# A1 — Operative Spezifikation der Metrik-Pipeline auf dem ST-Graph

(Formalisierung des Skripts `ST.py` / `st_pipeline_metrics.py`)

antaris

18. August 2025

**Ziel.** Dieses Dokument formalisiert die im Skript implementierte Pipeline zur Erzeugung des Sierpiński-Tetraeder-Graphen, zur Definition disjunkter Regionen via IFS-Präfixe, zur Berechnung fermionischer Korrelationsmatrizen (halbgefüllter Grundzustand), zu Verschränkungs- und Informationsmaßen sowie zu Schnittmetriken (*cut*-Kanten, mittlere Kreuzblöcke $\langle |C| \rangle$, minimale Graphdistanzen) und zur statischen / animierten 3D-Visualisierung.

## 0. Reproduzierbarkeit und Artefakte

Für eine gegebene Tiefenstufe $L \in \mathbb{N}$ erzeugt die Pipeline folgende Dateien (für $L = 4$ getestet):

- `regions_observables_exclusive.csv` — regionale Observablen ($|A|, \mathrm{S}(A), \mathrm{I}(A{:}\mathrm{Rest}), \langle |C| \rangle_{\mathrm{intra}}$),
- `pairs_observables_exclusive.csv` — Paarmetriken ($\mathrm{I}(A{:}B)$, `cut_edges`, $\langle |C| \rangle_{\mathrm{cross}}, d_{\min}$),
- `levels_observables.csv` — Geburts-Layer $\ell$ mit $(n_\ell, \mathrm{S}(\ell), \mathrm{I}(\ell{:}\mathrm{Rest}))$,
- `static_colored_obs_exclusive.png`, `levels_S_MI.png`, `static_colored_obs_exclusive_rotate.gi`

Die numerische Diagonalisierung verwendet eine deterministische Seed-Wahl, um Entartungen kontrolliert zu brechen.

## 1. Sierpiński-Tetraeder-Graph bei Tiefe $L$

**Definition 1** (IFS, Wörter, Zellen, Knotenmenge)**.** *Seien die Eckpunkte $V = \{v_0, v_1, v_2, v_3\} \subset \mathbb{R}^3$ gegeben durch $v_0 = (0,0,0)$, $v_1 = (2^L, 0, 0)$, $v_2 = (0, 2^L, 0)$, $v_3 = (0,0,2^L)$. Die vier Kontraktionen $S_i(x) = \frac{1}{2}(x + v_i)$ definieren eine IFS. Für $L$ sei $W_L = \{0,1,2,3\}^L$ die Wortmenge. Zu jedem Präfix $w \in \{0,1,2,3\}^{\le L}$ gehört die Zelle $S_w(\Delta)$ mit $\Delta = \mathrm{conv}(V)$. Die Knotenmenge $\mathcal{V}_L$ entsteht als Vereinigung aller Eckbilder $S_w(v_i)$, $w \in \{0,1,2,3\}^{\le L}$, $i \in \{0, \dots, 3\}$; Duplikate werden identifiziert.*

**Definition 2** (Kantenmenge, Adjazenz, Laplaceoperator)**.** *Für jede Zelle $S_w(\Delta)$ werden die sechs Kanten des Tetraeders auf die Eckbilder $S_w(v_i)$ übertragen. Mit $A_L \in \{0,1\}^{N \times N}$, $N = |\mathcal{V}_L|$, bezeichne die Adjazenzmatrix und $D = \mathrm{diag}(A_L \mathbf{1})$. Der ungewichtete Graph-Laplaceoperator ist $\mathcal{L}_L = D - A_L$.*

## 2. Freies Fermionmodell und Korrelationsmatrix

Wir interpretieren $H := \mathcal{L}_L$ als Tight-Binding-Hamiltonoperator und besetzen zum Füllgrad $\nu = \frac{1}{2}$ den Grundzustand. Sei $H = U \Lambda U^\top$ eine Eigenzerlegung (reell-symmetrisch). Mit $M = \lfloor \nu N \rfloor$ sei $U_{\mathrm{occ}}$ die Matrix der $M$ niedrigsten Eigenvektoren. Die *Ein-Teilchen-Korrelationsmatrix* lautet

$$C \;=\; U_{\mathrm{occ}} U_{\mathrm{occ}}^\top \;\in\; \mathbb{R}^{N \times N}. \tag{1}$$

Zur numerischen Entartungsauflösung wird eine infinitesimale diagonale Störung $H \mapsto H + \varepsilon\,\mathrm{diag}(\xi)$ verwendet (fixer Seed).

## 3. Regionen über Präfixe (exklusive Zuweisung)

**Definition 3** (Präfix-induzierte Regionen). *Für vorgegebene Präfixe $\wp\_R, \wp\_Y, \wp\_G$ definieren wir $A(\wp) = \{\, i \in \mathcal{V}_L \mid i$ ist Eckbild einer Zelle $S_w(\Delta)$ mit $w$ Präfix $\wp\,\}$. Die exklusive Zuweisung erfolgt in der Reihenfolge RED $\succ$ YELLOW $\succ$ GREEN über disjunkte Mengen*

$$A\_\mathrm{RED} := A(\wp\_R), \quad A\_\mathrm{YEL} := A(\wp\_Y)\setminus A\_\mathrm{RED}, \quad A\_\mathrm{GRN} := A(\wp\_G)\setminus\big(A\_\mathrm{RED} \cup A\_\mathrm{YEL}\big). \tag{2}$$

*Im Testfall L=4 werden $\wp\_R = (0,1,2,3)$, $\wp\_Y = (1,0)$, $\wp\_G =$ L0-Ecken eingesetzt.*

## 4. Entropische Größen und Informationsmaße

Für eine Indexmenge $A \subset \{1,\dots,N\}$ bezeichne $C\_A := C\_A, A$ den korrespondierenden Block.

**Definition 4** (Verschränkungsentropie (freie Fermionen)). *Seien $\lambda\_1,\dots,\lambda\_|A| \in (0,1)$ die Eigenwerte von $C\_A$. Dann ist die von Neumann-Entropie des Gaussian-Reduktionszustands*

$$\mathrm{S}(A) \;=\; -\sum\_j = 1^{|A|}\Big[\lambda\_j \log\lambda\_j + (1-\lambda\_j)\log(1-\lambda\_j)\Big]. \tag{3}$$

**Definition 5** (Wechselseitige Information). *Für disjunkte $A, B$ ist*

$$\mathrm{I}(A{:}B) \;=\; \mathrm{S}(A) + \mathrm{S}(B) - \mathrm{S}(A \cup B). \tag{4}$$

*Für den reinen Gesamtzustand gilt $\mathrm{I}(A{:}\mathrm{Rest}) = 2\,\mathrm{S}(A)$.*

**Definition 6** (Intra-/Cross-Korrelationsmaße).

$$\langle |C| \rangle\_\mathrm{intra}(A) := \frac{1}{|A|(|A|-1)} \sum\_{\substack{i,j\in A\\ i\neq j}} |C\_ij|\,, \tag{5}$$

$$\langle |C| \rangle\_\mathrm{cross}(A,B) := \frac{1}{|A|\,|B|} \sum\_i \in A \sum\_j \in B\, |C\_ij|\,. \tag{6}$$

## 5. Schnittmetriken im Graphen

**Definition 7** (Schnittkanten, minimale Distanz). *Die Anzahl der Schnittkanten zwischen disjunkten Mengen $A, B$ ist $\mathrm{cut}(A,B) := |\{\,\{i,j\} \in \mathcal{E}_L \mid i \in A,\ j \in B\,\}|$. Die minimale Graphdistanz $d\_\mathrm{min}(A,B)$ ist die kleinstmögliche Pfadlänge zwischen einem Knoten aus A und einem Knoten aus B, berechnet über Multi-Source-BFS.*

## 6. Geburts-Layer $\ell$

**Definition 8** (Ersterscheinungstiefe). *Jedem $x \in \mathcal{V}\_L$ ordnen wir die minimale Präfixtiefe $\ell(x) \in \{0,\dots,L\}$ zu, ab der $x$ als Eckbild vorkommt. Für $V\_\ell := \{x \in \mathcal{V}\_L \mid \ell(x) = \ell\}$ berechnen wir $\mathrm{S}(V\_\ell)$ und $\mathrm{I}(V\_\ell{:}\mathrm{Rest}) = 2\,\mathrm{S}(V\_\ell)$.*

## 7. Numerik und Komplexität (Überblick)

- Aufbau $(\mathcal{V}\_L, \mathcal{E}\_L)$ über alle Zellen $S\_w(\Delta)$ hat Kosten $\mathcal{O}(4^L \cdot L)$ (mit Deduplikation).
- BFS für $d\_\mathrm{min}$: $\mathcal{O}(|\mathcal{V}\_L| + |\mathcal{E}\_L|)$.
- Vollständige Eigenzerlegung von $H$: $\mathcal{O}(N^3)$; Hauptspeicher $\mathcal{O}(N^2)$.
- Entropie/MI über Spektren von $C\_A$: Kosten dominieren durch Eigenwerte auf $|A| \times |A|$-Blöcken.

## 8. Visualisierung

Die 3D-Darstellung nutzt eine starre Rotation $R \in \mathrm{SO}(3)$, die die Ebene der Grundfläche auf die $xy$-Ebene abbildet, sowie eine kantengenau gezeichnete Gitterstruktur mit farbigen Regionen (exklusive Zuweisung). Die Annotation umfasst alle in Abschnitt 4–5 definierten Metriken. Zusätzlich wird ein Linienplot $(\ell, \mathrm{S}(\ell), \mathrm{I}(\ell{:}\mathrm{Rest}))$ erzeugt.

## 9. Implementierungs-Mapping (Audit)

Die folgenden Funktionsnamen sind Bindeglieder zwischen Formalisierung und Implementierung:

- `build_st_graph_with_cells`: Konstruktion $(\mathcal{V}\_L, \mathcal{E}\_L)$ und Zell-Indizes.
- `adjacency_from_edges`, `laplacian_from_adjacency`: $A\_L$, $\mathcal{L}\_L$.
- `correlation_matrix_groundstate`: Grundzustand zum Füllgrad $\nu{=}\frac{1}{2}$ und $C$.
- `region_indices_from_prefixes` + exklusive Zuweisung: Mengen $A$_RED, $A$_YEL, $A$_GRN.
- `von_neumann_entropy_from_C`, `MI_disjoint`, `mean_abs_crossC`.
- `cut_edges_between`, `min_graph_distance` (Multi-Source-BFS).
- Rendering: statische PNG, Linienplot, rotierendes GIF.

# 10. Abbildungen (Beispiel, $L = 4$)

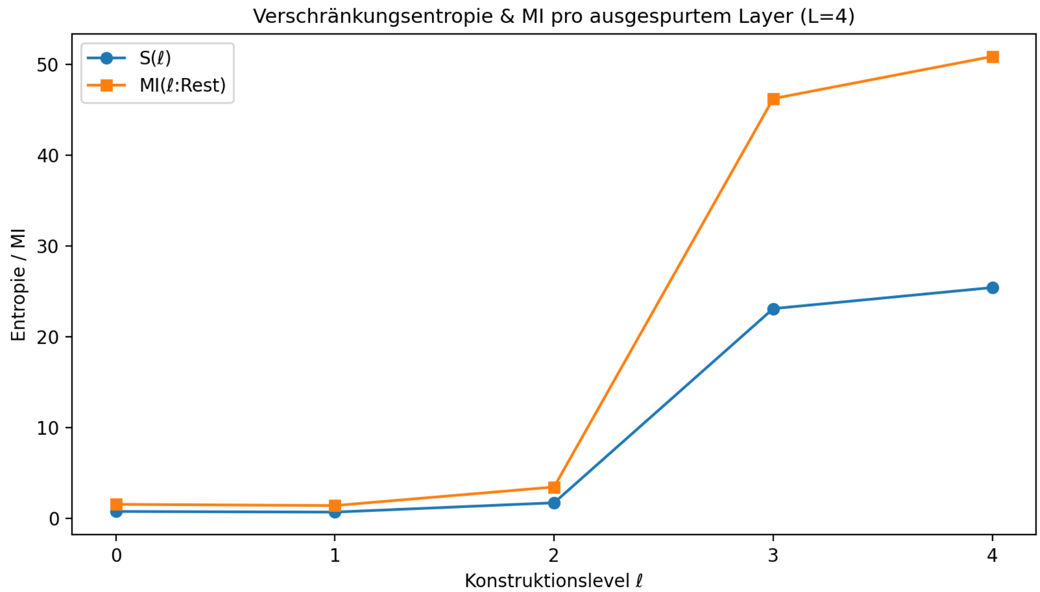


Abbildung 1: Verschränkungsentropie S($\ell$) und I($\ell$:Rest) pro Geburts-Layer.

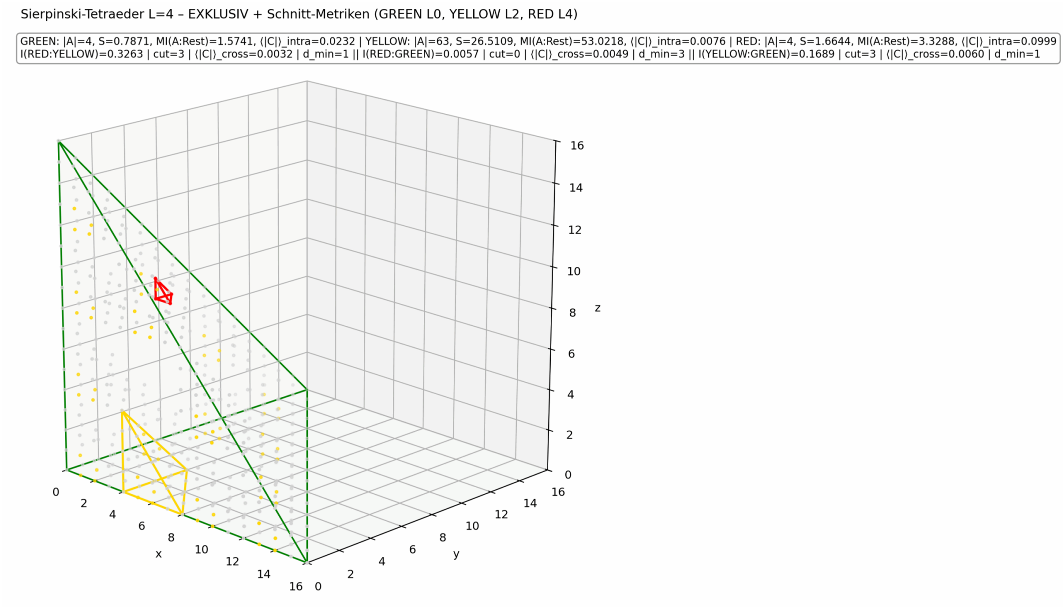


Abbildung 2: 3D-Ansicht des ST-Graphen mit exklusiver Regionenfärbung und Metrik-Annotation.