Записки научных
семинаров ПОМИ
Том 517, 2022 г.

В. В. Корняк

ПРИНЦИП ДОПОЛНИТЕЛЬНОСТИ И КОМПЛЕМЕНТАРНЫЕ НАБЛЮДАЕМЫЕ В КОНСТРУКТИВНОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

§1. Введение

Неизбежным элементом описания квантового поведения является наличие не допускающих одновременного измерения наблюдаемых. Нильс Бор выразил это обстоятельство в виде гносеологического *принципа дополнительности*[1]. Концептуальному принципу Бора можно придать конкретный математический смысл с помощью введенного Швингером [2] понятия, для которого впоследствии был предложен ставший общепринятым термин "взаимно несмещенные базисы" [3].

Два ортонормальных базиса

$$\mathcal{A} = \{|a_0\rangle, |a_1\rangle, \ldots, |a_{N-1}\rangle\} \quad \text{и} \quad \mathcal{B} = \{|b_0\rangle, |b_1\rangle, \ldots, |b_{N-1}\rangle\}$$

в N-мерном гильбертовом пространстве называются *взаимно несмещенными*, если вероятности переходов между состояниями, измеренными в разных базисах, одинаковы для любых таких пар состояний, т.е.,

$$|\langle a_k \mid b_\ell\rangle|^2 = \frac{1}{N} \quad k, \ell = 0, 1, \ldots, N-1\,.$$

Это означает, что если мы получили максимум информации, например, в базисе $\mathcal{A}$, т.е., оказалось, что измеряемое состояние точно принадлежит лучу, задаваемому вектором $|a_k\rangle$, то мы получим минимум информации при измерении этого же состояния в базисе $\mathcal{B}$ – результаты измерений будут разбросаны по всем базисным векторам $|b_0\rangle, |b_1\rangle, \ldots, |b_{N-1}\rangle$ с равной вероятностью.

Ключевые слова: принцип дополнительности, каноническое коммутационное соотношение Вейля, комплементарные наблюдаемые, взаимно несмещенные базисы, конечная квантовая механика, квантовая мереология.

[1]Существуют взгляды, что различные версии принципа дополнительности применимы во многих областях, где ради полноты описания используются различные, одновременно несовместимые средства. Например, статья [1] посвящена принципу дополнительности в биологии, психологии и социальных науках.

Исторически основным примером взаимно несмещенных базисов являются базисы собственных состояний операторов координаты $\hat{x}$ и импульса $\hat{p}$ для одномерного движения квантовой частицы. Очевидно, что этот континуальный пример, соответствующий размерности $N = \infty$, выходит за рамки конструктивных теорий.

Минимальный, но очень важный базовый пример дают базисы спиновых состояний частицы спина $\frac{1}{2}$ для двух перпендикулярных направлений. В этом случае размерность $N = 2$.

Мы будем называть квантовые наблюдаемые A и B *комплементарными*, если множества их нормализованных собственных векторов образуют взаимно несмещенную пару.

Начиная с работ Вейля и Швингера, понятию квантовой дополнительности было посвящено множество исследований. В частности, было показано, что в N-мерном гильбертовом пространстве не может быть (с точностью до унитарной эквивалентности) больше, чем $N + 1$ попарно комплементарных наблюдаемых. При этом они могут быть получены как алгебраические следствия определенной *базовой пары* канонически сопряженных наблюдаемых. Мы будем обозначать элементы этой пары символами X и Z, поскольку при $N = 2$ они представляют собой спиновые матрицы Паули σ_X и σ_Z, соответственно. В общем случае, X – это матрица, порождающая циклическую перестановку базисных элементов N-мерного гильбертова пространства, а Z – результат приведения матрицы X к диагональному виду с помощью преобразования Фурье.

По сути матрицы X и Z это два экземпляра одной и той же матрицы, записанной в двух разных базисах: необходимость как минимум двух различных базисов (систем координат) для воспроизведения квантовых интерференций вытекает из квантового формализма.

Тот факт, что канонически сопряженные наблюдаемые по существу происходят из циклической перестановки – а, как известно, произвольная перестановка представляет собой произведение циклических – хорошо согласуется с подходом к квантовой механике, основанном на унитарных представлениях групп перестановок [4–6]. Г. ’т Хоофт также предполагает, что на самом глубинном уровне в основе квантовой механики лежат перестановки [7].

Алгебраические соотношения для канонически сопряженных наблюдаемых можно получить конструируя проективные представления или, эквивалентно, центральные расширения абелевых групп. Эти соотношения образуют алгебраические структуры, называемые *обобщенными алгебрами Клиффорда.*

Канонически сопряженные наблюдаемые можно использовать естественным образом в задачах “квантовой мереологии”, т.е., в исследовании конструктивных методов разложения квантовых систем на подсистемы и связанных с такими разложениями задач: вычисление квантовых корреляций и других количественных характеристик взаимодействий между подсистемами.

Компьютерные вычисления являются эффективным методом исследования рассматриваемых в данной статье проблем. Для построения и исследования систем комплементарных наблюдаемых и связанных с ними задач мы разрабатываем и реализуем алгоритмы, основанные на методах компьютерной алгебры и вычислительной теории групп.

§2. Канонические коммутационные соотношения

2.1. Каноническое коммутационное соотношение Гейзенберга. В основе квантовой механики лежит каноническое коммутационное соотношение

$$[a, b] = \mathbf{i}\hbar \tag{1}$$

между канонически сопряженными наблюдаемыми a и b, представляющими собой эрмитовы операторы. Основным примером канонически сопряженной пары являются операторы координаты $\widehat{x} = x$ и импульса $\widehat{p} = -\mathbf{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ квантовой частицы, движущейся в одном измерении.

Без соотношений вида (1) невозможно описание квантового поведения, в частности, квантовых интерференций. Теорема Стоуна – фон Неймана утверждает единственность соотношений (1) для любой квантовой теории в бесконечномерном сепарабельном гильбертовом пространстве.

Канонические коммутационные соотношения (1) невозможно реализовать матрицами в пространстве конечной размерности N, поскольку, след коммутатора матриц всегда равен нулю, тогда как след правой части (1) равен $\mathbf{i}\hbar N$. Это противоречие означает, что каноническое коммутационное соотношение (1) не является фундаментальным, а представляет собой некоторую аппроксимацию при $N \to \infty$.

2.2. Канонически сопряженные наблюдаемые Вейля–Швингера. Более фундаментальные коммутационные соотношения, пригодные в N-мерном случае и воспроизводящие соотношение (1) в пределе $N \to \infty$, построил Герман Вейль [8].

Наблюдаемые в квантовой механике традиционно определяются как эрмитовы операторы. Однако Вейль [8], а впоследствии Швингер [2] показали, что для квантовой механики в конечномерных гильбертовых пространствах в качестве наблюдаемых более естественно использовать унитарные операторы вместо эрмитовых – унитарные операторы, в отличие от эрмитовых, имеют компактный спектр.

В квантовом формализме главную роль играет разложение гильбертова пространства в прямую сумму ортогональных подпространств, задаваемых собственными векторами оператора. Для такого разложения конкретные значения собственных чисел не существенны, поэтому достаточно, чтобы операторы были *нормальными*[2]. Как эрмитовы так и унитарные операторы являются нормальными. Внутри множества нормальных операторов они выделяются свойствами спектров: для эрмитовых операторов собственные числа лежат на вещественной оси комплексной плоскости, а для унитарных – на единичной окружности. При необходимости собственные числа операторов, имеющих одинаковые собственные подпространства можно пересчитать, используя простые функции. Например, переход от эрмитова оператора к унитарному осуществляется с помощью экспоненциального отображения.

В книге [8] Вейль показал, что в конечномерном гильбертовом пространстве каноническое коммутационное соотношение имеет вид

$$ZX = \omega XZ \tag{2}$$

и доказал его единственность. В соотношении (2) для N-мерного пространства $\omega \equiv \omega_N = \mathrm{e}^{2\pi\mathbf{i}/N}$ – базовый примитивный корень N-й степени из единицы, а унитарные операторы X и Z имеют (с точностью до

[2]Оператор A называется *нормальным*, если он коммутирует со своим сопряженным: $AA^* = A^*A$.

унитарной эквивалентности) вид

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{3}$$

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \omega & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \omega^{N-1} \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Эти матрицы впервые, в 19-м веке, под названиями, соответственно, "матрица сдвига" и "матрица часов" ввел Дж. Дж. Сильвестр. Очевидно, что

$$X^N = Z^N = \mathbb{1}\,. \tag{5}$$

В минимальной размерности $N = 2$ мы имеем $\omega = -1$, а матрицы X и Z совпадают с матрицами Паули:

$$X = \sigma_X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \sigma_Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Поэтому матрицы X и Z в гильбертовых пространствах произвольной размерности часто называют "обобщенными матрицами Паули".

Содержательно, матрица X это матрица перестановочного представления генератора циклической перестановки множества из N элементов, а матрица Z это результат приведения матрицы X к диагональному виду преобразованием Фурье

$$Z = FXF^{-1},$$

где унитарная матрица Фурье имеет вид

$$F \equiv F_N = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \cdots & \omega^{N-1} \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \cdots & \omega^{2(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega^{N-1} & \omega^{2(N-1)} & \cdots & \omega^{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix}. \tag{6}$$

2.3. Группа Вейля–Гейзенберга и унитарный базис Швингера. С помощью соотношений (2) и (5) произвольное произведение степеней X и Z можно привести к виду

$$Y_{k\ell m} = \omega^k X^\ell Z^m, \quad k, \ell, m = 0, 1, \ldots, N-1. \tag{7}$$

Унитарные операторы (7) образуют конечную неабелеву группу порядка N^3, называемую *группой Вейля–Гейзенберга* или *обобщенной группой Паули.*

Отметим важную особенность группы Вейля–Гейзенберга в четной размерности. Большинство элементов (7), как и их прождающие X и Z, имеют период N, однако в четной размерности четверть элементов $Y_{k\ell m}$ имеют период $2N$. Более конкретно

$$Y^N_{k\ell m} = \begin{cases} \mathbb{1}, & \text{если } N \text{ нечетное}, \\ (-1)^{\ell m}\,\mathbb{1}, & \text{если } N \text{ четное}. \end{cases} \tag{8}$$

В дальнейшем мы будем учитывать эту особенность четных размерностей.

Подмножество группы Вейля–Гейзенберга, состоящее из N^2 матриц вида $X^\ell Z^m$, образует линейный базис пространства операторов $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ в N-мерном гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$, называемый *унитарным базисом Швингера* [9]. Иными словами, любая $N \times N$-матрица может быть представлена как линейная комбинация матриц из базиса Швингера.

В минимальном случае $N = 2$ группа Вейля–Гейзенберга изоморфна группе кватернионов

$$Q_8 = \{\pm 1, \pm\mathbf{i}, \pm\mathbf{j}, \pm\mathbf{k}\},$$

а унитарный базис Швингера имеет вид

$$\{\mathbb{1}, \sigma_X, \sigma_Z, \sigma_X\sigma_Z\}$$

или, эквивалентно,

$$\{\mathbb{1}, \sigma_X, \sigma_Y, \sigma_Z\},$$

где вместо $\sigma_X\sigma_Z$ фигурирует матрица Паули $\sigma_Y = \mathbf{i}\sigma_X\sigma_Z = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{i} \\ \mathbf{i} & 0 \end{pmatrix}$. Умножение на $\mathbf{i}$ переводит антиэрмитову матрицу $\sigma_X\sigma_Z$ в эрмитову и, таким образом, все три спиновые матрицы Паули $\sigma_X, \sigma_Y, \sigma_Z$ оказываются одновременно и унитарными и эрмитовыми.

С другой стороны, замена матрицы $\sigma_X \sigma_Z$, имеющей, согласно (8), период 4, 2-периодической матрицей σ_Y приводит к потере “фазовой” информации, содержащейся в элементах группы Вейля–Гейзенберга.

Более подробно: легко вычисляемый в общем случае характеристический полином оператора XZ имеет вид

$$\det(XZ - \lambda \mathbb{1}) = \begin{cases} \lambda^N - 1, & \text{если } N \text{ нечетное,} \\ \lambda^N - \omega^{N/2}, & \text{если } N \text{ четное.} \end{cases} \tag{9}$$

Пусть $R_N = \left\{1, \omega, \ldots, \omega^{N-1}\right\}$ – множество всех корней из единицы N-й степени. Из (9) видно, что спектр оператора XZ в нечетномерном случае имеет вид $\operatorname{spec}(XZ) = R_N$, а в четномерном случае

$$\operatorname{spec}(XZ) = \left\{\omega^{1/2}, \omega^{1+1/2}, \ldots, \omega^{N-1+1/2}\right\} = \omega^{1/2} \times R_N.$$

Таким образом, при четном N оператор XZ представляет собой оператор периода N, умноженный на фазовый множитель $\omega^{1/2}$. Переход от произведения $\sigma_X \sigma_Z$ к матрице Паули σ_Y означает удаление этого фазового множителя.

§3. Комплементарные наблюдаемые и взаимно несмещенные базисы

В любом N-мерном гильбертовом пространстве, независимо от структуры разложения числа N на простые множители, существует универсальная тройка комплементарных наблюдаемых: операторы X и Z, представленные матрицами (3) и (4), и их произведение XZ.

Этим наблюдаемым соответствуют взаимно несмещенные базисы:

(1) Исходный (“онтический”) базис, называемый в квантовой информатике “стандартным” или “вычислительным”

$$\mathcal{B}_{\mathcal{O}} = \left\{ |0\rangle, \ldots, |k\rangle, \ldots, |N-1\rangle \right\}. \tag{10}$$

Действие оператора X на элементы этого базиса представляет собой циклический сдвиг

$$X\,|k\rangle = |k + 1 \bmod \mathcal{N}\rangle.$$

(2) Базис, в котором оператор X приведен к диагональному виду унитарным преобразованием Фурье

$$\mathcal{B}_{\mathcal{E}} = \left\{ \left|\widehat{0}\right\rangle, \ldots, \left|\widehat{\ell}\right\rangle, \ldots, \left|\widehat{N-1}\right\rangle \right\}. \tag{11}$$

Элементы этого базиса в терминах онтического базиса имеют вид

$$\left|\widehat{\ell}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=0}^{N-1}\left|k\right\rangle\omega^{k\ell}.$$

Назовем базис (11) “энергетическим”, поскольку он состоит из собственных векторов оператора Гамильтона[3], соответствующего оператору X, интерпретируемому как оператор эволюции.

Очевидно, что базисы $\mathcal{B}_{\mathcal{O}}$ и $\mathcal{B}_{\mathcal{E}}$ являются взаимно несмещенными, поскольку

$$\left|\left\langle\widehat{\ell}\mid k\right\rangle\right|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{N}}\omega^{-k\ell}\right|^2 = \frac{1}{N}\,.$$

(3) Базис, ассоциированный с оператором XZ

$$\mathcal{B}_{\mathcal{L}} = \left\{\left|\widetilde{0}\right\rangle,\ldots,\left|\widetilde{m}\right\rangle,\ldots,\left|\widetilde{N-1}\right\rangle\right\}.$$

Элементы этого базиса в терминах онтического базиса можно представить в виде

$$\left|\widetilde{m}\right\rangle = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{N}}\displaystyle\sum_{k=0}^{N-1}\left|k\right\rangle\omega^{-km+\frac{k(k-1)}{2}}, & \text{если } N \text{ нечетное},\\ \dfrac{1}{\sqrt{N}}\displaystyle\sum_{k=0}^{N-1}\left|k\right\rangle\omega^{-km+\frac{k^2}{2}}, & \text{если } N \text{ четное}\,. \end{cases}$$

Здесь опять в четномерном случае появляются полуцелые степени базового корня из единицы ω. Несмещенность базиса $\mathcal{B}_{\mathcal{L}}$ относительно $\mathcal{B}_{\mathcal{O}}$ очевидна, а для демонстрации несмещенности относительно базиса $\mathcal{B}_{\mathcal{E}}$ можно воспользоваться свойствами сумм корней из единицы, называемых обобщенными квадратичными суммами Гаусса.

Заметим что, прообразами наблюдаемых X, Z и XZ в классической механике являются, соответственно, координаты, импульсы и моменты импульсов. Возникает естественный вопрос: какие еще, помимо этой тройки, комплементарные наблюдаемые и соответствующие взаимно

[3]Фактически собственные значений оператора Гамильтона представляют собой частоты пропорциональные энергиям согласно формуле Планка $E = h\nu$, считающейся универсальной, т.е., справедливой для периодического процесса любой природы.

несмещенные базисы возможны в гильбертовом пространстве данной размерности? Этот вопрос связан непосредственно с проблемой квантовых измерений.

3.1. Квантовая томография. Квантовая томография [9, 10] – это часть квантовой информатики, занимающаяся восстановлением максимума информации о квантовом состоянии с помощью многократных квантовых измерений.

Типичная схема квантовых измерений предполагает разбиение гильбертова пространства на одномерные ортогональные подпространства. Это разбиение задается соответствующим ортонормальным базисом. Единичное квантовое событие это попадание квантовой системы в одно из подпространств, фиксируемое соответствующим датчиком. Этот процесс называется измерением. Проведя достаточно большое количество измерений одного и того же (т.е., “идентично приготовленного”) состояния в данном базисе мы получим набор вероятностей обнаружения системы в каждом из подпространств. Поскольку, в силу полноты рассматриваемой схемы измерений, сумма всех вероятностей равна единице, в N-мерном пространстве мы получим $N-1$ независимых параметров, описывающих статистику измерений данного квантового состояния в данном базисе.

Квантовое состояние общего вида описывается матрицей плотности, т.е., эрмитовой матрицей с единичным следом. Легко подсчитать, что для полного описания такой матрицы необходимо N^2-1 вещественных параметров. Таким образом, для полного восстановления квантового состояния нам необходимо выполнить серию измерений в

$$\left(N^2-1\right)/\left(N-1\right)=N+1$$

различных базисах. Наиболее оптимальным для квантовой томографии было бы иметь $N+1$ взаимно несмещенных базисов, поскольку измерения в таких базисах максимально независимы.

3.2. Максимальные множества взаимно несмещенных базисов. Более детальный анализ множества матриц плотности показывает, что по чисто геометрическим причинам [11] число взаимно несмещенных базисов не может превышать $N+1$.

Пусть $\mathfrak{M}_N$ – максимальное число взаимно несмещенных базисов в N-мерном гильбертовом пространстве. Если размерность гильбертова пространства равна степени простого числа, т.е., $N = p^m$, то непосредственным построением было показано, что $\mathfrak{M}_N$ равно максимально возможному значению $N + 1$. Например, если $N = p$ – простое число, то можно проверить [12], что собственные базисы унитарных наблюдаемых $X, Z, XZ, XZ^2, \ldots, XZ^{p-1}$ образуют множество взаимно несмещенных базисов, число которых равно $N + 1$. Аналогичный набор сопряженных унитарных наблюдаемых можно построить и в более общем случае $N = p^m$ с помощью конструкций, использующих вычисления в полях Галуа $\mathrm{GF}(p^m)$ [9, 13].

В общем случае размерность можно разложить в произведение элементарных множителей – степеней простых чисел

$$N = p_1^{m_1} \cdots p_k^{m_k} \cdots p_K^{m_K}.$$

В соответствии с этим разложением полное гильбертово пространство можно представить в виде тензорного произведения

$$\mathcal{H}_N = \bigotimes_{k=1}^{K} \mathcal{H}_{N_k},$$

где $N_k = p_k^{m_k}$ – k-й элементарный множитель.

Поскольку у нас имеются в явном виде максимальные множества сопряженных наблюдаемых (назовем эти наблюдаемые локальными) для каждого тензорного множителя $\mathcal{H}_{N_k}$, можно сконструировать взаимно несмещенные базисы пространства $\mathcal{H}_N$ в виде тензорных произведений базисов локальных наблюдаемых. Легко проверить, что если два (глобальных) базиса в пространстве $\mathcal{H}_N$ являются тензорными произведениями взаимно несмещенных локальных базисов, то эти глобальные базисы – взаимно несмещенные. Отсюда следует, что максимальное число взаимно несмещенных глобальных базисов должно удовлетворять условию

$$\mathfrak{M}_N \geqslant \min\{p_1^{m_1}, \ldots, p_K^{m_K}\} + 1. \tag{12}$$

Однако задача построения максимального множества взаимно несмещенных базисов в произвольной размерности очень трудна и не решена даже в простейшем случае $N = 6$ [9].

3.3. Комплексные матрицы Адамара. Произвольный вектор гильбертова пространства в онтическом базисе имеет вид

$$A=\sum_{k=0}^{N-1}a_k\left|k\right\rangle\equiv\begin{pmatrix}a_0\\a_1\\\vdots\\a_{N-1}\end{pmatrix}. \tag{13}$$

Этот вектор несмещен относительно онтического базиса, если

$$\left|\left\langle k\,|\,A\right\rangle\right|^2=\left|a_k\right|^2=\frac{1}{N},\quad k=0,1,\dots,N-1. \tag{14}$$

N взаимно ортогональных векторов вида (13), удовлетворяющих условиям (14), образуют ортонормальный базис

$$\mathcal{A}=\left\{A_0,\dots,A_\ell,\dots,A_{N-1}\right\}, \tag{15}$$

взаимно несмещенный с онтическим. Запишем элементы базиса (15) в виде

$$A_\ell=\frac{1}{\sqrt{N}}\begin{pmatrix}h_{0,\ell}\\h_{1,\ell}\\\vdots\\h_{N-1,\ell}\end{pmatrix},\quad\text{где}\quad\left|h_{k,\ell}\right|^2=1\,. \tag{16}$$

Из столбцов вида (16) можно составить унитарную матрицу

$$H=\frac{1}{\sqrt{N}}\left(h_{k,\ell}\right),$$

называемую *комплексной матрицей Адамара*. Ясно, что матрицы Адамара находятся во взаимно однозначном соответствии с базисами, несмещенными относительно онтического базиса. Частным случаем матрицы Адамара является матрица Фурье (6).

Две матрицы Адамара H_1 и H_2 называются взаимно несмещенными, если $H_1^*H_2=H_3$, где H_3 также матрица Адамара.

Заметим, что взаимная несмещенность инвариантна относительно произвольной перестановки векторов базиса и относительно умножения базисных векторов по отдельности на произвольные фазовые множители. Это означает наличие для матриц Адамара эквивалентности вида

$$H\sim HP\Phi,$$

где P – матрица перестановки, а Φ – диагональная унитарная матрица:

$$\Phi = \mathrm{diag}(\varphi_0, \ldots, \varphi_k, \ldots, \varphi_{N-1}), \quad |\varphi_k|^2 = 1.$$

Это означает, в частности, что, воспользовавшись подходящим выбором матрицы Φ, достаточно рассматривать только такие матрицы Адамара, первая строка которых состоит из единиц[4].

Аналогичным образом, можно рассмотреть перестановки P' элементов онтического базиса и изменение фаз Φ' строк матрицы Адамара, что эквивалентно “умножению слева”: $\Phi' P' H$. Однако такое преобразование, не нарушая отношение взаимной несмещенности, можно применить только ко всему множеству рассматриваемых матриц Адамара одновременно. В частности, только одна из множества взаимно несмещенных матриц Адамара может иметь первый столбец, состоящий из одних единиц.

Задача исчерпывающего поиска множеств взаимно несмещенных базисов сводится к проблеме классификации комплексных матриц Адамара. $N = 6$ – это минимальная размерность для которой отсутствует полная классификации комплексных матриц Адамара, что приводит к трудностям в построении максимального множества взаимно несмещенных базисов в этой размерности. Существует сайт [14], посвященный классификации комплексных матриц Адамара и смежным вопросам.

§4. Проективные представления абелевых групп и обобщенные алгебры Клиффорда

Проективные представления групп являются одним из основных элементов квантового формализма. В частности, коммутационное соотношение (2) Вейль получил с помощью проективного представления абелевой группы, являющейся прямым произведением двух циклических групп [8]. Проективные представления абелевых групп можно описать в рамках общей конструкции, называемой *обобщенными алгебрами Клиффорда* [15].

[4]Мы игнорируем здесь нормализующий множитель $1/\sqrt{N}$ – обычно комплексные матрицы Адамара для упрощения манипуляций с ними определяются без этого множителя.

4.1. Проективные представления. Правило умножения для операторов проективного представления R группы G в линейном пространстве над полем $\mathcal{F}$ имеет вид

$$R(g_1)\,R(g_2) = c(g_1, g_2)\,R(g_1 g_2)\,, \tag{17}$$

где $g_1, g_2 \in G$, а функция от двух аргументов

$$c : G \times G \to \mathcal{F}^* \equiv \mathcal{F} \setminus \{0\} \tag{18}$$

должна удовлетворять тождеству

$$c(g_1, g_2)\,c(g_1 g_2, g_3) = c(g_1, g_2 g_3)\,c(g_2 g_3)\,,$$

которое можно получить, если привести произведение $R(g_1)R(g_2)R(g_3)$ к $R(g_1 g_2 g_3)$ двумя разными путями используя (17).

Матрицы представления R определены с точностью до умножений на произвольные ненулевые элементы поля, т.е., $R(g)$ – представитель класса эквивалентности вида

$$R(g) \sim b(g)\,R(g)\,, \tag{19}$$

где $b : G \to \mathcal{F}^*$ – произвольная функция одного аргумента на группе. Изменение выбора представителей приводит к замене

$$c(g_1, g_2) \longrightarrow c_b(g_1, g_2)\,c(g_1, g_2)$$

в формуле (17), где

$$c_b(g_1, g_2) = \frac{b(g_1)\,b(g_2)}{b(g_1 g_2)}. \tag{20}$$

Функции (18) образуют коммутативную группу $Z^2(G, \mathcal{F}^*)$, называемую группой двумерных *коциклов* (2-коциклов). Функции вида (20), называемые *кограницами*, образуют подгруппу $B^2(G, \mathcal{F}^*)$ группы $Z^2(G, \mathcal{F}^*)$. Фактор-группа

$$H^2(G, \mathcal{F}^*) = Z^2(G, \mathcal{F}^*)\,/B^2(G, \mathcal{F}^*)$$

называется двумерной группой *когомологий* группы G с коэффициентами в $\mathcal{F}^*$.

Проективное представление R однозначно определяет некоторый класс $[c_R] \in H^2(G, \mathcal{F}^*)$. Любой коцикл $c(g_1, g_2) \in [c_R]$ называется *мультипликатором* [16] проективного представления R. Мультипликаторы, имеющие вид (20), принадлежат классу $[1 \in \mathcal{F}^*]$ и называются тривиальными. Проективное представление с тривиальным мультипликатором эквивалентно обычному векторному представлению.

Не всякая группа имеет нетривиальные проективные представления. Например, циклическая группа порядка n порождается одним элементом и имеет вид $G=\{\mathbf{1}, g, g^2, \ldots, g^{n-1}\}$. Для проективного представления такой группы должно выполняться равенство $R(g)^n = a\,\mathbb{1}$, где a – некоторый скаляр $a \in \mathcal{F}^*$. Если при каком-то выборе матриц представления окажется, что $a \neq 1$, то, воспользовавшись эквивалентностью (19) и сделав замену $R(g) \to a^{1/n}R(g)$, мы получим равенство $R(g)^n = \mathbb{1}$, показывающее, что любое проективное представление циклической группы эквивалентно обычному векторному представлению.

Наименьшей группой, имеющей нетривиальные проективные представления, является *четверная группа Клейна* $K_4 \simeq \mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$. Проективные представления даже в этом минимальном случае порождают богатый набор существенных для физики структур: описание частиц спина $\frac{1}{2}$; кватернионы и, в частности, описание трехмерных вращений; матрицы Паули и состоящие из них матрицы Дирака, лежащие в основе уравнения Дирака и т.д.

4.2. Обобщенные алгебры Клиффорда. Обобщенной алгеброй Клиффорда называется алгебра, порождаемая элементами $e_1, e_2, \ldots, e_n$, удовлетворяющими соотношениям

$$e_i^{N_i} = 1, \tag{21}$$

$$e_i e_j = \omega_{ij} e_j e_i, \tag{22}$$

$$\omega_{ij}^{N_i} = \omega_{ij}^{N_j} = 1, \tag{23}$$

$$\omega_{ij} e_k = e_k \omega_{ij}, \quad \omega_{ij}\omega_{k\ell} = \omega_{k\ell}\omega_{ij}, \tag{24}$$

где $i, j, k, \ell = 1, 2, \ldots, n$, N_i – положительные целые числа.[5]

Для любых матричных представлений, имеющих смысл в физических приложениях, достаточно выбрать элементы ω_{ij} в виде корней из единицы

$$\omega_{ij} = \omega_{ji}^{-1} = \mathrm{e}^{2\pi \mathbf{i}\, s_{ij}/N_{ij}}, \tag{25}$$

где s_{ij} – целые числа, $N_{ij} = \gcd(N_i, N_j)$. При таком выборе необходимость в соотношениях (24) отпадает.

[5]Обычной алгебре Клиффорда, которая определяется с помощью разложения заданной квадратичной формы в n-мерном пространстве в произведение линейных множителей, соответствует случай корней из единицы 2-й степени, т.е. $\omega_{ij} = -1$ и соотношения (22) принимают вид $e_i e_j = -e_j e_i$. Изначально понятие обобщенной алгебры Клиффорда возникло аналогичным образом при изучении разложений полилинейных форм высших степеней в произведения линейных множителей [17].

Введя общий период для всех корней из единицы $N = \mathrm{lcm}(\{N_{ij}\})$ можно несколько унифицировать (25):

$$\omega_{ij} = \mathrm{e}^{2\pi\mathbf{i}\,t_{ij}/N}, \ \ t_{ij} = -t_{ji}.$$

Таким образом, обобщенная алгебра Клиффорда задается множеством периодов $N_1, N_2, \ldots, N_n$ для порождающих элементов и кососимметрической целочисленной матрицей

$$T = \begin{pmatrix} 0 & t_{12} & \cdots & t_{1n} \\ -t_{12} & 0 & \cdots & t_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -t_{1n} & -t_{2n} & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

4.3. Проективные представления абелевых групп. Произвольную абелеву группу можно представить в виде прямого произведения циклических групп

$$G = \mathbb{Z}_{N_1} \times \mathbb{Z}_{N_2} \times \cdots \times \mathbb{Z}_{N_n}. \tag{26}$$

Замечание. Циклическая группа разлагается в прямое произведение подгрупп тогда и только тогда, когда порядки сомножителей взаимно просты, например,

$$\mathbb{Z}_{k\ell} \simeq \mathbb{Z}_k \times \mathbb{Z}_\ell \Longleftrightarrow \gcd(k, \ell) = 1.$$

Этот факт позволяет получить классификацию всех абелевых групп с точностью до изоморфизма:

$$G_{P,M} = \mathbb{Z}_{p_1^{m_1}} \times \mathbb{Z}_{p_2^{m_2}} \times \cdots \times \mathbb{Z}_{p_n^{m_n}},$$

где $P = \{p_1, \cdots, p_n\}$ – множество простых чисел (необязательно различных!), $M = \{m_1, \cdots, m_n\}$ – множество положительных целых чисел. Однако для построения проективных представлений нет необходимости предполагать, что в разложении (26) числа $N_1, \ldots, N_n$ – степени простых чисел.

Абелеву группу (26) можно задать с помощью соотношений

$$c_i^{N_i} = \mathbf{1}, \ c_i c_j = c_j c_i, \ i, j = 1, 2, \ldots, n, \tag{27}$$

где c_i обозначает образующую множителя $\mathbb{Z}_{N_i}$ в разложении (26). Подробное вычисление мультипликаторов проективного представления для G исходя из соотношений (27) приведено в [15]. Результатом вычислений являются соотношения для проективных образов $e_i = R(c_i)$, полностью совпадающие с соотношениями (21)–(24) для обобщенных алгебр Клиффорда.

§5. Канонически сопряженные наблюдаемые в конечной квантовой механике

Канонически сопряженные наблюдаемые Вейля–Швингера возникают как необходимое следствие возможности описывать квантовые интерференции в конечномерном гильбертовом пространстве.

Более того, в их основе лежит циклическая перестановка элементов конечного множества. Фактически из требования конечномерности пространства следует конечность множества состояний, что согласуется с идеологией версии квантовой механики, основанной на перестановках конечных множеств.

Соответствующая модификация квантового формализма [4–6], которую мы для краткости называем конечной квантовой механикой, обсуждается в [18].

Г. 'т Хоофт также придерживается убеждения, что в основе квантовой эволюции лежат перестановки ([7], стр. 66):

> *We postulate the existence of an ontological basis. It is an orthonormal basis of Hilbert space that is truly superior to the basis choices that we are familiar with. In terms of an ontological basis, the evolution operator for a sufficiently fine mesh of time variables, does nothing more than permute the states.*

5.1. Эволюция замкнутой квантовой системы. Один из основных постулатов квантовой механики утверждает, что эволюция замкнутой квантовой системы описывается унитарным преобразованием.

В стандартной (континуальной) квантовой механике эволюция описывается однопараметрической (т.е., циклической) группой унитарных преобразований $U^t = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht} = \left(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H}\right)^t$. Инфинитезимальным порождающим элементом этой группы является гамильтониан H, а параметром, нумерующим элементы группы – непрерывное время $t \in \mathbb{R}$. Эволюция из заданного состояния $\left|\Psi_0\right\rangle$ в состояние $\left|\Psi_t\right\rangle$ описывается уравнением

$$\left|\Psi_t\right\rangle = U^t \left|\Psi_0\right\rangle,$$

инфинитезимальной версией которого, получаемой дифференцированием по времени, является уравнение Шредингера

$$\mathbf{i}\hbar\frac{\partial\left|\Psi_t\right\rangle}{\partial t}=H\left|\Psi_t\right\rangle.$$

В конечной квантовой механике мы предполагаем, что на некотором глубоком уровне описания существует конечное множество первичных объектов

$$\Omega\simeq\{0,1,\ldots,N-1\}\,,\tag{28}$$

которые мы, следуя терминологии 'т Хоофта, будем называть *онтическими*[6]. Любое обратимое преобразование этого множества является перестановкой из группы $\mathrm{Sym}(\Omega)$. Мы можем отождествить множество Ω с ортонормальным базисом N-мерного гильбертова пространства $\mathcal{H}_N$. Эти пространство и базис также будем называть *онтическими.*

Любую перестановку $g\in\mathrm{Sym}(\Omega)$ можно представить в пространстве $\mathcal{H}_{\mathcal{N}}$ в виде унитарного оператора

$$U=\mathcal{M}(g)\,,\tag{29}$$

компоненты которого имеют вид

$$\mathcal{M}(g)_{k,\,\ell}=\delta_{kg,\,\ell},\quad k,\ell\in\Omega.$$

Эволюция замкнутой квантовой системы в конечной квантовой механике описывается циклической группой U^t, где $t\in\mathbb{Z}$ – дискретное время, а порождающим элементом является унитарный оператор (29). Любую перестановку $g\in\mathrm{Sym}(\Omega)$ можно разложить в произведение непересекающихся циклов

$$g=(c_1)\cdots(c_k)\cdots(c_K)\,,\tag{30}$$
$$c_k^{L_k}=\mathbf{1},\quad\sum_{k=1}^{K}L_k=N,$$

где L_k – длина цикла c_k, а символ $\mathbf{1}$ обозначает тождественную перестановку соответствующей длины.

[6]'т Хоофт использует слово *ontic* как сокращение для *ontological.*

В соответствии с разложением (30) оператор (29), порождающий эволюцию, приобретает блочно диагональный вид

$$U = \begin{pmatrix} \mathcal{M}(c_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathcal{M}(c_2) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathcal{M}(c_K) \end{pmatrix}.$$

Это означает, что онтическое множество разбивается в объединение непересекающихся подмножеств

$$\Omega = \Omega_1 \sqcup \Omega_2 \sqcup \ldots \sqcup \Omega_K, \tag{31}$$

в каждом из которых действует циклическая перестановка, а онтическое гильбертово пространство разбивается в прямую сумму инвариантных подпространств

$$\mathcal{H}_{\mathcal{N}} = \mathcal{H}_{L_1} \oplus \mathcal{H}_{L_2} \oplus \cdots \oplus \mathcal{H}_{L_K},$$

унитарная эволюция в каждом из которых задается оператором вида (3). Поэтому мы можем рассматривать эволюцию в каждом из подмножеств в разложении (31) независимо от остальных подмножеств, причем эта эволюция будет простой циклической перестановкой.

Чтобы избежать громоздких обозначений для выделения одного из подмножеств в разбиении (31), мы будем рассматривать циклическую эволюцию длины N всего онтического множества.

Генератор циклической эволюции X и его диагональная форма Z, задаваемые матрицами (3) и (4), образуют базовую пару канонически сопряженных наблюдаемых, а соответствующие им базисы (10) и (11) являются взаимно несмещенными.

5.2. Квантовая мереология в конечной квантовой механике. Квантовая мереология изучает взаимосвязи подсистем составной квантовой системы между собой и системой в целом. Заданное множество (локальных) квантовых систем легко объединить согласованным с правилами квантовой механики способом в (глобальную) квантовую систему, для которой локальные системы являются подсистемами. Более важной, интересной и трудной является обратная задача: разложить заданную квантовую систему на подсистемы наиболее разумным (в соответствии с определенными критериями) способом.

Гильбертово пространство глобальной системы является тензорным произведением локальных пространств. Легко показать, что между базисом глобального пространства и набором локальных базисов существует взаимно однозначное соответствие, т.е., не только можно построить глобальный базис из локальных, но можно однозначно восстановить все локальные базисы исходя из глобального [19–21]. Поскольку все базисы гильбертова пространства лежат на одной орбите группы унитарных преобразований, конкретное разложение глобальной квантовой системы на подсистемы можно получить, задав некоторое разложение размерности глобального пространства на множители и зафиксировав некоторый унитарный оператор в глобальном пространстве. После этого остальные характеристики разложения (квантовые корреляции, энергии взаимодействия и т.д.) вычисляются стандартными способами.

Выбрав в качестве глобального пространства онтическое пространство $\mathcal{H}_N$, в качестве разложения размерности — разложение на элементарные множители

$$N = p_1^{m_1} p_2^{m_2} \cdots p_k^{m_k} \cdots p_K^{m_K},$$

где все p_k – *различные* простые числа, а в качестве унитарного оператора, фиксирующего глобальный базис – каноническую наблюдаемую X, мы получим следующее разложение для гильбертова пространства

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_K,$$

где $\dim \mathcal{H}_k = p_k^{m_k}$.

Это разложение обладает тем свойством, что для него глобальные наблюдаемые являются тензорными произведениями локальных наблюдаемых:

$$\begin{aligned} X &= X_1 \otimes X_2 \otimes \cdots \otimes X_K, \\ Z &= Z_1 \otimes Z_2 \otimes \cdots \otimes Z_K. \end{aligned} \tag{32}$$

“Логарифмированием” (32) можно получить выражение, связывающее глобальный гамильтониан с локальными

$$\begin{aligned} H = H_1 \otimes \mathbb{1}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}_K + \mathbb{1}_1 \otimes H_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}_K \\ + \ldots + \mathbb{1}_1 \otimes \mathbb{1}_2 \otimes \cdots \otimes H_K, \end{aligned} \tag{33}$$

где $\mathbb{1}_k$ – единичные матрицы соответствующих размерностей. Отметим специальный вид формулы (33): глобальный гамильтониан равен сумме гамильтонианов подсистем – “энергия системы равна сумме энергий подсистем". При разложении квантовой системы на подсистемы "наугад" формула аналогичная (33) будет, как правило, содержать дополнительно гамильтонианы взаимодействий между подсистемами.

§6. Вычислительные задачи

Для решения разнообразных задач, возникающих при исследовании квантовых моделей с использованием обсуждаемых в данной статье методов, мы разрабатываем и реализуем (преимущественно на языке Си) соответствующие компьютерно–алгебраические алгоритмы.

Эти алгоритмы, среди прочего, включают

- средства работы с корнями из единицы.
  Несмотря на то, что обычно используемое выражение для n-го примитивного корня из единицы, $\omega_n = \mathrm{e}^{2\pi\mathbf{i}/n}$, содержит два трансцендентных числа, e и π, фактически ω_n – *целое алгебраическое число*, являющееся корнем n-го циклотомического полинома $\Phi_n(x)$. Поэтому вычисления с корнями из единицы сводятся к несложной арифметике с полиномами от одной переменной.
- вычисления с полями Галуа $\mathrm{GF}(p^m)$.
  Элементы таких полей используются для нумерации базисных элементов гильбертовых пространств размерности p^m.
- вычисления с матрицами из группы Вейля–Гейзенберга (7).

В качестве примера рассмотрим задачу построения максимальных множеств взаимно несмещенных базисов в гильбертовом пространстве заданной размерности N. Для решения этой задачи, помимо теоретических исследований, используется множество вычислительных средств, таких как компьютерная алгебра, численные методы и моделирование Монте-Карло [22–25]. Задача полностью решена для размерностей вида $N = p^m$, т.е. для степеней простого числа. В этом случае с помощью элементов группы Вейля–Гейзенберга в явном виде построены $N + 1$ – т.е. максимально возможное априори число – взаимно несмещенных базисов. Для составных размерностей $N = 6, 10, 12, \ldots$ задача не решена полностью ни в одном случае. Относительно случая $N = 6$, который, естественно, исследуется наиболее интенсивно (см., например, [23]), имеется твердое, хотя и не доказанное строго, убеждение, что в этой размерности максимальное число взаимно несмещенных базисов $\mathfrak{M}_6 = 3$.

Наиболее общим считается подход, использующий матрицы Адамара. Схема вычислений в этом подходе сводится к следующему. Для заданной матрицы Адамара вычисляется множество несмещенных относительно нее векторов из которых затем выбираются подмножества, образующие ортонормированные базисы. Затем эти базисы проверяются на взаимную несмещенность.

Обычно используется представление комплексных координат векторов парой вещественных переменных (за исключением первой координаты, которую всегда можно положить равной единице) [23]. Условия нормировки векторов совместно с условиями их несмещенности относительно матрицы Адамара образуют систему квадратных уравнений от $2\,(N-1)$ переменных. Решение этой системы полиномиальных уравнений с помощью базисов Гребнера позволяет получить наиболее общее множество несмещенных относительно заданной матрицы Адамара векторов. Опыт автора этой статьи в решении систем квадратных уравнений с помощью реализаций базисов Гребнера в системах Maple и Magma на компьютере с процессором 3.3GHz показывает, что решения можно получить в большинстве случаев, если число переменных $N_{var} \leqslant 16$ и изредка, если $N_{var} = 17$. Таким образом, можно предположить, что обсуждаемый полиномиальный подход может работать до размерностей N не превышающих 9 или 10.

Вычислительные подходы, основанные на комплексных матрицах Адамара общего вида, на первый взгляд выглядят более общими, чем методы, использующие группу Вейля–Гейзенберга. Однако общие матрицы Адамара, как правило, зависят от непрерывных параметров, вносящих неконструктивные или нефизические элементы, такие как нарушение периодичности. Например, полная классификация матриц Адамара в размерности $N = 4$ включает тензорное произведение двумерных матриц Фурье $F_2 \otimes F_2$ и континуальное семейство

$$H_4(\alpha) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & \mathbf{i}\,\mathrm{e}^{\mathbf{i}\alpha} & -1 & -\mathbf{i}\,\mathrm{e}^{\mathbf{i}\alpha} \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -\mathbf{i}\,\mathrm{e}^{\mathbf{i}\alpha} & -1 & \mathbf{i}\,\mathrm{e}^{\mathbf{i}\alpha} \end{pmatrix}, \qquad (34)$$

где α – вещественный параметр. Мы видим, что произвольное значение α нарушает 4-периодичность:

$$H_4(\alpha)^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}+\frac{1}{2}\,\mathrm{e}^{4\mathbf{i}\alpha} & 0 & \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\,\mathrm{e}^{4\mathbf{i}\alpha} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\,\mathrm{e}^{4\mathbf{i}\alpha} & 0 & \frac{1}{2}+\frac{1}{2}\,\mathrm{e}^{4\mathbf{i}\alpha} \end{pmatrix}.$$

Периодичность обеспечивается только если $\alpha = \pi k/2$, где k – целое. При этом матрица семейства (34) сводится к матрицам Фурье:

$$H_4(\pi k/2) = \begin{cases} F_2 \otimes F_2, & \text{если } k \text{ нечетное,} \\ \quad F_4, & \text{если } k \text{ четное.} \end{cases}$$

В общем случае, восстанавливая конструктивность мы должны использовать конечные множества в качестве координат векторов: целые степени базового корня из единицы для нечетных размерностей, и полуцелые – для четных.

Исходя из этих соображений мы реализовали на языке Си алгоритм, на первом шаге которого отбираются векторы, несмещенные относительно матрицы Фурье F_N, соответствующей наблюдаемой Z. Компоненты этих векторов являются целыми или полуцелыми, в зависимости от четности N, степенями базового корня из единицы ω. Таким образом, векторы кодируются комбинациями вида $\{0, \lambda_1, \ldots, \lambda_k, \ldots, \lambda_{N-1}\}$, где либо $\lambda_k \in \{0, 1, \ldots, N-1\}$, либо $\lambda_k \in \left\{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots, N-1, \frac{2N-1}{2}\right\}$.

Затем в множестве отобранных векторов выделяются подмножества, образующие ортонормальные базисы. Алгоритм завершается выделением максимальных взаимно несмещенных подмножеств в множестве базисов. Наиболее трудным является первый шаг алгоритма, поскольку число векторов, которые необходимо сгенерировать и проверить, равно N^{N-1}, если N нечетное, или $(2N)^{N-1}$, если N четное.

Мы провели вычисления на персональном компьютере с процессором 3.3GHz для всех $N = 2, 3, \ldots, 11$. Вычисления воспроизвели правильные результаты во всех размерностях, являющихся степенями простых чисел. В проблемных размерностях $N = 6$ и $N = 10$, мы получили $\mathfrak{M}_6 = \mathfrak{M}_{10} = 3$, т.е., минимальные значения, гарантированные неравенством (12), что согласуется с результатами вычислений других авторов.

Времена вычислений для размерностей $N = 10$ и $N = 11$ составили, соответственно, 1 час 23 мин. 32 сек. и 9 мин. 53 сек.

Благодарности. Я благодарен Ю. А. Блинкову, Н. Н. Васильеву и В. М. Северьянову за обсуждение работы и ценные советы.

Список литературы

1. H. H. Pattee, *The complementarity principle in biological and social structures.* — J. Soc. Biolog. Structures **1**, No. 2 (1978), 191–200.
2. J. Schwinger, *Unitary operator bases.* — Proc. Natl. Acad, Sci, USA **46**, No. 4 (1960), 570–579.
3. W. K. Wootters, B. D. Fields, *Optimal state-determination by mutually unbiased measurements.* — Annals Physics **191**, No. 2 (1989), 363–381.
4. V. V. Kornyak, *Quantum models based on finite groups.* — J. Phys.: Conference Series **965** (2018), 012023.
5. V. V. Kornyak, *Modeling quantum behavior in the framework of permutation groups.* — EPJ Web of Conferences **173** (2018), 01007.
6. V. V. Kornyak, *Mathematical modeling of finite quantum systems.* — Lect. Notes Comput. Sci. **7125** (2012), 79–93.
7. G. 't Hooft, The Cellular Automaton Interpretation of Quantum Mechanics, Fundamental Theories of Physics, Springer International Publishing (2016).
8. Г. Вейль, *Теория групп и квантовая механика*, Наука, Москва (1986).
9. T. Durt, B.-G. Englert, I. Bengtsson, K. Życzkowski, *On mutually unbiased bases.* — Intern. J. Quantum Inform. **8**, No. 4 (2010), 535–640.
10. G. M. D'Ariano, M. G. A. Paris, M. F. Sacchi, *Quantum tomography.* — Adv. Imag. Elect. Phys. **128** (2003), 206–309.
11. I. D. Ivanovic, *Geometrical description of quantal state determination.* — J. Phys. A: Math. General **14**, No. 12 (1981), 3241–3245.
12. B.-G. Englert, Ya. Aharonov, *The mean king's problem: prime degrees of freedom.* — Phys. Letters A **284**, No. 1 (2001), 1–5.
13. S. Bandyopadhyay, P. O. Boykin, V. Roychowdhury, F. Vatan, *A new proof for the existence of mutually unbiased bases.* — Algorithmica **34**, No. 4 (2002), 512–528.
14. W. Bruzda, W. Tadej, K. Życzkowski, *Catalogue of Complex Hadamard Matrices*, `https://chaos.if.uj.edu.pl/ karol/hadamard/index.html`, 24.09.2022.
15. R. Jagannathan, *On generalized Clifford algebras and their physical applications.* — In: The legacy of Alladi Ramakrishnan in the mathematical sciences, Springer, pp. 465–489 (2010).
16. А. А. Кириллов, *Элементы теории представлений*, Наука, Москва (1978).
17. K. Morinaga, T. Nōno, *On the Linearization of a Form of Higher Degree and its Representation.* — J. Sci. Hiroshima University, Ser. A (Mathematics, Physics, Chemistry) **16** (1952), 13–41.
18. T. Banks, *Finite deformations of quantum mechanics*, `arXiv:2001.07662 [hep-th]`, (2020).
19. V. V. Kornyak, *Quantum mereology in finite quantum mechanics.* — Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science **29**, No. 4 (2021), 347–360.
20. V. V. Kornyak, *Subsystems of a closed quantum system in finite quantum mechanics.* — J. Math. Sci. **261** (2022), 717–729.

21. V. V. Kornyak, *Decomposition of a finite quantum system into subsystems: symbolic–numerical approach.* — Programming and Computer Software **48** (2022), 293–300.
22. S. Brierley, S. Weigert, I. Bengtsson, *All mutually unbiased bases in dimensions two to five.* — Quantum Inf. Comput. **10** (2010), 803–820.
23. S. Brierley, S. Weigert, *Constructing mutually unbiased bases in dimension six.* — Phys. Rev. A **79**, No. 5 (2009), 052316.
24. M. P. Colomer, L. Mortimer, I. Frérot, M. Farkas, A. Acín *Three numerical approaches to find mutually unbiased bases using Bell inequalities* `arXiv preprint arXiv:2203.09429`, (2022).
25. A. Klappenecker, M. Rötteler, *Constructions of mutually unbiased bases.* — In: International Conference on Finite Fields and Applications, Springer, pp. 137–144 (2003).

Kornyak V. V. The complementarity principle and complementary observables in constructive quantum mechanics.

The mathematical formulation of Bohr's complementarity principle leads to the concepts of mutually unbiased bases in Hilbert spaces and complementary quantum observables. We consider the algebraic structures associated with these concepts and their applications to constructive quantum mechanics. Computer-algebraic approaches to the problems under consideration are briefly discussed.

Лаборатория информационных технологий,
Объединенный институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Россия
E-mail: `vkornyak@gmail.com`

Поступило 25 сентября 2022 г.