arXiv:2603.04504v1 [quant-ph] 4 Mar 2026

弱耦合区间内，马尔可夫型量子主方程具有指数级精度

Johannes Agerskov* 和 Frederik Nathan†*NNF Quantum Computing Programme, Niels Bohr Institute, University of Copenhagen, Denmark.*(日期：2026年3月6日)

我们研究与一个或多个高斯环境耦合的开放量子系统的演化。我们证明，这类系统可以由马尔可夫量子主方程（MQME）描述，误差仅为一个随系统-浴耦合强度倒数呈指数衰减的修正项。我们给出了该 MQME 的显式表达式，以及其残余修正的严格界，并对一个精确可解模型进行了数值基准测试。该 MQME 通过广义玻恩-马尔可夫近似得到；这一近似可针对系统-浴耦合迭代至任意阶，而我们的误差界随迭代阶数增加渐近收敛至零。因此，我们的结果表明，开放量子系统演化中的非马尔可夫分量虽然可能不可避免，但在弱耦合下可以被指数级抑制。

现实世界中的量子力学系统不可避免地会与周围环境相互作用。这种开放特性是理解量子力学定律如何在自然界中体现的关键 [1–4]。对开放量子系统的描述通常比对其孤立对应系统的描述复杂得多，因为它们没有类似薛定谔方程 [5, 6]的一般闭式运动定律。相反，我们依赖近似方法 [5–29]。要获得开放量子系统的近似描述通常颇具挑战，因为它们的动力学是非马尔可夫型的：要确定系统从某一时刻开始的演化轨迹，需要了解其此前的全部历史。

值得注意的是，有些开放量子系统可以用简单的马尔可夫型运动定律准确描述，从而大大简化对它们的描述。这些运动定律的形式是关于其密度矩阵的线性一阶微分方程——在此称为马尔可夫型量子主方程（*MQME*）。例如，可以通过玻恩-马尔可夫近似或系统与环境耦合方面相关的微扰展开 [7, 14, 22–24]得到 MQME。这些方法产生了多种广泛使用的 MQME，例如布洛赫-雷德菲尔德方程（BRE）、戴维斯方程 [14], 、卷积无关 MQME [9–11, 27–31], ，以及近期提出的非世俗林

布洛赫-雷德菲尔德方程 [19–24, 32]。如此繁多的方法引出了一个问题：*MQME*能以多高的精度刻画开放量子系统的演化?

在本工作中，我们试图回答上述问题。聚焦于广泛相关的高斯环境情形，我们证明，MQME 在弱耦合区间内具有指数精度。具体而言，我们确定了一个 MQME，它能够描述任何与高斯浴耦合的开放量子系统，其误差修正项随系统-浴耦合的倒数呈指数衰减，如$\Gamma e^{-2/\sqrt{\Gamma\tau}}$，其中 Γ 是环境耦合强度和关联时间的特征尺度，定义见公式 (1)–(2)。详情请参见定理1和图 1(a)。因此，开放量子系统的动力学并非只在某个极限下才成立，而是在一个有限参数区间内即可实现，

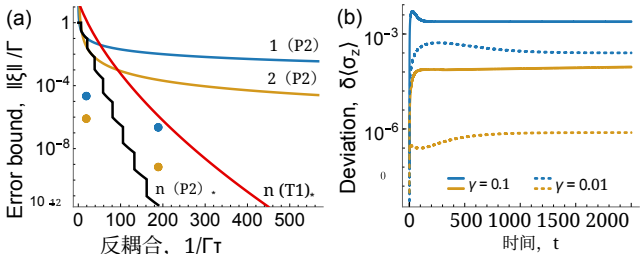

图1. 马尔可夫量子主方程误差的指数抑制。我们证明，任何与高斯浴耦合的开放量子系统都可以用带有耗散子$\Delta_{mn}(t)$的马尔可夫量子主方程来描述，直至有界残余误差 ξ_{mn}，见式(9,10)。在(a)中，我们展示了以 $\Gamma\tau$表示的对 $\|\xi_{nn}\|_{\mathrm{tr}}/\Gamma$ 的界，其中 Γ 和 τ 是式(1-2)中定义的热浴耦合强度与关联时间的尺度。曲线标签表示 n，而P2和T1分别指命题 2和定理1给出的界。如式(13)所定义，$n = n_*$的界随 $1/\sqrt{\Gamma\tau}$呈指数下降。(b) 精确可解自旋-玻色子模型中由 Δ_{11} (•) 和 Δ_{22} (•) 产生的 z自旋误差 $\delta\langle\sigma_z(t)\rangle$ 的演化；详见式(15)下方。(a)中的对应点表示 $t = 10/\gamma$处的 $\delta\langle\sigma_z(t)\rangle/t$ 。

对于几乎所有用途而言，马尔可夫型。

我们在公式 (9) 中给出了具有指数精度的 MQME 的显式表达式。它源于两种展开，这两种展开将传统的玻恩近似和马尔可夫近似推广到系统-浴耦合的任意阶数。这些展开得到的 MQME，其演化会随着展开阶数增加而渐近地收敛于真实动力学。特别地，我们为该族 MQME 得到的偏差界会随展开阶数增加而呈指数下降，直至达到一个最优的有限阶数，即 $n_* \sim 1/\sqrt{\Gamma\tau}$ [参见公式 (13)]；在此处截断便得到具有指数精度的 MQME。我们针对一个精确可解模型对该展开的 MQME 进行了数值基准测试 [参见图 1(b)]。

问题介绍—本文考虑一个量子系统 $\mathcal{S}$ ，其哈密顿量 $H_{\mathcal{S}}(t)$（可能）随时间变化，并与周围的环境或热浴 $\mathcal{B}$耦合，该热浴由 $H_{\mathcal{B}}$ [33]描述。在不失一般性的情况下，

我们将系统–热浴相互作用参数化为 $H_{\rm int}=\sqrt{\gamma}\sum_\alpha X_\alpha\otimes B_\alpha$，其中 X_α 和 B_α 是厄米算符，分别仅作用于 $\mathcal{S}$ 和 $\mathcal{B}$上。我们对每个算符 X_α 进行归一化，使得 $\|X_\alpha\|=1$，其中 $\|\cdot\|$为通常意义上的算符范数。因此，组合系统的哈密顿量为 $H_{\mathcal{SB}}(t)=H_{\mathcal{S}}(t)+H_{\mathcal{B}}+H_{\rm int}$。我们假设在某个初始时刻 t_0，系统处于乘积态 $\rho=\rho_0\otimes\rho_{\mathcal{B}}$，其中 $\rho_{\mathcal{B}}$ 将在下文描述；并令 $\rho_{\mathcal{SB}}(t)$表示该态经由 $H_{\mathcal{SB}}(t)$ 演化后得到的密度矩阵。不失一般性，我们进一步假设 $\mathrm{Tr}[\rho_{\mathcal{B}}B_\alpha]=0$。

我们假设热浴是高斯的，这意味着在从态 $\rho_{\mathcal{B}}$ 出发、经由 H_B 演化后，$\{B_\alpha\}$ 的关联函数满足威克定理 [34]。因此，热浴完全由其关联函数刻画，即 $J_{\alpha\beta}(t-s):=\mathrm{Tr}[\rho_{\mathcal{B}}B_\alpha(t)B_\beta(s)]$,，其中 $\hat{}B_\alpha(t)=e^{iH_Bt}B_\alpha e^{-iH_Bt}$ [35]。为了使下面的展开方案至少在一阶上有效，我们假设 $\|\mathbf{J}(t)\|_{1,1}$ 和 $\|t\mathbf{J}(t)\|_{1,1}$ 在区间 $\mathbb{R}_+=(0,\infty)$ 上勒贝格可积。下文中，$\mathbf{J}(t)$ 表示一个矩阵，其 α,β 元由 $J_{\alpha\beta}(t)$ 给出，并且$\|\mathbf{M}\|_{1,1}=\sum_{a,b}|M_{ab}|$，其中矩阵 $\mathbf{M}$ 的元素为 M_{ab}。

我们关注的是求得系统的约化密度矩阵 $\rho(t):=\mathrm{Tr}_{\mathcal{B}}[\rho_{\mathcal{SB}}(t)]$,，它决定了所有系统可观测量期望值的演化。尽管 $\rho(t)$ 的演化通常是非马尔可夫型的，我们的目标是求得一个微分方程——即一个 MQME——来描述 $\rho(t)$，并尽可能准确地逼近其真实演化。

热浴的关联时间尺度——我们的近似所依据的关键在于$\mathbf{J}(t)$ 的特征幅度和衰减时间尺度。我们将其参数化如下：

定义1。——我们定义相互作用率，Γ，以及浴关联矩，$\{\mu_i\}$，如下：

$$\Gamma=4\gamma\int_{\mathbb{R}_+}dt\,\|\mathbf{J}(t)\|_{1,1}\,,\quad \mu_i=\frac{\int_{\mathbb{R}_+}dt\,\|\mathbf{J}(t)\|_{1,1}t^i}{\int_{\mathbb{R}_+}dt\,\|\mathbf{J}(t)\|_{1,1}}\ \text{for } i\in\mathbb{N}. \tag{1}$$

这里，Γ 定义了系统与热浴之间耦合强度的尺度，[36], 而 $\{\mu_i\}$则定义了热浴关联时间尺度的层级。为简单起见，我们用一个单一时间尺度来概括这一层级：

定义2（关联时间）。——我们将热浴关联时间 τ 定义为满足下式的最小时间尺度：

$$\mu_i<i!\tau^i\quad \text{for } i=1,...,\left\lceil\frac{2}{\sqrt{\Gamma\tau}}\right\rceil. \tag{2}$$

其中 $\lceil\cdot\rceil$ 和 $\lfloor\cdot\rfloor$ 分别表示上取整函数和下取整函数。注意，根据我们对 $\mathbf{J}(t)$ 的假设，$\mu_1\le\tau<\infty$。特别地，对于具有指数衰减关联函数的热浴，若 $\|\boldsymbol{J}(t)\|_{1,1}\le ce^{-k|t|}$，其中常数为 c 和 k，则有 $\Gamma\tau\le 4\gamma c/k$。

预备知识—现在我们将推导一个适用于 $\rho(t)$ 的近似 MQME，并对误差界进行控制。我们首先介绍一些便于使用的记号。

首先，我们的处理采用超算符记法，这种记法强调系统中的算符本身也可以视为希尔伯特空间中的向量。因此，下文有时将算符 A表示为一个 ket：$|A\rangle\!\rangle$，并将希尔伯特-施密特内积记作 $\langle\!\langle A|B\rangle\!\rangle:=\mathrm{Tr}(A^\dagger B)$ [37]。一般而言，我们用花体字母表示超算符，即作用于算符空间的线性算符。一个重要的例外是对应于某个给定算符 O的左乘和右乘的超算符。我们分别用 O^L 和 O^R 表示这两个超算符，使得：$O^L|A\rangle\!\rangle:=|OA\rangle\!\rangle$ 和 $O^R|A\rangle\!\rangle:=|AO\rangle\!\rangle$.

其次，我们将在相互作用绘景中进行讨论，该绘景通过旋转参考系变换 $U_{\mathrm{S}}(t)e^{-iH_Bt}$得到，其中 $U_{\mathrm{S}}(t)=\mathcal{T}e^{-i\int_0^t ds H_{\mathrm{S}}(s)}$，而 $\mathcal{T}$表示时间排序 [38]。在相互作用绘景中，复合系统的哈密顿量写作 $H(t)=\sqrt{\gamma}\sum_\alpha\hat{}X_\alpha(t)\hat{}B_\alpha(t)$，其中$\hat{}X_\alpha(t)=U_S^\dagger(t)X_\alpha U_S(t)$。下文中，我们用 $\hat{}$ 这一标记表示相互作用绘景中的物理量。

我们的推导从相互作用绘景下薛定谔方程所给出的 $\hat{}\rho(t)$ 的精确运动方程开始。用超算符记号表示，该方程为

$$\partial_t|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle=-i\,\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\,\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{\mathcal{U}}(t,t_0)|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_{\mathcal{B}}\rangle\!\rangle, \tag{3}$$

其中，$\hat{}\mathcal{H}(t)=\hat{}H^L(t)-\hat{}H^R(t)$ 是复合系统在相互作用绘景下的刘维尔算符，而 $\mathcal{U}(t,t_0)=\mathcal{T}e^{-i\int_{t_0}^t dt'\hat{}\mathcal{H}(t')}$ 是它所生成的幺正演化超算符。我们可以利用威克定理改写式 (3)，得到 [22]

$$\begin{aligned}\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\,\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{\mathcal{U}}(t,\tau_0)|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_B\rangle\!\rangle=&-\gamma\int_{t_0}^t ds J^{\alpha\beta}_{\nu\mu}(t-s)\\&\times\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\,\hat{X}^\nu_\alpha(t)\hat{\mathcal{U}}(t,s)\hat{X}^\mu_\beta(s)\hat{\mathcal{U}}(s,\tau_0)|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_{\mathcal{B}}\rangle\!\rangle.\end{aligned} \tag{4}$$

其中，$J^{\nu\mu}_{\alpha\beta}(t-s):=\eta_\mu\eta_\nu\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\,\hat{}B^\nu_\alpha(t)\hat{}B^\mu_\beta(s)|\rho_B\rangle\!\rangle$，其中$\eta_L=-\eta_R=1$，是超算符热浴关联函数。在式 (4) 及下文中，我们采用爱因斯坦求和约定：每当指标α，β，μ，ν在同一项中重复出现时，便对其隐式求和。上述表达式在形式上是精确的，并作为我们进行近似的出发点。

广义玻恩近似——我们的第一个近似是一个展开，它用显式记忆核表示 $\partial_t\rho(t)$，其残差在 γ中可达到任意指定阶数的有界值。通过在式（4）中使用恒等式 $\hat{}\mathcal{U}(t,s)=1-i\int_s^t dt'\hat{}\mathcal{H}(t')\hat{}\mathcal{U}(t',s)$，并舍弃由上述第二项产生的部分，即可得到一阶展开。这等价于传统的玻恩近似 [1, 28]。参考文献 [22, 23] 表明，该近似的误差有界于 $\Gamma^2\mu_1$。在此，我们将这一思路加以推广：不在第一次迭代后舍弃残差，而是保留它并递归地进行代换。

忽略进行 n 次此类递归代换后得到的残差，即可得到n阶展开。我们将其称为 n阶玻恩近似。该近似给出一个显式记忆核，因此引出以下定义 [34]:

定义 3 (记忆核）。— 我们将 n 阶记忆核定义为

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_n(t,s) \coloneqq \sum_{k=1}^{n}(-1)^k \int_{t_0}^{t} ds_1 \int_{s_1}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} ds_2 \int_{\min(s_1,s_2)}^{t_2} dt_3 \int_{t_0}^{t_3} ds_3 \dots \\ \times \int_{\min(s_1,\dots,s_{k-1})}^{t_{k-1}} dt_k \int_{t_0}^{t_k} ds_k \delta(s-\min(s_1,\dots,s_k)) \\ \times \mathcal{T}\Big[\prod_{i=1}^{k} J^{\alpha_i\beta_i}_{\mu_i\nu_i}(t_i-s_i)\hat{X}^{\mu_i}_{\alpha_j}(t_j)\hat{X}^{\nu_i}_{\beta_j}(s_j)\Big]. \end{aligned} \tag{5}$$

我们的第一个主要结果是对该记忆核所生成演化的残差修正给出的一个界:

命题 1.— 设 $\hat{\rho}(t)$ 为方程 (3) 的解。那么

$$\partial_t|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle = \int_{t_0}^{t} ds\, \mathcal{K}_n(t,s)|\hat{\rho}(s)\rangle\!\rangle + |\xi_n^{\mathrm{B}}(t)\rangle\!\rangle, \tag{6}$$

其中 $\left\|\xi_n^{\mathrm{B}}(t)\right\|_{\mathrm{tr}} \le \varepsilon_n$，对 t 一致成立，其中

$$\varepsilon_n \coloneqq \Gamma \sum_{(q_i)_{i=1}^n \in \mathcal{W}_n^n} \prod_{i=1}^{n} (\Gamma\mu_{q_i}). \tag{7}$$

这里 $\mathcal{W}_m^n$ 表示将 n 弱组合成 m 个部分所得的集合，即由非负且不必互不相同的整数元组 $(q_1,\dots q_m)$ 构成的集合，其中 $\sum_i q_i = n$。

接下来，我们使用以下引理来说明记忆核 [34] 的衰减:

引理 1.—设 $\mathcal{K}_n$ 为 n阶玻恩核。则 $\int_{t_0}^{t} ds\, \|\mathcal{K}_n(t,s)\|(t-s)^j \le M_n^{\mathrm{B}}[j]$，其中

$$M_n^{\mathrm{B}}[j] \coloneqq \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{(q_i)_{i=0}^k \in \mathcal{W}_{k+1}^{k+j}} \prod_{i=0}^{k} (\Gamma\mu_{q_i}). \tag{8}$$

广义马尔可夫近似—— 虽然式(6)给出了$\hat{\rho}(t)$的显式运动方程，但它是非马尔可夫的，右端依赖于态的历史。为弥补这一点，我们在此引入第二个近似：广义马尔可夫近似，它使式(6)可改写为一项MQME与一个对 γ任意阶有界的残差。为得到这一展开，我们首先由(6)注意到

$$|\hat{\rho}(s)\rangle\!\rangle = |\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle - \int_s^t da \int_{t_0}^{a} db \mathcal{K}_n(a,b)|\hat{\rho}(b)\rangle\!\rangle - \int_s^t db |\xi_n^{\mathrm{B}}(b)\rangle\!\rangle.$$

接下来，我们将上述表达式递归代入上文 $|\hat{\rho}(b)\rangle\!\rangle$ 所在的位置。经过 $m-1$ 次迭代后，丢弃最后一个残余修正，并将所得表达式代入公式（6），即可得到我们展开式的 m 阶；我们将这一近似称为 m阶马尔可夫近似。这一过程得到的 MQME，其耗散子如下:

定义 4 (耗散子).— 我们将(m,n)阶耗散子定义为

$$\begin{aligned}\Delta_{mn}(t) \coloneqq \int_{t_0}^{t} ds_0\, \mathcal{K}_n(t,s_0) \sum_{k=0}^{m-1}(-1)^k \\ \times \prod_{j=1}^{k}\left[\int_{s_{j-1}}^{t} dt_j \int_{t_0}^{t_j} ds_j\, \mathcal{K}_n(t_j,s_j)\right]. \end{aligned} \tag{9}$$

注意， $\Delta_{11}(t)$是相互作用绘景中常规BRE的耗散子。在此意义上， $\Delta_{mn}(t)$将BRE耗散子推广到玻恩(n)近似与马尔可夫(m)近似的任意阶。因此，我们将MQME $\partial_t|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle = \Delta_{mn}(t)|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle$ 称为(m,n)阶*BRE*。 作为我们的第二个主要结果，我们得到该方程的误差界:

命题 2 (最紧界)。— 设 $\hat{\rho}(t)$ 为方程 (3) 的解。则

$$\partial_t|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle = \Delta_{mn}(t)|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle + |\xi_{mn}(t)\rangle\!\rangle, \tag{10}$$

其中，对所有 t，均有

$$\begin{aligned}\|\xi_{mn}(t)\|_{\mathrm{tr}} \le \sum_{(q_i)_1^m \in \mathcal{W}_{m+1}^m} \prod_{l=1}^{m+1} \binom{l-1-\sum_{i=1}^{l-1} q_i}{q_l} M_n[q_l] \\ + \varepsilon_n \sum_{k=0}^{m} \sum_{(q_i)_1^k \in \mathcal{W}_k^k} \prod_{l=1}^{k} \binom{l-\sum_{i=1}^{l-1} q_i}{q_l} M_n[q_l]. \end{aligned} \tag{11}$$

此处， ε_n 和 $M_n[q]$ 定义见方程 (7) 和 (8)，第二个求和中的 $k=0$ 项按约定取 1。

命题 2 使我们能够根据矩 μ_i 估算 (m,n) 阶 BRE 修正项的界。具体而言，在使用 $\mu_i \le i!\tau^i$ 后，我们在图 1(a) 中绘出了上文右端在不同 m,n 下的取值。请注意，由于弱组合的数量呈指数增长，命题 2 中界的计算复杂度会随 m 和 n 急剧增加。利用额外的组合不等式，我们得到一个更简单的界:

引理 2 (简单界)。— 令 $\xi_{mn}(t)$ 表示方程 (10) 中的 (m,n) 阶 BRE 修正项，并令 $\tau_0 \coloneqq \max_{i=1\dots m+n-1}(\mu_i/i!)^{1/i}$. 那么，若 $(m+n-1)\Gamma\tau_0 < 1/4$,

$$\frac{\|\xi_{mn}(t)\|_{\mathrm{tr}}}{\Gamma} \le \sum_{k=0}^{m}(k!)^2(\Gamma\tau_0)^k \frac{\delta_{mk}+n!(4\Gamma\tau_0)^n}{(1-4(m+n-1)\Gamma\tau_0)^{2k+1}}. \tag{12}$$

引理 2 表明，由$\Delta_{mn}(t)$生成的演化会在 m 和 n 下渐近地趋向真实动力学。例如，分子中的第一项

会产生一个按 $(m!)^2(\Gamma\tau_0)^m$ 缩放的项，因此在 m 取有限非零值时该项最小。事实上，选取 m 和 n，使其取相同的、依赖于 $\Gamma\tau$ 的值 n_*，便可以用一个随 $1/\sqrt{\Gamma\tau}$指数衰减的量来界定上述右端。这是我们的第三个主要结果：

定义 5。— 我们定义

$$n_* := \left\lfloor \frac{1+4\Gamma\tau}{\sqrt{\Gamma\tau}+8\Gamma\tau} \right\rfloor. \tag{13}$$

定理 1（*MQME*的指数精度）。— 令$\xi_{n_*n_*}(t)$表示式（10）中定义的 (n_*, n_*) 阶 BRE 的修正项。那么，

$$\frac{\|\xi_{n_*n_*}(t)\|_{\mathrm{tr}}}{\Gamma} \le \exp\left(\frac{-2}{\sqrt{\Gamma\tau}}\frac{1-\sqrt{\Gamma\tau}-4\Gamma\tau}{1+8\sqrt{\Gamma\tau}}+2.13\right). \tag{14}$$

重要的是，上述右端按$e^{-2/\sqrt{\Gamma\tau}}$ 随 $\Gamma\tau \to 0$ 缩放。因此，对于关联函数指数衰减的热浴，其中 $\Gamma\tau \le 4\gamma c/k$，某个 c 和 k [见式（2）下方]，，修正项ξ_{n_*,n_*}至少会以 $e^{-\sqrt{k/c\gamma}}$ 随 $\gamma \to 0$的速度下降。从这个意义上说，对于与关联函数指数衰减的热浴弱耦合的开放量子系统，MQME具有指数精度。

我们在图 1(a) 中用红色绘出了上述界，并同时绘出了命题 2 中针对 $m=n$ 取 1、2 和 n_*时的界，其中使用了 $\mu_i = i!\tau^i$。虽然命题 2 给出的最紧界优于上述简单得多的界，但二者都随$1/\sqrt{\Gamma\tau}$ 呈指数衰减。

数值基准测试——我们针对一个简单且可精确求解的自旋-玻色子模型，对高阶 BRE 及我们的界进行了数值基准测试。我们考虑一个自旋-玻色子模型，其中二能级系统耦合到一个具有洛伦兹功率谱密度的高斯环境。在这种情况下，热浴可精确表示为单个玻色子伪模 [39, 40]：其精确动力学由一个林德布拉德方程描述，该方程对应于由二能级系统和单个玻色模式构成的复合系统：

$$\partial_t\rho_{\mathrm{full}} = -i[H,\rho_{\mathrm{full}}] + L\rho_{\mathrm{full}}L^\dagger - \frac{1}{2}\{L^\dagger L,\rho_{\mathrm{full}}\}, \tag{15}$$

其中 $L=\sqrt{\eta}b$、$H = H_{\mathrm{S}}+H_{\mathrm{B}}+H_{\mathrm{int}}$、$H_{\mathrm{S}} = \Omega\sigma_z$、$H_{\mathrm{B}} = b^\dagger b + 1/2$ $H_{\mathrm{int}} = \sqrt{\gamma}\sigma_x B$ $B = \Omega(\,)$，且 $(b+b^\dagger)/\sqrt{2}$ [41]、σ_i 表示该二能级系统的第 i 个泡利矩阵，b 表示赝模的玻色湮灭算符。通过直接积分上述主方程，可以精确求解该模型。另一方面，可以直接验证，只要将赝模初始化为真空态，$|0\rangle$，上述模型就等价于一个哈密顿量为 H_{S} 的开放量子系统，该系统通过 H_{int} 与高斯环境耦合，其关联函数为 $\hat{B}(t)$ 的表达式为 $J(t) = \frac{1}{2}e^{-(i\Omega+\frac{\eta}{2})t}$ [39, 40]。因此，上述模型可以用于比较高阶 BRE 与真实动力学。我们关注耗散子 $\Delta_{11}(t)$ 和 $\Delta_{22}(t)$，分别将其称为 BRE 和 BRE2。

我们从初态$|\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes |0\rangle\langle 0|$ 出发，针对系统-浴耦合 $\gamma/\Omega = 0.1$ 或$\gamma/\Omega = 0.01$求解动力学，并固定 $\eta = 5.5\Omega$。我们计算自旋极化 $\langle\sigma_z(t)\rangle$随时间的演化，并将 BRE 和 BRE2 与精确数值解 $\langle\sigma_z(t)\rangle_{\mathrm{exact}}$进行比较。图1(b)绘出了自旋极化误差随时间的变化关系，$\delta\langle\sigma_z(t)\rangle := |\langle\sigma_z(t)\rangle - \langle\sigma_z(t)\rangle_{\mathrm{exact}}|$。正如预期，BRE2 的表现优于 BRE，其中 $\delta\langle\sigma_z(t)\rangle$对于 BRE 似乎与 γ 成正比，而对于 BRE2 则似乎与 γ^2 成正比。

接下来，我们将这些数据与命题 2 和定理1给出的界进行比较。具体而言，$\delta\langle\sigma_z(t)\rangle$ 的稳态值受限于 $t_{\mathrm{r}}\|\bar{\xi}_{nm}\|_{\mathrm{tr}}$，其中 $t_{\mathrm{r}} = \|\bar{\Delta}_{mn}^{-1}\|$ 和 $\bar{\Delta}_{mn}$ 以及 $\bar{\xi}_{nm}$ 分别是薛定谔绘景 [42, 43]中 $\Delta_{mn}(t)$ 和 $\xi_{mn}(t)$ 的时间无关稳态值。我们将 $t_{\mathrm{o}} = 10/\gamma$ 的观测到的衰减时间作为 t_{r} 的估计，因此预期 $\delta\langle\sigma_z(t_{\mathrm{o}})\rangle/\Gamma t_{\mathrm{o}} \le \|\xi_{nn}\|_{\mathrm{tr}}/\Gamma$。在图 1(a)中，我们绘出了所考虑的 γ 和 n 两个取值下的 $\delta\langle\sigma_z(t_{\mathrm{o}})\rangle/\Gamma t_{\mathrm{o}}$，并利用洛伦兹功率谱密度的热浴满足 $\Gamma = 8\gamma/\eta$ 和 $\tau = 2/\eta$ 这一条件来确定 x 和 y 的取值。正如预期的那样，这些点都低于我们给出的所有界。

有趣的是，我们的结果表明，相较于 BRE 和 BRE2，精度还有很大的提升空间：对于 $\gamma = 0.1$，命题 2 表明 $\|\xi_{77}\| \le 1.6\times10^{-4}\Gamma$；因此，(7，7) 阶 BRE 的 $\delta\langle\sigma_z(t_r)\rangle$ 稳态值不超过 $1.6\times10^{-4}\Gamma t_{\mathrm{r}}$。同样，对于 $\gamma = 0.01$，我们发现 $\|\xi_{88}\|_{\mathrm{t}}/\Gamma \le 2.3\times10^{-12}$，这意味着 (8，8) 阶 BRE 的 $\delta\langle\sigma_z(t_r)\rangle \le 10^{-12}\Gamma t_{\mathrm{r}}$。请注意，第一个数值显著低于我们针对 $m=n=n_*$ 得到的界（命题 2 和定理1 中均如此）。这表明，我们的展开阶数 n_* 虽然在弱耦合时表现良好，且足以得到定理1中的指数界，但在中等耦合下仍可大幅改进。

讨论— 本文表明，与高斯浴耦合的开放量子系统可以由马尔可夫主方程（MQME）描述，误差仅为一个残余修正项，其大小随系统-浴耦合强度倒数的增加而呈指数衰减。我们得到了该 MQME 的显式表达式，并针对一个精确可解模型进行了数值基准测试。

我们通过广义玻恩近似和马尔可夫近似，从一族 MQME 中推导出指数精确的 MQME；这族方程将 BRE 推广到系统-浴耦合的任意阶。因此，我们的结果给出了一种 MQME 展开，该展开渐近地 趋近于真实动力学；误差界在某个有限阶数处达到最小，而该阶数随 $1/\sqrt{\Gamma\tau}$ 变化。在此处截断后，误差将小到关于 $1/\sqrt{\Gamma\tau}$ 呈指数级。

有趣的是，我们的 MQME 并非林德blad形式，

因此通常无法保持密度矩阵的正性。最近，Ref. [22]通过在标准玻恩–马尔可夫近似的基础上，对算符空间施加可逆的 $\mathcal{O}(\Gamma\tau)$ 变换，严格推导出一个林德布拉德方程，其精度具有 $\Gamma\tau$ [22] 阶的有界修正项。Ref. [44] 随后证明，林德布拉德方程的精度至多只能达到这种 $\mathcal{O}(\Gamma\tau)$ 修正项的程度（例如，另见 Refs. [32, 45]）；而 Ref. [25] 则证明，通过考虑上述算符空间变换，可以绕过这些限制。因此，值得探究我们在此描述的高阶 BRE 能否结合算符空间变换，从而得到一个在系统–环境耦合方面具有更高阶精度的林德布拉德方程。

我们预计，我们的研究成果将为开放量子系统的系统性研究开辟新途径，补充此前关于时间卷积无关主方程的研究 [9, 10, 28, 30], ，为 MQME 中偏离精确动力学的残差提供严格界限，并证明这种偏差相对于系统-浴耦合的倒数可以小到呈指数级。因此，简而言之：开放量子系统并非只在极限条件下才如此，而是在一个有限的参数范围 内，其动力学在几乎所有实际意义上都是马尔可夫型的。

致谢—感谢 Gil Refael、Mark Rudner 和 Peter Zoller 提供的有益讨论。本研究得到诺和诺德基金会（资助编号 NNF22SA0081175）、NNF 量子计算计划以及丹麦电子基础设施联盟（资助编号 4317-00014B）的支持。

* johannes.agerskov@nbi.ku.dk † frederik.nathan@nbi.ku.dk

[1] C. Gardiner 和 P. Zoller, *Quantum Noise: A Handbook of Markovian and Non-Markovian Quantum Stochastic Methods with Applications to Quantum Optics* 3，第 3 版（施普林格，柏林；纽约，2004）。[2] L. H. Delgado-Granados、T. J. Krogmeier、L. M. Sager-Smith、I. Avdic、Z. Hu、M. Sajjan、M. Abbasi、S. E. Smart、P. Narang、S. Kais、A. W. Schlimgen、K. Head-Marsden 和 D. A. Mazziotti, 《化学评论》**125**，1823（2025）。[3] P. Krantz、M. Kjaergaard、F. Yan、T. P. Orlando、S. Gustavsson 和 W. D. Oliver, 《应用物理评论》**6**，021318（2019）。[4] Y. Akamatsu, 《夸克胶子等离子体中的夸克偶素：重新审视开放量子系统方法》（2021）。[5] S. Nakajima, 《理论物理进展》**20**，948（1958）。[6] R. Zwanzig, 《化学物理学杂志》**33**，1338（1960）。[7] A. G. Redfield，载于 *Advances in Magnetic and Optical Resonance*，《磁共振进展》第 1 卷，J. S. Waugh 编（学术出版社，1965），第 1–32 页。[8] R. Feynman 和 F. Vernon, 《物理学年鉴》**24**，118（1963）。[9] R. Kubo, 《数学物理学杂志》4，174（1963）。[10] N. Van Kampen, 《Physica》74，239（1974）。[11] S. Chaturvedi 和 F. Shibata, 《物理学杂志B：凝聚态与量子》35，297（1979）。[12] G. Lindblad, 《数学物理通讯》48，119（1976）。[13] V. Gorini、A. Kossakowski 和 E. C. G. Sudarshan, 《数学物理学杂志》17，821（1976）。[14] E. B. Davies, *Quantum theory of open systems*（学术出版社，伦敦，1976）。[15] Y. Tanimura 和 R. Kubo, 《日本物理学会杂志》58，101（1989）。[16] J. Dalibard、Y. Castin 和 K. Mølmer, 《物理评论快报》68，580（1992）。[17] R. Rosenbach、J. Cerrillo、S. F. Huelga、J. Cao 和 M. B. Plenio, 《新物理学杂志》18，023035（2016）。[18] A. Strathearn、P. Kirton、D. Kilda、J. Keeling 和 B. W. Lovett, 《自然·通讯》9，3322（2018）。[19] G. Kirˇsanskas、M. Francki´e 和 A. Wacker, 《物理评论B》97，035432（2018）。[20] F. Nathan、I. Martin 和 G. Refael, 《物理评论B》99，094311（2019）。[21] D. Davidovi´c, 《Quantum》4，326（2020）。[22] F. Nathan 和 M. S. Rudner, 《物理评论B》102，115109（2020）。[23] E. Mozgunov 和 D. Lidar, 《Quantum》4，227（2020）。[24] A. Trushechkin, 《物理评论A》103，062226（2021）。[25] F. Nathan 和 M. S. Rudner, 《物理评论B》109，205140（2024）。[26] I. de Vega 和 D. Alonso, 《现代物理学评论》89，015001（2017）。[27] A. S. Trushechkin, 《斯捷克洛夫数学研究所论文集》313，246（2021）。[28] H.-P. Breuer、F. Petruccione、H.-P. Breuer 和 F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*（牛津大学出版社，牛津、纽约，2007）。[29] H.-P. Breuer、J. Gemmer 和 M. Michel, 《物理评论E》73，016139（2006）。[30] E. Crowder、L. Lampert、G. Manchanda、B. Shoffeitt、S. Gadamsetty、Y. Pei、S. Chaudhary 和 D. Davidovi´c, 《物理评论A》109，052205（2024）。[31] L. Lampert、S. Gadamsetty、S. Chaudhary、Y. Pei、J. Chen、E. Crowder 和 D. Davidovi´c, 《物理评论A》111，042214（2025）。[32] P. P. Potts、A. A. S. Kalaee 和 A. Wacker, 《新物理学杂志》23，123013（2021）。[33] 请注意，我们并不局限于复合系统（即由 S 和 B 组成的系统）的传统薛定谔演化。我们只要求动力学具有一个能够保持热浴高斯性的超算符生成元。例如，在下一节中，我们考虑一个具有林德布拉德演化基础的系统–热浴，即其中正文中的热浴哈密顿量 H_{B} 被热浴林德布拉德算符所取代，并通过数值计算展示二阶近似的有效性。[34] 详细信息请参见补充材料（SM）。[35] 我们的结果也可直接推广到非平稳热浴，即浴关联函数 $C_{\alpha\beta}(t,\ s)$: $= \mathrm{Tr}[\rho_B \hat{} B_\alpha(t) \hat{} B_\beta(s)]$, 不能写成 $t-s$ 的函数，参见 SM 定义 S.1。[36] 特别地，与本文的研究结果一致，[式（2）], 文献 [22, 23] 表明，$\|\partial_t \hat{} \rho\|_{\mathrm{tr}} \leq \Gamma$，其中 $\hat{} \rho$ 表示相互作用绘景中的密度矩阵，

（定义见下文）。[37] 严格来说，希尔伯特-施密特（HS）内积仅在 HS 算子的空间上定义内积。然而请注意，只要 B 是迹类，$\langle\!\langle I|B\rangle\!\rangle = \mathrm{Tr}(B)$ 就有意义，即使单位算子 I 不是 HS 算子。我们将经常以这种方式对非 HS 算子使用内积记号。[38] 具体而言，$\hat{H}(t)$ 描述密度矩阵 $\hat{\rho}(t) \equiv U_{\mathrm{rf}}(t)\,\rho(t)\,U^{\dagger}{}_{\mathrm{rf}}(t)$ 的演化。[39] A. Imamoglu，《物理评论A》**50**，3650（1994）。[40] M. Xu、V. Vadimov、J. T. Stockburger 和 J. Ankerhold，《现代物理学评论》，（2026）。[41]我们选择 Ω 来控制赝模和自旋的激发能，以尽量减少参数数量。[42] F. Nathan 和 M. S. Rudner，《物理评论B》**109**，205140（2024）。[43] 注意，由于一般而言，$\Delta_{n,n}$ 在无迹算子子空间上是满秩自同构，并且 ξ_{nm} 是无迹的，因此这是定义良好的。[44] D. Tupkary、A. Dhar、M. Kulkarni 和 A. Purkayastha，《物理评论A》**105**，032208（2022）。[45] E. Pyurbeeva 和 R. Kosloff，《新物理学杂志》**28**，014515（2026）。

《马尔可夫量子主方程在弱耦合下具有指数精度》补充材料

Johannes Agerskov 和 Frederik Nathan
2026年3月6日

在本补充材料中，我们给出正文所述结果的技术细节和证明：在 S.I 节中，我们回顾高斯浴的定义性质，并将 Γ、$\{\mu_i\}$ 和 τ 的定义推广到非平稳浴。在 S.II 节中，我们证明正文的命题1（广义玻恩近似）。在 S.III 节中，我们证明正文的引理 S.4（记忆核各阶矩的界）。在 S.IV 节中，我们证明正文的命题 2（广义马尔可夫近似；最紧界）。在 S.V 节中，我们证明正文的引理 2 （广义马尔可夫近似；简化界）。最后，在 S.VI 节中，我们证明正文的定理 1（*MQME*的指数精度）。

S.I：高斯浴

这里回顾高斯浴的定义性质。开放量子系统的热浴——也就是它对系统的影响——可以完全用其初态 ρ_B 以及与系统耦合的时间演化观测量 $\{B_\alpha(t)\}$ 来描述。若这些观测量在态 $\rho_{\rm B}$ 中满足威克定理，我们就称该热浴为 高斯：

$$\langle \hat{B}_1 \hat{B}_2 ... \hat{B}_n \rangle_{\rho_{\rm B}} = \sum_{i=2}^{n} \langle \hat{B}_1 \hat{B}_i \rangle_{\rho_{\rm B}} \langle \hat{B}_2 ... \hat{B}_{i-1} \hat{B}_{i+1} ... \hat{B}_n \rangle_{\rho_{\rm B}}, \tag{S1}$$

其中 $\hat{B}_j \coloneqq \hat{B}_{\alpha_j}(t_j)$，适用于 $j = 1, ..., n$，且 $\langle \cdot \rangle_{\rho_{\mathcal{B}}} \equiv \mathrm{Tr}_{\rm B}[\cdot \rho_{\mathcal{B}}]$。例如，若 $\hat{B}_\alpha(t) \coloneqq e^{iH_{\rm B}t} B_\alpha e^{-iH_{\rm B}t}$，则该热浴为高斯；其中 $H_{\rm B}$ 是玻色模式的二次哈密顿量，每个 B_α 都是模式产生和湮灭算符的线性组合，而 $\rho_{\rm B}$ 是这些模式的高斯态。

高斯浴的一个关键特征是，其对系统的影响完全由其二点关联函数 [S1, S2] 决定

$$C_{\alpha\beta}(t,s) \coloneqq \langle \hat{B}_\alpha(t) \hat{B}_\beta(s) \rangle. \tag{S2}$$

当热浴平稳时（例如 若上述情形中 $[H_{\rm B}, \rho_{\rm B}] = 0$ ），热浴二点关联函数在时间平移下不变，从而我们可以写成

$$C_{\alpha\beta}(t,s) = J_{\alpha\beta}(t-s), \tag{S3}$$

对于函数 $J_{\alpha\beta} : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ ，我们也称之为浴关联函数。为简单起见，我们在正文中考虑这一平稳情形。然而，我们的所有结果都可以直接推广到非平稳浴，只要按如下方式修改正文中 Γ 与 μ_i 的定义：

定义 S.1 （非平稳浴情形下 Γ 与 μ_i 的定义）。 对于非平稳浴，我们定义相互作用率， Γ 与浴关联矩 $\{\mu_i\}$ 为

$$\Gamma \coloneqq 4\gamma \sup_{t\in\mathbb{R}} \int_{-\infty}^{t} ds \left\| \mathbf{C}(t,s) \right\|_{1,1}, \quad \mu_i \coloneqq \frac{\sup_{t\in\mathbb{R}} \int_{-\infty}^{t} ds (t-s)^i \left\| \mathbf{C}(t,s) \right\|_{1,1}}{\sup_{t\in\mathbb{R}} \int_{-\infty}^{t} ds \left\| \mathbf{C}(t,s) \right\|_{1,1}} \text{ for } i \in \mathbb{N}, \tag{S4}$$

其中$\mathbf{C}(t,\ s)$表示（α，β）元由 $C_{\alpha\beta}(t,\ s)$给出的矩阵。

注意，该定义推广了正文中的定义 1，其意义在于：对于平稳热浴，它退化为定义 1。

S.II：命题1的证明：广义玻恩近似

在本节中，我们证明正文中的命题1。具体而言，我们将引入广义玻恩近似，并对其残差进行界定。

我们的出发点是系统约化密度矩阵的精确运动方程 [正文中的式（3）]:

$$\partial_t|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle = -i\,\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\,\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{\mathcal{U}}(t,t_0)|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_{\mathcal{B}}\rangle\!\rangle, \tag{S5}$$

此处 $\hat{\mathcal{H}}(t) = H^L_{\mathcal{SB}}(t) - H^R_{\mathcal{SB}}(t) = \sum_{\mu\in\{L,R\}}\eta_\mu\sum_\alpha \hat{X}^\mu_\alpha(t)\,\hat{B}^\mu_\alpha(t)$ 是复合系统 $\mathcal{SB}$ 的精确刘维尔算符，其中 $\eta_L = -\eta_R = 1$，而 $\hat{\mathcal{U}}(t,\tau_0) = \mathcal{T}e^{-i\int_{t_0}^{t}dt'\,\hat{\mathcal{H}}(t')}$ 是由 $\hat{\mathcal{H}}(t)$ 生成的幺正演化超算符，其中$\mathcal{T}$ 表示时间排序。

As 作为预备步骤，我们注意到 $\hat{\mathcal{U}}(t,t_0)$ 具有如下简单的运动方程

$$\partial_t\hat{\mathcal{U}}(t,t_0) = -i\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{\mathcal{U}}(t,t_0), \tag{S6}$$

其边界条件为 $\hat{\mathcal{U}}(t_0,t_0) = 1$。这进而意味着

$$\hat{\mathcal{U}}(t,t_0) = 1 - i\int_{t_0}^{t} ds\hat{\mathcal{H}}(s)\hat{\mathcal{U}}(s,t_0). \tag{S7}$$

S将其代入方程 (S5)，并运用威克定理 [方程 (S1)], 我们得到 [S3]

$$\partial_t|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle = -\int_{t_0}^{t} ds\sum_{\mu,\nu\in\{L,R\}}\sum_{\alpha,\beta}J^{\alpha\beta}_{\mu\nu}(t-s)\,\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\,\hat{X}^\mu_\alpha(t)\hat{\mathcal{U}}(t,s)\hat{X}^\nu_\beta(s)\hat{\mathcal{U}}(s,t_0)|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_{\mathcal{B}}\rangle\!\rangle, \tag{S8}$$

其中 $J^{\nu\mu}_{\alpha\beta}(t-s) := \eta_\mu\eta_\nu\,\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\hat{B}^\nu_\alpha(t)\,\hat{B}^\mu_\beta(s)|\rho_B\rangle\!\rangle$ 超算符浴关联函数。该结果已在正文的方程 (4) 中引用，并在参考文献 [S3] 中作了描述。下文我们采用正文中引入的爱因斯坦求和约定，其中指标 α,β,μ,ν 在表达式中出现不止一次时隐式求和。

为证明命题1，我们递归地将公式（S7）代入公式（S8），并运用威克定理，通过 $J^{\nu\mu}_{\alpha\beta}(t)$ 表示由此得到的各项。重复这一过程，我们得到以下引理:

引理 S.1. 设 $\hat{\rho}(t)$ 表示一个开放量子系统的约化密度矩阵，其相互作用绘景下的哈密顿量为 $\hat{H}(t) = \sqrt{\gamma}\sum_\alpha \hat{X}_\alpha(t)\,\hat{B}_\alpha(t)$，复合系统的初态为 $|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_{\rm B}\rangle\!\rangle$。那么，对于任意 $n\in\mathbb{N}_0$，$\hat{\rho}(t)$ 满足运动方程

$$\begin{aligned}
\partial_{t_1}|\hat{\rho}(t_1)\rangle\!\rangle =& \sum_{k=1}^{n}(-1)^k\int_{t_0}^{t_1}ds_1\int_{s_1}^{t_1}dt_2\int_{t_0}^{t_2}ds_2\ldots\int_{\min(s_1,\ldots,s_{k-1})}^{t_{k-1}}dt_k\int_{t_0}^{t_k}ds_k\prod_{i=1}^{k}J^{\alpha_i\beta_i}_{\mu_i\nu_i}(t_i-s_i)\\
&\times\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\,\mathcal{T}\Big\{\prod_{j=1}^{k}\hat{X}^{\mu_j}_{\alpha_j}(t_j)\hat{X}^{\nu_j}_{\beta_j}(s_j)\Big\}\hat{\mathcal{U}}(\min(s_1,\ldots,s_k),t_0)|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_{\mathcal{B}}\rangle\!\rangle\\
&-(-1)^n\int_{t_0}^{t_1}ds_1\int_{s_1}^{t_1}dt_2\int_{t_0}^{t_2}ds_2\ldots\int_{\min(s_1,\ldots,s_n)}^{t_n}dt_{n+1}\int_{t_0}^{t_n}ds_{n+1}\prod_{i=1}^{n+1}J^{\alpha_i\beta_i}_{\mu_i\nu_i}(t_i-s_i)\\
&\times\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\,\mathcal{T}\Big\{\Big[\prod_{j=1}^{n+1}\hat{X}^{\mu_j}_{\alpha_j}(t_j)\hat{X}^{\nu_j}_{\beta_j}(s_j)\Big]\hat{\mathcal{U}}(t_{n+1},t_0)\Big\}|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_{\mathcal{B}}\rangle\!\rangle.
\end{aligned} \tag{S9}$$

证明。 我们给出一个归纳证明。

首先，我们证明归纳起始步，即公式（S9）对 $n=0$ 成立。这显而易见：对于 $n=0$，该公式化简为公式（S8）,(S9)而我们已在 [S3] 中证明了这一点。

接下来，我们证明归纳步骤：假设对于某个给定的 $n\geq 0$，公式（S9）成立，现在要证明它对于 $n+1$ 也成立。为此，我们着重改写公式（S9）中的第二项。首先注意到，$\hat{t}_{n+1}\geq\min(s_1、\ldots\ldots s_{n+1}) \geq t_0$ 位于积分的积分域内。此外，利用 $\partial_t\mathcal{U}(t、t') = -i\mathcal{H}(t)\mathcal{U}(t、t')$，我们得到

$$\hat{\mathcal{U}}(t_{n+1},t_0) = \hat{\mathcal{U}}(\min(s_1,\ldots,s_{n+1}),t_0) - i\int_{\min(s_1,\ldots,s_{n+1})}^{t_{n+1}}dt_{n+2}\hat{\mathcal{H}}(t_{n+2})\hat{\mathcal{U}}(t_{n+2},t_0). \tag{S10}$$

将这一结果与威克定理 [公式（S1）], 结合起来，我们得到

$$\begin{aligned}\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\,\mathcal{T}\Big\{\Big[\prod_{j=1}^{n+1}\hat{X}_{\alpha_j}(t_j)\hat{X}_{\beta_j}(s_j)\Big]\hat{\mathcal{U}}(t_{n+1},t_0)\Big\}|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_{\mathcal{B}}\rangle\!\rangle &= \langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\,\mathcal{T}\Big\{\Big[\prod_{j=1}^{n+1}\hat{X}_{\alpha_j}(t_j)\hat{X}_{\beta_j}(s_j)\Big]\hat{\mathcal{U}}(\min(s_1,...,s_{n+1}),t_0)\Big\}|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_{\mathcal{B}}\rangle\!\rangle \\ &\quad-\int_{\min(s_1,\ldots,s_{n+1})}^{t_{n+1}}dt_{n+2}\int_{t_0}^{t_{n+2}}ds_{n+2}J^{\alpha_{n+2}\beta_{n+2}}_{\mu_{n+2}\nu_{n+2}}(t_{n+2}-s_{n+2}) \\ &\quad\times\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\,\mathcal{T}\Big\{\Big[\prod_{j=1}^{n+2}\hat{X}^{m_j}_{\alpha_j}(t_j)\hat{X}^{n_j}_{\beta_j}(s_j)\Big]\hat{\mathcal{U}}(t_{n+2},t_0)\Big\}|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_{\mathcal{B}}\rangle\!\rangle.\end{aligned} \tag{S11}$$

将上述结果代入公式（S9）第二项中 $\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\,\mathcal{T}\Big\{\Big[\prod_{j=1}^{n+1}\hat{X}_{\alpha_j}(t_j)\hat{X}_{\beta_j}(s_j)\Big]\hat{\mathcal{U}}(t_{n+1},\ t_0)\Big\}|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_{\mathcal{B}}\rangle\!\rangle$ 的位置，可得公式（S9）对 $n+1$ 成立。这就证明了归纳步骤，并完成了证明。 □

值得注意的是，公式（S9）右端的两项分别可视为记忆核和残差对 $\partial_t|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle$ 的贡献。这启发我们给出以下定义：

定义 S.2（正文中的定义 *3*： n阶记忆核）。我们将 n阶记忆核定义为

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_n(t,s) \coloneqq \sum_{k=1}^{n}(-1)^k\int_{t_0}^{t}ds_1\int_{s_1}^{t}dt_2\int_{t_0}^{t_2}ds_2\ldots\int_{\min(s_1,\ldots,s_k)}^{t_{k-1}}dt_k\int_{t_0}^{t_k}ds_k\delta(s-\min(s_1,...,s_k)) \\ \times\prod_{i=1}^{k}J_{\alpha_i\beta_i}(t_i-s_i)\mathcal{T}\Big\{\prod_{j=1}^{k}\hat{X}_{\alpha_j}(t_j)\hat{X}_{\beta_j}(s_j)\Big\}.\end{aligned} \tag{S12}$$

定义 S.3 (对 n阶记忆核的修正项**)**。 我们将对 n阶记忆核的残余修正定义为

$$\begin{aligned}|\xi^{\mathrm{B}}_n(t_1)\rangle\!\rangle \coloneqq \int_{t_0}^{t_1}ds_1\int_{s_1}^{t_1}dt_2\int_{t_0}^{t_2}ds_2\ldots\int_{\min(s_1,\ldots,s_n)}^{t_n}dt_{n+1}\int_{t_0}^{t_n}ds_{n+1}\prod_{i=1}^{n+1}\gamma J^{\alpha_i\beta_i}_{\mu_i\nu_i}(t_i-s_i) \\ \times\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\,\mathcal{T}\Big\{\Big[\prod_{j=1}^{n+1}\hat{X}^{\mu_j}_{\alpha_j}(t_j)\hat{X}^{\nu_j}_{\beta_j}(s_j)\Big]\hat{\mathcal{U}}(t_{n+1},t_0)\Big\}|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_{\mathcal{B}}\rangle\!\rangle.\end{aligned} \tag{S13}$$

为了证明这些定义的合理性，我们现在将说明，由 $\mathcal{K}_n(t,\ s)$ 生成的演化与精确演化相比，确实具有由残差 $|\xi^{\mathrm{B}}_n(t)\rangle\!\rangle$ 给出的误差

命题 S.1。 设 $\hat{\rho}(t)$ 为方程 (S5) 的解。那么

$$\partial_t|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle = \int_{t_0}^{t}ds\mathcal{K}_n(t,s)|\hat{\rho}(s)\rangle\!\rangle + |\xi^{\mathrm{B}}_n(t)\rangle\!\rangle, \tag{S14}$$

证明。 这由引理 S.1 和定义 S.2-S.3 直接得出。 □

现在我们要利用积分中的三角不等式来界定残差 $|\xi^{\mathrm{B}}_n(t)\rangle\!\rangle$。为此，我们将用到以下引理：

引理 S.2。 设 X,Y 是复合希尔伯特空间 $\mathscr{H}_{\mathcal{SB}}=\mathscr{H}_{\mathrm{S}}\otimes\mathscr{H}_{\mathrm{B}}$ 上的有界算子，且 M 是 $\mathscr{H}_{\mathcal{SB}}$ 上的迹类算子。那么 $\|\mathrm{tr}_{\mathrm{B}}(XMY)\|_{\mathrm{tr}}\le\|X\|\,\|Y\|\,\|M\|_{\mathrm{tr}}$，其中$\mathrm{tr}_B$表示对 $\mathscr{H}_{\mathrm{B}}$ 的偏迹。

证明。 令 U为 $\mathscr{H}_{\mathrm{S}}$中由 $\mathrm{tr}_{\mathrm{B}}(XMY)$ 的极分解得到的酉算子，即 $\mathrm{tr}_B(XMY) = U\,|\mathrm{tr}_B(XMY)|$，其中 $|A|:=\sqrt{A^\dagger A}$ 表示通常意义上的算子的绝对值。于是

$$\|\mathrm{tr}_{\mathrm{B}}(XMY)\|_{\mathrm{tr}} = \mathrm{tr}_{\mathrm{S}}\left[U^\dagger\,\mathrm{tr}_B(XMY)\right] = \left|\mathrm{tr}_{\mathrm{S}}\left[\mathrm{tr}_B\left([U^\dagger\otimes I]XMY\right)\right]\right|. \tag{S15}$$

根据矩阵（或算子）的标准 $(\infty,1)$–H¨older 不等式，我们得到

$$\left|\mathrm{tr}_{\mathrm{S}}\left[\mathrm{tr}_B\left([U^\dagger\otimes I]XMY\right)\right]\right| \le \left\|U^\dagger\otimes I\right\|\mathrm{tr}\left[|XMY|\right] \le \|X\|\,\|Y\|\,\|M\|_{\mathrm{tr}}. \tag{S16}$$

由此得证。 □

引理 S.3. 设 $k \in \mathbb{N}$ 和 $l \in \mathbb{N}_0$。则

$$\int_{t_0}^{t_1} ds_1 \int_{s_1}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} ds_2 \ldots \int_{\min(s_1,\ldots,s_{k-1})}^{t_{k-1}} dt_k \int_{t_0}^{t_k} ds_k \prod_{i=1}^{k} \left[4\gamma \left\|\mathbf{J}(t_i - s_i)\right\|_{1,1}\right] \max_{j\le k} |t_j - s_j|^l \le \sum_{(q_i)_{i=1}^k \in \mathcal{W}_k^{k+l-1}} \prod_{i=1}^{k} (\Gamma\mu_{q_i}), \tag{S17}$$

其中， $\mathcal{W}_m^n$ 表示将 n 分成 m 部分的弱组合。这里，将 n 分成 m 部分的弱组合是由 m 个非负整数$(l_1, ..., l_m)$ 构成的序列，满足 $\sum_{i=1}^m l_i = n$。注意， $|\mathcal{W}_m^n| = \binom{n+m-1}{m-1}$。

证明。 为方便起见，我们将公式（S17）的左侧记为$I_{k,l}$。

我们通过归纳证明公式（S17）。首先证明归纳起始步，即公式（S17）对$k = 1$成立。为此，注意到当 $k = 1$时，公式（S17）变为

$$I_{1,l} \le \Gamma\mu_l, \tag{S18}$$

根据正文中给出的关于 μ_i 和 Γ 的定义 1，该结果可直接得到，其中定义了 $\mu_l := I_{1,l}/\Gamma$。由此完成归纳起始步。

接下来证明归纳步骤：对于给定的某个 $n > 1$，假设公式（S17）对 $k = n - 1$成立，并尝试证明它对 $k = n$也成立。为此，我们建立关于$I_{k,l}$的递归关系。首先，我们着重对公式（S17）中最内层的两个积分进行界定。为此，我们利用 $\max_{j\le n} |t_j - s_j|^l \le \max_{j\le n-1} |t_j - s_j|^l + \bar{\delta}_{l0} |t_n - s_n|^l$，其中 $\delta_{ab} = 1 - \delta_{ab}$，而 δ_{ab} 为通常的克罗内克 delta。因此，

$$\int_{\min(s_1,\ldots,s_{n-1})}^{t_{n-1}} dt_n \int_{t_0}^{t_n} ds_n\, 4\gamma \left\|\mathbf{J}(t_n - s_n)\right\| \max_{j\le n} |t_j - s_j|^l \le \Gamma \left[\mu_0 \max_{j\le n-1} |t_j - s_j|^l + \bar{\delta}_{l0}\mu_l\right] |t_{n-1} - \min(s_1, ..., s_{n-1})| \,. \tag{S19}$$

这里为方便起见引入了 $\mu_0 = 1$，并利用了 $\int_a^b dx \int_c^x dy |f(x-y)| \le \int_0^\infty dx |f(x)||b-a|$。

接下来注意，对于公式（S17）的积分域，其中 $t_{i-1} \ge t_i$，有 $|t_{n-1} - \min(s_1, \ldots.. s_{n-1})| \le \max_{j\le n-1} |t_j - s_j|$。因此，对于 $t_1 \ge t_2$，$\ldots \ge t_n$，有

$$\int_{\min(s_1,\ldots,s_{n-1})}^{t_{n-1}} dt_n \int_{t_0}^{t_n} ds_n\, 4\gamma \left\|\mathbf{J}(t_n - s_n)\right\| \max_{j\le n} |t_j - s_j|^l \le \Gamma \left[\mu_0 \max_{j\le n-1} |t_j - s_j|^{l+1} + \bar{\delta}_{0l}\mu_l \max_{j\le n-1} |t_j - s_j|\right]. \tag{S20}$$

将其代入 公式（S17）左端最内侧两个积分所在的位置，我们由此得到 d

$$I_{n,l} \le \Gamma\mu_0 I_{n-1,l+1} + \Gamma\mu_l \bar{\delta}_{0l} I_{n-1,1} \tag{S21}$$

根据我们的假设，公式（S17）对 $n-1$ 及任意 l成立，因此可对$I_{n-1,\ j} \le \sum_{(q_i)_{i=1}^{n-1} \in \mathcal{W}_{n-1}^{n+j-2}} \prod_{i=1}^{n-1} (\Gamma\mu_{q_i})$使用 $j \in \{1, l+1\}$。由此可得

$$I_{n,l} \le \Gamma\mu_0 \sum_{(q_i)_{i=1}^{n-1} \in \mathcal{W}_{n-1}^{n+l-1}} \prod_{i=1}^{n-1} (\Gamma\mu_{q_i}) + \Gamma\mu_l \bar{\delta}_{0l} \sum_{(q_i)_{i=1}^{n-1} \in \mathcal{W}_{n-1}^{n-1}} \prod_{i=1}^{n-1} (\Gamma\mu_{q_i}) \tag{S22}$$

将上文的右端改写后，我们得到

$$I_{n,l} \le \sum_{(q_i)_{i=1}^{n} \in \mathcal{W}_{n}^{n+l-1}} (\delta_{0q_n} + \delta_{lq_n} \bar{\delta}_{0l}) \prod_{i=1}^{n} (\Gamma\mu_{q_i}). \tag{S23}$$

利用（$\delta_{0q_n} + \delta_{lq_n}\delta_{0l}$） ≤ 1，即可得到该结果。 □

已经 确立了这些预备引理，我们现在可以证明本节的主要结果 :

命题 S.2（命题 正文中的 n 1：广义玻恩近似）。 对 nth 阶记忆核的残余修正

阶记忆核，$\xi_n^{\mathrm{B}}(t)$，满足界

$$\left\|\xi_n^{\mathrm{B}}(t)\right\|_{\mathrm{tr}} \leq \Gamma \sum_{(q_i)_{i=1}^n \in \mathcal{W}_n^n} \prod_{i=1}^n (\Gamma \mu_{q_i}), \tag{S24}$$

其中，对于 $n=0$，右侧的和按照约定取 1 。

证明。为证明这一点，我们考虑定义 S.3 中 $|\xi_n^{\mathrm{B}}(t)\rangle\!\rangle$ 的定义。利用三角不等式、引理 S.2 以及假设 $\|X_\alpha\|=1$，可得 $\|\langle\!\langle I_{\mathcal{B}}|\, \mathcal{T}\left\{\left[\prod_{j=1}^{n+1} \hat{} X_{\alpha_j}^{\mu_j}(t_j) \hat{} X_{\beta_j}^{\nu_j}(s_j)\right] \hat{} \mathcal{U}(t_{n+1},t_0)\right\}|\rho_0\rangle\!\rangle|\rho_{\mathcal{B}}\rangle\!\rangle\|_{\mathrm{tr}} \leq 1$。将其代入定义 S.3，并结合 $\sum_{\mu,\nu}\sum_{\alpha,\beta}\left|J_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(t)\right| = \sum_{\alpha,\beta} 4\,|J_{\alpha\beta}(t)| = 4\,\|\mathbf{J}(t)\|_{1,1}$，可得

$$\|\xi_n^{\mathrm{B}}(t_1)\|_{\mathrm{tr}} \leq \int_{t_0}^{t_1} ds_1 \int_{s_1}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} ds_2 \ldots \int_{\min(s_1,\ldots,s_n)}^{t_n} dt_{n+1} \int_{t_0}^{t_n} ds_{n+1} \prod_{i=1}^{n+1} 4\gamma \left\|\mathbf{J}(t_i-s_i)\right\|_{1,1}. \tag{S25}$$

如果 $n=0$，则根据 Γ 正文中的定义 1，结论立即成立。如果 $n\geq 1$，我们利用 $\int^{t_n}_{\min(s_1,\ldots,s_n)} dt_{n+1}\int_{t_0}^{t_n} ds_{n+1} 4\gamma\,\|\mathbf{J}(t_{n+1}-s_{n+1})\|_{1,1} \leq \Gamma\,|t_n-\min(s_1,\ldots,s_n)|$ 对最内层的两个积分进行界定，从而得到

$$\int_{\min(s_1,\ldots,s_n)}^{t_n} dt_{n+1} \int_{t_0}^{t_n} ds_{n+1} \prod_{i=1}^{n+1} 4\gamma \left\|\mathbf{J}(t_i-s_i)\right\|_{1,1} \leq \Gamma \prod_{i=1}^{n} 4\gamma \left\|\mathbf{J}(t_i-s_i)\right\|_{1,1} |t_n-\min(s_1,\ldots,s_n)|. \tag{S26}$$

现在，注意到在公式 (S25) 的积分域中，$|t_n-\min(s_1,\ldots,s_n)| \leq \max_{k\leq n}|t_k-s_k|$，我们可以将上面的右端界定为

$$\int_{\min(s_1,\ldots,s_n)}^{t_n} dt_{n+1} \int_{t_0}^{t_n} ds_{n+1} \prod_{i=1}^{n+1} 4\gamma \left\|\mathbf{J}(t_i-s_i)\right\|_{1,1} \leq \Gamma \prod_{i=1}^{n} 4\gamma \left\|\mathbf{J}(t_i-s_i)\right\|_{1,1} \max_{j\leq n}|t_j-s_j|. \tag{S27}$$

现在，结论由此得出 将公式 (S27) 代入公式 (S25)，并利用引理 S.3 以及 $k=n$ 和 $l=1$，即可得到 . □

S.III：引理 1 的证明：记忆核的矩界

这里我们证明正文中的引理 1，该引理给出了 n 阶数记忆核的矩的界。该结果用于证明下一节中的命题 2。

引理 S.4（正文中的引理 1：玻恩核的矩）。对于 j，$n\geq 0$，我们有

$$\int_{t_0}^{t} ds \left\|\mathcal{K}_n(t,s)\right\| (t-s)^j \leq M_n[j], \tag{S28}$$

其中

$$M_n[j] \coloneqq \sum_{k=1}^{n} \sum_{(q_i)_{i=1}^k \in \mathcal{W}_{k+j-1}^k} \prod_{i=1}^{k} (\Gamma \mu_{q_i}). \tag{S29}$$

证明。对于 $n=0$，该界显然成立。因此，设 $n\geq 1$ 根据 n 阶数记忆核的定义 S.2，我们首先注意到

$$\begin{aligned} &\int_{t_0}^{t} ds \left\|\mathcal{K}_n(t,s)\right\| (t-s)^j \leq \\ &\sum_{k=1}^{n} \int_{t_0}^{t} ds_1 \int_{s_1}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_1} ds_2 \ldots \int_{\min(s_1,\ldots,s_k)}^{t_k} dt_k \int_{t_0}^{t_k} ds_k \prod_{i=1}^{k} \left[4\gamma \left\|\mathbf{J}(t_i-s_i)\right\|_{1,1}\right] |t-\min_{i\leq k}(s_i)|^j \end{aligned} \tag{S30}$$

这由三角不等式得出 不等式以及 $\left\| \hat{} X_\alpha^\mu(t) \hat{} X_\beta^\nu(s) J_{\mu\nu}^{\alpha\beta}(t-s)\right\| \leq 4\,\|\mathbf{J}(t-s)\|_{1,\,1}$。式（S29）现可得出

通过使用 $|t-\min^{i\le k}(s_i)|^j \le |\max^{i\le k}(t_i-s_i)|^j$，然后再使用引理 S.3，它将右侧第 k 项界定为$\sum_{(q_i)}$ $\sum_{i=0}^{k}\in\mathcal{W}_k^{j+k-1}\prod_{i=1}^{k}(\Gamma\mu_{q_i})$。 □

S.IV：命题 2 的证明：广义马尔可夫近似

这里我们证明正文中的命题 2。具体而言，我们引入高阶马尔可夫近似，并对其残余修正进行界定。

为了解广义马尔可夫近似的原理，回顾命题 S.1 可知

$$\partial_t|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle = \int_{t_0}^{t} ds\mathcal{K}_n(t,s)|\hat{\rho}(s)\rangle\!\rangle + |\xi_n^{\mathrm{B}}(t)\rangle\!\rangle \tag{S31}$$

由此可得

$$|\hat{\rho}(s)\rangle\!\rangle = |\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle - \int_s^t dt_1\left[\int_{t_0}^{t_1} ds_1\mathcal{K}_n(t_1,s_1)|\hat{\rho}(s_1)\rangle\!\rangle - |\xi_n^{\mathrm{B}}(t_1)\rangle\!\rangle\right]. \tag{S32}$$

我们通过将上述关系递归代入自身m 次、在最后一次迭代时舍弃第二项，并将所得结果代入方程 (S31)，来构造 m 阶广义马尔可夫近似。此过程产生的一部分项定义了一个马尔可夫量子主方程。我们将其余项视为该方程的残余修正。具体而言，作如下定义：

定义 S.4 （定义 *S.* 正文的第 *4* 节：阶数 (m,n) 耗散子。 我们将阶数为 (m,n) 的耗散子定义为

$$\Delta_{mn}(t) \coloneqq \sum_{j=0}^{m-1}(-1)^j\int_{t_0}^{t} ds\int_s^t dt_1\int_{t_0}^{t_1} ds_1\ldots\int_{s_{j-1}}^{t} dt_j\int_{t_0}^{t_j} ds_j\mathcal{K}_n(t,s)\mathcal{K}_n(t_1,s_1)\cdots\mathcal{K}_n(t_j,s_j). \tag{S33}$$

定义 S.5 (阶数为 (m,n) 的耗散子的修正项。 我们将阶数为 (m,n) 的耗散子的残余修正定义为

$$\begin{aligned}|\xi_{mn}(t)\rangle\!\rangle \coloneqq&(-1)^m\int_{t_0}^{t} ds\int_s^t dt_1\int_{t_0}^{t_1} ds_1\ldots\int_{s_{m-1}}^{t} dt_m\int_{t_0}^{t_m} ds_m\mathcal{K}_n(t,s)\mathcal{K}_n(t_1,s_1)\cdots\mathcal{K}_n(t_m,s_m)|\hat{\rho}(s_m)\rangle\!\rangle + |\xi_n^{\mathrm{B}}(t)\rangle\!\rangle\\ &-\sum_{k=0}^{m-1}(-1)^k\int_{t_0}^{t} ds_0\int_{s_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t_1} ds_1\ldots\int_{s_{k-1}}^{t} dt_k\int_{t_0}^{t_k} ds_k\int_{s_k}^{t} dt_{k+1}\mathcal{K}_n(t,s)\mathcal{K}_n(t_1,s_1)\cdots\mathcal{K}_n(t_k,s_k)|\xi_n^{\mathrm{B}}(t_k)\rangle\!\rangle\end{aligned} \tag{S34}$$

为论证这些定义，我们现在证明，由耗散子 $\Delta_{mn}(t)$ 生成的马尔可夫型量子主方程所产生的演化，与精确演化相比，其误差确实为 $|\xi_{mn}(t)\rangle\!\rangle$：

引理 S.5。 设 $\hat{}\rho(t)$ 是方程 (S5) 的解。若 $\Gamma^i\mu_i<\infty$ 对于 $i=1,\ldots,m+n-1$ 均成立，则

$$\partial_t|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle = \hat{\Delta}_{mn}(t)|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle + |\xi_{mn}(t)\rangle\!\rangle \tag{S35}$$

证明。 我们用归纳法证明。

由于 i 归纳开始时，我们首先证明公式（S35）对 $m=0$ 成立。为此，我们注意到 at

$$|\xi_{0n}(t)\rangle\!\rangle = \int_{t_0}^{t} ds\mathcal{K}_n(t,s)|\hat{\rho}(s)\rangle\!\rangle + |\xi_n^{\mathrm{B}}(t)\rangle\!\rangle. \tag{S36}$$

根据命题 S.1，我们将上面的右端识别为 $\lceil\rho(t)\rangle\!\rangle$。因此，公式（S35）对 $m=0$成立，因为$\Delta_{0n}(t)=0$。接下来我们证明归纳步骤。具体而言，我们将证明：若公式（S35）对某个 $m_0\ge 0$的 $m=m_0$ 成立，则它对 $m=m_0+1$ 成立。为此，我们将公式（S32）中的递归关系代入定义 S.5 中 $|\xi_{mn}(t)\rangle\!\rangle$的定义一次，从而重新表示 $\lceil\rho(s_m)\rangle\!\rangle$。我们分别将公式（S32）的第一项和第二项所产生的两个项识别为 $[\Delta_{(m+1)n}(t)-\Delta_{mn}(t)]\lceil\rho(t)\rangle\!\rangle$ 和 $|\xi_{(m+1)n}(t)\rangle\!\rangle$。因此

$$|\xi_{mn}(t)\rangle\!\rangle = [\Delta_{(m+1)n}(t)-\Delta_{mn}(t)]|\hat{\rho}(t)\rangle\!\rangle + |\xi_{(m+1)n}(t)\rangle\!\rangle.$$

由于我们假设公式（S35）对 $m = m_0$成立，通过简单变换可知，它对 $m = m_0 + 1$也成立，证明完毕。

□

在得到修正项 $|\xi_{mn}(t)\rangle\!\rangle$的显式表达式后，接下来我们寻求对其进行界定。为此，我们利用以下引理：

引理 S.6。 阶数为(m, n) 的耗散子 $|\xi_{mn}(t)\rangle\!\rangle$的修正项满足

$$\|\xi_{mn}(t)\|_{\mathrm{tr}} \leq f_n[m,0] + \varepsilon_n \left(1 + \sum_{k=0}^{m-1} f_n[k,1]\right). \tag{S37}$$

其中， ε_n 表示命题 *S.2* 中对 $\left\|\xi_n^{\mathrm{B}}(t)\right\|_{\mathrm{tr}}$ 给出的界，即

$$\varepsilon_n := \Gamma \sum_{(q_i)_{i=1}^n \in \mathcal{W}_n^n} \prod_{i=1}^n (\Gamma \mu_{q_i}), \tag{S38}$$

and

$$f_n[m,j] := \int_{t_0}^t ds \int_s^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} ds_1 \ldots \int_{s_{m-1}}^t dt_m \int_{t_0}^{t_m} ds_m \left\| \mathcal{K}_n(t,s)\mathcal{K}_n(t_1,s_1)\cdots\mathcal{K}_n(t_m,s_m)(t-s_m)^j \right\|. \tag{S39}$$

证明。 该结果可直接由对式 (S34) 使用三角不等式，结合超算符范数的次乘法性质，以及命题 S.2 所保证的 $\left\|\int_{s_k}^t dt_k |\xi_n^{\mathrm{B}}(t_k)\rangle\!\rangle\right\|_{\mathrm{tr}} \leq |t - s_k|\varepsilon_n$ 这一事实得到。

□

现在我们通过建立这些函数之间的递归关系，来寻求对 $f_n[m,j]$ 的界。

引理 S.7。 如式 (S39) 所定义，函数 $f_n[m,j]$ 满足

$$f_n[m,j] \leq \sum_{k=0}^{j} \binom{j}{k} f_n[0,k] f_n[m-1, j-k+1]. \tag{S40}$$

证明。 首先注意到，在式 (S39) 中积分的积分域上， $s_{m-1} \leq t_m$ 和 $s_m \leq t_m$，这意味着$t - s_m \leq (t - s_{m-1}) + (t_m - s_m)$。结合三角不等式和二项式展开使用这一事实，即可得到该引理。

□

推论 S.1。 对于 j， $m \in \mathbb{N}_0$，令 $f_n[m,j]$ 如上定义。则

$$f_n[m,j] \leq \sum_{k_1,\ldots k_m=0}^{\infty} M_n\left[j + m - \sum_{i=1}^m k_i\right] \prod_{l=1}^m \binom{j + l - 1 - \sum_{i=1}^{l-1} k_i}{k_l} M_n[k_l]. \tag{S41}$$

其中 $M_n[j]$ 在式 (S29) 中定义，并且我们约定：当 $b > a$ 时取 $\binom{a}{b} = 0$，当 $a < 0$ 时取相应值。

证明。 这可直接通过归纳法得到：对于 $m = 0$，式 (S41) 化为 $f_n[0,j] \leq M_n[j]$，而根据引理 S.4，该式成立。然后，假设对于某个 $m_0 \geq 0$，式 (S41) 对 $m = m_0$ 成立，则通过将式 (S41) 代入式 (S40) 并使用 $f_n[0,j] \leq M_n[j]$，即可直接证明它对 $m = m_0 + 1$ 也成立。

□

结合命题 S.2、引理 S.6 和推论 S.1，我们现在可以证明正文中的命题 2，这正是本节的目标。

命题 S.3 （正文命题 2：广义马尔可夫近似，最紧界）。 对于 m， $n \geq 0$，阶数为 $(m,\ n)$ 耗散子 $|\xi_{mn}(t)\rangle\!\rangle$ 的残余修正满足

$$\|\xi_{mn}(t)\|_{\mathrm{tr}} \leq \sum_{(q_i)_1^m \in \mathcal{W}_{m+1}^m} \prod_{l=1}^{m+1} \binom{l - 1 - \sum_{i=1}^{l-1} q_i}{q_l} M_n[q_l] + \varepsilon_n \sum_{k=0}^{m} \sum_{(q_i)_1^k \in \mathcal{W}_k^k} \prod_{l=1}^{k} \binom{l - \sum_{i=1}^{l-1} q_i}{q_l} M_n[q_l]. \tag{S42}$$

其中，第二个求和中的 $k=0$ 项根据约定为1， $M_n[j]:=\sum_{k=1}^{n}\sum_{(q_i)_{i=1}^{k}\in\mathcal{W}_{k+j-1}^{k}}\prod_{i=1}^{k}(\Gamma\mu_{q_i})$。在正文的式 (S29) [式 (8) 中定义]，而 $\varepsilon_n=\Gamma\sum_{(q_i)_{i=1}^{n}\in\mathcal{W}_n^n}\prod_{i=1}^{n}(\Gamma\mu_{\ell_i})$ 表示命题 *S.2* 中的玻恩误差界。

证明。结合引理 S.6 和推论 S.1，我们得到

$$\begin{aligned}\|\xi_{mn}(t)\|_{\mathrm{tr}}\le&\sum_{q_1,\dots q_m=0}^{\infty}M_n\left[m-\sum_{i=1}^{m}q_i\right]\prod_{l=1}^{m}\binom{l-1-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_l}M_n[q_l]\\&+\varepsilon_n\left(1+\sum_{a=0}^{m-1}\sum_{q_1,\dots q_a=0}^{\infty}M_n\left[a+1-\sum_{i=1}^{a}q_i\right]\prod_{l=1}^{a}\binom{l-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_l}M_n[q_l]\right)\end{aligned}\tag{S43}$$

现在注意到，式 (S42) 的右端与上文的右端相同：为此，先考察式 (S42) 右端的第一项。我们有 $\sum_{(q_i)_1^m\in\mathcal{W}_{m+1}^m}=\sum_{q_1,\dots q_{m+1}}\delta[x-\sum_{i=1}^{m+1}q_i]$ 其中 $\delta[0]=1$，并且 $\delta[x]=0$ 当 $x\neq 0$时。此外，$\binom{l-1-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_{m+1}}=1$ 当 $l=m+1$时。进行这些代换后，对 q_{m+1} 求和，便可得到式 (S43) 的第一项。运用同样的论证，我们可以确认式 (S42) 的第二项与式 (S43) 的第二项相同。因此，式 (S42) 和式 (S43) 的右端相同，结论由此立即得出。

□

S.V：引理 2 的证明： $|\xi_{mn}(t)\rangle\!\rangle$**上的简化界。**

本节证明正文中的引理 2，即对 (m,n) 阶耗散子 $|\xi_{mn}(t)\rangle\!\rangle$ 的修正项范数给出一个简化界。

我们的推导首先根据下文引理 2 [引理 S.9 的假设]中定义的时间尺度 τ_0，对命题 S.3 中的前因子 $M_n[j]$ 和 ε_n 进行界定。随后，我们利用这一结果证明正文中的引理 2 [下文的命题 S.4]。

W我们首先给出一个简单的引理，稍后将用它来界定一个组合求和 w.

引理 S.8。设 $0\le x<1$。则

$$\sum_{k=0}^{n-1}\binom{j+k}{j}x^k\le\frac{1}{(1-x)^{j+1}}.\tag{S44}$$

证明。我们首先利用 $(1-x)\sum_{k=0}^{n-1}\binom{j+k}{j}x^k\le 1+\sum_{k=1}^{n-1}\left[\binom{j+k}{j}-\binom{j+k-1}{j}\right]x^k$，得到

$$(1-x)\sum_{k=0}^{n-1}\binom{j+k}{j}x^k\le\sum_{k=0}^{n-1}\binom{j-1+k}{j-1}x^k,$$

其中我们使用了 $\binom{a}{b}-\binom{a-1}{b}=\binom{a-1}{b-1}$。因此，通过归纳法可得

$$(1-x)^j\sum_{k=0}^{n-1}\binom{j+k}{j}x^k\le\sum_{k=0}^{n-1}\binom{k}{0}x^k.$$

由于 $\binom{k}{0}=1$，我们将上面的右端识别为 $\frac{1-x^n}{1-x}$。使用 $1-x^n\le$ 即可得到该结果 1. □

做好这些准备后，我们现在可以对 $M_n[j]$ 进行界定：

引理 S.9. 设 $\tau_0>0$，并令 $M_n[j]:=\sum_{k=1}^{n}\sum_{(q_i)_{i=1}^{k}\in\mathcal{W}_k^{j+k-1}}\prod_{i=1}^{k}(\Gamma\mu_{q_i})$ 表示阶数为 n 的玻恩核的第 j 阶矩的界，其定义见式 (S29)。对于满足 $\mu_i<i!\tau_0^i$（对 $i=1\dots j+n-1$ 与 $4\Gamma\tau_0[n+j-1]<1$）的高斯浴，我们有

$$M_n[j]\le\frac{j!\Gamma\tau_0^j}{(1-4(j+n-1)\Gamma\tau_0)^{j+1}},\tag{S45}$$

证明. 注意，对于 $k \le n$，我们有 $q_i \le j+n-1$（对 $(q_1, \dots q_k) \in \mathcal{W}_k^{j+k-1}$）。因此，根据我们关于 $\mu_i < i!\tau_0^i$（对 $i = 1 \dots j+n-1$）的假设，对上述 $M_n[j]$ 定义中出现的所有弱组合，我们有 $\mu_{q_i} < q_i!\tau_0^{q_i}$。于是，

$$M_n[j] \le \sum_{k=1}^{n} \Gamma^k \tau_0^{j+k-1} \sum_{(q_i)_{i=1}^k \in \mathcal{W}_k^{j+k-1}} \prod_{i=1}^{k} q_i!. \tag{S46}$$

接下来，我们利用 $a!b! \le (a+b)!$ 和 $|\mathcal{W}_a^b| = \binom{a+b-1}{b}$，并将求和变量 k 平移 1，得到

$$M_n[j] \le \Gamma \tau_0^j \sum_{k=0}^{n-1} (j+k)! (\Gamma\tau_0)^k \binom{j+2k}{j+k}. \tag{S47}$$

现在注意到，上述求和中有 $k \le n-1$，因此 $(j+k)! \le j!(j+n-1)^k$。此外，$\binom{j+2k}{j+k} \le \binom{2k}{k}\binom{j+k}{j} \le 4^k \binom{j+k}{k}$，其中第一个不等式可利用 $\frac{j+1+2k}{j+1+k} \le \frac{j+1+k}{j+1}$，对 j 使用归纳法轻松证明。因此，

$$M_n[j] \le j!\Gamma\tau_0^j \sum_{k=0}^{n-1} \binom{j+k}{k} [4(j+n-1)\Gamma\tau_0]^k \tag{S48}$$

现在我们应用引理 S.8，即可得到所需结果。 □

在对 $M_n[j]$ 给出界之后，接下来我们要对 ε_n 给出界：

引理 S.10。 设 $\tau_0 \ge 0$，并令 ε_n 如正文中的式 (7) 所定义，即 $\varepsilon_n := \sum_{(q_i)_{i=1}^n \in \mathcal{W}_n^n} \prod_{i=1}^n \Gamma\mu_i$。对于满足 $\mu_i < i!\tau_0^i$（其中 $i = 1$、$\dots n$）的高斯浴，我们有

$$\varepsilon_n \le \Gamma(4\Gamma\tau_0)^n n!. \tag{S49}$$

证明。 我们首先注意到，根据我们关于 $\{\mu_i\}$、$\mu_{q_i} \le q_i!\tau_0^{q_i}$ 的假设，对于 $\mathcal{W}_n^n$ 中的所有弱组合（q_1，$\dots q_n$）均成立。此外，$\sum_i q_i = n$。将其代入上面定义 ε_n 的求和式中，我们得到

$$\varepsilon_n \le \Gamma^{n+1}\tau_0^n \sum_{(q_i)_{i=1}^n \in \mathcal{W}_n^n} \prod_{i=1}^{n} q_i!. \tag{S50}$$

接下来，我们使用 $\prod_i q_i! \le (\sum_i q_i)!$ 以及 $|\mathcal{W}_n^n| = \binom{2n-1}{n}$，得到

$$\varepsilon_n \le \Gamma^{n+1}\tau_0^n n! \binom{2n-1}{n}. \tag{S51}$$

使用 $\binom{2n-1}{n} \le 4^n$ 后即可得到式 (S49)。 □

现在，我们将对 ε_n 和 $M_n[j]$ 的界代入命题 S.3，得到一个界 $\|\xi_{mn}(t)\|_{\mathrm{tr}}$，从而建立本节的主要结果。在此过程中，我们需要对代入后式 (S42) 中剩余的组合因子的乘积进行界定。为此，我们建立弱组合集合的以下有用性质：

引理 S.11。 对于 $j \in \{0, 1\}$，我们有

$$\sum_{(q_i)_1^{m+j} \in \mathcal{W}_{m+j}^m} \prod_{l=1}^{m+j} \binom{l-j-\sum_{i=1}^{l-1} q_i}{q_i} = m! \tag{S52}$$

证明。 要看出这一结果，请注意

$$\sum_{(q_i)_1^{m+j} \in \mathcal{W}_{m+j}^m} \prod_{l=1}^{m+j} \binom{l-j-\sum_{i=1}^{l-1} q_i}{q_l} = \sum_{q_1, \dots q_{m+j}=0}^{\infty} \delta\left[m - \sum_{i=1}^{m+j} q_i\right] \prod_{l=1}^{m+j} \binom{l-j-\sum_{i=1}^{l-1} q_i}{q_l} \tag{S53}$$

注意，上述乘积中的最后一个（$l=m+j$）因子为 **1**，因为要使上面右端的求和项非零， q_{m+j} 必须等于 $m-\sum_{i=1}^{m+j-1} q_i$。因此，对 q_{m+j} 求和可得

$$\sum_{(q_i)_1^{m+j}\in\mathcal{W}_{m+j}^m}\prod_{l=1}^{m+j}\binom{l-j-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_l}=\sum_{q_1,\dots q_{m+j-1}=0}^{\infty}\prod_{l=1}^{m+j-1}\binom{l-j-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_l} \tag{S54}$$

现在我们注意到

$$\sum_{q_1\dots q_k=0}^{\infty}\prod_{l=1}^{k}\binom{l-1+a-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_l}=k!(k+1)^a. \tag{S55}$$

使用 $\sum_{k=0}^{\infty}\binom{n}{k}m^{n-k+1}=m(m+1)^n$ 时，可通过归纳法得到这一结论。将上述关系代入式 **(S55)**，取 $k=m+j-1$ 和 $a=1-j$，并注意到对于 $j\in\{0,1\}$，$(m+j-1)!(m+j)^{1-j}=m!$，即可得到式 **(S53)**。 □

做好这些准备后，我们现在可以证明正文中的引理 2：

命题 S.4 (简化界). 设 $0<\Gamma\tau_0<\frac{1}{4}$，并令 n、$m\in\mathbb{N}_0$ 满足 $4\Gamma\tau_0[n+m-1]\leq 1$。对于满足 $\mu_i<i!\tau_0^i$（$i=1,\dots,m+n-1$）的高斯浴，我们有

$$\frac{\|\xi_{mn}(t)\|_{\mathrm{tr}}}{\Gamma}\leq\frac{[(m-1)!+1]m!(\Gamma\tau_0)^m}{(1-4\Gamma\tau_0(m+n-1))^{2m+1}}+n!(4\Gamma\tau_0)^n\sum_{k=0}^{m}\frac{[(k-1)!+1]k!(\Gamma\tau_0)^k}{(1-4\Gamma\tau_0(m+n-1))^{2k}}. \tag{S56}$$

对于所有 $t\in(t_0,\infty)$，根据约定，$(-1)!=0$。正文中的引理 *2* 可直接由上述内容结合 $1-4\Gamma\tau_0(m+n-1)\leq 1$ 和 $(k-1)!+1\leq k!$ 得出。

证明。 我们首先考虑情形 $n=0$。注意，对于 $n=0$，右端大于 Γ；而 $\mathcal{K}_0(t,s)=0$，因此 $|\xi_{m0}(t)\rangle\!\rangle=\partial_t|\rho(t)\rangle\!\rangle$。于是，对于 $n=0$，上述界显然成立，因为根据参考文献 [S3]（另见公式 **(4)**），$\|\partial_t|\rho(t)\rangle\!\rangle\|_{\mathrm{tr}}\leq\Gamma$。

接下来考虑 $n\geq 1$ 的情形。我们要对命题 S.3 的右端进行估计。首先重点估计此处出现的 M_n 的因子。为此，令

$$(q_1,\dots q_a)\in\mathcal{W}_a^b$$

对于某些稍后将选定的 $b\leq m$ 和 $a\geq 1$。注意，根据我们的假设，$q_i\leq b\leq m+n-1$ 对所有 $i=1,\dots,a$ 以及 $n\geq 1$ 和 $b\leq m$ 都成立。因此，对所有 $l=1,\dots a$，$\mu_{q_l}\leq q_l!\tau_0^{q_l}$。此外，由于我们假设 $4\Gamma\tau_0[m+n-1]\leq 1$，特别地，对所有 l、$4\Gamma\tau_0[q_l+n-1]\leq 1$ 和 $i=1,\dots q_l+n-1$，有 $\mu_i\leq i!\tau_0^i$。这意味着引理 S.9 适用于每个 l 对应的 $M_n[q_l]$，从而得到：

$$M_n[q_l]\leq\frac{q_l!\Gamma\tau_0^{q_l}}{(1-4(m+n-1)\Gamma\tau_0)^{m+k}}. \tag{S57}$$

利用 $(q_1,\dots q_a)\in\mathcal{W}_a^b$ 的 $\sum_l q_l=b$，我们由此得到

$$\prod_{l=1}^{a}M_n[q_l]\leq\frac{(\prod_{l=1}^{a}q_l!)\Gamma^a\tau_0^b}{(1-4(m+n-1)\Gamma\tau_0)^{a+b}}. \tag{S58}$$

现在我们要对乘积 $\prod_{i=1}^{k}q_i!$ 进行界定。首先考虑 $(q_1,\dots q_a)$ 属于弱组合 $(q_1,\dots q_a)$ 的子集 $\mathcal{S}_a^b\subseteq\mathcal{W}_a^b$ 的情形，其中对于恰好一个 l 的取值，$q_l=b$ 成立（对于其他所有 l 的取值，$q_l=0$ 均成立）。在这种情形下，我们得到 $\prod_i q_i!=b!$，因此

$$\prod_{l=1}^{a}M_n[q_l]\leq\frac{b!\Gamma^a\tau_0^b}{(1-4(m+n-1)\Gamma\tau_0)^{a+b}}\quad\text{for}\quad(q_1,\dots q_a)\in\mathcal{S}_a^b. \tag{S59}$$

另一方面，如果 $(q_1,\dots q_a)$不属于这个子集，也就是说，属于 $\bar{\mathcal{S}}_a^b=\mathcal{W}_a^b/\mathcal{S}_a^b$，那么对于至少两种 l 的选择，必有 $q_l\geq 1$。在这种情况下，我们有 $\prod_i q_i!\leq(q-1)!$ 这可以利用 $\alpha!\,\beta!\leq(\alpha+\beta-1)!$ 在 $\alpha,\beta\geq 1$ 时证明，并且

$\alpha!\ \beta!$ 如果 $\alpha,\beta\geq 0$，则有 $\leq(\alpha+\beta)!$ 因此，

$$\prod_{l=1}^{a} M_n[q_l] \leq \frac{(b-1)!\Gamma^a\tau_0^b}{(1-4(m+n-1)\Gamma\tau_0)^{a+b}} \quad \text{for} \quad (q_1,\dots q_k)\in\bar{\mathcal{S}}_a^b. \tag{S60}$$

接下来，我们将上述结果代入命题 S.3，其中 $a=m+1$ 和 $b=m$ （对应第一项），以及 $a=b=k$（对应第二项），得到

$$\begin{aligned}\|\xi_{mn}(t)\|_{\mathrm{tr}} \leq{}& \frac{m!\Gamma^{m+1}\tau_0^m}{(1-4(m+n-1)\Gamma\tau_0)^{2m+1}} \sum_{(q_i)_1^{m+1}\in S_{m+1}^m}\prod_{l=1}^{m+1}\binom{l-1-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_l}\\ &+\frac{(m-1)!\Gamma^{m+1}\tau_0^m}{(1-4(m+n-1)\Gamma\tau_0)^{2m+1}} \sum_{(q_i)_1^{m+1}\in \bar{\mathcal{S}}_{m+1}^m}\prod_{l=1}^{m+1}\binom{l-1-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_l}\\ &+\varepsilon_n\sum_{k=0}^{m}\frac{k!\Gamma^k\tau_0^k}{(1-4(m+n-1)\Gamma\tau_0)^{2k}} \sum_{(q_i)_1^{k}\in \mathcal{S}_{k}^k}\prod_{l=1}^{k}\binom{l-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_l}\\ &+\varepsilon_n\sum_{k=0}^{m}\frac{(k-1)!\Gamma^k\tau_0^k}{(1-4(m+n-1)\Gamma\tau_0)^{2k}} \sum_{(q_i)_1^{k}\in \bar{\mathcal{S}}_{k}^k}\prod_{l=1}^{k}\binom{l-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_l}.\end{aligned} \tag{S61}$$

注意，根据我们的约定，$\binom{\alpha}{\beta}=0$ 对于 $\alpha<0$，在 $\mathcal{S}_{m+1}^m$ 中恰好有一个元素使得 $\prod_{l=1}^{m+1}\binom{l-1-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_l}$ 非零，即满足以下条件的弱组合：$q_l=0$ 对于 $l\leq m$，且 $q_{m+1}=m$。对于这个弱组合，乘积的值为 1。同样，在 $\mathcal{S}_k^k$ 中恰好有一个元素使得 $\prod_{l=1}^{k}\binom{l-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_l}\neq 0$，即满足以下条件的弱组合：$q_k=k$，且 $q_l=0$ 对于 $l\leq k-1$。利用这一结果以及 $\bar{\mathcal{S}}_a^b\subseteq\mathcal{W}_a^b$这一事实，我们得到

$$\begin{aligned}\|\xi_{mn}(t)\|_{\mathrm{tr}} \leq{}& \frac{\Gamma^{m+1}\tau_0^m}{(1-4(m+n-1)\Gamma\tau_0)^{2m+1}}\left[m!+(m-1)!\sum_{(q_i)_1^{m+1}\in\mathcal{W}_{m+1}^m}\prod_{l=1}^{m+1}\binom{l-1-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_l}\right]\\ &+\varepsilon_n\sum_{k=0}^{m}\frac{\Gamma^k\tau_0^k}{(1-4(m+n-1)\Gamma\tau_0)^{2k}}\left[k!+(k-1)!\sum_{(q_i)_1^{k}\in\mathcal{W}_{k}^k}\prod_{l=1}^{k}\binom{l-\sum_{i=1}^{l-1}q_i}{q_l}\right].\end{aligned} \tag{S62}$$

现在，引理 S.11 使我们能够将括号内的求和分别识别为 $m!$ 和 $k!$。结合引理 S.10 所给出的 $\varepsilon_n\leq\Gamma(4\Gamma\tau_0)^n n!$，我们得到了式 (S56)，这正是我们要证明的结果。 □

S.VI：定理1的证明

我们终于可以证明最后一个结果：正文中的定理1，该定理说明马尔可夫型量子主方程在弱耦合区间具有指数精度。

定理 S.1 (正文中的定理1：MQME的指数精度)。令 n_* 表示定义 *5* 中的整数。阶数为 (n_*,n_*) 的耗散子的残余修正 $|\xi_{n_*n_*}(t)\rangle\!\rangle$ 满足

$$\|\xi_{n_*n_*}(t)\|_{\mathrm{tr}} < \exp\left(-\frac{2}{\sqrt{\Gamma\tau}}\frac{1-\sqrt{\Gamma\tau}-4\Gamma\tau}{1+8\sqrt{\Gamma\tau}}+2.13\right) \tag{S63}$$

证明。我们首先根据给定的 $\Gamma\tau$，证明关于浴矩 $\{\mu_i\}$ 的一个有用事实，这将使我们能够利用上文得到的引理和命题。回顾一下，我们有

$$n_* \coloneqq \left\lfloor\frac{1+4x^2}{x+8x^2}\right\rfloor, \tag{S64}$$

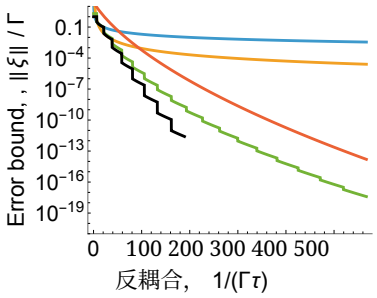

图 S1. **证明公式 (S63) 成立的数值数据，适用于** $\sqrt{\Gamma\tau} \geq 0.042\,(1/\Gamma\tau \leq 567)$。 *Green:* 由公式 (S67) 得出的 $\|\xi_{nn}\|_{\rm tr}$ 界限。 *Red*: 公式 (S63) 的右端。为方便起见，我们还绘出了正文图1中的其他曲线：蓝色和橙色分别表示命题 S.3 给出的 $\|\xi_{nn}\|_{\rm tr}$ 界限，对应于 $n = 1$，2。黑色曲线表示命题 S.3 对部分区间内的 $\|\xi_{nn}\|_{\rm tr}$ 给出的界限。这里我们利用了，对于 $i = 1, \ldots n_*$，有 $\mu_i \leq i!\tau_\circ$

为方便起见，我们在此处及下文中使用简写 $x = \sqrt{\Gamma\tau}$。由此可知 $2n_* - 1 \leq 2/x$。现在，根据正文中定义 2 的 τ的定义，我们有 $\mu_i \leq i!\tau^i$，其中 $i = 1, \ldots \lceil 2/x \rceil$。因此，

$$\mu_i \leq i!\tau^i \quad \text{for} \quad i = 1, \ldots 2n_* - 1. \tag{S65}$$

现在我们着手证明公式 (S63)。我们将证明分为两部分，分别考虑 $x > 0.042$ 和$x \leq 0.042$ 的情形。

我们首先利用命题 S.3，通过直接数值计算证明公式 (S63) 对 $x > 0.042$ 成立。为避免命题 S.3 中涉及的指数多项所带来的计算成本，我们考虑一个稍微放宽的界。具体而言，根据命题 S.3，我们注意到

$$\|\xi_{n_*n_*}(t)\|_{\rm tr} \leq n_*! \max_{(q_i)_1^{n_*} \in \mathcal{W}_{n_*+1}^{n_*}} \left(\prod_{j=1}^{n_*+1} M_{n_*}[q_j] \right) + n_*! \binom{2n_* - 1}{n_*} (\Gamma\tau)^{n_*} \sum_{k=0}^{n_*} k! \max_{(q_i)_1^k \in \mathcal{W}_k^k} \left(\prod_{j=1}^{k} M_{n_*}[q_j] \right). \tag{S66}$$

其中我们还用到了引理 S.11 和公式 (S51)。我们可以利用公式 (S51)，因为 $\mu_i \leq i!\tau^i$ for $i = 1, \ldots 2n_* - 1$ 意味着该结果的条件在 [S4] 下得到满足。为了对上述结果进行数值估计，我们利用 $M_{n_*}[q] \leq c_{n_*}[q]$for $q \leq n_*$，其中

$$c_{n_*}[q] \coloneqq \Gamma\tau^q \sum_{k=0}^{n_*-1} (q+k)!(\Gamma\tau)^k \binom{q+2k}{q+k}.$$

此结果可通过在 $n = n_*$、$j = q$ 和 $\tau_0 = \tau$ 的情况下使用公式 (S47) 得出，因为公式 (S65) 表明，当 $q \leq n_*$ [S5] 时，公式 (S47) 的条件得到满足。利用此界，我们得到

$$\|\xi_{n_*n_*}(t)\|_{\rm tr} \leq n_*! \max_{(q_i)_1^{n_*} \in \mathcal{W}_{n_*+1}^{n_*}} \left(\prod_{j=1}^{n_*+1} c_{n_*}[q_j] \right) + n! \binom{2n_* - 1}{n_*} (\Gamma\tau)^{n_*} \sum_{k=0}^{n_*} k! \max_{(q_i)_1^k \in \mathcal{W}_k^k} \left(\prod_{j=1}^{k} c_{n_*}[q_j] \right). \tag{S67}$$

我们通过直接搜索弱组合的集合来求得上述最大值。与命题 S.3 相比，计算复杂度大幅降低，因为求最大值时只需考虑有序弱组合的集合，从而使搜索空间呈指数级缩小。在图 S1 中，我们绘制了公式 (S67) 右端随 $1/x^2 = 1/\Gamma\tau$ 变化的曲线，其中 $x \geq 0.042$ （即 $0 \leq 1/\Gamma\tau \leq 567$），并将其与公式 (S63) 的右端进行比较。直接观察可知，在所绘区间内，公式 (S63) 的右端始终是公式 (S67) 右端的上界，这表明公式 (S63) 对 $x \geq 0.042$成立。

接下来，我们证明公式 (S63) 对 $x \leq 0.042$成立。为此，首先注意到， $x \leq 0.042$ 显然意味着$\Gamma\tau = x^2 < 1/4$。此外，根据上文 n_* 的定义，也很容易验证，对于 $x \leq 0.042$,

$$4\Gamma\tau[2n_* - 1] \leq 1. \tag{S68}$$

这一事实结合方程 （S65）表明，我们可以利用命题 S.4 来界定 $\|\xi_{mn}(t)\|_{\rm tr}$，其中 $\tau_0 = \tau$

和 $m = n = n_*$。因此，

$$\frac{\|\xi_{n_* n_*}(t)\|_{\mathrm{tr}}}{\Gamma} \leq \frac{[(n_*-1)!+1]n_*!x^{2n_*}}{(1-4(2n_*-1)x^2)^{2n_*+1}} + n!(4x^2)^n \sum_{k=0}^{n_*} \frac{[(k-1)!+1]k!(x^2)^k}{(1-4(2n_*-1)x^2)^{2k}}. \tag{S69}$$

我们首先着重对第一项进行上界估计。为此，我们使用斯特林近似（上界） [S6] ，其指出

$$n_*! \leq \sqrt{2\pi n_*} e^{-n_* + \frac{1}{12n_*}} n_*^{n_*}, \tag{S70}$$

并且，等价地，由于 $(n-1)! = n!/n$，

$$(n_*-1)! = n_*!/n_* \leq \sqrt{2\pi/n_*} e^{-n_* + \frac{1}{12n_*}} n_*^{n_*}. \tag{S71}$$

此外，可以 很容易验证，对于 $n_* \geq 17$，有 $x \leq 0.042$，这意味着 $(n_*-1)!+1 \leq \frac{16!+1}{16!}(n_*-1)!$。因此 ce

$$\frac{[(n_*!-1)!+1]n_*!(x^2)^{n_*}}{(1-4(2n_*-1)x^2)^{2n_*}} \leq 2\pi \frac{16!+1}{16!} e^{-2n_* + \frac{1}{6n_*}} \left(\frac{xn_*}{1-4(2n_*-1)x^2}\right)^{2n_*}. \tag{S72}$$

现在，我们利用 $n_* = \lfloor g(x) \rfloor$，其中

$$g(x) = \frac{1+4x^2}{x+8x^2}.$$

因此，特别地， $n_* \leq g(x)$，这意味着

$$\frac{xn_*}{1-4(2n_*-1)x^2} \leq \frac{xg(x)}{1-4(2g(x)-1)x^2}. \tag{S73}$$

不难验证，我们对 $g(x)$ 的选择确保了上式右端恰好为 1：

$$\frac{g(x)x}{1-4(2g(x)-1)x^2} = 1, \tag{S74}$$

这意味着

$$\frac{xn_*}{1-4(2n_*-1)x^2} \leq 1. \tag{S75}$$

将其代入公式（S72），我们得到

$$\frac{[(n_*!-1)!+1]n_*!(x^2)^{n_*}}{(1-4(2n_*-1)x^2)^{2n_*}} \leq 2\pi \frac{16!+1}{16!} e^{-2n_* + \frac{1}{6n_*}}. \tag{S76}$$

这就给出了公式（S69）中第一项的界。

接下来，我们寻求对公式（S69）中的第二项进行界定。首先，我们着重简化关于 k 的求和。为此，由公式（S75）可知

$$\frac{[(k-1)!+1]k!(x^2)^k}{(1-4(2n_*-1)x^2)^{2k}} \leq \frac{[(k-1)!+1]k!}{n_*^{2k}} \tag{S77}$$

接下来我们使用斯特林近似，求得对于 $1 \leq k \leq n_*$,

$$\frac{[(k-1)!+1]k!(x^2)^k}{(1-4(2n_*-1)x^2)^{2k}} \leq 2\pi e^{-2k + \frac{1}{6k}} \left(\frac{k}{n_*}\right)^{2k} + 2\pi e^{-k + \frac{1}{12k}} \left(\frac{k}{n_*}\right)^{k+1/2} \left(\frac{1}{n_*}\right)^{k-1/2}. \tag{S78}$$

因此，根据我们的约定，由于上式左侧在 $k=0$ 时的值为 1，我们得到，

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^{n_*}\frac{[(k-1)!+1]k!(x^2)^k}{(1-4(2n_*-1)x^2)^{2k}} &\le 1+\sum_{k=1}^{n_*}2\pi\left[e^{-2k+\frac{1}{6k}}+(en_*)^{-k}e^{1/12}\sqrt{n_*}\right]\\ &\le 2\pi\left[e^{1/6}\sum_{k=0}^{n_*}e^{-2k}+e^{1/12}\sqrt{n_*}\sum_{k=1}^{n_*}(en_*)^{-k}\right]\\ &\le\frac{2\pi e^{1/6}}{1-e^{-2}}+\frac{2\pi e^{1/12}\sqrt{n_*}}{en_*-1}.\end{aligned}\tag{S79}$$

这就为公式（S69）中的第二项建立了一个界。

我们已在公式（S76）和（S79）中分别为公式（S69）的两项建立了界，现在将这两个界合并，得到

$$\frac{\|\xi_{n_*n_*}(t)\|_{\rm tr}}{2\pi\Gamma}\le\frac{16!+1}{16!}\frac{e^{-2n_*+\frac{1}{6n_*}}}{1-4(2n_*-1)x^2}+n_*!(4x^2)^{n_*}\left[\frac{e^{1/6}}{1-e^{-2}}+\frac{e^{1/12}\sqrt{n_*}}{en_*-1}\right].\tag{S80}$$

接下来，我们使用 $n_*\le g(x)$ 和公式（S74），由此可得

$$(1-4x^2(2n_*-1))\ge(1-4x^2(2g(x)-1))=xg(x).$$

这使我们能够进一步简化：

$$\frac{\|\xi_{n_*n_*}(t)\|_{\rm tr}}{2\pi\Gamma}\le\frac{16!+1}{16!}\frac{e^{-2n_*+\frac{1}{6n_*}}}{g(x)x}+n_*!(4x^2)^{n_*}\left[\frac{e^{1/6}}{1-e^{-2}}+\frac{e^{1/12}\sqrt{n_*}}{en_*-1}\right].\tag{S81}$$

接下来，我们再次使用斯特林近似，对 $n_*!$ 进行界定，从而得到

$$\frac{\|\xi_{n_*n_*}(t)\|_{\rm tr}}{2\pi\Gamma}\le\frac{16!+1}{16!}\frac{e^{-2n_*+\frac{1}{6n_*}}}{g(x)x}+\sqrt{2\pi n_*}e^{-n_*+\frac{1}{12n_*}}(4x^2n_*)^{n_*}\left[\frac{e^{1/6}}{1-e^{-2}}+\frac{e^{1/12}\sqrt{n_*}}{en_*-1}\right].\tag{S82}$$

再次利用 $g(x)-1\le n_*\le g(x)$，我们得到

$$\frac{\|\xi_{n_*n_*}(t)\|_{\rm tr}}{2\pi\Gamma}\le\frac{16!+1}{16!}\frac{e^{-2n_*+\frac{1}{6[g(x)-1]}}}{g(x)x}+\sqrt{2\pi g(x)}e^{-n_*+\frac{1}{12}}(4x^2n_*)^{n_*}\left[\frac{e^{1/6}}{1-e^{-2}}+\frac{e^{1/12}\sqrt{g(x)}}{e[g(x)-1]-1}\right].\tag{S83}$$

接下来，我们提取一个 e^{-2n_*} 的前因子，从而得到

$$\frac{\|\xi_{n_*n_*}(t)\|_{\rm tr}}{2\pi\Gamma}\le e^{-2n_*}\left(\frac{16!+1}{16!}\frac{e^{\frac{1}{6[g(x)-1]}}}{g(x)x}+\sqrt{2\pi g(x)}e^{n_*(1+\log[4x^2n_*])+\frac{1}{12}}\left[\frac{e^{1/6}}{1-e^{-2}}+\frac{e^{1/12}\sqrt{g(x)}}{e[g(x)-1]-1}\right]\right).\tag{S84}$$

现在，我们再次使用 $g(x)-1\le n_*\le g(x)$。因此，上面的括号项的上界为

$$\begin{aligned}\max\Bigg\{&\frac{16!+1}{16!}\frac{e^{\frac{1}{6[g(x)-1]}}}{g(x)x}+\sqrt{2\pi g(x)}e^{g(x)(1+\log[4x^2g(x)])+\frac{1}{12}}\left[\frac{e^{1/6}}{1-e^{-2}}+\frac{e^{1/12}\sqrt{g(x)}}{e[g(x)-1]-1}\right],\\ &\frac{16!+1}{16!}\frac{e^{\frac{1}{6[g(x)-1]}}}{g(x)x}+\sqrt{2\pi g(x)}e^{[g(x)-1](1+\log[4x^2g(x))])+\frac{1}{12}}\left[\frac{2\pi e^{1/6}}{1-e^{-2}}+\frac{2\pi e^{1/12}\sqrt{g(x)}}{e[g(x)-1]-1}\right]\Bigg\}.\end{aligned}\tag{S85}$$

直接计算可得，上式在 $0\le x\le 0.042$ 时有界于 $e^{2.13}/2\pi$。因此，对于 $x\le 0.042$,

$$\frac{\|\xi_{n_*n_*}(t)\|_{\rm tr}}{\Gamma}\le e^{-2n_*+2.13}\tag{S86}$$

最后我们指出，

$$n_* \geq g(x) - 1 = \frac{1}{x}\left(\frac{1-x-4x^2}{1+8x}\right). \tag{S87}$$

Thus

$$\frac{\|\xi_{n_* n_*}(t)\|_{\mathrm{tr}}}{\Gamma} \leq \exp\left[-\frac{2}{x}\left(\frac{1-x-4x^2}{1+8x}\right) + 2.13\right]. \tag{S88}$$

因此，公式 (S63) 对 $x \leq 0.042$ 也成立，证明至此完成。 □

---

*johannes.agerskov@nbi.ku.dk † frederik.nathan@nbi.ku.dk[S1] R. Feynman 和 F. Vernon, 《物理学年鉴》**24**, 118 (1963)。[S2] G. Park、Z. Huang、Y. Zhu、C. Yang、G. K.-L. Chan 和 L. Lin, 《物理评论B》**110**, 195148 (2024)。[S3] F. Nathan 和 M. S. Rudner, 《物理评论B》**102**, 115109 (2020)。[S4] 也就是说，$\mu_i \leq i!\tau^i$ 对于 $i = 1, \ldots n_*$。具体而言，请注意，如果 $n = 0$，这两个条件显然都成立；而对于 $2n_* - 1 \geq n_*$，则有 $n_* \geq 1$。[S5] 具体来说，公式 (S47) 仅假设 $\mu_i < i!\tau_0^i$ 对于 $i = 1 \ldots j + n - 1$。取 $\tau_0 = \tau$、$j = q$ 和 $n = n_*$ 时，这些条件均满足，因为对于 $i = 1 \ldots 2n_* - 1$，有 $\mu_i \leq i!\tau^i$；同时 $n \leq n_*$，且 $q \leq n_*$。[S6] H. Robbins, 《美国数学月刊》**62**, 26 (1955)。

---

* johannes.agerskov@nbi.ku.dk †
frederik.nathan@nbi.ku.dk