情况下，几乎总能找到一个热浴谱函数和系统-热浴耦合，从而确保热化。因此，$\tau_{opt} \geq \delta$ 的意思是，对于这些参数，趋近热态的动力学无法由一个保持局域守恒定律的完全正马尔可夫量子主方程所支配。因此，该动力学必然具有某种非马尔可夫特征。事实上，正如我们从上面的例子中看到的，τ_{opt} 给出了在所选参数下开放系统动力学能够接近马尔可夫性的程度估计。

接下来，我们讨论前两个量子比特连接到热浴的情形，并重点说明在参数选择相近时观察到的显著差异。

2. *Two qubits attached to bath*

在图（4）中，我们绘制了 τ_{opt} 与 $g_\ell = g$ 的关系，其中 $N_L = 2$，即连接到热浴的前两个量子比特，而 $N_M = 1$、2、3、4，

0.00033 0		0	-0.00123 0		0	0.00033 0		0	0.00019 0	0		0.00001 0		0
0	0.00196 0		0	-0.00179 0	0		-0.03638 0		0	0	0	0	-0.00002 0	
0	0	0.00081 0		0	0	0	0	-0.00081 0		0	0.01307 0		0	-0.00021
-0.00123 0		0	0.02611 0		0	-0.00282 0		0	0.00157 0	0		-0.00143 0		0
0	-0.00179 0		0	0.00172 0	0		0.03491 0		0	0	0	0	0.00011 0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.00033 0		0	-0.00282 0		0	0.00045 0		0	0.00002 0	0		0.00011 0		0
0	-0.03638 0		0	0.03491 0	0		0.70685 0		0	0	0	0	0.00209 0	
0	0	-0.00081 0		0	0	0	0	0.00082 0		0	-0.01311 0		0	0.00021
0.00019 0		0	0.00157 0		0	0.00002 0		0	0.00035 0	0		-0.00014 0		0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0.01307 0		0	0	0	0	-0.01311 0		0	0.26032 0		0	-0.00208
0.00001 0		0	-0.00143 0		0	0.00011 0		0	-0.00014 0	0		0.00009 0		0
0	-0.00002 0		0	0.00011 0	0		0.00209 0		0	0	0	0	0.0001	0
0	0	-0.00021 0		0	0	0	0	0.00021 0		0	-0.00208 0		0	0.00009

表 I. $\Gamma^{(L)}$ 从 CVX 获得，用于 $N_L = 2$，$N_M = 4$，$\omega_0^{(\ell)} = 1$，$g_\ell = 0.1$，$\Delta_\ell = 1$，$\beta = 1$，即用于计算图 6的数值。为便于呈现，每个数值均四舍五入至小数点后 5 位。对应的$H_{LS}^{(L)}$ 设为零。对于给定的参数选择，该 $\Gamma^{(L)}$ 在精度达到$\delta = 10^{-6}$ 的情况下满足完全正性、局域守恒定律和热化。

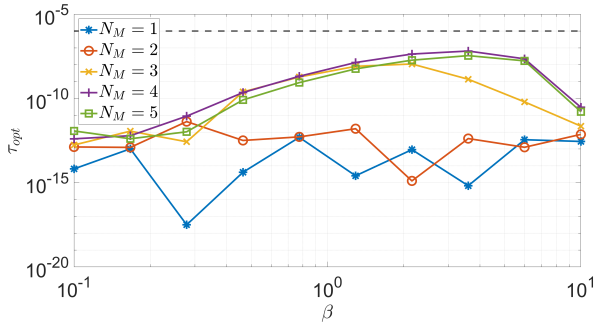

图 5. 对于 $N_L = 2$，在所有 ℓ 的情况下，τ_{opt} 随 β 的变化，其中 $\omega_0^{(\ell)} = 1$、$\Delta_\ell = 1$、$g_\ell = 0.1$。所选容差为 $\delta = 10^{-6}$，并以水平虚线表示。我们发现，对于较小的 g，$\tau_{opt} \ll \delta$，这表明在此类设置下，存在一种量子主方程能够同时保持完全正性、遵守局域守恒定律，并在容差所设定的精度范围内实现热化。图中小于 10^{-12} 的数值低于 CVX MATLAB 软件包的数值精度。

取 $\omega_0^{(\ell)} = 1$、$\Delta_\ell = 1$ 和 $\beta = 1$为固定值。这些参数与图2中的相同，且 g 在相同范围内变化。非常令人惊讶的是，与图 2形成鲜明对比的是，我们发现，在这种情况下，$\tau_{opt} \ll \delta$ 在 $g < 1$的相当大范围内均成立。接着，我们考察 τ_{opt} 随 β的变化情况，并固定 $\omega_0^{(\ell)} = 1$、$\Delta_\ell = 1$、$g_\ell = g = 0.1$。结果如图 5所示。对于 $N_M > N_L$，我们再次观察到非单调行为。然而，与图 3形成鲜明对比的是，我们发现，在所选取的整个 $\beta\tau_{opt} \ll \delta$范围内均如此。因此，对于 $N_L = 2$，在相当大的参数范围内，存在一种量子主方程，能够同时保持完全正性、遵守局域守恒定律，并在给定精度下满足热化条件。这是一个极不平凡的结果。

此前，局域双量子比特 Lindblad 耗散子已被用于研究 XXZ 型量子比特链中的能量输运（例如，参考文献 [39, 40]）。然而，这些局域双量子比特 Lindblad 算符的构造目标，仅是在不与链其余部分耦合的情况下使这两个量子比特达到热平衡。这种 Lindblad 描述无法保证整条链达到热浴 [41] 的给定逆温度 β。我们的结果表明，可以构造一种双量子比特局域 Lindblad 描述，使整条链以较高精度达到热浴的给定温度。

如前所述，CVX 还会输出一组可能的 $\Gamma^{(L)}$ 和 $H_{LS}^{(L)}$ 矩阵，对应于 τ_{opt}。因此，当 $\tau_{opt} < \delta$时，我们便得到所需类型的量子主方程的一个可能候选方案。对于我们选择的参数，CVX 总是输出 $H_{LS}^{(L)} = 0$，以及一个非平凡的 $\Gamma^{(L)}$ 值，否则很难猜到这一结果。在表I中，我们展示了 $\Gamma^{(L)}$ 在$N_L = 2$，$N_M = 4$，$\omega_0^{(\ell)} = 1$，$g_\ell = 0.1$，$\Delta_\ell = 1$，$\beta = 1$条件下得到的结果。$\Gamma^{(L)}$ 矩阵对应于如下选取的算符基：$\{F_k\}$

$$F_k = f_{\lceil k/4 \rceil} \otimes f_{k(\mathrm{mod}\ 4)} \otimes I_M \tag{43}$$

其中，$\{f_i\} = \{-\sigma_z/\sqrt{2}, \sigma_-, \sigma_+, I_2/\sqrt{2}\}$，$\lceil k/4 \rceil$ 表示大于或等于 $k/4$的最小整数，而k(mod 4)表示 k 模 4 的值，k 的取值范围为 1 到 15。我们还注意到，CVX 计算得到的 $\Gamma^{(L)}$和 $H_{LS}^{(L)}$ 的精确值可能取决于编程环境的具体配置（例如 CVX 使用的内部求解器）。

对于系统的每个参数，都存在一个不同的 τ_{opt}，其对应的 $\Gamma^{(L)}$ 和 $H_{LS}^{(L)}$ 值由 CVX 给出。如果我们想探索系统的较大参数空间，似乎每个参数点都需要不同的 $\Gamma^{(L)}$ 和 $H_{LS}^{(L)}$。令人惊讶的是，我们发现这并非总是必要的。如果一组参数下的 $\tau_{opt} \ll \delta$，我们可以大幅改变参

系统中远离连接热浴的量子比特的参数，同时仍获得 $\tau \ll \delta$ 的值，且 $\Gamma^{(L)}$ 和 $H_{LS}^{(L)}$ 的值保持不变。图（6）展示了这一点，其中τ 是在改变与热浴耦合的两个量子比特之外的各种参数、并固定 $H_{LS}^{(L)} = 0$和 $\Gamma^{(L)}$ 为表I中的值时计算得到的。在所选参数的整个范围内 $\tau \ll \delta$。请注意，与之前的图不同，这并非τ的最优值。尽管如此，如果 $\tau \ll \delta$，我们仍能得到一个完全正定的马尔可夫量子主方程，它保留局域守恒定律，并在所选精度范围内表现出热化。给定 $\Gamma^{(L)}$ 和 $H_{LS}^{(L)}$，检查这一点要比寻找最优值 τ_{opt}容易得多。

如果与热浴耦合的两个量子比特的参数发生变化，我们就不能再使用相同的 $\Gamma^{(L)}$和 $H_{LS}^{(L)}$。例如，如果我们选择与图 $\Gamma^{(L)}$ 6 中相同的，并将 g_1 从 0.1 改为 0.2，就会得到 τ =0.0014 $\gg \delta$。

上述观察表明，CVX 得到的 $\Gamma^{(L)}$和 $H_{LS}^{(L)}$ 的值可以用来定义量子主方程，而不受系统主体部分参数的影响。这与背后的图景一致：$\Gamma^{(L)}$ 和 $H_{LS}^{(L)}$ 的每个取值都对应于热浴谱函数和系统-热浴耦合哈密顿量的一种不同选择。如果我们改变与热浴相连的量子比特的任何参数，这种变化都会显著影响系统-热浴耦合哈密顿量，因此τ 的值会与使用原始参数得到的 τ_{opt} 大不相同。如果我们改变远离这两个量子比特的参数，这种变化对系统-热浴耦合哈密顿量的影响就小得多，因此 τ 与 τ_{opt}的原始值处于同一数量级。这为在广泛的参数范围（包括广泛的温度范围）内，利用物理上自洽的马尔可夫量子主方程研究系统-热浴装置的动力学，带来了令人振奋的前景。由于局域马尔可夫耗散有利于基于张量网络的数值方法，此类研究也有望扩展到长链。原则上，此类耗散还可以在量子计算和量子模拟平台中加以设计，例如离子阱 [42, 43]，里德伯原子 [44, 45]，超导量子比特 [46] 以及量子点 [47]。

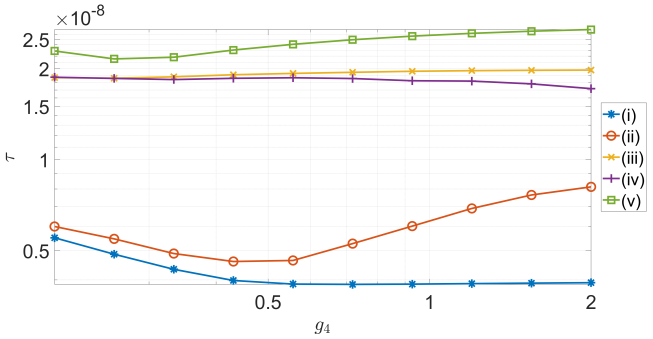

图 6. 对于所有.....（另有说明者除外），$N_L = 2, N_M = 4$，以及 $\omega_0^{(\ell)} = 1$、$\Delta_\ell = 1$、$\beta = 1$ ℓ 和 $g_\ell = 0.1$，τ 与 g_4的对比。τ 由 $\Gamma^{(L)}$ 计算得出，$H_{LS}^{(L)}$ 则由 CVX 得到；对于所有 ℓ，$N_L = 2, N_M = 4$，以及 $\omega_0^{(\ell)} = 1$、$\Delta_\ell = 1$、$\beta = 1$ 和 $g_\ell = 0.1$。图中所用的修改后参数如下：(i)（参数未作改动）；(ii) $\Delta_3 = 0.4, \Delta_4 = 1.2$; (iii) $\omega_0^{(3)}$ =1.5, $\omega_0^{(4)} = 1.5, g_5 = 0.3$; (iv) $\omega_0^{(3)} = 1.5, \omega_0^{(4)} = 1.5$, $g_3 = 0.3$ $\Delta_4 = 0.5$ $\tau \ll \delta = 10^{-6}$,; (v) 。我们发现，即使改变系统中未与热浴耦合的量子比特的参数，

V. 总结与展望

寻找物理上自洽的马尔可夫量子主方程——物理上自洽的马尔可夫量子主方程必须满足完全正性、遵循局域守恒定律，并能够展现热化。在这项工作中，我们系统地寻找了此类量子主方程。整个过程分为三个步骤，每一步的结果都具有重要意义。尤其是，我们由此提出了 TOP 问题：一种优化问题，旨在以给定精度寻找具备上述所有性质的量子主方程。TOP 为耗散量子系统的研究开辟了一条全新的途径。

我们考虑一个有限维、无驱动的系统，其中一部分与热浴弱耦合。微观推导得到的量子主方程（QME）在系统-热浴耦合的最低阶近似下写为 Redfield 方程（RE），已知它遵循局域守恒定律，并能够展现热化 [23]。首先，我们普遍地证明，除非处于极其特殊的情形，RE 都会违反完全正性。尽管已有研究通过具体例子（例如 [26, 27, 32, 35]）展示了这一点，但据我们所知，还没有类似于我们这种与模型无关的证明。接下来，我们证明，要求完全正性并保持局域守恒定律，会迫使量子主方程采用“局域”形式。也就是说，Lindblad 算符和兰姆位移哈密顿量的支撑集只能位于与热浴直接耦合的系统部分上，而在其他部分则必须为单位算符。这排除了任何“全局”形式的林德布拉德方程与局域守恒定律相容的可能性，而这类方程通常是为了展现热化而构造的。随后，我们探讨能否找到一个可以展现热化的“局域”林德布拉德方程。我们发现，寻找这种林德布拉德方程的任务可以转化为一个优化问题，我们称之为 TOP。最有意思的是，这个优化问题实际上是一个半定规划（SDP）。对于给定的系统和参数，该半定规划可以通过 CVX MATLAB 软件包等高级编程软件包高效求解。TOP 的输出可以明确表明，对于选定的系统参数和温度，所需类型的量子主方程是否可行，精度则由预先选定的精度阈值决定。作为数值示例，我们考察了一个由少数格点组成的 XXZ量子比特链中的 TOP，并固定了一个相当高的精度。当只有第一个格点与热浴耦合时，我们发现，除非温度处于极端范围，否则不可能找到一个局域林德布拉德

方程，使其能够在选定的精度范围内展现热化。

结合现有各种量子主方程形式进行讨论 — 文献中在各种近似下推导并分析了多种形式的量子主方程（例如，[34, 38, 48**?** –59]。尽管上述例子表明，不存在普遍适用且物理上一致的马尔可夫量子主方程形式，但这并不意味着这些方程无法使用。事实上，在这些形式的量子主方程中，系统密度矩阵的某些元素是正确的，而其他元素则不正确[23]。因此，解读这些方程的结果时需要谨慎，始终牢记其微观推导过程及所采用的近似。尽管 RE 不具备完全正性，但在大多数情况下，它比所有这类林德布拉德量子主方程都更准确。为了说明这种情况如何发生，设想在某个给定的设置中，某个能级（例如 $\langle E_j|\,\rho\,|E_j\rangle$）的布居在物理上应当为零。此时，RE 可能会给出一个很小的负值（例如 $\langle E_j|\,\rho\,|E_j\rangle = -10^{-3}$），而任何一种林德布拉德方程都可能给出较大的正值（例如 $\langle E_j|\,\rho\,|E_j\rangle = 0.1$）。如果要计算各种熵（量子信息和热力学中经常需要这样做），这两种情况都会造成问题。对于 RE，通常可以通过检查结果随系统-热浴耦合 [23, 60]的标度关系，排除不符合物理的结果。而在林德布拉德量子主方程中，这通常更加困难，因为其近似往往较难控制。最近推导出的统一林德布拉德方程所得到的状态 [34],已被证明违反局域守恒定律 [23]，但经过修正后，可以获得与 RE 同样准确的结果[51]。这样便恢复了局域守恒定律，但也付出了代价：密度矩阵会再次出现与 RE 相同的正性问题。另一项近期研究推导出了一种一般形式的量子主方程 [48]，其准确性高于 RE，尽管仍无法保证动力学具有完全正性。

TOP 与（非）马尔可夫性 — 在微观图像中，给定热浴的温度，热浴谱函数和系统-热浴耦合的类型便完全决定了量子主方程。随后，可以将 TOP 理解为遍历所有可能的热浴谱函数和系统-热浴耦合类型，从而找出局域 Lindblad 方程最接近满足热化的情形。因此，当 TOP 表明所需类型的量子主方程不可能实现时，这意味着无论连接何种热浴、无论热浴以何种方式与系统耦合，在所选参数下，都不可能通过满足局域守恒定律且呈现热化的完全正马尔可夫量子主方程来描述其动力学。对于这类系统参数和温度，趋近热态的过程必然具有某种非马尔可夫特征。TOP 的输出 τ_{opt} 显示出对系统参数和温度的非平凡依赖。这种依赖似乎反映了在所选参数下，动力学能够达到的马尔可夫程度。

当两个量子比特连接到热浴时，令人惊讶的是——惊—讶地，我们发现，当少站点 XXZ 链的前两个量子比特连接到热浴时，通过求解 TOP，可以找到遵循局域守恒定律并呈现热化的 Lindblad算子，且精度相当高。这在相当大的参数范围内都成立，其中包括广泛的温度范围。值得注意的是，在整个这一参数区域内，当只有一个量子比特与热浴耦合时，这样的量子主方程是不可能构造出来的。

只要 TOP 表明存在满足所有条件的量子主方程，通常用于求解半定规划的高级编程软件包也会输出这样一个量子主方程的可行形式。当两个量子比特与热浴耦合时，由此得到的量子主方程形式满足所有要求，却相当复杂，否则很难猜到。更有意思的是，我们发现，若取一个针对某组系统参数得到的量子主方程，并改变两个量子比特与热浴耦合之外的某些系统参数，该量子主方程仍然满足所有要求。这为我们开启了若干令人振奋的可能性，将在下文介绍。

未来方向 — 我们的研究结果开启了一种令人振奋的可能性：利用物理上自洽的马尔可夫量子主方程，在广泛的参数范围（包括广泛的温度范围）内，研究开放量子多体系统趋近热态的动力学。这尤其得益于局域林德布拉德方程适用于张量网络技术。否则，在有限温度下研究此类动力学往往颇具挑战，需要模拟非马尔可夫动力学 [61–63]。

TOP 使我们能够找出局域林德布拉德方程可以实现热化的系统参数范围。如我们所见，对于连接到热浴的两个量子比特，这一参数范围可能相当大。在离子阱 [42, 43], 里德伯原子 [44, 45], 超导量子比特[46] 和量子点 [47]等量子计算和量子模拟平台上，或许可以设计出此类局域耗散。尤其是在离子阱和里德伯原子平台上，这为在这些平台中可控地制备复杂量子多体系统的有限温度态提供了一种有趣的方法，而这目前仍是一项技术挑战。通常，需要全局林德布拉德耗散算符才能确保制备出热态。若要在量子模拟平台上模拟复杂量子多体系统，这类耗散算符将难以设计。将局域耗散限制在两个量子比特上的可能性，提供了一种容易得多的替代方案。

此外，正如我们在 XXZ量子比特链的例子中所见，TOP 的输出 τ_{opt}对系统各种参数的依赖，已经蕴含了丰富而有趣的物理。对于复杂量子多体系统，可能需要更具可扩展性的半定规划技术，而这本身也是计算机科学的一个研究方向[64]。利用这些技术，便可以研究 τ_{opt}随各种参数变化所呈现的丰富行为。

因此，我们的结果，尤其是引入 TOP，

为量子信息、计算和技术领域带来了新的范式。然而，仍有诸多问题尚待解决。一个主要问题涉及稳态相干性 [60, 65–67]。当系统以任意有限耦合强度与热浴耦合时，系统密度矩阵将在系统的能量本征基中具有相干性 [66, 67]。这些相干性在量子信息和热力学中可能十分重要 [68–71]，并且由 RE 在领先阶上正确给出 [23, 60, 67]。然而，尚不清楚通过 TOP 获得的物理一致的马尔可夫量子主方程所计算出的稳态相干性，是否会与通过 RE 获得的结果相同。在这方面仍需进一步研究，相关工作将在未来开展。

本研究中使用的所有代码均可在 [72]找到。

致谢

MK 谨此感谢印度-法国高级研究促进中心（IFCPAR）项目 6004-1、拉马努金研究员奖学金（SB/S2/RJN-114/2016）、SERB 青年职业生涯研究奖（ECR/2018/002085）以及 SERB Matrics 资助（MTR/2019/001101），该资助来自科学与工程研究委员会（SERB）、印度科学技术部和印度政府。AD 和 MK 感谢印度政府原子能部通过项目编号 RTI4001 提供的支持。AP 感谢欧洲研究委员会（ERC）通过欧盟“地平线 2020”研究与创新计划提供的资助（资助协议编号：758403）。A.P 还感谢丹麦国家研究基金会通过“CCQ”卓越中心提供的资助（资助协议编号：DNRF156）。

附录 A：将方程(14) 转化为方程(15)

在本附录中，我们展示将方程 (14) 化为方程 (15) 形式的步骤，该形式更便于研究与完全正性守恒相关的问题。我们从方程 (14) 出发，回顾其表达式为

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = i[\rho, H_S] - \epsilon^2 \sum_l \sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=1}^{d^2} \Big\{ a^*_{l\alpha} b_{l\tilde{\alpha}} [F^\dagger_\alpha, F_{\tilde{\alpha}}\rho] + c'^*_{l\alpha} a'_{l\tilde{\alpha}} [\rho F^\dagger_\alpha, F_{\tilde{\alpha}}] + b^*_{l\alpha} a_{l\tilde{\alpha}} [\rho F^\dagger_\alpha, F_{\tilde{\alpha}}] + a'^*_{l\alpha} c'_{l\tilde{\alpha}} [F^\dagger_\alpha, F_{\tilde{\alpha}}\rho] \Big\}. \tag{A1}$$

This can be rewritten as

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = i[\rho, H_S] + \epsilon^2 \sum_l \sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=1}^{d^2} \Big\{ a^*_{l\alpha} b_{l\tilde{\alpha}} \Big(F_{\tilde{\alpha}}\rho F^\dagger_\alpha - \frac{\{F^\dagger_\alpha F_{\tilde{\alpha}}, \rho\}}{2} - \frac{[F^\dagger_\alpha F_{\tilde{\alpha}}, \rho]}{2} \Big) + c'^*_{l\alpha} a'_{l\tilde{\alpha}} \Big(F_{\tilde{\alpha}}\rho F^\dagger_\alpha - \frac{\{F^\dagger_\alpha F_{\tilde{\alpha}}, \rho\}}{2} + \frac{[F^\dagger_\alpha F_{\tilde{\alpha}}, \rho]}{2} \Big) + b^*_{l\alpha} a_{l\tilde{\alpha}} \Big(F_{\tilde{\alpha}}\rho F^\dagger_\alpha - \frac{\{F^\dagger_\alpha F_{\tilde{\alpha}}, \rho\}}{2} + \frac{[F^\dagger_\alpha F_{\tilde{\alpha}}, \rho]}{2} \Big) + a'^*_{l\alpha} c'_{l\tilde{\alpha}} \Big(F_{\tilde{\alpha}}\rho F^\dagger_\alpha - \frac{\{F^\dagger_\alpha F_{\tilde{\alpha}}, \rho\}}{2} - \frac{[F^\dagger_\alpha F_{\tilde{\alpha}}, \rho]}{2} \Big) \Big\}, \tag{A2}$$

其中，$A,\ B = AB + BA$ 为反对易子。接下来注意到，上述方程中的求和项 $\sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=1}^{d^2}$ 可以写成 $\sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=1}^{d^2} = \sum_{\alpha=\tilde{\alpha}=d^2} + \sum_{\alpha=1,\tilde{\alpha}=d^2}^{d^2-1} + \sum_{\tilde{\alpha}=1,\alpha=d^2}^{d^2-1} + \sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=1}^{d^2-1}$。利用这一点以及 $F_{d^2} = I_S/\sqrt{d}$ 与所有算符对易这一事实，我们将所有对易子项合并并写作 $i[\rho, H_S + H_{LS}]$，从而得到

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = i[\rho, H_S + H_{LS}] + \sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=1}^{d^2-1} \Gamma_{\alpha\tilde{\alpha}} \Big(F_{\tilde{\alpha}}\rho F^\dagger_\alpha - \frac{\{F^\dagger_\alpha F_{\tilde{\alpha}}, \rho\}}{2} \Big). \tag{A3}$$

Here

$$H_{LS} = \epsilon^2 \sum_l \Bigg\{ \sum_{\alpha,\tilde{\alpha}=1}^{d^2} \Big\{ \frac{a^*_{l\alpha} b_{l\tilde{\alpha}}}{2i} - \frac{c'^*_{l\alpha} a'_{l\tilde{\alpha}}}{2i} - \frac{b^*_{l\alpha} a_{l\tilde{\alpha}}}{2i} + \frac{a'^*_{l\alpha} c'_{l\tilde{\alpha}}}{2i} \Big\} F^\dagger_\alpha F_{\tilde{\alpha}} + \sum_{\alpha=1}^{d^2-1} \frac{(a^*_{l\alpha} b_{l,d^2} + c'^*_{l\alpha} a'_{ld^2} + b^*_{l\alpha} a_{l,d^2} + a'^*_{l\alpha} c'_{l,d^2})}{2i\sqrt{d}} F^\dagger_\alpha - \sum_{\tilde{\alpha}=1}^{d^2-1} \frac{(a^*_{ld^2} b_{l\tilde{\alpha}} + c'^*_{l,d^2} a'_{l\tilde{\alpha}} + b^*_{l,d^2} a_{l\tilde{\alpha}} + a'^*_{l,d^2} c'_{l\tilde{\alpha}})}{2i\sqrt{d}} F_{\tilde{\alpha}} \Bigg\} \tag{A4}$$

and

$$\Gamma_{\alpha\tilde{\alpha}} = \epsilon^2 \sum_l (a^*_{l\alpha} b_{l\tilde{\alpha}} + c'^*_{l\alpha} a'_{l\tilde{\alpha}} + b^*_{l\alpha} a_{l\tilde{\alpha}} + a'^*_{l\alpha} c'_{l\tilde{\alpha}}), \tag{A5}$$

$\alpha,\ \tilde{\alpha}$ 从 1 到 $d^2 - 1$。这是正文中给出的方程（15）。

附录 B：一个 Redfield 方程违反完全正性的例子

本节将给出第 II 节所述内容的一个简单示例。我们的装置由一条双量子比特XXZ链组成，其中只有第一个量子比特与一个热浴相连，该热浴由无限多个玻色模式构成。令 H 表示完整装置的哈密顿量，其表达式为

$$H = H_S + \epsilon\, H_{SB} + H_B, \tag{B1}$$

其中

$$\begin{aligned} H_S &= \frac{\omega_0}{2}(\sigma_z^{(1)} + \sigma_z^{(2)}) \\ &\quad - g(\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)} + \sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)} + \Delta\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(2)}) \\ H_{SB} &= \sum_{r=1}^{\infty}(\kappa_r \hat{B}_r^\dagger \sigma_-^{(1)} + \kappa_r^* \hat{B}_r \sigma_+^{(1)}) \\ H_B &= \sum_{r=1}^{\infty} \Omega_r \hat{B}_r^\dagger \hat{B}_r \end{aligned} \tag{B2}$$

其中 $\sigma_x^{(\ell)}, y, z$ 表示作用于 ℓ^{th}量子比特的泡利矩阵，$\sigma_+^{(\ell)} = (\sigma_x^{(\ell)} + i\sigma_y^{(\ell)})/2$、$\sigma_-^{(\ell)} = (\sigma_x^{(\ell)} - i\sigma_y^{(\ell)})/2$，$\hat{}B_r$ 是热浴 r^{th} 模的玻色湮灭算符。这里，ω_0、g和 $g\Delta$ 分别表示磁场、总量子比特间耦合强度和各向异性。该系统的 RE 可计算为 [23]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} = i[\rho(t), H_S] + \epsilon^2\big\{&[S^\dagger, S^{(1)}\rho(t)] - [S^\dagger, \rho(t)S^{(2)}] \\ &+ \text{H.c}\big\} \end{aligned} \tag{B3}$$

with

$$\begin{aligned} S^\dagger &= \sigma_+^{(1)}, \qquad S = \sigma_-^{(1)} \\ S^{(1)} &= \sum_{j,k=1}^{4} |E_j\rangle \langle E_j| \sigma_-^{(1)} |E_k\rangle \langle E_k| D(j,k), \\ S^{(2)} &= \sum_{j,k=1}^{4} |E_j\rangle \langle E_j| \sigma_-^{(1)} |E_k\rangle \langle E_k| C(j,k) \end{aligned} \tag{B4}$$

and

$$\begin{aligned} C(j,k) &= \frac{\mathfrak{J}(E_{kj})n(E_{kj})}{2} - i\mathcal{P}\int_0^\infty d\omega \frac{\mathfrak{J}(\omega)n(\omega)}{\omega - E_{kj}}, \\ D(j,k) &= \frac{e^{\beta(E_{kj}-\mu_\ell)}\mathfrak{J}(E_{kj})n(E_{kj})}{2} \\ &\quad - i\mathcal{P}\int_0^\infty d\omega \frac{e^{\beta(\omega-\mu)}\mathfrak{J}(\omega)n(\omega)}{\omega - E_{kj}}, \\ \mathfrak{J}(\omega) &= \sum_{k=1}^{\infty} 2\pi\,|\kappa_k|^2\,\delta(\omega - \Omega_k), \\ n(\omega) &= [e^{\beta\omega} - 1]^{-1}. \end{aligned} \tag{B5}$$

在上文中，$\mathfrak{J}(\omega)$ 称为热浴谱函数。我们考虑具有高斯截断的欧姆谱函数所描述的玻色浴，$\mathfrak{J}(\omega) = \omega e^{-(\omega/\omega_c)^2}\Theta(\omega)$,其中 $\Theta(\omega)$ 是赫维赛德阶跃函数，ω_c 是截断频率。随后可以通过数值方法计算上述算符。

下一步是为 $\mathcal{H}_L$ 上的算符选择基 f_i 和 g_j。对于一般情况，可以从任意一组线性无关算符开始，这组算符构成一个基并包含恒等算符，然后应用格拉姆-施密特正交归一化过程，得到一个包含归一化恒等算符的正交归一基。对于我们的情况，可以很容易地验证，集合 $\{-\sigma_z^{(i)}/\sqrt{2}, \sigma_-^{(i)}, \sigma_+^{(i)}, I_2^{(i)}/\sqrt{2}\}$ 已足够,–其中$i = 1$ 适用于 $\{f_i\}$，而 $i = 2$ 适用于 $\{g_j\}$，I_2 是恒等算符。

整个系统的基 $\{F_i\}$ 可按小节 IIA 1中所述，由上述基构造得到，具体为

$$\begin{aligned} F_i &= f_i \otimes \frac{I_2^{(2)}}{2} \qquad (\text{for } i = 1,2,3) \\ F_{3i+j} &= f_i \otimes g_j \qquad (\text{for } i = 1,2,3,4 \text{ and } j = 1,2,3) \\ F_{16} &= \frac{I_4}{2} \end{aligned} \tag{B6}$$

任意算符 X 都可以根据上述基展开为 $X = \sum_\alpha x_\alpha F_\alpha$，其中 $x_\alpha = \langle F_\alpha, X\rangle = \text{Tr}(F_\alpha^\dagger X)$。因此，将 $S, S^\dagger, S^{(1)}$，$S^{(2)}$ [式 (B4)]，展开后，便可计算出式 (13) 中的所有系数。最后，可以根据式 (16) 计算矩阵 Γ。对于这个例子，在参数取为$g = 0.1, \omega_0 = 1, \omega_c = 10, \beta = 1, \mu = -0.5$，$\Delta = 1$时，矩阵 Γ 为

$$\Gamma = \epsilon^2 \begin{bmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0 \\
0 & 0 & 1.542+3.428i & 0 & 0 & 0.014+0.047i & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0 \\
0 & 1.542-3.428i & 0 & 0 & -0.18-0.007i & 0 & 0.18+0.007i & 0\;0\;0\;0\;0\;0\;0\;0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0 \\
0 & 0 & -0.18+0.007i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0 \\
0 & 0.014-0.047i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0 \\
0 & 0 & 0.18-0.007i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0
\end{bmatrix} \tag{B7}$$

我们可以看到，上述矩阵具有式 (17) 所预期的结构，

$$\Gamma = \left[\begin{array}{c|c} \Gamma_{\alpha,\tilde{\alpha}<4} & \Gamma_{\alpha<4,\tilde{\alpha}\geq 4} \\ \hline \Gamma_{\alpha\geq 4,\tilde{\alpha}<4} & 0 \end{array}\right] \tag{B8}$$

而且至关重要的是，$\Gamma_{\alpha<4,\ \tilde{\alpha}\geq 4} \neq 0$。因此，根据 GKSL 定理，该 Redfield 方程不会保持完全正性。此示例使用 QuTiP [73, 74] 计算得出。

附录 C：满足局域守恒定律的有效林德布拉德方程

在本附录中，我们将证明式（29）蕴含式（31）。满足完全正性且遵循局域守恒定律的量子主方程条件由式（29）给出，现将其回顾如下：

$$\begin{aligned} &-i[O_M, H'] + \sum_{\alpha_M,\tilde{\alpha}_M=1}^{d_M^2-1} \widetilde{\Lambda}_{\alpha_M,\tilde{\alpha}_M} \Big(g^\dagger_{\alpha_M} O_M g_{\tilde{\alpha}_M} \\ &- \frac{1}{2} O_M g^\dagger_{\alpha_M} g_{\tilde{\alpha}_M} - \frac{1}{2} g^\dagger_{\alpha_M} g_{\tilde{\alpha}_M} O_M \Big) = 0, \qquad \forall O_M, \end{aligned} \tag{C1}$$

其中我们记

$$H' = \sum_{\alpha_M=1}^{d_M^2} \nu_{d_L^2,\alpha_M} g_{\alpha_M}, \tag{C2}$$

为方便起见，下面我们将采用参考文献9中的算符—向量对应关系，其中算符 X 的向量化形式 $\mathbf{vec}(X)$ 可通过线性性构造得到，并且

$$\mathrm{vec}(|i\rangle\langle j|) = |i\rangle \otimes |j\rangle^*, \tag{C3}$$

其中 $|j\rangle^*$ 表示 $|j\rangle$的复共轭。我们将利用式（C3）对式（C1）进行处理，并使用恒等式（参考文献 9中的式 1.132）

$$\mathrm{vec}(A_0 B A_1^T) = (A_0 \otimes A_1)\mathrm{vec}(B). \tag{C4}$$

对式（C1）两边应用 vec 运算，可得

$$\begin{aligned} &-i\,\mathrm{vec}(I_M O_M H') + i\,\mathrm{vec}(H' O_M I_M) + \sum_{\alpha_M,\tilde{\alpha}_M=1}^{d_M^2-1} \widetilde{\Lambda}_{\alpha_M,\tilde{\alpha}_M} \\ &\Big(\mathrm{vec}(g^\dagger_{\alpha_M} O_M g_{\tilde{\alpha}_M}) - \frac{1}{2}\mathrm{vec}(I_M O_M g^\dagger_{\alpha_M} g_{\tilde{\alpha}_M}) \\ &- \frac{1}{2}\mathrm{vec}(g^\dagger_{\alpha_M} g_{\tilde{\alpha}_M} O_M I_M) \Big) = 0, \qquad \forall O_M. \end{aligned} \tag{C5}$$

利用方程（C4），可将方程（C5）化简为：

$$\begin{aligned} &\Big\{ -iI_M \otimes (H')^T + iH' \otimes I_M \sum_{\alpha_M,\tilde{\alpha}_M=1}^{d_M^2-1} \widetilde{\Lambda}_{\alpha_M,\tilde{\alpha}_M} \\ &\Big(g^\dagger_{\alpha_M} \otimes g^T_{\tilde{\alpha}_M} - \frac{1}{2} I_M \otimes (g^\dagger_{\alpha_M} g_{\tilde{\alpha}_M})^T \\ &- \frac{1}{2}(g^\dagger_{\alpha_M} g_{\tilde{\alpha}_M}) \otimes I_M \Big) \Big\} \mathrm{vec}(O_M) = 0, \qquad \forall O_M. \end{aligned} \tag{C6}$$

方程（C6）具有如下形式：$\mathcal{M}\,\mathrm{vec}(O_M) = 0$ 对于所有厄米 O_M。由于厄米矩阵（例如 O_M）构成整个算符空间的一组基，这意味着$\mathcal{M}\mathrm{vec}(X) = 0$ 对于所有算符 X。这是因为可以将 X 展开为厄米算符（例如 O_M）的线性组合。现在，$\mathcal{M}\,\mathrm{vec}(X) = 0\,\forall\, X$ 意味着$\mathcal{M} = 0$。因此，方程（C6）意味着

$$\begin{aligned} \mathcal{M} = &-iI_M \otimes (H')^T + iH' \otimes I_M + \sum_{\alpha_M,\tilde{\alpha}_M=1}^{d_M^2-1} \widetilde{\Lambda}_{\alpha_M,\tilde{\alpha}_M} \\ &\Big(g^\dagger_{\alpha_M} \otimes g^T_{\tilde{\alpha}_M} - \frac{1}{2} I_M \otimes (g^\dagger_{\alpha_M} g_{\tilde{\alpha}_M})^T \\ &- \frac{1}{2}(g^\dagger_{\alpha_M} g_{\tilde{\alpha}_M}) \otimes I_M \Big) = 0. \end{aligned} \tag{C7}$$

如果 $\mathcal{M} = 0$，则 $\mathbf{Tr}(\mathcal{M}) = 0$。对式（C7）两边取迹，并利用 $\{g_i\}$ 的正交归一性以及以下事实

即 $\mathrm{Tr}(g_i)=\delta_{i,\ d_M^2}$，我们得到

$$\mathrm{Tr}(\mathcal{M})=-\sum_{\alpha_M=1}^{d_M^2-1}\widetilde{\Lambda}_{\alpha_M,\alpha_M}d_M=0 \tag{C8}$$

这意味着

$$\sum_{\alpha_M=1}^{d_M^2-1}\widetilde{\Lambda}_{\alpha_M,\alpha_M}=\sum_{\alpha_M=1}^{d_M^2-1}\sum_{\alpha_L=1}^{d_L^2}\widetilde{\Gamma}_{(\alpha_L,\alpha_M),(\alpha_L,\alpha_M)}=0. \tag{C9}$$

即正文中的式（31）。

附录 D：热化的条件

根据量子统计力学的基本原理，我们预期系统在与温度相同的热浴耦合时会发生热化。量子主方程必须满足的热化确切条件已在文献23中推导。为求完整起见，我们在此回顾相关讨论。

设总系统哈密顿量为 $H=H_S+\epsilon H_{SB}+H_B$，其中 ϵ 是控制系统-热浴耦合强度的无量纲参数，而 H_{SB} 是系统-热浴耦合哈密顿量。接下来，我们逐阶求解量子主方程的稳态。描述该设置的任何量子主方程都可以展开为所谓的无记忆卷积形式 [6],

$$\frac{\partial\rho(t)}{\partial t}=\sum_{m=0}^{\infty}\epsilon^{2m}\mathcal{L}_{2m}(t)[\rho(t)], \tag{D1}$$

其中 $\mathcal{L}$ 通常可以是随时间变化的算符，且 $L_0(t)[\rho(t)]=i[\rho(t)\ H_S]$。对于写到系统-热浴耦合二阶的量子主方程，上述求和可以截断至二阶。记 $\mathcal{L}_{2m}\equiv\lim_{t\to\infty}\mathcal{L}_{2m}(t)$，稳态 ρ_{SS}可表示为

$$\rho_{SS}=\lim_{t\to\infty}e^{t(\mathcal{L}_0+\epsilon^2\mathcal{L}_2)}\rho(0), \tag{D2}$$

假设其唯一。稳态满足

$$0=\sum_{m=0}^{\infty}\epsilon^{2m}\mathcal{L}_{2m}[\rho_{SS}]. \tag{D3}$$

接下来，我们可以将 ρ_{SS} 按 ϵ 的偶次幂展开:

$$\rho_{SS}=\sum_{m=0}^{\infty}\epsilon^{2m}\rho_{SS}^{(2m)} \tag{D4}$$

将式（D4）代入式（D3），我们可以逐阶求得 ρ_{SS}的解。在 ϵ 的零阶，我们得到

$$[\rho_{SS}^{(0)},H_S]=0. \tag{D5}$$

假设哈密顿量没有简并，则式（D5）意味着 $\rho_{SS}^{(0)}$ 在能量本征基中是对角的,

$$\rho_{SS}^{(0)}=\sum_i p_i\left|E_i\right\rangle\left\langle E_i\right|. \tag{D6}$$

其中，$|E_i\rangle$ 是系统的一个本征态。在 ϵ 的二阶（$m=1$）下，我们得到以下两个方程:

$$\left\langle E_i\right|\mathcal{L}_2[\rho_{SS}^{(0)}]\left|E_i\right\rangle=0,\quad\forall i \tag{D7}$$

$$\begin{aligned}&i(E_i-E_j)\left\langle E_i\right|\rho_{SS}^{(2)}\left|E_j\right\rangle\\&+\epsilon^2\left\langle E_i\right|\mathcal{L}_2[\rho_{SS}^{(0)}]\left|E_j\right\rangle=0,\quad\forall i\neq j\end{aligned} \tag{D8}$$

由于 $\rho_{SS}^{(0)}$ 在能量本征基中是对角的，方程（D7）确定了 $\rho_{SS}^{(0)}$ 的对角元。得到 $\rho_{SS}^{(0)}$ 后，方程（D8）便确定了 $\rho_{SS}^{(2)}$ 的非对角元。从上述方程可知，ρ_{SS} 的最低阶对角元与 ϵ无关。还可以证明，ρ_{SS} 在系统能量本征基中的最低阶非对角元按 ϵ^2的尺度变化。正如正文中所讨论的，当量子主方程满足以下条件时，系统会热化:

$$\lim_{\epsilon\to0}\rho_{SS}=\rho_{th} \tag{D9}$$

其中，ρ_{th} 是系统的吉布斯态，定义为

$$\rho_{th}=\frac{e^{-\beta H_S}}{\mathrm{Tr}[e^{-\beta H_S}]}. \tag{D10}$$

由此我们得出，这种意义上的热化是关于ρ_{SS}的对角元主导阶的陈述。将式（D9）代入式（D7），可得系统发生热化所需满足的 $\mathcal{L}_2$ 条件:

$$\left\langle E_i\right|\mathcal{L}_2[\rho_{th}]\left|E_i\right\rangle=0\quad\forall i. \tag{D11}$$

附录 E：半定规划（SDP）

1. 基本理论

本节介绍半定规划（SDP）的理论框架。我们遵循参考文献9第 57 页给出的 SDP 定义。下文中，我们将使用 Φ 和 Ψ 表示保持厄米性的线 $\Phi^\dagger$ 性映射。我们还将使用 [9], 表示“伴随映射”

$$\langle A,\Phi(B)\rangle=\langle\Phi^\dagger(A),B\rangle \tag{E1}$$

其中

$$\langle A,B\rangle=\mathrm{Tr}(A^\dagger B) \tag{E2}$$

表示希尔伯特-施密特内积。

半定规划由元组 (Φ, Ψ, A, B, C) 定义，其中Φ，Ψ是厄米保持线性映射，A，B，C是厄米算符。半定规划的“原始”问题为

$$\begin{aligned} &\text{maximize}: \quad \langle A, X\rangle \quad w.r.t.\ X \\ &\text{subject to}: \quad \Phi(X) = B,\ \Psi(X) \le C,\ X \ge 0, \end{aligned} \tag{E3}$$

其中，不等式表示矩阵不等式。也就是说，$A \ge B$ 等价于 $A - B \ge 0$，并意味着 $A - B$是半正定的。我们将使用记号 X_f 表示 X 的任意“可行”取值，该取值满足方程 (E3) 中的三个约束；并用 $\mathcal{P}$ 表示方程 ($\langle A,\ X\rangle$) 中 $\langle A$的最大值 $X\rangle$ （假设至少存在一个满足约束的 X ）。

对于每个“原始”问题，都存在一个“对偶”问题，其形式为

$$\begin{aligned} &\text{minimize}: \quad \langle B, Y\rangle + \langle C, Z\rangle \quad w.r.t.\ Y, Z \\ &\text{subject to}: \quad \Phi^\dagger(Y) + \Psi^\dagger(Z) \ge A, \\ &\qquad\qquad Y \text{is hermitian}, Z \ge 0. \end{aligned} \tag{E4}$$

我们将使用记号 (Y_f, Z_f) 表示 Y，Z 的任意“可行”取值，该取值满足方程 (E4) 中的三个约束；并用 $\mathcal{D}$ 表示$\langle B$的最小值$Y\rangle + \langle C,\ Z\rangle$ 该最小值在方程 (E4) 中取得（假设至少存在某个满足约束的 (Y, Z)）。

半定规划具有一种称为对偶性的概念，它将原始问题和对偶问题的性质联系起来。具体而言，可以证明

$$\mathcal{P} \le \mathcal{D} \tag{E5}$$

这一性质称为“弱对偶性”。在大多数情况下，可以证明 $\mathcal{P} = \mathcal{D}$，即式（E5）中等号成立。这一条件称为“强对偶性”。

根据弱对偶性以及原始问题和对偶问题的定义，利用式（E3）、（E4）和（E5），我们得到

$$\langle A, X_f\rangle \le \mathcal{P} \le \mathcal{D} \le \langle B, Y_f\rangle + \langle C, Z_f\rangle\,. \tag{E6}$$

由式（E6）可知，对原始问题和对偶问题（X_f、Y_f、Z_f）中的输入作出任意可行选择，都会为原始问题和对偶问题的最优值提供下界和上界 [（见图（7））]。特别地，若我们得到$\langle A$、$X_f\rangle = \langle B$、$Y_f\rangle + \langle C$、$Z_f\rangle$，则式（E6）中的等号处处成立。因此，这一性质可用于求得半定规划原始问题的精确解。

我们将在第 E2 节说明，式（40）中的热优化问题（TOP）可以化为半定规划的标准形式 [式（E3）]。

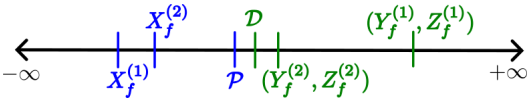

图7. 示意图展示了根据公式（E6），公式（E3）和（E4）中半定规划的弱对偶性。$X_f^{(j)}$ 和（$Y_{(j)f}, Z_f^{(j)}$）分别表示原问题和对偶问题的任意可行输入。任何此类输入都会为原问题和对偶问题的解给出上界和下界。

2. 将热优化问题（TOP）化为标准形式

Recall that the TOP was given by [Eq.(40)]

最小化：τ

$$\text{subject to}: H_{LS}^{(L)} \text{ is hermitian}, \mathrm{Tr}(\Gamma^{(L)}) = 1,\ \Gamma^{(L)} \ge 0. \tag{E7}$$

的定义见公式（39），的定义见公式（and Eq. (38)），$\Gamma^{(L)}$。本小节将说明如何将公式（E7）中的 TOP 化为半定规划的标准形式。需要指出的是，公式（E3）中的半定规划标准形式尚不适用于此目的。因此，我们在公式（E3）和公式（E4）中将 $A \to -A, C \to -C$，$\Psi \to -\Psi, Y \to -Y$,替换掉，同时保持 Φ, B, X 和 Z 不变。由于最大化任何函数都等同于最小化其相反数，我们得到新的“原问题”形式如下

$$\begin{aligned} &\text{minimize}: \quad \langle A, X\rangle \\ &\text{subject to}: \quad \Phi(X) = B,\ \Psi(X) \ge C,\ X \ge 0, \end{aligned} \tag{E8}$$

~其中我们用 P 表示 $\langle A$的最小值，$X\rangle$该值由方程（E8）得出。新的“对偶”形式写作

$$\begin{aligned} &\text{maximize}: \quad \langle B, Y\rangle + \langle C, Z\rangle \\ &\text{subject to}: \quad \Phi^\dagger(Y) + \Psi^\dagger(Z) \le A, \\ &\qquad\qquad Y \text{is hermitian},\ Z \ge 0, \end{aligned} \tag{E9}$$

~其中我们用 D 表示 $\langle B$的最小值，$Y\rangle + \langle C$，$Z\rangle$ 该值由方程（E9）得出。随后，方程（E6）转化为 [见图（8）]，

$$\langle A, X_f\rangle \ge \widetilde{\mathcal{P}} \ge \widetilde{\mathcal{D}} \ge \langle B, Y_f\rangle + \langle C, Z_f\rangle\,. \tag{E10}$$

现在我们将说明如何通过对方程（E8）中的优化问题进行一系列变换，将方程（E8）中的 TOP 化简为方程（E8）。我们分三步进行。

步骤 *1*：第一步是写出一个原始优化问题，其解（达到的最小值）等于

$$||K||_1 = \mathrm{Tr}(\sqrt{K^\dagger K}). \tag{E11}$$

对于任意厄米矩阵 K。设 Π_p 和 Π_n 分别为投影到 K 的正特征子空间和负特征子空间上的投影算子。在这种

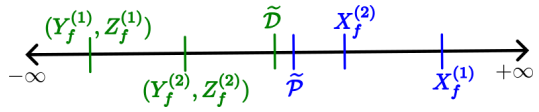

图8. 示意根据式（E8）和（E9）定义的半定规划的弱对偶性，依据式（E10）。 $X_f^{(j)}$ 和（$Y_{(j)f}$， $Z_f^{(j)}$）分别表示原问题和对偶问题的任意可行输入。任何此类输入都会给出原问题和对偶问题解的上界和下界。

情况下，

$$||K||_1 = \mathrm{Tr}(\Pi_p K \Pi_p) - \mathrm{Tr}(\Pi_n K \Pi_n). \tag{E12}$$

现在来考虑以下优化问题：

$$\begin{aligned} \text{minimize}: \quad & \left\langle \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} P & . \\ . & Q \end{pmatrix} \right\rangle \\ \text{subject to}: \quad & \Psi_1 \begin{pmatrix} P & . \\ . & Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P & 0 \\ 0 & Q \end{pmatrix} \geq \begin{pmatrix} K & 0 \\ 0 & -K \end{pmatrix}, \\ & \begin{pmatrix} P & . \\ . & Q \end{pmatrix} \geq 0, \end{aligned} \tag{E13}$$

这里我们用省略号表示矩阵的任意块，这些块始终可以设为零，而不会影响目标函数或约束。注意Ψ_1 式（E13）中的映射会将非对角块替换为零矩阵，同时保持对角块不变。容易看出，式（E13）具有式（E8）的形式（省略了 Φ 和 B，即没有等式约束）。因此，式（E13）是一个半定规划。

原问题在式（E13）中的对偶问题为

$$\begin{aligned} \text{maximize}: \quad & \left\langle \begin{pmatrix} K & 0 \\ 0 & -K \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \bar{P} & . \\ . & \bar{Q} \end{pmatrix} \right\rangle \\ \text{subject to}: \quad & \Psi_1^\dagger \begin{pmatrix} \bar{P} & . \\ . & \bar{Q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{P} & 0 \\ 0 & \bar{Q} \end{pmatrix} \leq \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \\ & \begin{pmatrix} \bar{P} & . \\ . & \bar{Q} \end{pmatrix} \geq 0. \end{aligned} \tag{E14}$$

其中， $\Psi_1^\dagger$ 结果表明，它与 Ψ_1 使用式（E1）得到的映射相同。可以看出，式（E14）具有式（E9）的形式（同样省略了 Φ 和 B）。

我们现在将证明，式（E13）和（E14）中的原问题和对偶问题所达到的最优值均等于 $||K||_1$。为证明这一点，注意令

$$P_f = \Pi_p K \Pi_p, \quad Q_f = -\Pi_n K \Pi_n \tag{E15}$$

（其中 P_f 和 Q_f 分别表示 P 和 Q在式（E13）中的“可行”选择）使我们能够得到原始目标函数中的 $||K||_1$。此外，令

$$\bar{P}_f = \Pi_p, \quad \bar{Q}_f = \Pi_n \tag{E16}$$

式（E14）使我们能够得到对偶目标函数中的 $||K||_1$。因此，我们明确构造了式（E13）和（E14）中原始问题和对偶问题的可行输入选择，分别使原始目标函数和对偶目标函数取得 $||K||_1$。因此，根据式（E10），原始问题和对偶问题所达到的最优值均恰好等于$||K||_1$。

步骤 *2*：在第一步中，我们构造了一个半定规划，其解等于 $||K||_1$，其中 K固定。现在我们将构造一个半定规划，用于计算$||K||_1$的最小值，同时满足关于 K的一些约束。我们首先将式（E13）中的问题改写为

$$\begin{aligned} \text{minimize}: \quad & \mathrm{Tr}(P) + \mathrm{Tr}(Q) \\ \text{subject to}: \quad & P \geq K, \; Q \geq -K, \; P, Q \geq 0. \end{aligned} \tag{E17}$$

式（E13）计算

$$||K||_1 = \sum_i |K_{ii}|. \tag{E18}$$

当 K 为对角矩阵时。设 $\mathcal{G}$ 为一个线性且保持厄米性的映射，其输出始终为对角矩阵。那么，由下式给出的优化问题

$$\begin{aligned} \text{minimize}: \quad & \mathrm{Tr}(P) + \mathrm{Tr}(Q) \\ \text{subject to}: \quad & P \geq \mathcal{G}(R), \; Q \geq -\mathcal{G}(R), \\ & \Phi(R) = B, \quad P, Q, R \geq 0, \end{aligned} \tag{E19}$$

计算最小值$R \geq 0, \; \Phi(R) = B \sum_i |\mathcal{G}(R)_{ii}|$。现在，我们将开始把上述形式体系与方程（E7）中的 TOP 联系起来。我们将说明如何选择 R，使其体现对 $H_{LS}^{(L)}$ 和 $\Gamma^{(L)}$的优化；并如何选择 Φ，使其体现对 $\Gamma^{(L)}$的迹约束。然后，我们将指定一个映射 $\mathcal{G}$，以 R 为输入（即， $H_{LS}^{(L)}$ 和 $\Gamma_{LS}^{(L)}$），并输出一个对角矩阵，使得目标函数计算出

$$\tau = \sum_i \left| \langle E_i | \, \mathcal{L}_2(\rho_{th}) \, | E_i \rangle \right|. \tag{E20}$$

步骤 *3*：在热优化问题[方程（E7）], 中，我们对 $\Gamma^{(L)} \geq 0$ 以及厄米 $H_{LS}^{(L)}$ 进行优化。我们利用这样一个事实：任意厄米矩 $H_{LS}^{(L)}$ 阵 $H_{LS}^{(L)} = S - T$均可写成S, $T \geq 0$。此外， $S - T$ 对于任意 S， $T \geq 0$ 始终是厄米的。现在，我们将用正矩阵之差 $H_{LS}^{(L)}$ 替代厄米矩阵 $S - T$。这是必要的，因为半定规划只能处理对半正定变量的优化。此外，令 $\Gamma^{(L)}$ 对应某个矩阵 U。现在考虑映射$\mathcal{G}$，其作用如下：

$$\mathcal{G}\begin{pmatrix} S & . & . \\ . & T & . \\ . & . & U \end{pmatrix} \equiv \mathcal{G}(S,T,U) \equiv \begin{pmatrix} \langle E_1|\,\mathcal{L}_2(\rho_{th})\,|E_1\rangle & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \langle E_2|\,\mathcal{L}_2(\rho_{th})\,|E_2\rangle & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \langle E_d|\,\mathcal{L}_2(\rho_{th})\,|E_d\rangle\,, \end{pmatrix} \tag{E21}$$

其中，该映射根据方程（ $\mathcal{L}_2$ 38）构造 $H_{LS}^{(L)} = S - T$，并令 $\Gamma^{(L)} = U$。现在，我们考虑方程（E19）中优化问题的一个特例，其中选择方程（E21）中的 $\mathcal{G}$ 。我们得到：

$$\begin{aligned} &\text{minimize}: \quad \mathrm{Tr}(P) + \mathrm{Tr}(Q) \\ &\text{subject to}: \quad P \geq \mathcal{G}\begin{pmatrix} S & . & . \\ . & T & . \\ . & . & U \end{pmatrix},\ Q \geq -\mathcal{G}\begin{pmatrix} S & . & . \\ . & T & . \\ . & . & U \end{pmatrix}, \\ &\Phi_1\begin{pmatrix} S & . & . \\ . & T & . \\ . & . & U \end{pmatrix} = \mathrm{Tr}(U) = 1, P, Q, S, T, U \geq 0. \end{aligned} \tag{E22}$$

由于 $\mathcal{G}$ 始终输出对角矩阵 [参见方程（E21）],方程（E22）计算

$$\begin{aligned} &\min \quad \sum_i \left| \mathcal{G}\begin{pmatrix} S & & \\ & T & \\ & & U \end{pmatrix}_{ii} \right| \\ &\text{subject to}: \quad S, T, U \geq 0, \mathrm{Tr}(U) = 1 \end{aligned} \tag{E23}$$

由于 $H_{LS}^{(L)}$ 总可以写成 $S-T$，且 $\Gamma^{(L)}$ 写成 U，方程（E23） [因此方程（E22）]与方程（E7）中的热优化问题相同。因此，方程（E22）计算 τ_{opt}。

剩下的工作是将方程（E22）转换为方程（E8）的标准形式。方程（E22）可在选择

$$\begin{aligned} &A = \begin{pmatrix} I & & & & \\ & I & & & \\ & & 0 & & \\ & & & 0 & \\ & & & & 0 \end{pmatrix}, \quad B = 1, \quad X = \begin{pmatrix} P & . & . & . & . \\ . & Q & . & . & . \\ . & . & S & . & . \\ . & . & . & T & . \\ . & . & . & . & U \end{pmatrix}, \quad C = 0, \\ &\Psi\begin{pmatrix} P & . & . & . & . \\ . & Q & . & . & . \\ . & . & S & . & . \\ . & . & . & T & . \\ . & . & . & . & U \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P - \mathcal{G}(S,T,U) & 0 \\ 0 & Q + \mathcal{G}(S,T,U) \end{pmatrix}, \quad \Phi\begin{pmatrix} P & . & . & . & . \\ . & Q & . & . & . \\ . & . & S & . & . \\ . & . & . & T & . \\ . & . & . & . & U \end{pmatrix} = \mathrm{Tr}(U) \end{aligned} \tag{E24}$$

请记住，将 P、Q 视为计算目标函数所需的变量 τ [方程（E7）],S，T是产生 $H_{LS}^{(L)} = S - T$的变量，而 U 是编码 $\Gamma^{(L)}$的变量。因此，我们证明了 TOP [方程（E7）]是一个半定规划。

需要注意的是，使用 CVX 并不需要先将 TOP 化为半定规划的标准形式 [36]。事实上，方程（E7）中的 TOP 可直接在 CVX 中实现；CVX 本身会在后台自动构造对偶问题。

[1] F. Binder、L. A. Correa、C. Gogolin、J. Anders 和 G. Adesso 编，*Thermodynamics in the Quantum Regime* 2018 （Springer, Cham，）。[2] K. L. Hur、L. Henriet、A. Petrescu、K. Plekhanov、G. Roux 和 M. Schir´ **17**, 808 2016 o，Comptes Rendus Physique（）。[3] Y. Cao、J. Romero、J. P. Olson、M. Degroote、P. D. John- son、M. Kieferov´a、I. D. Kivlichan、T. Menke、B. Per- opadre、N. P. D. Sawaya 等，Chemical Reviews **119**, 10856–10915（2019）。

[4] D. D. Awschalom, C. H. R. Du, R. He, J. Heremans, A. Hoffmann, J. Hou, H. Kurebayashi, Y. Li, L. Liu, V. Novosad, J. Sklenar, S. Sullivan, D. Sun, H. Tang, V. Tyberkevych, C. Trevillian, A. W. Tsen, L. Weiss, W. Zhang, X. Zhang, L. Zhao, 和 C. W. Zollitsch，IEEE Transactions on Quantum Engineering, 1 (2021)。[5] J. Cao, R.J.Cogdell, D.F.Coker, H.-G.Duan, J.Hauer, U. Kleinekath¨ofer, T. L. C. Jansen, T. Man˘cal, R. J. D. Miller, J. P. Ogilvie, V. I. Prokhorenko, T. Renger, H.-S. Tan, R. Tempelaar, M. Thorwart, E. Thyrhaug, S. West-

enhoff，和 D. Zigmantas，《科学进展》6 (2020)。[6] H.-P. Breuer 和 F. Petruccione，*The Theory of Open Quantum Systems*（牛津大学出版社，牛津，2006）。[7] A. Rivas 和 S. F. Huelga，SpringerBriefs in Physics (2012)。[8] H. Carmichael，*Statistical Methods in Quantum Optics 1. Master Equations and Fokker–Planck Equations*（Springer-Verlag Berlin Heidelberg，2002）。[9] J. Watrous，*The Theory of Quantum Information*（剑桥大学出版社，2018）。[10] V. Siddhu 和 S. Tayur，“五个入门专题：通过半定规划学习量子信息科学”，载于 *Tutorials in Operations Research: Emerging and Impactful Topics in Operations* 2022 3, 59 92（）第 页 –。[11] D. A. Mazziotti，《物理评论快报》93, 213001 (2004)。[12] D. A. Mazziotti，《物理评论快报》106, 083001 (2011)。[13] M. M. Wolf, J. Eisert, T. S. Cubitt, 和 J. I. Cirac，《物理评论快报》101, 150402 (2008)。[14] T. S. Cubitt, J. Eisert, 和 M. M. Wolf，《数学物理通讯》310, 383 (2012)。[15] A. H. Kiilerich 和 K. Mølmer，《物理评论A辑》97, 052113 (2018)。[16] V. Gorini, A. Kossakowski, 和 E. C. G. Sudarshan，《数学物理学杂志》17, 821 (1976)。[17] V. Gorini, A. Frigerio, M. Verri, A. Kossakowski, 和 E. Sudarshan，《数学物理报告》13, 149 (1978)。[18] G. Lindblad，《数学物理通讯》48, 119 (1976)。[19] H. Weimer, A. Kshetrimayum, 和 R. Or´us，《现代物理评论》93, 015008 (2021)。[20] M. B. Plenio 和 P. L. Knight，《现代物理评论》70, 101 (1998)。[21] J. Dalibard, Y. Castin, 和 K. Mølmer，《物理评论快报》68, 580 (1992)。[22] K. Mølmer, Y. Castin, 和 J. Dalibard，《美国光学学会杂志B辑》10, 524 (1993)。[23] D. Tupkary, A. Dhar, M. Kulkarni, 和 A. Purkayastha，《物理评论A辑》105, 032208 (2022)。[24] A. G. Redfield，IBM Journal of Research and Development 1, 19 (1957)。[25] F. Bloch，《物理评论》105, 1206 (1957)。[26] R. Hartmann 和 W. T. Strunz，《物理评论A辑》101, 012103 2020( )。[27] P. R. Eastham, P. Kirton, H. M. Cammack, B. W. Lovett, 和 J. Keeling，《物理评论A辑》94, 012110 (2016)。[28] S. Anderloni, F. Benatti, 和 R. Floreanini，《物理学杂志A辑：数学与理论》40, 1625 (2007)。[29] P. Gaspard 和 M. Nagaoka，《化学物理学杂志》111, 5668 (1999)。[30] D. Kohen, C. C. Marston, 和 D. J. Tannor，《化学物理学杂志》107, 5236 (1997)。[31] S. Gnutzmann 和 F. Haake，Zeitschrift f¨ur Physik B Condensed Matter 101, 263 (1996)。[32] A. Su´arez, R. Silbey, 和 I. Oppenheim，《化学物理学杂志》97, 5101 (1992)。[33] R. S. Whitney，《物理学杂志A辑：数学与理论》41, 175304 (2008)。[34] F. Nathan 和 M. S. Rudner，《物理评论B辑》102, 115109 (2020)。[35] H. Spohn，《现代物理评论》52, 569 (1980)。[36] M. Grant 和 S. Boyd，《CVX：用于规范凸优化的 Matlab 软件，2.1 版》，http://cvxr. com/cvx (2014). [37] D. Walls 和 G. J. Milburn，*Quantum optics* (Springer- Verlag Berlin Heidelberg, 2008). [38] T. Becker、L.-N. Wu 和 A. Eckardt，《物理评论E》104, 014110 2021( ). [39] T. Prosen 和 M. ˇ Znidariˇc，《统计力学杂志：理论与实验》2009, P02035 (2009). [40] J. J. Mendoza-Arenas、S. R. Clark 和 D. Jaksch，《物理评论E》91, 042129 (2015). [41] M. ˇZnidariˇc、T. c. v. Prosen、G. Benenti、G. Casati 和 D. Rossini，《物理评论E》81, 051135 (2010). [42] J. T. Barreiro、M. M¨uller、P. Schindler、D. Nigg、T. Monz、M. Chwalla、M. Hennrich、C. F. Roos、P. Zoller 和 R. Blatt，《自然》470, 486 (2011). [43] P. Schindler、M. M¨uller、D. Nigg、J. T. Barreiro、E. A. Martinez、M. Hennrich、T. Monz、S. Diehl、P. Zoller 和 R. Blatt，《自然·物理》9, 361 (2013). [44] H. Weimer、M. M¨uller、I. Lesanovsky、P. Zoller 和 H. P. B¨uchler，《自然·物理》6, 382 (2010). [45] T. L. Nguyen、J. M. Raimond、C. Sayrin、R. Corti¯nas、T. Cantat-Moltrecht、F. Assemat、I. Dotsenko、S. Gleyzes、S. Haroche、G. Roux、T. Jolicoeur 和 M. Brune，《物理评论X》8, 011032 (2018). [46] G. Garc´ıa-P´erez、M. A. C. Rossi 和 S. Maniscalco，npj量子信息6, 1 (2020). [47] C. W. Kim、J. M. Nichol、A. N. Jordan 和 I. Franco，《PRX量子》3, 040308 (2022). [48] T. Becker、A. Schnell 和 J. Thingna，《物理评论快报》129, 200403 (2022). [49] G. McCauley、B. Cruikshank、D. I. Bondar 和 K. Ja- cobs，npj量子信息6 (2020). [50] U. Harbola、M. Esposito 和 S. Mukamel，《物理评论B辑》74, 235309 (2006). [51] F. Nathan 和 M. S. Rudner，(2022), 10.48550/ARXIV.2206.02917. [52] A. S. Trushechkin 和 I. V. Volovich，《欧洲物理快报》113, 30005 (2016). [53] E. Kleinherbers、N. Szpak、J. K¨onig 和 R. Sch¨utzhold，《物理评论B辑》101, 125131 (2020). [54] D. Davidovi´c，《Quantum》4, 326 (2020). [55] E. Mozgunov 和 D. Lidar，《Quantum》4, 227 (2020). [56] G. Kirˇsanskas、M. Francki´e 和 A. Wacker，《物理评论B辑》97, 035432 (2018). [57] M. Gerry 和 D. Segal，(2022), arXiv:2212.11307. [58] M. Ostilli 和 C. Presilla，《物理评论A辑》95, 062112 (2017). [59] T. Macrì、M. Ostilli 和 C. Presilla，《物理评论A辑》95, 042107 2017( ). [60] A. Purkayastha、G. Guarnieri、M. T. Mitchison、R. Filip 和 J. Goold，npj量子信息6 (2020). [61] G. E. Fux、D. Kilda、B. W. Lovett 和 J. Keeling，(2022), 10.48550/ARXIV.2201.05529. [62] A. Purkayastha、G. Guarnieri、S. Campbell、J. Prior 和 J. Goold，《物理评论B辑》104, 045417 (2021). [63] A. M. Lacerda、A. Purkayastha、M. Kewming、G. T. Landi 和 J. Goold，(2022), 10.48550/ARXIV.2206.01090. [64] A. Majumdar、G. Hall 和 A. A. Ahmadi，《控制、机器人与自主系统年度评论》3, 331 2020( ). [65] G. Guarnieri、M. Kol´aˇr 和 R. Filip，《物理评论快报》121，070401 (2018)。

[66] A. S. Trushechkin、M. Merkli、J. D. Cresser 和 J. Anders，AVS Quantum Science **4**，012301（2022）。[67] J. D. Cresser 和 J. Anders，《物理评论快报》**127**，250601（2021）。[68] A. Streltsov、G. Adesso 和 M. B. Plenio，《现代物理评论》**89**，041003（2017）。[69] G. Francica、J. Goold 和 F. Plastina，《物理评论E》**99**，042105 2019( )。[70] J. P. Santos、L. C. C´eleri、G. T. Landi 和 M. Paternostro，npj量子信息**5** (2019)。

[71] V. Narasimhachar 和 G. Gour，《自然·通讯》**6** (2015)。[72] D. Tupkary，`https://github.com/dtupkary/SearchingLindbladians` (2022)。[73] J. Johansson、P. Nation 和 F. Nori，《计算机物理通讯》**183**，1760（2012）。[74] J. Johansson 、 P. Nation 和 F. Nori，《计算机物理通讯》**184**，1234（2013）。