

ARTICLE INFO

摘要

Keywords:

完全正性和迹保持性, Kraus 形式
高阶, 积分因子, Lindblad 主方程

我们设计了高阶精确的方法, 在利用密度矩阵中的低秩结构的同时, 尊重 Lindblad 方程的基本结构。我们的方法保持完全正性并且是保迹的。

我们关注的是密度矩阵 $\rho(t) \in \mathbb{C}^{N \times N}$ 的演化, 它是一个单位迹对称半正定 (SPSD) 矩阵, 描述了一个量子系统的状态 (例如, 一个量子计算机), 其中 ρ 受 Lindblad 方程 [1] 的支配

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H\rho(t) - \rho(t)H] + \mathcal{L}_D\rho(t), \quad \rho(0) = \rho_0. \quad (1)$$

这里 H 是哈密顿量, 而 \mathcal{L}_D 的形式为

$$\mathcal{L}_D\rho(t) = \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha} \left(L_{\alpha}\rho(t)L_{\alpha}^{\dagger} - \frac{1}{2}(L_{\alpha}^{\dagger}L_{\alpha}\rho(t) + \rho(t)L_{\alpha}^{\dagger}L_{\alpha}) \right). \quad (2)$$

在这里我们仅考虑时间独立的 H 和 L_{α} 。为了记号上的方便, 我们考虑具有单一的 α 和 $\gamma_{\alpha} = 1$ 的情况, 那么我们有

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H\rho(t) - \rho(t)H] + \left(L\rho(t)L^{\dagger} - \frac{1}{2}(L^{\dagger}L\rho(t) + \rho(t)L^{\dagger}L) \right). \quad (3)$$

我们的目标是设计高阶准确的方法, 在利用 ρ 中的低秩结构的同时尊重 Lindblad 方程的基本结构。Lindblad 方程的一个显著特征是其对 ρ 的演化保持完全正性 (CP) 和保迹性 (TP) [2]。Choi 定理 (参见例如 [2]) 表示: 一个线性映射 \mathcal{G} 是 CP 当且仅当它可以表示为

$$\mathcal{G}\rho = \sum_l G_l^{\dagger}\rho G_l,$$

这提供了一种构建保留 CP 的数值方法的方式。令 $\rho^n \approx \rho(t_n)$ 为时间 t_n 处密度矩阵的近似值, 并定义一个数值方法为将 ρ^n 映射到 ρ^{n+1} 的克劳斯映射 \mathcal{G} , 即

$$\rho^{n+1} \equiv \mathcal{G}\rho^n = \sum_l G_l^{\dagger}\rho^n G_l.$$

这样的方法显然是 CP, 通过在每个时间步结束时归一化 $\rho^{n+1} \leftarrow \rho^{n+1} / \text{Tr}(\rho^{n+1})$ 可以保持迹的保真性。

设计 CPTP 方案是一项非平凡的任务。例如, 众所周知, [3], 没有显式的龙格-库塔方法是 CP 的。因此, 在设计 Kraus 形式的数值方案上花费了大量精力。在这方面的一项开创性工作是 [4], 其中使用了泰勒级数展开技术, 并提供了定义直到四阶精度方案的显式公式。后续的工作 [5, 6, 7] 基于各种技术, 包括杜哈梅原理和随机展开原则。虽然上述方案很有趣, 但我们注意到, 在推导这些方案时所使用的技巧使得构建高阶准确方案变得有些复杂。

进一步, 在许多量子系统中, 特别是低熵的那些系统中, 密度矩阵的一个显著属性是可以用低秩技术有效地近似。低秩性质被认为与“弱耦合到环境的系统, 或者从纯态初始化的动力学早期阶段的

<Corresponding author

✉ appel@vt.edu (D. Appelö); yingda@vt.edu (Y. Cheng)

ORCID(s): 0000-0002-0378-4563 (D. Appelö); 0000-0003-3229-2979 (Y. Cheng)

系统”相关 [8] (关于低秩性的进一步示例和动机, 请参见 [8])。当存在低秩结构时, 可以并且应该利用它来加速模拟并减少内存占用。此外, 如本文后面所示, Kraus 形式与低秩结构很好地配合, 并且可以直接对低秩 Cholesky 因子进行操作。在文献中, 一种用于演化低秩结构的标准方法是时间依赖变分原理 (TDVP) [9]。TDVP 已经在 [10, 8] 中实现以近似低秩密度矩阵的时间演化。TVDP 的主要思想是在低秩矩阵流形上投影方程的解进行演化。然而, 由于 Lindbladian 在一般情况下投影到低秩密度矩阵流形上的切线可能不是 Lindbladian, 根据作者所知, 从 TDVP 得出 CP 性质的数值方案是不可能的。

针对这些挑战, 我们在此提出一种不同的、系统且直接的方法来构建 Lindblad 方程的高阶 CPTP 低秩方案。我们的方法使用积分因子 (IF) 方法 (或 Lawson 方法 [11]), 并产生一类只要 Butcher 表中的条目满足易于验证的约束条件就将是 CP 的高阶积分器。我们的方案可以以完整形式或低秩形式使用。在低秩形式中, 我们使用所谓的低秩步截断 (在物理学文献中也称为集合截断 [12, 13] 或特征值截断 [14])。该方法使用截断奇异值分解 (SVD), 我们在本文中证明它也是一种 CP 映射。因此, 结合 IF 和步截断, 我们获得了一类高阶低秩 CPTP 方案。

积分因子诱导的 CP 方案

如下所示例如 [4] 我们用一个有效的哈密顿量 J 重写 (3)

$$\frac{d}{dt}\rho.t/ = (J\rho.t/ + \rho.t/J^\xi) + L\rho.t/L^\xi \equiv \mathcal{L}_J\rho.t/ + \mathcal{L}_L\rho.t/, \quad (4)$$

其中 $J = *iH_{\text{eff}}$, $H_{\text{eff}} = H + \frac{1}{2i}L^\xi L$. 算子 \mathcal{L}_L 已经是克劳斯形式, 因此设计 CP 方案的关键是对算子 \mathcal{L}_J 的适当离散化。

我们的方案始于将 (4) 重写, 使用积分因子, 作为

$$\frac{d}{dt}.e^{*\mathcal{L}_J t}\rho/ = e^{*\mathcal{L}_J t}\mathcal{L}_L\rho. \quad (5)$$

注意, $e^{*\mathcal{L}_J t}$ 对 ρ 和 $\mathcal{L}_L\rho$ 进行操作, 这两个都是半正定矩阵。

在定义方案之前, 出于即将揭晓的原因, 我们考虑矩阵 $e^{\mathcal{L}_J t}$ 对一个半正定矩阵 $q.t/$ 的作用。这样的矩阵允许进行乔列斯基分解 $q.t/ = V.t/V.t/^\xi$ 。一个时间步长后, 在时间 $t+t$, 我们有 $q.t+t/ = e^{\mathcal{L}_J t}q.t/$, 这也可以表示为 $q.t+t/ = V.t+t/V.t+t/^\xi$ 。这里, 由于

$$\frac{d}{dt}q.t/ = Jq.t/ + q.t/J^\xi, \quad (6)$$

和

$$\frac{d}{dt}V.t/ = JV.t/, \quad (7)$$

的等价性, 我们得到 $V.t+t/ = U.t/V.t/$, 其中 $U.t/$ 是精确的流算子 e^{Jt} 。请注意, $q.t+t/ = U.t/q.t/U.t/^\xi$, 处于 Kraus 形式, 因此是 CP 的。进一步注意, 即使使用近似流 $\hat{U}.t/$ (例如通过数值方案求解 (7)), 更新 $q.t+t/ = \hat{U}.t/q.t/\hat{U}.t/^\xi$ 仍然会是 CP。

在定义我们的方法之前, 我们回顾一下用于常微分方程系统

$$\frac{dy.t/}{dt} = f.t, y/, \quad (8)$$

的 s 阶, k 阶显式 RK 方法的定义, 该方法由一个 Butcher 表格 $\mathbf{A}, \mathbf{b}, \mathbf{c}/$ 使用时间步长 t 来表征。设 y_0 为当前解, 则下一时间步的近似解由

$$y_1 = y_0 + t \sum_{i=1}^s b_i f.t_0 + c_i t, y^{i/}/ \quad y^{i/} = y_0 + t \sum_{j=1}^{i*1} a_{ij} f.t_0 + c_j t, y^{j/}/, \quad i = 1, \S, s.$$

给出。将 RK 方法应用于 (5) 得到

$$e^{*\mathcal{L}_J t}\rho_1 = \rho_0 + t \sum_{i=1}^s b_i e^{*\mathcal{L}_J c_i t}\mathcal{L}_L\rho^{i/} \quad e^{*\mathcal{L}_J t}\rho^{i/} = \rho_0 + t \sum_{j=1}^{i*1} a_{ij} e^{*\mathcal{L}_J c_j t}\mathcal{L}_L\rho^{j/}, \quad i = 1, \S, s.$$

重新整理项并使用流算子 $U \cdot /$, IF 方法对 (4) 由此给出为

$$\begin{aligned}\rho^{i/} &= U \cdot c_i t / \rho_0 U \cdot c_i t / \mathbb{L} + t \sum_{j=1}^{i*1} a_{ij} U \cdot c_i * c_j / t / \mathcal{L}_L \rho^{j/} U \cdot c_i * c_j / t / \mathbb{L}, \quad i = 1, \mathbb{S}, s, \\ \rho_1 &= U \cdot t / \rho_0 U \cdot t / \mathbb{L} + \sum_{i=1}^s b_i t U \cdot 1 * c_i / t / \mathcal{L}_L \rho^{i/} U \cdot 1 * c_i / t / \mathbb{L},\end{aligned}\quad (9)$$

其形式符合 Kraus 形式, 因此只要 \mathbf{b}, \mathbf{A} 的元素非负, 则它就是 CP (例如经典四阶龙格库塔方法和所有强稳定性保持方法都是这种情况)。为了完整指定该方案, 应定义流算子 $U \cdot \tau / V$ 。除了通过矩阵指数计算的确切流动之外, 我们还可以使用 k 阶泰勒级数方法, 其中导数 $\frac{d^m V}{dt^m}, m = 1, \mathbb{S} k$ 递归地从 (7) 计算得出。使用泰勒级数方法的理由是整体精度阶由基本的 RK 方案决定, 因此无需更精确地近似流动。我们注意到也可以用隐式方法如梯形法来近似流算子。

截断 SVD 是一个 CP 映射

方案 (9) 可以通过低秩截断实现, 该截断基于 k 个低秩矩阵 $\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_1^\mathbb{L} + \mathbb{S} \mathbf{R}_k \mathbf{R}_k^\mathbb{L}$ 的和, 其中包含 $\mathbf{R}_j \in \mathbb{C}^{N r_j}$ 。假设 $\mathbf{W} = [\mathbf{R}_1, \mathbb{S}, \mathbf{R}_k]$, 则 $\mathbf{R} = \mathbf{W} \mathbf{W}^\mathbb{L}$ 和低秩截断 $\mathcal{T}_{\epsilon, r_{\max}}[\mathbf{R}]$ 定义为根据秩阈值 r_{\max} 和能量截止值 ϵ 对 \mathbf{R} 进行的截断奇异值分解 (SVD)。在实践中, 可以通过以下程序高效地实现这一点。计算枢轴 QR 分解 $\mathbf{Q} \mathbf{R} = \mathbf{W}$, 然后计算小矩阵 $\mathbf{R} = \hat{\mathbf{U}} \hat{\mathbf{V}}^\mathbb{L}$ 的 SVD。则 $\mathcal{T}_{\epsilon, r_{\max}}[\mathbf{R}] = \hat{\mathbf{W}} \hat{\mathbf{W}}^\mathbb{L}$, 其中 $\hat{\mathbf{W}} = \mathbf{Q} \hat{\mathbf{U}} \cdot, 1 : r / . 1 : r, 1 : r /$, $r = \min . r_\epsilon, r_{\max} /$, 和 r_ϵ 是最小的整数使得 $\sum_{j=r_\epsilon+1}^N \sigma_j^2 \leq \epsilon^2$ 。

重要的是, 在以下定理中, 我们证明了截断 SVD 是一个 CP 映射。

定理 1. 截断 SVD 算子 $\mathcal{T}_{\epsilon, r_{\max}}[A]$, 其中 A 是 SPSSD, 处于 Kraus 形式, 因此是一个 CP 映射。

证明. 由于 A 是半正定的, 其奇异值分解具有形式 $A = \underbrace{U U^\mathbb{L}}_r$, 和 $\mathcal{T}_{\epsilon, r_{\max}}[A] = U D D^\mathbb{L} U^\mathbb{L}$ 其中 $D = \text{diag} . 1, \mathbb{S} 1, 0 \mathbb{S}, 0 /$ 。因此, $\mathcal{T}_{\epsilon, r_{\max}}[A] = U D U^\mathbb{L} A \cdot U D U^\mathbb{L} / \mathbb{L}$ 处于 Kraus 形式。 \square

CPTP 低秩 IF 方案

我们现在准备展示 IF 方案的低秩版本 (9)。从 $V_0 \in \mathbb{C}^{N r}$ 开始, 对于 i 阶段中的 s 形成一个高瘦矩阵 $W^{i/}$, 其列是

$$U \cdot c_i t / V_0, \text{ and, when } i > 1, \text{ columns } \sqrt{t a_{i,j}} U \cdot c_i * c_j / t / L V^{j/}, \quad j = 1, \mathbb{S}, i * 1.$$

然后对 $W^{i/}$ 、 $\mathcal{T}_{\epsilon, r_{\max}}[W^{i/}]$ 进行低秩截断以获得 $V^{i/}$ 。下一个时间步的解通过形成矩阵 W 而找到, 其列是

$$U \cdot t / V_0, \quad \sqrt{b_i t} U \cdot 1 * c_i / t / L V^{i/}, \quad i = 1, \mathbb{S}, s.$$

接着进行截断

$$V_1 V_1^\mathbb{L} = \mathcal{T}_{\epsilon, r_{\max}}[W W^\mathbb{L}].$$

最后, 经过重新归一化 $\rho_1 \leftarrow \rho_1 / \text{Tr} . \rho_1 /$, 这定义了一类高阶低秩 CPTP 方案。截断可以与用户预设的 ϵ 和 $r_{\max} = \emptyset$ 一起使用, 或者与用户预设的 r_{\max} 和 $\epsilon = 0$ 一起使用。在第一种情况下, 当使用 9 的 k^* 阶 Runge-Kutta 方法时, 合适的选择是 $\epsilon \dot{t}^{k+1}$ 。

我们强调该方法的以下特点。对于低秩方案, 我们只需要存储低秩因子, 例如 $V_0, V^{i/}$, 而从不需存储完整的密度矩阵。这意味着如果秩因子较低, 我们将显著减少内存占用和计算成本。我们还强调迹重正规化将保持原始离散化的精度阶。

可选截断

我们注意到, 在形成 $W^{i/}$ 和 W 时, 可以在执行上述截断之前, 对具有 $\mathcal{O} . \sqrt{t} /$ 前因子的列进行更激进的 $\epsilon \dot{t}^k$ 截断。虽然增加的截断步骤会提高形成 $W^{i/}$ 和 W 的成本, 但对于那些 L 包含许多项的问题来说, 由于 $W^{i/}$ 和 W 列数较少而导致的较低成本可以抵消这一额外成本。

数值例子

我们现在展示数值示例以说明新方案的特点。我们将基于 (9) 并用矩阵指数近似流算子 $U_{\cdot}/$ 的方案记为 IF。我们将低秩实现的基于 (9) 的方案记为 IF-LR 和 IF-LR-T，其中流算子 $U_{\cdot}/$ 分别用矩阵指数近似，流算子 $U_{\cdot}/$ 用泰勒级数展开近似。本节中的所有结果均使用对应于经典四阶精度龙格-库塔方法的 (9) 布特查表格。请注意我们倾向于使用无量纲量，但由于为了重复 [3] 中的数值实验，我们采用了他们的符号表示，其中包括物理单位。

CPTP 的确认

在 [3] 中，Riesch 和 Jirauschek 研究了数值方法应用于 Liouville-von Neumann 方程的 CP。这里我们重复他们的数值实验 (见 [3] 的第 4 节)，使用相同的哈密顿量和初始数据，但增加了由两个 Lindblad 算子建模的退相干

$$L_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}10^5 a, \quad L_2 = 10^5 a^\dagger a.$$

这里 a 是具有元素 $a_{l,l+1} = \sqrt{l}, l = 1, \dots, 5$ 的降阶矩阵。

在图 1 的左侧部分，我们展示了使用 IF 方法和经典的四阶龙格-库塔方法计算的 $\rho_{33}(t)/$ ，两者都采用了时间步长 $t = 0.1fs$ (与 [3] 中的相同)。如插图所示，龙格-库塔方法未能保持 CPTP，而 IF 方法则能保持。在图 1 的右侧部分，我们再次展示了使用相同方法获得的 $\rho_{33}(t)/$ ，但这次时间步长增加了五倍。对于这个更大的时间步长，不仅 CPTP 的损失更为明显 (尤其是在早期)，而且很明显的是，尽管两种方法都是四阶精度，IF 方法在这个示例中更准确。在图 1 的右子图中，我们还包含了使用第六阶精度泰勒级数的 IF-LR-T 的结果，结果非常相似。

振荡恢复在 Jaynes-Cumming 模型中

在这个示例中，我们考虑一个两级原子 (量子比特) 与单个量化场模式 (腔) 相互作用的 Jaynes-Cumming 模型，该系统具有 m 能级。在转动波变换和精确共振下，(相互作用) 哈密顿量取特别简单的形式，[15]，

$$H = \lambda.b\sigma^+ + b^\dagger\sigma^* /,$$

并且只有一个 Lindblad 算子 $L = \sqrt{\kappa}b$ 。这里

$$b = I_{22} \otimes \hat{b}, \quad \sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes I_{mm}, \quad \sigma^* = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes I_{mm}$$

和 \hat{b} 是元素为 $\hat{b}_{l,l+1} = \sqrt{l}, l = 1, \dots, m-1$ 的 $m \times m$ 降阶矩阵。初始时刻原子处于激发态，腔处于相干态

$$v \hat{1} \sum_{n=0}^{m-1} \frac{|v|^n}{\sqrt{n!}} e_n,$$

即，初密度矩阵是 $\rho = VV^\dagger$ 其中

$$V = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{v}{\|v\|}.$$

这里我们选择 $v = \sqrt{m-3}$ 使得对 m 的中等值，求和中的最后一项对于 v 也很小。随着这些选择并且对于较大的 m ，原子中的种群坍缩到 1_2 ，但在 $t_r = 2\pi|v|/\lambda$ 处恢复，参见 [15]。

作为第一个示例，我们选取了 $m = 30$ 和 $\kappa = 0.001$ ，并模拟直至时间 $1.8t_r$ 。激发态中种群的时间演化显示在图 2 中。为了验证精度阶数，我们将使用经典四阶龙格-库塔方法 (RK4) 直接求解 (1)，并与 IF 方法一起进行比较。我们还使用了 IF-LR 和 IF-LR-T (采用四阶泰勒级数) 方法。在表 1 中，我们报告了激发态人口的时间 (L_2) 误差以及观察到的收敛率。对于低秩方案，我们使用了两种不同的

steps	IF		RK		ME-7		T-7		ME-9		T-9	
200	1.1(-4)		3.6(-1)		1.1(-4)		6.1(-2)		1.1(-4)		6.1(-2)	
400	6.8(-6)	4.0	6.3(-2)	2.5	9.1(-6)	3.6	4.1(-3)	3.9	6.8(-6)	4.0	4.1(-3)	3.9
800	4.2(-7)	4.0	4.2(-3)	3.9	1.2(-5)	-0.35	2.6(-4)	4.0	4.4(-7)	3.9	2.6(-4)	4.0

表 1

这里 ME-X 和 T-X 分别指使用矩阵指数和四阶精度泰勒级数方法的低秩方法。-X 指的是使用 $\epsilon = 10^{-X}$ 。IF 指的是由 (9) 定义的方法。RK 指的是经典的四阶精度龙格-库塔方法。步数指的是时间步的数量。每种方法下面的数字是激发态下 qubit 中的时间 L_2 错误，右边的数字是收敛阶的估计值。

容差 (见表 1 的标题)。除了在宽松容差下的 IF-LR 方法外，所有情况下我们都看到了预期的收敛速度。这一点可以从图 2 的右子图中理解，在该子图中我们展示了使用更严格容差的 800 时间步计算的误差。可以看出，使用矩阵指数的方法准确度显著更高。这是可以预料到的，对于哈密顿量主导林布利亚德的问题来说是如此。由于 IF-LR 方法的时间步长误差相当小，宽松容差代表了主要的误差源，并且没有观察到随着 t 减少而收敛的现象。我们的观察结果是图 2 中的结果具有典型性，传统的 RK 方法准确度最低，全秩 IF 方法最准确。效率显著更高、处于中间准确度的低秩方法也在其中。

代替将容差选择一个固定数值，可以选择为 $\epsilon = t^q$ 。在图 3 中我们展示了在量子比特中激发态人口中的误差对于 $q = 2, 3, 4, 5$ 和使用矩阵指数和泰勒级数的低秩方法下的流。如所见，收敛速率是 $q * 1$ ，表明 ϵ 应该选择为与底层龙格-库塔方法的局部截断误差相同大小。

在此示例中，我们取 $m = 150, \kappa = 0.002_9$ 并使用 4000 个时间步长模拟到时间 $3t_r$ 。我们展示了使用低秩方法、RK4 和四阶泰勒级数的流对 $\epsilon = 10^{-3}, 10^{-5}, 10^{-7}$ 的结果。结果显示在图 4 中。左侧绘制了激发态的人口 (插图是放大视图) 对于 $\epsilon = 10^{-7}$ 。第二个子图显示了每个容差下的激发态人口 (垂直偏移 1 和 2 以清晰显示)。具有最大 ϵ 的计算过度预测了复兴的振幅。第三个图形显示了不同容差下随时间变化的秩参数。可以看到，尽管解高度振荡，秩参数仍然缓慢增长。具有最大 ϵ 的计算等级在整个模拟过程中为一，这可以解释复兴的过度预测。最右侧的图形显示了使用 $\epsilon = 10^{-3}, 10^{-5}$ 与 $\epsilon = 10^{-7}$ 获得的解之间的差异。尽管误差略大于 ϵ ，但看起来两种情况之间减少了大约 100 倍。

总之，本文开发了一类高阶低秩 CPTP 方案用于处理具有时间独立哈密顿量和跳跃算子的林德布罗方程。我们在数值示例中证明了这些方案对于具有低秩特性的问题是准确且高效的。在后续工作中，我们将考虑哈密顿量和跳跃算子依赖于时间的一般情况。我们还计划开发基于张量网络的低秩方案 [16, 17] 来应对多个量子比特的挑战性案例。正如一位审稿人指出的，这里使用的低秩技术可能可以应用于其他方法，例如在 [4, 5] 中提到的方法。

致谢和免责声明

本材料基于美国能源部科学办公室高级科学研究计算研究 (ASCR) 资助下的项目，资助号为 DE-SC0025424。

本报告是作为美国政府机构赞助工作的记录而准备的。美国政府、其任何机构或其雇员均不作任何形式的保证，也不承担因披露的任何信息、设备、产品或过程的准确性、完整性或实用性所引起的任何法律责任或责任，也不表示使用这些内容不会侵犯私人拥有的权利。在此提及特定的商品名称、商标、制造商或其他方式标识的商业产品、工艺或服务并不一定构成或意味着美国政府或其任何机构的认可、推荐或偏好。文中表达的观点和意见不一定反映美国政府或其任何机构的观点。

本材料基于由国家科学基金会资助编号为 2436319 的项目工作。本文中表达的任何意见、发现、结论或建议均为作者的观点，并不一定反映国家科学基金会的意见。

参考文献

- [1] G. Lindblad, On the generators of quantum dynamical semigroups, *Communications in Mathematical Physics* 48 (2) (1976) 119–130.
- [2] D. Manzano, A short introduction to the Lindblad master equation, *Aip Advances* 10 (2) (2020) 025106.
- [3] M. Riesch, C. Jirauschek, Analyzing the positivity preservation of numerical methods for the Liouville-von Neumann equation, *Journal of Computational Physics* 390 (2019) 290–296.
- [4] J. Steinbach, B. M. Garraway, P. L. Knight, High-order unraveling of master equations for dissipative evolution, *Phys. Rev. A* 51 (1995) 3302–3308.

- [5] Y. Cao, J. Lu, Structure-preserving numerical schemes for Lindblad equations, arXiv preprint arXiv:2103.01194 (2021).
- [6] K. Wang, X. Li, Simulation-assisted learning of open quantum systems, *Quantum* 8 (2024) 1407.
- [7] Z. Ding, X. Li, L. Lin, Simulating open quantum systems using Hamiltonian simulations, *PRX Quantum* 5 (2) (2024) 020332.
- [8] L. Gravina, V. Savona, Adaptive variational low-rank dynamics for open quantum systems, *Physical Review Research* 6 (2) (2024) 023072.
- [9] P. A. Dirac, Note on exchange phenomena in the thomas atom, in: *Mathematical proceedings of the Cambridge philosophical society*, Vol. 26, Cambridge University Press, 1930, pp. 376–385.
- [10] C. Le Bris, P. Rouchon, Low-rank numerical approximations for high-dimensional Lindblad equations, *Phys. Rev. A* 87 (2013) 022125.
- [11] J. D. Lawson, Generalized runge-kutta processes for stable systems with large lipschitz constants, *SIAM Journal on Numerical Analysis* 4 (3) (1967) 372–380.
- [12] K. Donatella, Z. Denis, A. Le Boité, C. Ciuti, Continuous-time dynamics and error scaling of noisy highly entangling quantum circuits, *Physical Review A* 104 (6) (2021) 062407.
- [13] G. McCaul, K. Jacobs, D. I. Bondar, Fast computation of dissipative quantum systems with ensemble rank truncation, *Physical Review Research* 3 (1) (2021) 013017.
- [14] Y.-T. Chen, C. Farquhar, R. M. Parrish, Low-rank density-matrix evolution for noisy quantum circuits, *NPJ Quantum Information* 7 (1) (2021) 61.
- [15] J. Gea-Banacloche, Atom- and field-state evolution in the Jaynes-Cummings model for large initial fields, *Phys. Rev. A* 44 (1991) 5913–5931.
- [16] A. H. Werner, D. Jaschke, P. Silvi, M. Kliesch, T. Calarco, J. Eisert, S. Montangero, Positive tensor network approach for simulating open quantum many-body systems, *Physical Review Letters* 116 (23) (2016) 237201.
- [17] D. Sulz, C. Lubich, G. Ceruti, I. Lesanovsky, F. Carollo, Numerical simulation of long-range open quantum many-body dynamics with tree tensor networks, *Physical Review A* 109 (2) (2024) 022420.

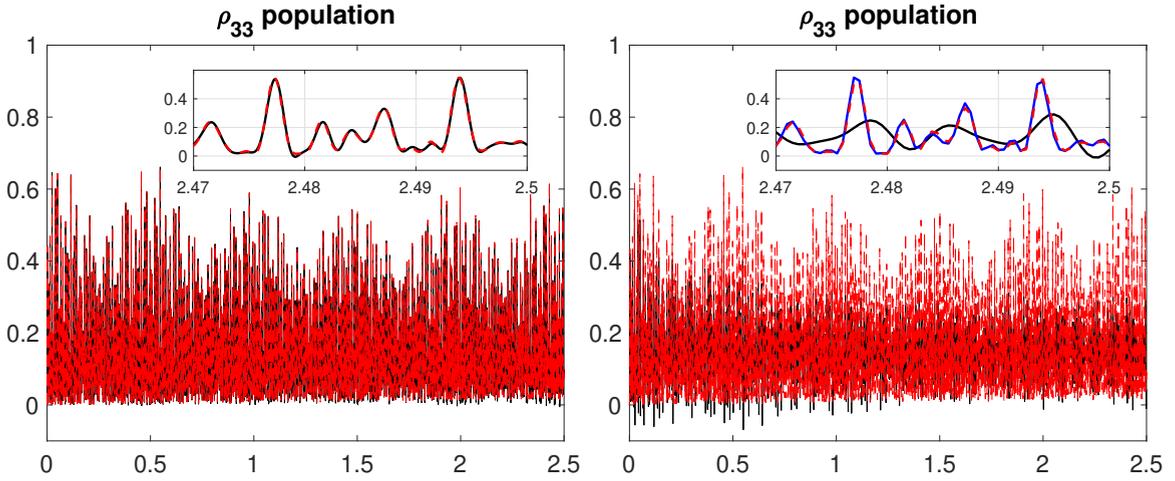


图 1: 人口 ρ_{33} 在示例中从 [3] 的演变。x-轴的单位是皮秒。左图和右图中的时间步数量分别为 300 和 60。左侧我们比较了经典的 RK4 方法 (黑色) 和使用矩阵指数计算流的积分因子方法 (红色, 虚线), 时间步长为 0.1 飞秒。右侧我们使用五倍大的时间步长, 并且还包含当使用六阶泰勒级数方法计算流时的结果。

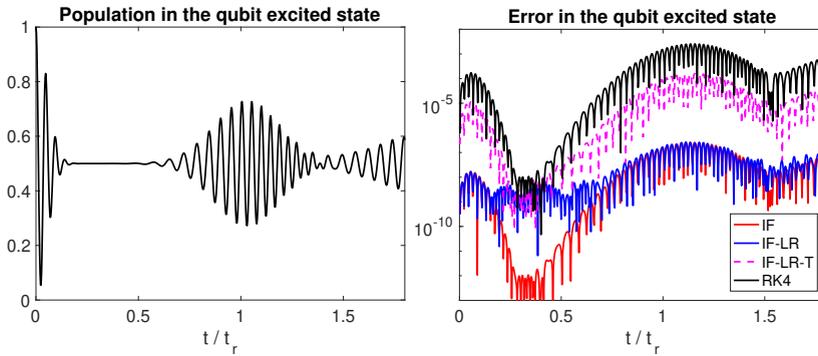


图 2: 使用经典四阶准确龙格-库塔方法、全秩积分因子方法和两种低秩方法 (矩阵指数和泰勒级数) 计算小 m 情况的复现。参见正文中的子图说明。

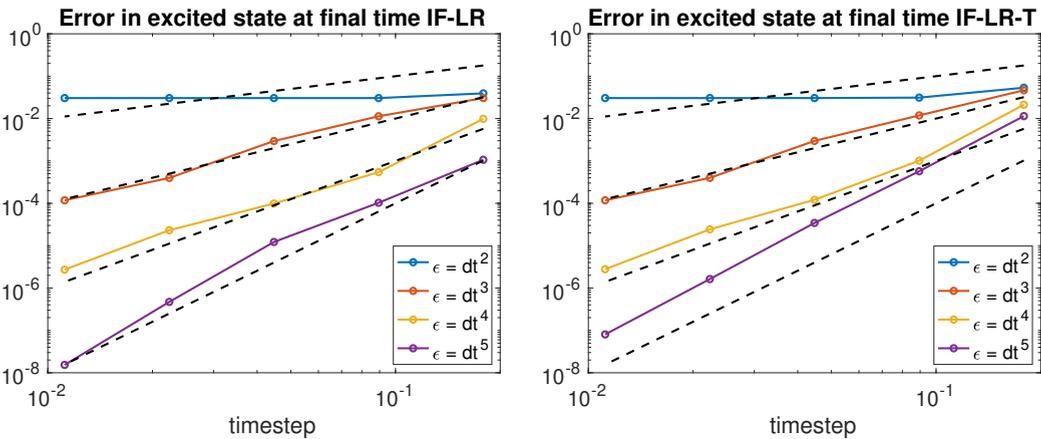


图 3: 最终时刻两种低秩方法 (矩阵指数化 (左侧) 和泰勒级数 (右侧)) 的误差作为时间步长的函数。虚线表示阶次, 从一到四。关于子图的解释请参见正文。

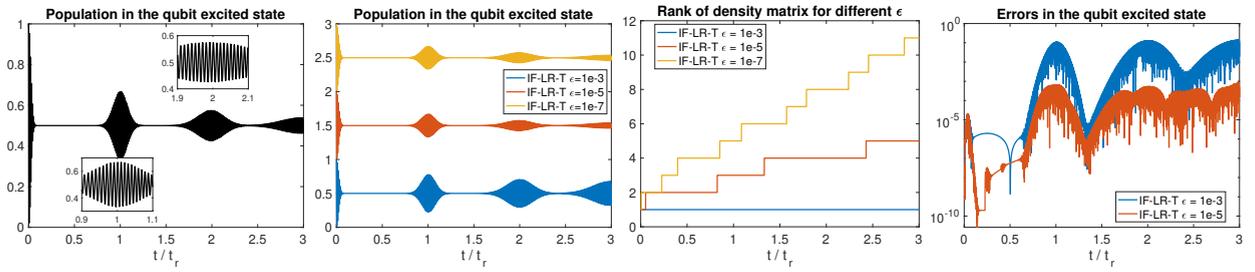


图 4: 低秩计算在大规模 m 情形下的复现。参见正文对子图的说明。