ПРОГРАММИРОВАНИЕ, 2023, № 5, с. 59–69

КОМПЬЮТЕРНАЯ АЛГЕБРА

УДК 512.547.2:530.145.81

ДОПОЛНИТЕЛЬНОСТЬ В КОНЕЧНОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И КОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ КОМПЛЕМЕНТАРНЫХ НАБЛЮДАЕМЫХ

© 2023 г. В. В. Корняк[a],*

[a]*Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Московская область, Россия*

**E-mail: vkornyak@gmail.com*

Поступила в редакцию 17.07.2022 г.
После доработки 17.08.2022 г.
Принята к публикации 30.10.2022 г.

Математическая формулировка принципа дополнительности Бора приводит к понятиям взаимно несмещенных базисов в гильбертовых пространствах и комплементарных квантовых наблюдаемых. Мы рассматриваем связанные с этими понятиями алгебраические структуры и их приложения к конструктивной квантовой механике. Кратко обсуждаются компьютерно-алгебраические подходы к рассматриваемым задачам и приводится алгоритм для решения одной из них.

DOI: 10.31857/S0132347423020115, **EDN:** MFYKPU

1. ВВЕДЕНИЕ

Согласно *принципу дополнительности* (*комплементарности*) Бора для полного описания квантовомеханических явлений неизбежно использование взаимоисключающих, т.е., не допускающих одновременного измерения, наборов данных. Этому принципу, сформулированному Бором на гносеологическом уровне[1], можно придать более конкретный математический смысл с помощью введенного Швингером [2] понятия, для которого впоследствии был предложен ставший общепринятым термин [3] “взаимно несмещенные базисы”.

Два ортонормальных базиса

$$\mathscr{A} = \{|a_0\rangle, |a_1\rangle, \ldots, |a_{N-1}\rangle\}$$

и

$$\mathscr{B} = \{|b_0\rangle, |b_1\rangle, \ldots, |b_{N-1}\rangle\}$$

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.,

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

Классическим 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 *канонически сопряженными* (или *комплементарными*), если множества их нормализованных собственных векторов образуют взаимно несмещенную пару.

В многочисленных исследованиях понятия квантовой дополнительности, начиная с работ Вейля и Швингера, было показано, что в N-мерном гильбертовом пространстве не может быть (с точностью до унитарной эквивалентности) больше, чем $N + 1$ взаимно сопряженных наблюдаемых. При этом все они конструируются как алгебраические следствия определенной *базовой пары* канонически сопряженных наблюдаемых, одна из которых (мы будем обозначать ее символом X, поскольку при $N = 2$ она аналогична спиновой матрице Паули σ_x) порождается циклической перестановкой N элементов (эти элементы можно отождествить с базисными векторами рассматриваемого N-мерного гильбертова простран-

[1] Предполагается, что вариации принципа дополнительности можно применять в различных областях, где ради полноты описания используются различные, одновременно несовместимые, средства. Например, в статье представлен обзор принципа дополнительности в биологии, психологии и социальных науках.

ства), а другая наблюдаемая Z (аналог матрицы Паули σ_z) получается приведением матрицы X к диагональному виду с помощью преобразования Фурье. Несмотря на эту эквивалентность между наблюдаемыми X и Z (по сути это одна и та же матрица, записанная в двух разных базисах), из формализма квантовой механики следует, что для воспроизведения квантовых интерференций необходимо рассматривать эти наблюдаемые как различные элементы[2].

Тот факт, что канонически сопряженные наблюдаемые по существу происходят из единственной циклической перестановки[3] 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. В результате возникают алгебраические структуры, называемые обобщенными алгебрами Клиффорда.

Канонически сопряженные наблюдаемые можно использовать 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, изучение временно́й эволюции этих характеристик и т.д.

Компьютерные вычисления являются эффективным методом исследования рассматриваемых в данной статье проблем. Для построения и исследования систем канонически сопряженных наблюдаемых и связанных с ними задач разрабатываются и реализуются алгоритмы, основанные, главным образом, на методах компьютерной алгебры.

2. КАНОНИЧЕСКИЕ КОММУТАЦИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ

2.1. Каноническое коммутационное соотношение Гейзенберга

В основе квантовой механики лежит каноническое коммутационное соотношение

$$[a,b] = \mathbf{i}\hbar \tag{2.1}$$

между канонически сопряженными наблюдаемыми a и b, представляющими собой эрмитовы операторы. Типичный пример канонически сопряженных наблюдаемых — операторы координаты $\hat{x} = x$ и импульса $\hat{p} = -\mathbf{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ квантовой частицы, движущейся в одном измерении.

Без соотношений вида (2.1) невозможно описание квантового поведения, в частности, квантовых интерференций. Теорема Стоуна–фон Неймана доказывает единственность соотношений (2.1) для любой квантовой теории в бесконечномерном сепарабельном гильбертовом пространстве.

Канонические коммутационные соотношения (2.1) невозможно реализовать матрицами в пространстве конечной размерности N, поскольку вычисляя, например, след левой и правой частей равенства (2.1) мы получим противоречие:

$$\begin{aligned}&\mathrm{tr}([a,b]) = \mathrm{tr}(ab) - \mathrm{tr}(ba) = 0\\ &\|\\ &\mathrm{tr}(\mathbf{i}\hbar\mathbb{1}_N) = \mathbf{i}\hbar N.\end{aligned}$$

Это означает, что каноническое коммутационное соотношение в форме (2.1) не является фундаментальным, а представляет собой некоторую аппроксимацию.

2.2. Канонически сопряженные наблюдаемые Вейля–Швингера

Герман Вейль [8] построил более фундаментальные коммутационные соотношения, пригодные в N-мерном случае и воспроизводящие соотношение (2.1) в пределе $N \to \infty$.

В квантовой механике наблюдаемые обычно 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. В квантовом формализме главную роль играет разложение гильбертова пространства в прямую сумму ортогональных подпространств, задаваемых собственными векторами оператора, а не конкретные значения собственных чисел, поэтому достаточно, чтобы операторы были *нормальными*[4]. В частности, эрмитовы 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 пе-

[2] Необходимость как минимум двух различных базисов (систем координат) для описания физической реальности это своего рода проявление принципа дополнительности.

[3] Заметим, что циклические перестановки это наиболее простые составляющие, на которые разлагается любая перестановка.

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

ресчитать, используя простые функции (например, экспоненты и логарифмы в случае эрмитовых и унитарных операторов).

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

$$XZ = \omega ZX \tag{2.2}$$

и доказал его единственность. Здесь $\omega = e^{2\pi i/N}$ – базовый примитивный корень N-й степени из единицы, а унитарные операторы X и Z имеют (с точностью до унитарной эквивалентности) вид

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \\ 1 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \omega & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \omega^{N-1} \end{pmatrix}. \tag{2.3}$$

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

$$X^N = Z^N = \mathbb{1}. \tag{2.4}$$

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 в гильбертовых пространствах произвольной размерности N матрицы X и Z 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 унитарным преобразованием:

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

где F – матрица преобразования Фурье:

$$F = \frac{1}{\sqrt{N}}(\omega^{-k\ell}), \quad k, \ell = 0, 1, \dots, N-1. \tag{2.5}$$

2.3. Группа Вейля–Гейзенберга и унитарный базис Швингера

Пара канонически сопряженных наблюдаемых X и Z является алгебраически полной в том смысле, что из произведений их степеней можно построить полный базис пространства $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ линейных операторов в N-мерном гильбертовом пространстве [9].

С помощью соотношений (2.2) и (2.4) произвольное произведение степеней X и Z можно привести к виду

$$Y_{k\ell m} = \omega^k X^\ell Z^m, \quad k, \ell, m = 0, 1, \dots, N-1. \tag{2.6}$$

Унитарные операторы (2.6) образуют конечную группу порядка N^3, называемую *группой Вейля–Гейзенберга* или *обобщенной группой Паули*.

Подмножество группы Вейля–Гейзенберга, состоящее из N^2 матриц вида $X^\ell Z^m$, образует базис пространства операторов $\mathcal{L}(\mathcal{H})$, называемый *унитарным базисом 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,

$$\{\mathbb{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\},$$

поскольку матрицу Паули $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{i} \\ \mathbf{i} & 0 \end{pmatrix}$ можно представить как $\sigma_y = \mathbf{i}\sigma_x\sigma_z$ – умножение на $\mathbf{i}$ переводит антиэрмитову матрицу $\sigma_x\sigma_z$ в эрмитову и, таким образом, все три спиновые матрицы Паули σ_x, σ_y, σ_z оказываются одновременно и унитарными и эрмитовыми.

3. КАНОНИЧЕСКИ СОПРЯЖЕННЫЕ НАБЛЮДАЕМЫЕ И ВЗАИМНО НЕСМЕЩЕННЫЕ БАЗИСЫ

Рассмотрим два базиса в N-мерном гильбертовом пространстве

1. $\mathcal{B}_o = \{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |N-1\rangle\}$ – базис, в котором оператор X действует как циклическая перестановка в соответствии с (2.3) (исходный "онтический базис").

2. $\mathcal{B}_\varepsilon = \{|\tilde{0}\rangle, |\tilde{1}\rangle, \dots, |\widetilde{N-1}\rangle\}$ – базис, в котором оператор X имеет диагональный вид ("энергетический базис").

Эти два базиса связаны между собой преобразованием Фурье (2.5). Легко показать, что базисы $\mathcal{B}_o$ и $\mathcal{B}_\varepsilon$ являются взаимно несмещенными:

$$\mathcal{B}_\varepsilon = F\mathcal{B}_o$$
$$\Rightarrow |\,\tilde{\ell}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=0}^{N-1}|k\rangle\omega^{-k\ell}$$
$$\Rightarrow \langle\tilde{\ell}|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\omega^{k\ell}$$
$$\Rightarrow |\langle\tilde{\ell}|k\rangle|^2 = \frac{1}{N} \quad \square$$

Возникает естественный вопрос: какие еще, помимо X и Z, сопряженные наблюдаемые и ассоциированные с ними взаимно несмещенные базисы возможны в гильбертовом пространстве данной размерности N? Этот вопрос связан непосредственно с проблемой измерений в квантовой механике.

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, соответствующие элементам некоторого ортонормального базиса. Единичное квантовое событие фиксируется датчиком как попадание квантовой системы в одно из подпространств. 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

$$(N^2 - 1)/(N - 1) = N + 1$$

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 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 M_N равно максимально возможному значению $N + 1$. Например, если $N = p$ – простое число, то несложно проверить [12], что собственные базисы унитарных наблюдаемых X, Z, XZ, XZ^2, ..., XZ^{p-1} образуют множество взаимно несмещенных базисов с максимально возможным числом элементов $N + 1$. Аналогичный набор сопряженных унитарных наблюдаемых можно построить и в более общем случае $N = p^m$ с помощью конструкций, использующих вычисления в полях Галуа 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

$$M_{N=p_1^{m_1}\cdots p_K^{m_K}} \geq \min\{p_1^{m_1},\ldots,p_K^{m_K}\} + 1. \qquad (3.1)$$

Однако задача построения максимального множества взаимно несмещенных базисов в произвольной размерности очень трудна [9] и не решена даже в простейшем случае $N = 2 \times 3$.

4. ПРОЕКТИВНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ АБЕЛЕВЫХ ГРУПП И ОБОБЩЕННЫЕ АЛГЕБРЫ КЛИФФОРДА

Проективные представления групп являются одним из центральных элементов квантового формализма. В частности, коммутационное соотношение (2.2) 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* [14].

4.1. Проективные представления

Правило умножения для операторов проективного (лучевого) представления R группы G в линейном пространстве над полем $\mathcal{F}$ имеет вид

$$R(g_1)R(g_2) = c(g_1, g_2)R(g_1g_2), \tag{4.1}$$

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

$$c : G \times G \to \mathcal{F}^* \equiv \mathcal{F}\backslash\{0\} \tag{4.2}$$

должна удовлетворять тождеству

$$c(g_1, g_2)c(g_1g_2, g_3) = c(g_1, g_2g_3)c(g_2g_3),$$

которое можно получить, если привести произведение $R(g_1)R(g_2)R(g_3)$ к $R(g_1g_2g_3)$ двумя разными путями используя (4.1).

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

$$R(g) \sim b(g)R(g), \tag{4.3}$$

где $b : G \to \mathcal{F}^*$ – произвольная функция на группе. Изменение выбора представителей приводит к замене $c(g_1, g_2) \to c_b(g_1, g_2)c(g_1, g_2)$ в формуле (4.1), где

$$c_b(g_1, g_2) = \frac{b(g_1)b(g_2)}{b(g_1g_2)}. \tag{4.4}$$

Функции (4.2) образуют коммутативную группу $Z^2(G, \mathcal{F}^*)$, называемую группой двумерных коциклов (2-коциклов). Функции вида (4.4), 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* [15] проективного представления R. Мультипликаторы, имеющие вид (4.4), принадлежат классу $[1 \in \mathcal{F}^*]$ и называются тривиальными. Проективное представление с тривиальным мультипликатором эквивалентно обычному линейному представлению.

Не всякая группа имеет нетривиальные проективные представления. Например, циклическая группа порядка n порождается одним элементом и имеет вид $G = \{1, g, g^2, \ldots, g^{n-1}\}$. Для проективного представления такой группы должно выполняться равенство $R(g)^n = a\mathbb{1}$, где a – некоторый скаляр $a \in \mathcal{F}^*$. Если $a \neq 1$, то, воспользовавшись эквивалентностью (4.3) 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 линейному 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

$$e_i^{N_i} = 1, \tag{4.5}$$

$$e_ie_j = \omega_{ij}e_je_i, \tag{4.6}$$

$$\omega_{ij}^{N_i} = \omega_{ij}^{N_j} = 1, \tag{4.7}$$

$$\omega_{ij}e_k = e_k\omega_{ij}, \quad \omega_{ij}\omega_{k\ell} = \omega_{k\ell}\omega_{ij}, \tag{4.8}$$

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

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

$$\omega_{ij} = \omega_{ji}^{-1} = \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} s_{ij}/N_{ij}}, \tag{4.9}$$

где s_{ij} – целые числа, $N_{ij} = \gcd(N_i, N_j)$. При таком выборе необходимость в соотношениях (4.8) отпадает[5].

[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 (4.6) принимают вид $e_ie_j = -e_je_i$.

Введя общий период для всех корней из единицы $N = \operatorname{lcm}(\{N_{ij}\})$ можно несколько унифицировать (4.9):

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

Таким образом, обобщенная алгебра Клиффорда задается множеством периодов

$$N_1, N_2, \ldots, N_n$$

для порождающих элементов и кососимметрической целочисленной матрицей

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

4.3. Проективные представления абелевых групп

Произвольную (конечную) абелеву группу можно представить в виде прямого произведения циклических групп

$$G = \mathbb{Z}_{N_1} \times \mathbb{Z}_{N_2} \times \ldots \times \mathbb{Z}_{N_n}. \tag{4.10}$$

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

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

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

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

где $P = \{p_1, \ldots, p_n\}$ – множество простых чисел (необязательно различных!), $M = \{m_1, \ldots, m_n\}$ – множество положительных целых чисел. Мы однако не будем предполагать, что в разложении (4.10) числа $N_1, \ldots, N_n$ – степени простых чисел.

Абелеву группу (4.10) можно задать с помощью соотношений

$$c_i^{N_i} = 1, \quad c_i c_j = c_j c_i, \quad i, j = 1, 2, \ldots, n, \tag{4.11}$$

где c_i обозначает образующую множителя $\mathbb{Z}_{N_i}$ в разложении (4.10). Подробное вычисление мультипликаторов проективного представления для G исходя из соотношений (4.11) приведено в [14]. Результатом вычислений являются соотношения для проективных образов $e_i = R(c_i)$, полностью совпадающие с соотношениями (4.5)–(4.8) 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 [16].

Г. 'т Хоофт также предполагает, что перестановки лежат в основе квантовой эволюции ([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 главных постулатов квантовой механики утверждает, что эволюция замкнутой квантовой системы описывается унитарным преобразованием.

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

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

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

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

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

$$\Omega \simeq \{0,1,\ldots,\mathcal{N}-1\}, \qquad (5.1)$$

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 некоторого $\mathcal{N}$-мерного гильбертова пространства $\mathcal{H}_{\mathcal{N}}$. 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

$$U = \mathcal{M}(g), \qquad (5.2)$$

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 $t \in$ — дискретное время, а порождающим элементом является унитарный оператор (5.2). Любую перестановку $g \in \mathrm{Sym}(\Omega)$ можно разложить в произведения непересекающихся циклов

$$\begin{gathered} g = (c_1)\ldots(c_k)\ldots(c_K), \\ c_k^{L_k} = \mathbf{1}, \quad \sum_{k=1}^{K} L_k = \mathcal{N}, \end{gathered} \qquad (5.3)$$

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

В соответствии с разложением (5.3) оператор (5.2), порождающий эволюцию, приобретает вид

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

Это означает, что онтическое множество разбивается в объединение непересекающихся подмножеств

$$\Omega = \Omega_1 \sqcup \Omega_2 \sqcup \ldots \sqcup \Omega_K, \qquad (5.4)$$

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

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

унитарная эволюция в каждом из которых задается оператором вида (2.3). Поэтому мы можем рассматривать эволюцию в каждом из подмножеств в разложении (5.4) независимо от остальных подмножеств, причем эта эволюция будет простой циклической перестановкой.

Чтобы избежать громоздких обозначений для выделения одного из подмножеств в разбиении (5.4), мы будем рассматривать циклическую эволюцию длины $\mathcal{N}$ всего онтического множества.

5.2. Канонически сопряженные наблюдаемые и взаимно несмещенные базисы

Онтический базис, в соответствии с (5.1), имеет вид

$$\mathcal{B}_o = \{|0\rangle, |1\rangle, \ldots, |\mathcal{N}-1\rangle\}. \qquad (5.5)$$

Циклическая эволюция порождается онтической канонической наблюдаемой $\mathcal{X}$, действие которой на элементы онтического базиса (5.5) имеет вид

$$\mathcal{X}|k\rangle = |k-1 (\mathrm{mod}\, \mathcal{N})\rangle.$$

Нормированные собственные векторы наблюдаемой $\mathcal{X}$ образуют ортонормальный базис

$$\mathcal{B}_\varepsilon = \{|\tilde{0}\rangle, |\tilde{1}\rangle, \ldots, |\widetilde{N-1}\rangle\}, \qquad (5.6)$$

который мы называем *энергетическим*[7].

В энергетическом базисе, переход к которому от онтического осуществляется преобразованием Фурье, оператор $\mathcal{X}$ имеет вид

$$\mathcal{Z} = \mathrm{diag}(1, \omega, \omega^2, \ldots, \omega^{\mathcal{N}-1}),$$

где $\omega = e^{2\pi i/\mathcal{N}}$ — базовый примитивный корень из единицы степени $\mathcal{N}$.

В разделе 3 показано, что базисы (5.5) и (5.6) являются взаимно несмещенными, а операторы $\mathcal{X}$ и $\mathcal{Z}$ образуют базовую пару канонически сопряженных наблюдаемых.

5.3. 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.

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

[7] Мы пользуемся этим термином поскольку собственные значения оператора $\mathcal{X}$ представляют собой экспоненты частот, которые пропорциональны энергиям согласно формуле Планка $E = h\nu$, считающейся справедливой для периодического процесса любой природы.

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 [17–19]. 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 $\mathcal{H}_{\mathcal{N}}$, в качестве разложения размерности – разложение на элементарные множители

$$\mathcal{N} = p_1^{m_1} p_2^{m_2} \ldots p_k^{m_k} \ldots p_K^{m_K}, \tag{5.7}$$

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

$$\mathcal{H}_{\mathcal{N}} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_K,$$

где $\dim\mathcal{H}_k = p_k^{m_k}$.

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

$$\begin{aligned} \mathcal{X} &= X_1 \otimes X_2 \otimes \ldots \otimes X_K, \\ \mathcal{Z} &= Z_1 \otimes Z_2 \otimes \ldots \otimes Z_K. \end{aligned} \tag{5.8}$$

Заметим, что эти равенства невозможны при несоблюдении требования различия простых чисел в разложении (5.7).

"Логарифмированием" (5.8) можно получить выражение, связывающее глобальный гамильтониан с локальными

$$\begin{aligned} \mathrm{H} = H_1 \otimes \mathbb{1}_2 \otimes \ldots \otimes \mathbb{1}_K + \mathbb{1}_1 \otimes H_2 \otimes \ldots \otimes \mathbb{1}_K \\ + \ldots + \mathbb{1}_1 \otimes \mathbb{1}_2 \otimes \ldots \otimes H_K, \end{aligned} \tag{5.9}$$

где $\mathbb{1}_k$ – единичные матрицы соответствующих размерностей. Отметим специальный вид формулы (5.9): глобальный гамильтониан равен сумме гамильтонианов подсистем – "энергия системы равна сумме энергий подсистем". При разложении квантовой системы на подсистемы "наугад" формула аналогичная (5.9) будет, как правило, содержать дополнительно гамильтонианы взаимодействий между подсистемами.

6. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ

Для решения многочисленных 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, $\omega_n = \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}/n}$, содержит два трансцендентных числа, **e** и π, на самом деле 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 (2.6).

Положительным с вычислительной точки зрения свойством этих матриц является то, что они содержат ровно N (а не N^2) ненулевых элементов в N-мерном случае.

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 [20–23]. Задача полностью решена для размерностей вида $N = p^m$, т.е. для степеней простого числа. В этом случае с помощью унитарных матриц из базиса Швингера 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, подвергся наиболее интенсивному изучению (см., например, [21]), имеется твердое, хотя и не доказанное, убеждение, что максимальное число взаимно несмещенных базисов в этой размерности равно трем: $M_{N=6} = 3$.

Обычно алгоритмы поиска взаимно несмещенных базисов основаны на работе с унитарными матрицами из группы Вейля–Гейзенберга (2.6). Мы предлагаем здесь алгоритм, в основе которого лежит "фазовая калибровочная инвариантность" онтического базиса, дающая возможность построить полное множество неэквивалентных комплементарных партнеров онтического базиса.

6.1. Комбинаторный алгоритм поиска взаимно несмещенных базисов

Пусть $\mathcal{B}_o = \{|0\rangle, ..., |k\rangle, ..., |N-1\rangle\}$ – онтический базис. Калибровочное преобразование этого базиса, сводящееся к умножению его элементов на произвольные фазовые множители, приводит к ортонормальному базису

$$\mathcal{B}_{o,\boldsymbol{\lambda}} = \left\{ e^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{N}\lambda_0}|0\rangle, \dots, e^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{N}\lambda_k}|k\rangle, \dots, e^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{N}\lambda_{N-1}}|N-1\rangle \right\},$$

где мы используем обозначение

$$\boldsymbol{\lambda} = \{\lambda_0, \dots, \lambda_k, \dots, \lambda_{N-1}\}.$$

Базис $\mathcal{B}_{o,\boldsymbol{\lambda}}$ физически неотличим от исходного базиса $\mathcal{B}_o$, поскольку фигурирующие в квантовых измерениях проекторы в базисные подпространства не меняются:

$$|k\rangle\langle k| \to e^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{N}\lambda_k}|k\rangle\langle k|e^{-\frac{2\pi \mathrm{i}}{N}\lambda_k} = |k\rangle\langle k|.$$

Однако переход к комплементарному базису $\mathcal{B}_{\boldsymbol{\lambda}} = F\mathcal{B}_{o,\boldsymbol{\lambda}}$, ℓ-й элемент которого имеет вид

$$|\boldsymbol{\lambda}, \ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=0}^{N-1}|k\rangle\omega^{-k\ell}e^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{N}\lambda_k},$$

приводит к физически наблюдаемым последствиям, поскольку в проекторах базиса $\mathcal{B}_\lambda$ появляются физически значимые элементы, зависящие от $\boldsymbol{\lambda}$:

$$|\boldsymbol{\lambda}, \ell\rangle\langle\boldsymbol{\lambda}, \ell| = \frac{1}{N}\sum_{k,k'=0}^{N-1}|k\rangle\langle k'|\omega^{(k'-k)\ell}e^{\boxed{\frac{2\pi \mathrm{i}}{N}(\lambda_k - \lambda_{k'})}}.$$

Это один из примеров проявления квантовой дополнительности.

Выражение для $|\boldsymbol{\lambda}, \ell\rangle$ можно переписать в виде

$$|\boldsymbol{\lambda}, \ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=0}^{N-1}|k\rangle\omega^{-k\ell+\lambda_k}. \qquad (6.1)$$

Если размерность N – нечетное число, то все элементы группы Вейля–Гейзенберга (2.6) имеют период N, однако в четной размерности некоторые элементы этой группы имеют период $2N$. Из (6.1) видно, что обеспечить должную периодичность можно, предположив, что λ_k – целые числа в нечетной размерности и полуцелые – в четной. Четная размерность требует дополнительного внимания при программировании алгоритма, но для простоты изложения основных идей алгоритма мы будем далее предполагать, что N – нечетное число.

Каждый базис $\mathcal{B}_\lambda$, нумеруемый элементом $\boldsymbol{\lambda}$ множества $\Lambda = \{0, 1, ..., N-1\}^N$, комплементарен онтическому базису $\mathcal{B}_o$, что видно из скалярного произведения базисных элементов $|k\rangle \in \mathcal{B}_o$ и $|\boldsymbol{\lambda}, \ell\rangle \in \mathcal{B}_{\boldsymbol{\lambda}}$

$$\langle k \mid \boldsymbol{\lambda}, \ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\omega^{-k\ell+\lambda_k} \Rightarrow |\langle k \mid \boldsymbol{\lambda}, \ell\rangle|^2 = \frac{1}{N}.$$

Пусть $V_\Lambda = \{\mathcal{B}_{\boldsymbol{\lambda}} : \lambda \in \Lambda\}$ – множество всех базисов, комплементарных к онтическому. Эти базисы индексируются элементами множества Λ.

Мы можем интерпретировать множество

$$V = \{\mathcal{B}_o\} \cup V_\Lambda$$

как множество вершин графа, ребрами которого являются комплементарные (т.е., взаимно несмещенные) пары базисов и, таким образом, проблема сводится к классической задаче теории графов – поиску *клик*[8] в графе. Максимальные множества взаимно несмещенных базисов являются кликами максимального размера.

Учитывая фундаментальное значение канонической пары комплементарных наблюдаемых X и Z, а также для уменьшения объема вычислений мы потребуем, чтобы искомая клика обязательно содержала эту пару.

Наблюдаемая X соответствует вершине $\mathcal{B}_o$, которую можно сразу исключить из рассмотрения, поскольку она соединена ребрами со всеми остальными вершинами и подключается автоматически к любой клике, найденной в графе V_Λ.

Наблюдаемой Z соответствует "энергетический базис"

$$\mathcal{B}_\varepsilon \equiv \mathcal{B}_{\mathbf{0}} \in V_\Lambda,$$

где $\mathbf{0} = \{0, 0, ..., 0\} \in \Lambda$.

Первым шагом алгоритма является сканирование множества $\Lambda\backslash\{\mathbf{0}\}$ с выделением множества вершин $V_{\mathbf{0}}$, смежных с вершиной $\mathcal{B}_o$. Ввиду большого размера множества $\Lambda\backslash\{0\}$, это наиболее трудоемкая часть вычислений, вносящая основной вклад в затраты времени. Например, в размерности $N = 11$ мы имеем

$$|\Lambda\backslash\{0\}| = 285311670610 \approx 2.9 \times 10^{11}.$$

При этом, множество смежных с $\mathcal{B}_o$ вершин, получаемое в результате работы первого шага, имеет небольшой размер, например, $|V_{\mathbf{0}}| = 1210$ для $N = 11$.

Для завершающего шага вычислений – поиску клик в графе $V_{\mathbf{0}}$, мы используем алгоритм Брона–Кербоша [24, 25]. Этот алгоритм является одним из самых эффективных алгоритмов поиска клик[9] и считается стандартным для решения этой задачи.

[8] Кликой называется полный подграф неориентированного графа, не содержащийся в большем полном подграфе.

[9] После работы Брона и Кербоша появился ряд конкурирующих алгоритмов [26–29], но ввиду некритичности этой части наших вычислений, вряд ли целесообразно заниматься сравнительным изучением различных алгоритмов.

Основной процедурой нижнего уровня является определение взаимной несмещенности базисов (смежности вершин графов). Эта процедура сводится к вычислению и анализу выражений $\langle \boldsymbol{\mu}, m|\boldsymbol{\lambda}, \ell\rangle$. Технически удобно отбросить коэффициенты нормировки (степени выражения $\frac{1}{\sqrt{N}}$) и иметь дело с полиномами от корней из единицы. Тогда бóльшая часть вычислений сводится к целочисленной модулярной арифметике и только для окончательного приведения выражений по модулю циклотомического полинома $\Phi_N(\omega)$ применяются методы полиномиальной алгебры.

Проверка несмещенности сводится к следующему. В результате вычисления скалярного произведения $\langle \boldsymbol{\mu}, m|\boldsymbol{\lambda}, \ell\rangle$ возникает полином вида

$$A(\omega) = \sum_{k=0}^{N-1} \omega^{k(m-\ell)+\lambda_k-\mu_k}.$$

Если после редукции по $\Phi_N(\omega)$ квадрата модуля этого полинома выполняется равенство

$$|A(\omega)|^2 = N,$$

то проверка продолжается на другой комбинации базисных элементов, в противном случае проверка прекращается и сообщается, что базисы не являются взаимно несмещенными (отсутствует ребро между парой вершин).

С помощью реализации этого алгоритма на языке Си мы выполнили поиск максимальных множеств взаимно несмещенных базисов для всех размерностей до $N = 11$ включительно.

В нетривиальных размерностях $N = 6$ и $N = 10$, в согласии с результатами работ других авторов, мы получили $M_{N=6} = M_{N=10} = 3$, т.е., минимальные значения, гарантированные неравенством (3.1).

Вычисления проводились на персональном компьютере с процессором 3.3GHz Intel Core i3 2120. Приведем времена вычислений, T_N, в секундах для размерностей $8 \le N \le 11$:

$$T_8 = 4.7, \quad T_9 = 155, \quad T_{10} = 5012, \quad T_{11} = 169278.$$

Имеются очевидные возможности существенного улучшения алгоритма и реализации, поэтому есть определенная надежда "добраться" до следующих нетривиальных размерностей $N = 12$, 14, 15.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Pattee H.H.* The complementarity principle in biological and social structures // Journal of Social and Biological Structures. 1978. V. 1. № 2. P. 191–200. Access mode: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0140175078800074.
2. *Schwinger Julian*. Unitary Operator Bases // Proc Natl Acad Sci U S A. 1960. Apr. V. 46. № 4. P. 570–579. Access mode: https://www.pnas.org/doi/abs/10.1073/pnas.46.4.570.
3. *Wootters William K., Fields Brian D.* Optimal state-determination by mutually unbiased measurements // Annals of Physics. 1989. May. V. 191. № 2. P. 363–381.
4. *Kornyak Vladimir V.* Quantum models based on finite groups // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Feb. V. 965. P. 012023. Access mode: https://doi.org/10.1088/1742-6596/965/1/012023
5. *Kornyak Vladimir V.* Modeling Quantum Behavior in the Framework of Permutation Groups // EPJ Web of Conferences. 2018. V. 173. P. 01007. Access mode: https://doi.org/10.1051/epjconf/201817301007
6. *Kornyak Vladimir V.* Mathematical Modeling of Finite Quantum Systems // Lect. Notes Comput. Sci. 2012. V. 7125. P. 79–93. 1107.5675.
7. *'t Hooft Gerard.* The Cellular Automaton Interpretation of Quantum Mechanics. Fundamental Theories of Physics. Cham: Springer International Publishing, 2016. ISBN: 978-3-319-82314-0. Access mode: https://doi.org/10.1007/978-3-319-41285-6.
8. *Вейль Герман*. Теория групп и квантовая механика. Москва: "Наука", 1986. С. 496.
9. On Mutually Unbiased Bases / Durt Thomas, Englert Berthold-Georg, Bengtsson Ingemar, and Z˙ yczkowski Karol // International journal of quantum information. 2010. V. 8. № 4. P. 535–640.
10. *D'Ariano G.* Mauro, Paris Matteo G.A., *Sacchi Massimiliano F.* Quantum tomography // Advances in Imaging and Electron Physics. 2003. V. 128. P. 206–309.
11. Ivanovic I.D. Geometrical description of quantal state determination // Journal of Physics A: Mathematical and General. 1981. dec. V. 14. № 12. P. 3241–3245. Access mode: https://doi.org/10.1088/0305-4470/14/12/019
12. *Englert Berthold-Georg*, *Aharonov Yakir*. The mean king's problem: prime degrees of freedom // Physics Letters A. 2001. V. 284. № 1. P. 1–5.
13. A New Proof for the Existence of Mutually Unbiased Bases / Bandyopadhyay Somshubhro, Boykin P Oscar, Roychowdhury Vwani, and Vatan Farrokh // Algorithmica. 2002. V. 34. № 4. P. 512–528.
14. *Jagannathan Ramaswamy*. On generalized Clifford algebras and their physical applications // The legacy of Alladi Ramakrishnan in the mathematical sciences. Springer, 2010. P. 465–489.
15. *Кириллов А.А.* Элементы теории представлений. Москва: "Наука", 1978. С. 343.
16. *Banks T.* Finite Deformations of Quantum Mechanics // arXiv: High Energy Physics – Theory. 2020. Jan. P. 2001.07662.
17. *Kornyak Vladimir V.* Quantum mereology in finite quantum mechanics // Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science. 2021. V. 29. № 4. P. 347–360. Access mode: https://journals.rudn.ru/miph/article/view/29428.
18. *Kornyak Vladimir V.* Subsystems of a Closed Quantum System in Finite Quantum Mechanics // Journal of Mathematical Sciences. 2022. Apr. V. 261. P. 717–729.

Access mode: https://doi.org/10.1007/s10958-022-05783-2

19. *Kornyak Vladimir V.* Decomposition of a Finite Quantum System into Subsystems: Symbolic–Numerical Approach // Programming and Computer Software. 2022. Jul. V. 48. P. 293–300. Access mode: https://doi.org/10.1134/S0361768822020062
20. *Brierley Stephen, Weigert Stefan, Bengtsson Ingemar*. All mutually unbiased bases in dimensions two to five // Quantum Inf. Comput. 2010. V. 10. P. 803–820.
21. *Brierley Stephen, Weigert Stefan*. Constructing mutually unbiased bases in dimension six // Phys. Rev. A. 2009. May. V. 79. P. 052316. Access mode: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.79.052316.
22. Three numerical approaches to find mutually unbiased bases using Bell inequalities / Colomer Maria Prat, Mortimer Luke, Frérot Iréenée, Farkas Máté, and Acín Antonio // arXiv preprint arXiv:2203.09429. 2022.
23. *Klappenecker Andreas, Rötteler Martin*. Constructions of mutually unbiased bases // International Conference on Finite Fields and Applications / Springer. 2003. P. 137–144.
24. *Bron Coenraad, Kerbosch Joep*. Algorithm 457: finding all cliques of an undirected graph // Communications of The ACM. 1973. V. 16. P. 575–577.
25. *Рейнгольд Э., Нивергельт Ю., Део Н.* Комбинаторные алгоритмы: теория и практика. Москва: "МИР", 1980. С. 478.
26. *Tarjan Robert Endre*, *Trojanowski Anthony E.* Finding a Maximum Independent Set // SIAM Journal on Computing. 1977. V. 6. № 3. P. 537–546. https://doi.org/10.1137/0206038
27. *Carraghan Randy, Pardalos Panos M*. An exact algorithm for the maximum clique problem // Operations Research Letters. 1990. V. 9. № 6. P. 375–382. Access mode: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/016763779090057C.
28. *Robson John Michael*. Algorithms for Maximum Independent Sets // J. Algorithms. 1986. V. 7. P. 425–440.
29. *Östergård Patric R.J.* A fast algorithm for the maximum clique problem // Discrete Applied Mathematics. 2002. V. 120. № 1. P. 197–207. Special Issue devoted to the 6th Twente Workshop on Graphs and Combinatorial Optimization. Access mode: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0166218X01002906.

Complementarity in Finite Quantum Mechanics and Computer-Aided Computations of Complementary Observables

© 2023 г. V. V. Kornyak

Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow oblast, 141980 Russia

e-mail: vkornyak@gmail.com

Mathematical formulation of Bohr's complementarity principle leads to the concepts of mutually unbiased bases in Hilbert spaces and complementary quantum observables. In this paper, we consider algebraic structures associated with these concepts and their applications to constructive quantum mechanics. We also briefly discuss some computer-algebraic approaches to the problems under consideration and propose an algorithm for solving one of them.