# Sokrész korrelációk kvantumrendszerekben
ELFT Vándorgyűlés 2016, Szeged

**Szalay Szilárd**

Elméleti Szilárdtestfizikai Osztály, Wigner Fizikai Kutatóközpont

2016 augusztus 26

A kutatási projektet támogatta
az Országos Tudomyányos Kutatási Alap (OTKA-K100908), és
a Magyar Tudományos Akadémia "Lendület" programja (81010-00).

Kvantumrendszerek korrelációi

- lehet tisztán klasszikus,
- tartalmazhat kvantumos járulékot is (steering, discord, entanglement)
- entropikus mennyiségek: független az obszervábilisektől

# Bevezető

## Kvantumrendszerek korrelációi

- lehet tisztán klasszikus,
- tartalmazhat kvantumos járulékot is (steering, discord, entanglement)
- entropikus mennyiségek: független az obszervábilisektől

## Sokrész korrelációk

- korreláció a rendszer egy felosztására nézve (I. szint)
- korreláció a rendszer több lehetséges felosztására nézve (II. szint)
- és ezek a tulajdonságok a teljes rendszer különböző részein belül

# Bevezető

## Kvantumrendszerek korrelációi

- lehet tisztán klasszikus,
- tartalmazhat kvantumos járulékot is (steering, discord, entanglement)
- entropikus mennyiségek: független az obszervábilisektől

## Sokrész korrelációk

- korreláció a rendszer egy felosztására nézve (I. szint)
- korreláció a rendszer több lehetséges felosztására nézve (II. szint)
- és ezek a tulajdonságok a teljes rendszer különböző részein belül

## Alkalmazás: molekulák elektronszerkezete

- lokalizált pályák
- kémiai kötésekben erős korrelációk
- kötések között gyenge korrelációk

Diszkrét véges kvantumrendszerek állapotai

- *állapot vektor*: $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (normált)
- *tiszta állapot*: $\pi = |\psi\rangle\langle\psi| \in \mathcal{P}$
  bizonytalanok vagyunk a mérés kimenetében,
  tiszta állapotok kódolják ezek *valószínűségét*

# Kvantumrendszerek

Diszkrét véges kvantumrendszerek állapotai

- *állapot vektor*: $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (normált)
- *tiszta állapot*: $\pi = |\psi\rangle\langle\psi| \in \mathcal{P}$
  bizonytalanok vagyunk a mérés kimenetében,
  tiszta állapotok kódolják ezek *valószínűségét*
- *kevert állapot* (sokaság): $\varrho = \sum_j p_j \pi_j \in \mathcal{D} = \mathrm{Conv}\,\mathcal{P}$
  bizonytalanok vagyunk a tiszta állapotban is
- $\mathcal{D}$ egy konvex halmaz, sőt, $\mathcal{P} = \mathrm{Extr}\,\mathcal{D}$

# Kvantumrendszerek

Diszkrét véges kvantumrendszerek állapotai

- *állapot vektor*: $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (normált)
- *tiszta állapot*: $\pi = |\psi\rangle\langle\psi| \in \mathcal{P}$
  bizonytalanok vagyunk a mérés kimenetében,
  tiszta állapotok kódolják ezek *valószínűségét*
- *kevert állapot* (sokaság): $\varrho = \sum_j p_j \pi_j \in \mathcal{D} = \operatorname{Conv} \mathcal{P}$
  bizonytalanok vagyunk a tiszta állapotban is
- $\mathcal{D}$ egy konvex halmaz, sőt, $\mathcal{P} = \operatorname{Extr} \mathcal{D}$
- a dekompozíció nem egyértelmű

# Kevertség és megkülönböztethetőség

Kevertség mértéke:

- Neumann entrópia: $S(\varrho) = -\operatorname{tr} \varrho \ln \varrho$
- konkáv, nemnegatív, nulla pontosan tiszta állapotokra
- Schur-konkáv: *entrópia* $=$ *kevertség*
  Schumacher zajmentes kódolási tétel:
  *Neumann entrópia* $=$ *kvantum információ tartalom*

# Kevertség és megkülönböztethetőség

Kevertség mértéke:

- Neumann entrópia: $S(\varrho) = -\operatorname{tr} \varrho \ln \varrho$
- konkáv, nemnegatív, nulla pontosan tiszta állapotokra
- Schur-konkáv: *entrópia = kevertség*
  Schumacher zajmentes kódolási tétel:
  *Neumann entrópia = kvantum információ tartalom*

Megkülönböztethetőség mértéke:

- (Umegaki) kvantum relatív entrópia: $D(\varrho||\sigma) = \operatorname{tr} \varrho(\ln \varrho - \ln \sigma)$
- együtt-konvex, nemnegatív, nulla pontosan ha $\varrho = \omega$
- kvantum Stein lemma: *relatív entrópia = megkülönböztethetőség*
  (tévesztés valószínűségének csökkenési rátája
  hipotézis tesztelésnél, Hiai & Petz)

# Kétrész korrelációk

Korreláció fogalmak:

- két esemény korrelált,
  ha bekövetkezésük együtt valószínűbb, mint külön: $p_{12} > p_1 p_2$

# Kétrész korrelációk

Korreláció fogalmak:

- két esemény korrelált,
  ha bekövetkezésük együtt valószínűbb, mint külön: $p_{12} > p_1 p_2$
- két val.változó korreláltságának mértéke:
  $\mathrm{COV}(A, B) = \langle (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) \rangle = \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$
  $-1 \leq \mathrm{CORR}(A, B) = \mathrm{COV}(A, B) / \sqrt{\mathrm{COV}(A, A)\, \mathrm{COV}(B, B)} \leq 1$

Korreláció fogalmak:

- két esemény korrelált,
  ha bekövetkezésük együtt valószínűbb, mint külön: $p_{12} > p_1 p_2$
- két val.változó korreláltságának mértéke:
  $\mathrm{COV}(A,B) = \langle (A - \langle A\rangle)(B - \langle B\rangle)\rangle = \langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$
  $-1 \leq \mathrm{CORR}(A,B) = \mathrm{COV}(A,B)/\sqrt{\mathrm{COV}(A,A)\,\mathrm{COV}(B,B)} \leq 1$
- „magának az állapotnak" a korreláltsága: $\Gamma := \varrho_{12} - \varrho_1 \otimes \varrho_2$
  ezzel $\mathrm{COV}(A,B) = \mathrm{tr}\,\Gamma A \otimes B = (\Gamma, A \otimes B)_{\mathrm{HS}}$

# Kétrész korrelációk

Korreláció fogalmak:

- két esemény korrelált,
  ha bekövetkezésük együtt valószínűbb, mint külön: $p_{12} > p_1 p_2$
- két val.változó korreláltságának mértéke:
  $\mathrm{COV}(A,B) = \langle (A - \langle A\rangle)(B - \langle B\rangle)\rangle = \langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$
  $-1 \le \mathrm{CORR}(A,B) = \mathrm{COV}(A,B)/\sqrt{\mathrm{COV}(A,A)\,\mathrm{COV}(B,B)} \le 1$
- „magának az állapotnak” a korreláltsága: $\Gamma := \varrho_{12} - \varrho_1 \otimes \varrho_2$
  ezzel $\mathrm{COV}(A,B) = \mathrm{tr}\,\Gamma A \otimes B = (\Gamma, A \otimes B)_{\mathrm{HS}}$
- több (nemtriviálisan) különböző obszervábilis egy rendszeren
- $\Gamma$ értelmes akkor is, ha nincsenek szám értékek, csak események

# Kétrész korrelációk

Korreláció fogalmak:

- két esemény korrelált,
  ha bekövetkezésük együtt valószínűbb, mint külön: $p_{12} > p_1 p_2$
- két val.változó korreláltságának mértéke:
  $\mathrm{COV}(A,B) = \langle (A - \langle A\rangle)(B - \langle B\rangle)\rangle = \langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$
  $-1 \leq \mathrm{CORR}(A,B) = \mathrm{COV}(A,B)/\sqrt{\mathrm{COV}(A,A)\,\mathrm{COV}(B,B)} \leq 1$
- „magának az állapotnak" a korreláltsága: $\Gamma := \varrho_{12} - \varrho_1 \otimes \varrho_2$
  ezzel $\mathrm{COV}(A,B) = \mathrm{tr}\,\Gamma A \otimes B = (\Gamma, A \otimes B)_{\mathrm{HS}}$
- több (nemtriviálisan) különböző obszervábilis egy rendszeren
- $\Gamma$ értelmes akkor is, ha nincsenek szám értékek, csak események
- az állapot *korrelálatlan* pontosan akkor, ha $\Gamma = 0$
  (pontosan akkor, ha $\langle AB\rangle = \langle A\rangle\langle B\rangle$ minden $A$, $B$ obszervábilisre)

# Kétrész korrelációk

## Tiszta állapotok

- a klasszikus esetben a tiszta állapotok automatikusan korrelálatlanok, a kvantum esetben nem!
- ha egy tiszta állapot korrelált, akkor ez a korreláció kvantumos eredetű, ezt hívjuk összefonódásnak

# Kétrész korrelációk

## Tiszta állapotok

- a klasszikus esetben a tiszta állapotok automatikusan korrelálatlanok, a kvantum esetben nem!
- ha egy tiszta állapot korrelált, akkor ez a korreláció kvantumos eredetű, ezt hívjuk összefonódásnak
- $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \qquad \rightsquigarrow \qquad |\psi\rangle\langle\psi| = \pi \in \mathcal{P}$
- korrelálatlanok: *szeparálhatók*
  $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \qquad \rightsquigarrow \qquad \pi = \pi_1 \otimes \pi_2 \in \mathcal{P}_{\mathrm{sep}} \subset \mathcal{P}$

# Kétrész korrelációk

## Tiszta állapotok

- a klasszikus esetben a tiszta állapotok automatikusan korrelálatlanok, a kvantum esetben nem!
- ha egy tiszta állapot korrelált, akkor ez a korreláció kvantumos eredetű, ezt hívjuk összefonódásnak
- $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \qquad \rightsquigarrow \qquad |\psi\rangle\langle\psi| = \pi \in \mathcal{P}$
- korrelálatlanok: *szeparálhatók*
  $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \qquad \rightsquigarrow \qquad \pi = \pi_1 \otimes \pi_2 \in \mathcal{P}_{\text{sep}} \subset \mathcal{P}$
- korreláltak: *összefontak* $(\mathcal{P} \setminus \mathcal{P}_{\text{sep}})$
  Ekkor az egyik részrendszeren végzett mérés a másik állapotának kollapszusát is „okozza"? (EPR probléma)

# Kétrész korrelációk

## Tiszta állapotok

- a klasszikus esetben a tiszta állapotok automatikusan korrelálatlanok, a kvantum esetben nem!
- ha egy tiszta állapot korrelált, akkor ez a korreláció kvantumos eredetű, ezt hívjuk összefonódásnak
- $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad \rightsquigarrow \quad |\psi\rangle\langle\psi| = \pi \in \mathcal{P}$
- korrelálatlanok: *szeparálhatók*
  $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \quad \rightsquigarrow \quad \pi = \pi_1 \otimes \pi_2 \in \mathcal{P}_{\text{sep}} \subset \mathcal{P}$
- korreláltak: *összefontak* $(\mathcal{P} \setminus \mathcal{P}_{\text{sep}})$
  Ekkor az egyik részrendszeren végzett mérés a másik állapotának kollapszusát is „okozza”? (EPR probléma)
- részrendszer állapota (pl. $\operatorname{tr}_2 \pi \in \mathcal{D}_1$) nem feltétlen tiszta
- $\pi$ összefont pontosan akkor, ha $\operatorname{tr}_2 \pi$ és $\operatorname{tr}_1 \pi$ kevertek
  Ekkor *„az egész teljes ismerete nem jelenti a részek teljes ismeretét.”* (Schrödinger)

# Kétrész korrelációk

## Kevert állapotok: korreláció

- *korrelálatlan*: $\Gamma = 0$ (szorzat), $\varrho_{12} = \varrho_1 \otimes \varrho_2 \in \mathcal{D}_{\text{unc}}$, különben *korrelált* $(\mathcal{D} \setminus \mathcal{D}_{\text{unc}})$
- könnyen eldönthető

# Kétrész korrelációk

## Kevert állapotok: korreláció

- *korrelálatlan*: $\Gamma = 0$ (szorzat), $\varrho_{12} = \varrho_1 \otimes \varrho_2 \in \mathcal{D}_{\text{unc}}$, különben *korrelált* ($\mathcal{D} \setminus \mathcal{D}_{\text{unc}}$)
- könnyen eldönthető

## Kevert állapotok: összefonódás

- *szeparálható*: ha létezik szeparálható dekompozíció:
$$\varrho = \sum_i p_i \pi_{1,i} \otimes \pi_{2,i} \in \mathcal{D}_{\text{sep}} = \operatorname{Conv} \mathcal{P}_{\text{sep}} = \operatorname{Conv} \mathcal{D}_{\text{unc}} \subset \mathcal{D}$$
- klasszikusan korrelált források ilyen állapotokat adnak (Werner) lokális kvantum műveletekkel és klasszikus kommunikációval (LOCC) előállnak, különben *összefontak* ($\mathcal{D} \setminus \mathcal{D}_{\text{sep}}$)

# Kétrész korrelációk

Kevert állapotok: korreláció

- *korrelálatlan*: $\Gamma = 0$ (szorzat), $\varrho_{12} = \varrho_1 \otimes \varrho_2 \in \mathcal{D}_{\text{unc}}$, különben *korrelált* ($\mathcal{D} \setminus \mathcal{D}_{\text{unc}}$)
- könnyen eldönthető

Kevert állapotok: összefonódás

- *szeparálható*: ha létezik szeparálható dekompozíció:

$$\varrho = \sum_i p_i \pi_{1,i} \otimes \pi_{2,i} \in \mathcal{D}_{\text{sep}} = \operatorname{Conv} \mathcal{P}_{\text{sep}} = \operatorname{Conv} \mathcal{D}_{\text{unc}} \subset \mathcal{D}$$

- klasszikusan korrelált források ilyen állapotokat adnak (Werner) lokális kvantum műveletekkel és klasszikus kommunikációval (LOCC) előállnak, különben *összefontak* ($\mathcal{D} \setminus \mathcal{D}_{\text{sep}}$)
- a dekompozíció nem egyértelmű

## Kevert állapotok: korreláció

- *korrelálatlan*: $\Gamma = 0$ (szorzat), $\varrho_{12} = \varrho_1 \otimes \varrho_2 \in \mathcal{D}_{\text{unc}}$, különben *korrelált* ($\mathcal{D} \setminus \mathcal{D}_{\text{unc}}$)
- könnyen eldönthető

## Kevert állapotok: összefonódás

- *szeparálható*: ha létezik szeparálható dekompozíció:
$$\varrho = \sum_i p_i \pi_{1,i} \otimes \pi_{2,i} \in \mathcal{D}_{\text{sep}} = \operatorname{Conv} \mathcal{P}_{\text{sep}} = \operatorname{Conv} \mathcal{D}_{\text{unc}} \subset \mathcal{D}$$
- klasszikusan korrelált források ilyen állapotokat adnak (Werner) lokális kvantum műveletekkel és klasszikus kommunikációval (LOCC) előállnak, különben *összefontak* ($\mathcal{D} \setminus \mathcal{D}_{\text{sep}}$)
- a dekompozíció nem egyértelmű
- a szeparabilitás eldöntése nehéz

# Kétrész korrelációk – mértékek

- *korreláció*:

$$C(\varrho) = \min_{\sigma\in\mathcal{D}_{\mathsf{unc}}} D(\varrho||\sigma)$$

„mennyire korrelált = mennyire nem korrelálatlan”

# Kétrész korrelációk – mértékek

- *korreláció* (kölcsönös információ):

$$C(\varrho) = \min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\mathsf{unc}}} D(\varrho || \sigma) = S(\varrho_{\{1\}}) + S(\varrho_{\{2\}}) - S(\varrho)$$

„mennyire korrelált = mennyire nem korrelálatlan"

# Kétrész korrelációk – mértékek

- *korreláció* (kölcsönös információ):

$$C(\varrho) = \min_{\sigma\in\mathcal{D}_{\mathrm{unc}}} D(\varrho||\sigma) = S(\varrho_{\{1\}}) + S(\varrho_{\{2\}}) - S(\varrho)$$

„mennyire korrelált = mennyire nem korrelálatlan”

- *összefonódás* (tiszta állapotokra):

$$E(\pi) = C|_{\mathcal{P}}(\pi),$$

tiszta állapot korrelációja az összefonódás

összefonódás monoton

# Kétrész korrelációk – mértékek

- *korreláció* (kölcsönös információ):

$$C(\varrho) = \min_{\sigma\in\mathcal{D}_{\mathrm{unc}}} D(\varrho||\sigma) = S(\varrho_{\{1\}}) + S(\varrho_{\{2\}}) - S(\varrho)$$

„mennyire korrelált = mennyire nem korrelálatlan"

- *összefonódás* (tiszta) *formációs összefonódás* (kevert állapotokra):

$$E(\pi) = C|_{\mathcal{P}}(\pi), \qquad E(\varrho) = \min\Big\{\sum\nolimits_i p_i E(\pi_i) \;\Big|\; \sum\nolimits_i p_i \pi_i = \varrho\Big\}$$

tiszta állapot korrelációja az összefonódás
kevertre: optimális dekompozíció átlagos összefonódása
összefonódás monoton

# Kétrész korrelációk – mértékek

- *korreláció* (kölcsönös információ):

$$C(\varrho) = \min_{\sigma\in\mathcal{D}_{\text{unc}}} D(\varrho||\sigma) = S(\varrho_{\{1\}}) + S(\varrho_{\{2\}}) - S(\varrho)$$

  „mennyire korrelált = mennyire nem korrelálatlan"

- *összefonódás* (tiszta) *formációs összefonódás* (kevert állapotokra):

$$E(\pi) = C|_{\mathcal{P}}(\pi), \qquad E(\varrho) = \min\Big\{\sum_i p_i E(\pi_i) \,\Big|\, \sum_i p_i\pi_i = \varrho\Big\}$$

  tiszta állapot korrelációja az összefonódás
  kevertre: optimális dekompozíció átlagos összefonódása
  összefonódás monoton

- diszkrimináns (hű): $C(\varrho) = 0 \Leftrightarrow \varrho \in \mathcal{D}_{\text{unc}}$, $E(\varrho) = 0 \Leftrightarrow \varrho \in \mathcal{D}_{\text{sep}}$
- $E(\varrho)$ számítása nehéz

# Sokrész korrelációk – struktúra

0. szint: részrendszerek

Boole háló struktúra: $P_0 = 2^L$

- teljes rendszer: $L = \{1, 2, \dots, n\}$
- részrendszer: $X \subseteq L$, ezekhez $\mathcal{H}_X$, $\mathcal{P}_X$, $\mathcal{D}_X$

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])
Szalay, Kökényesi, PRA **86**,032341 (2012) (arXiv:1206.6253 [quant-ph])

# Sokrész korrelációk – struktúra

0. szint: részrendszerek — Boole háló struktúra: $P_0 = 2^L$

- teljes rendszer: $L = \{1, 2, \ldots, n\}$
- részrendszer: $X \subseteq L$, ezekhez $\mathcal{H}_X$, $\mathcal{P}_X$, $\mathcal{D}_X$

I. szint: felosztások — háló struktúra: $P_\mathrm{I} = \Pi(L)$

- partíció: $\xi = \{X_1, X_2, \ldots, X_{|\xi|}\} \in \Pi(L)$
- finomítás (részben rendezés): $\upsilon \preceq \xi$ def.: $\forall Y \in \upsilon, \exists X \in \xi : Y \subseteq X$


Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])
Szalay, Kökényesi, PRA **86**,032341 (2012) (arXiv:1206.6253 [quant-ph])

# Sokrész korrelációk – struktúra

I. szint: felosztások háló struktúra: $P_{\mathrm{I}} = \Pi(L)$

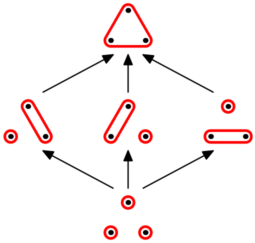
- partíció: $\xi = \{X_1, X_2, \dots, X_{|\xi|}\} \in \Pi(L)$
- finomítás (részben rendezés): $\upsilon \preceq \xi$ def.: $\forall Y \in \upsilon, \exists X \in \xi : Y \subseteq X$

  $n = 2$:

I. szint: felosztások — háló struktúra: $P_\mathrm{I} = \Pi(L)$

- partíció: $\xi = \{X_1, X_2, \dots, X_{|\xi|}\} \in \Pi(L)$
- finomítás (részben rendezés): $\upsilon \preceq \xi$ def.: $\forall Y \in \upsilon, \exists X \in \xi : Y \subseteq X$

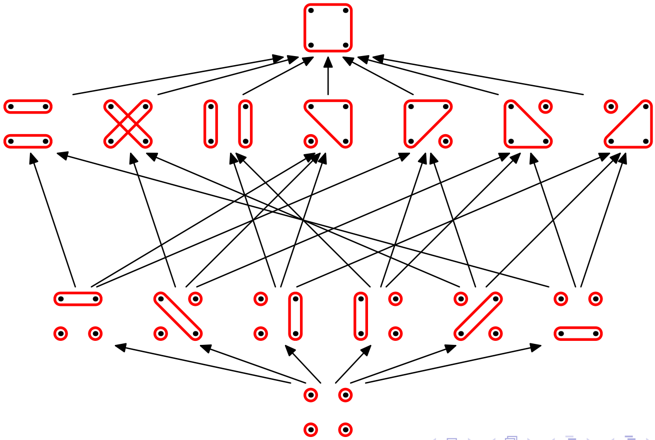
$n = 3$:



I. szint: felosztások    háló struktúra: $P_\mathrm{I} = \Pi(L)$

- partíció: $\xi = \{X_1, X_2, \dots, X_{|\xi|}\} \in \Pi(L)$
- finomítás (részben rendezés): $\upsilon \preceq \xi$ def.: $\forall Y \in \upsilon, \exists X \in \xi : Y \subseteq X$

  $n = 4$:



# Sokrész korrelációk – struktúra

0. szint: részrendszerek — Boole háló struktúra: $P_0 = 2^L$

- teljes rendszer: $L = \{1, 2, \dots, n\}$
- részrendszer: $X \subseteq L$, ezekhez $\mathcal{H}_X$, $\mathcal{P}_X$, $\mathcal{D}_X$

I. szint: felosztások — háló struktúra: $P_\mathrm{I} = \Pi(L)$

- partíció: $\xi = \{X_1, X_2, \dots, X_{|\xi|}\} \in \Pi(L)$
- finomítás (részben rendezés): $\upsilon \preceq \xi$ def.: $\forall Y \in \upsilon, \exists X \in \xi : Y \subseteq X$


Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])
Szalay, Kökényesi, PRA **86**,032341 (2012) (arXiv:1206.6253 [quant-ph])

# Sokrész korrelációk – struktúra

0. szint: részrendszerek — Boole háló struktúra: $P_0 = 2^L$

- teljes rendszer: $L = \{1, 2, \dots, n\}$
- részrendszer: $X \subseteq L$, ezekhez $\mathcal{H}_X$, $\mathcal{P}_X$, $\mathcal{D}_X$

I. szint: felosztások — háló struktúra: $P_\mathrm{I} = \Pi(L)$

- partíció: $\xi = \{X_1, X_2, \dots, X_{|\xi|}\} \in \Pi(L)$
- finomítás (részben rendezés): $\upsilon \preceq \xi$ def.: $\forall Y \in \upsilon, \exists X \in \xi : Y \subseteq X$
- *$\xi$-korrelálatlan állapotok*: $\mathcal{D}_{\xi\text{-unc}} \ni \otimes_{X\in\xi}\varrho_X$,
  $\upsilon \preceq \xi \Leftrightarrow \mathcal{D}_{\upsilon\text{-unc}} \subseteq \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}$
- *$\xi$-szeparálható állapotok*: $\mathcal{D}_{\xi\text{-sep}} = \mathrm{Conv}\,\mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}$
  $\upsilon \preceq \xi \Leftrightarrow \mathcal{D}_{\upsilon\text{-sep}} \subseteq \mathcal{D}_{\xi\text{-sep}}$

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])
Szalay, Kökényesi, PRA **86**,032341 (2012) (arXiv:1206.6253 [quant-ph])

# Sokrész korrelációk – mértékek

I. szint: felosztások

háló struktúra: $P_{\mathrm{I}} = \Pi(L)$

- *$\xi$-korreláció* ($\xi$-kölcsönös információ):

$$C_\xi(\varrho) = \min_{\sigma\in\mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}} D(\varrho||\sigma) = \sum_{X\in\xi} S(\varrho_X) - S(\varrho)$$

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])

# Sokrész korrelációk – mértékek

I. szint: felosztások  háló struktúra: $P_{\mathrm{I}} = \Pi(L)$

- *$\xi$-korreláció* ($\xi$-kölcsönös információ):

$$C_\xi(\varrho) = \min_{\sigma\in\mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}} D(\varrho\|\sigma) = \sum\nolimits_{X\in\xi} S(\varrho_X) - S(\varrho)$$

- *$\xi$-(formációs) összefonódás*:

$$E_\xi(\pi) = C_\xi|_{\mathcal{P}}(\pi), \qquad E_\xi(\varrho) = \min\Big\{\sum\nolimits_i p_i E_\xi(\pi_i) \;\Big|\; \sum\nolimits_i p_i\pi_i = \varrho\Big\}$$

összefonódás monoton

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])

# Sokrész korrelációk – mértékek

I. szint: felosztások — háló struktúra: $P_{\mathrm{I}} = \Pi(L)$

- *$\xi$-korreláció* ($\xi$-kölcsönös információ):

$$C_\xi(\varrho) = \min_{\sigma\in\mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}} D(\varrho||\sigma) = \sum\nolimits_{X\in\xi} S(\varrho_X) - S(\varrho)$$

- *$\xi$-(formációs) összefonódás*:

$$E_\xi(\pi) = C_\xi|_{\mathcal{P}}(\pi), \qquad E_\xi(\varrho) = \min\Big\{\sum\nolimits_i p_i E_\xi(\pi_i) \;\Big|\; \sum\nolimits_i p_i\pi_i = \varrho\Big\}$$

összefonódás monoton

- diszkrimináns (hű): $C_\xi(\varrho) = 0 \Leftrightarrow \varrho \in \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}$, $E_\xi(\varrho) = 0 \Leftrightarrow \varrho \in \mathcal{D}_{\xi\text{-sep}}$

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])

I. szint: felosztások háló struktúra: $P_{\mathrm{I}} = \Pi(L)$

- *$\xi$-korreláció* ($\xi$-kölcsönös információ):

$$C_\xi(\varrho) = \min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}} D(\varrho||\sigma) = \sum\nolimits_{X \in \xi} S(\varrho_X) - S(\varrho)$$

- *$\xi$-(formációs) összefonódás*:

$$E_\xi(\pi) = C_\xi|_{\mathcal{P}}(\pi), \qquad E_\xi(\varrho) = \min\Big\{\sum\nolimits_i p_i E_\xi(\pi_i) \,\Big|\, \sum\nolimits_i p_i \pi_i = \varrho\Big\}$$

összefonódás monoton

- diszkrimináns (hű): $C_\xi(\varrho) = 0 \Leftrightarrow \varrho \in \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}$, $E_\xi(\varrho) = 0 \Leftrightarrow \varrho \in \mathcal{D}_{\xi\text{-sep}}$
- sokrész monoton: $\upsilon \preceq \xi \Leftrightarrow C_\upsilon \geq C_\xi, E_\upsilon \geq E_\xi$

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])

# Sokrész korrelációk – struktúra

II. szint: több lehetséges felosztás háló struktúra: $P_{\mathrm{II}} = \mathcal{O}_{\downarrow}(P_{\mathrm{I}}) \setminus \{\emptyset\}$

- partíciók ideálja: $\boldsymbol{\xi} = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{|\boldsymbol{\xi}|}\} \subseteq P_{\mathrm{I}}$ (zárt lefelé $\preceq$-re)
- részben rendezés: $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi}$ def.: $\boldsymbol{\upsilon} \subseteq \boldsymbol{\xi}$,

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])
Szalay, Kökényesi, PRA **86**,032341 (2012) (arXiv:1206.6253 [quant-ph])

# Sokrész korrelációk – struktúra

II. szint: több lehetséges felosztás  háló struktúra: $P_{\mathrm{II}} = \mathcal{O}_{\downarrow}(P_{\mathrm{I}}) \setminus \{\emptyset\}$

- partíciók ideálja: $\boldsymbol{\xi} = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{|\boldsymbol{\xi}|}\} \subseteq P_{\mathrm{I}}$ (zárt lefelé $\preceq$-re)
- részben rendezés: $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi}$ def.: $\boldsymbol{\upsilon} \subseteq \boldsymbol{\xi}$,
- *$\boldsymbol{\xi}$-korrelálatlan állapotok*: $\mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}} = \cup_{\xi\in\boldsymbol{\xi}} \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}$,
  $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi} \Leftrightarrow \mathcal{D}_{\boldsymbol{\upsilon}\text{-unc}} \subseteq \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}$
- *$\boldsymbol{\xi}$-szeparálható állapotok*: $\mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-sep}} = \mathrm{Conv}\,\mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}$,
  $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi} \Leftrightarrow \mathcal{D}_{\boldsymbol{\upsilon}\text{-sep}} \subseteq \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-sep}}$

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])
Szalay, Kökényesi, PRA **86**,032341 (2012) (arXiv:1206.6253 [quant-ph])

# Sokrész korrelációk – struktúra

II. szint: több lehetséges felosztás háló struktúra: $P_{\mathrm{II}} = \mathcal{O}_{\downarrow}(P_{\mathrm{I}}) \setminus \{\emptyset\}$

- partíciók ideálja: $\boldsymbol{\xi} = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{|\boldsymbol{\xi}|}\} \subseteq P_{\mathrm{I}}$ (zárt lefelé $\preceq$-re)
- részben rendezés: $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi}$ def.: $\boldsymbol{\upsilon} \subseteq \boldsymbol{\xi}$,
- *$\boldsymbol{\xi}$-korrelálatlan állapotok*: $\mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}} = \cup_{\xi \in \boldsymbol{\xi}} \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}$,
  $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi} \Leftrightarrow \mathcal{D}_{\boldsymbol{\upsilon}\text{-unc}} \subseteq \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}$
- *$\boldsymbol{\xi}$-szeparálható állapotok*: $\mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-sep}} = \operatorname{Conv} \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}$,
  $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi} \Leftrightarrow \mathcal{D}_{\boldsymbol{\upsilon}\text{-sep}} \subseteq \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-sep}}$
- spec.: $k$-partícionálható és $k'$-produkálható (láncok)

$$\boldsymbol{\mu}_k = \big\{\mu \in P_{\mathrm{I}} \;\big|\; |\mu| \geq k\big\}, \qquad \boldsymbol{\nu}_{k'} = \big\{\nu \in P_{\mathrm{I}} \;\big|\; \forall N \in \nu : |N| \leq k'\big\}$$

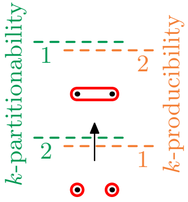
Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])
Szalay, Kökényesi, PRA **86**,032341 (2012) (arXiv:1206.6253 [quant-ph])

# Sokrész korrelációk – struktúra

- spec.: $k$-partícionálható és $k'$-produkálható (láncok)

  $\boldsymbol{\mu}_k = \{\mu \in P_{\mathrm{I}} \mid |\mu| \geq k\}, \qquad \boldsymbol{\nu}_{k'} = \{\nu \in P_{\mathrm{I}} \mid \forall N \in \nu : |N| \leq k'\}$

  $n = 2$:

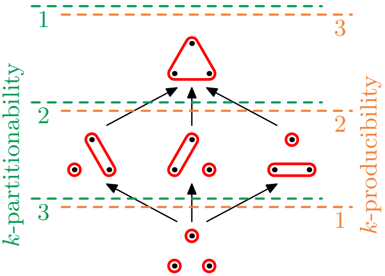


# Sokrész korrelációk – struktúra

- spec.: $k$-partícionálható és $k'$-produkálható (láncok)

  $$\boldsymbol{\mu}_k = \{\mu \in P_{\mathrm{I}} \mid |\mu| \geq k\}, \qquad \boldsymbol{\nu}_{k'} = \{\nu \in P_{\mathrm{I}} \mid \forall N \in \nu : |N| \leq k'\}$$

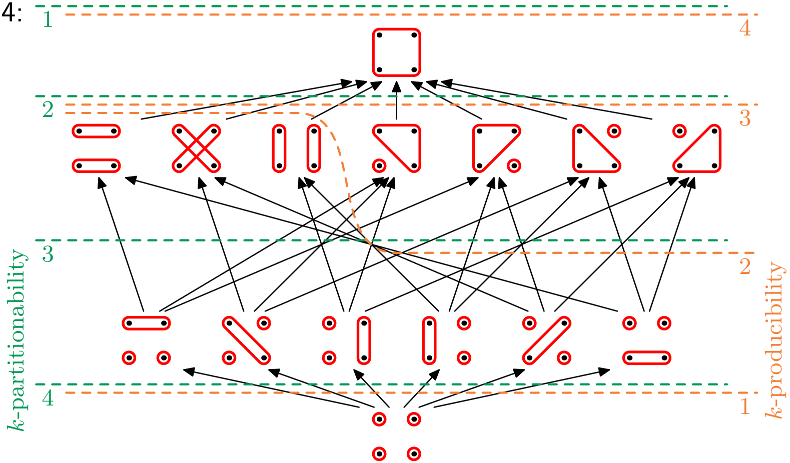
  $n = 3$:



- spec.: $k$-partícionálható és $k'$-produkálható (láncok)

$$\boldsymbol{\mu}_k = \{\mu \in P_\mathrm{I} \mid |\mu| \geq k\}, \qquad \boldsymbol{\nu}_{k'} = \{\nu \in P_\mathrm{I} \mid \forall N \in \nu : |N| \leq k'\}$$

$n = 4$:



# Sokrész korrelációk – struktúra

II. szint: több lehetséges felosztás   háló struktúra: $P_{\mathrm{II}} = \mathcal{O}_{\downarrow}(P_{\mathrm{I}}) \setminus \{\emptyset\}$

- partíciók ideálja: $\boldsymbol{\xi} = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{|\boldsymbol{\xi}|}\} \subseteq P_{\mathrm{I}}$ (zárt lefelé $\preceq$-re)
- részben rendezés: $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi}$ def.: $\boldsymbol{\upsilon} \subseteq \boldsymbol{\xi}$,
- *$\boldsymbol{\xi}$-korrelálatlan állapotok*: $\mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}} = \cup_{\xi\in\boldsymbol{\xi}} \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}$,
  $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi} \Leftrightarrow \mathcal{D}_{\boldsymbol{\upsilon}\text{-unc}} \subseteq \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}$
- *$\boldsymbol{\xi}$-szeparálható állapotok*: $\mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-sep}} = \operatorname{Conv} \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}$,
  $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi} \Leftrightarrow \mathcal{D}_{\boldsymbol{\upsilon}\text{-sep}} \subseteq \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-sep}}$
- spec.: $k$-partícionálható és $k'$-produkálható (láncok)

$$\boldsymbol{\mu}_k = \big\{\mu \in P_{\mathrm{I}} \,\big|\, |\mu| \geq k\big\}, \qquad \boldsymbol{\nu}_{k'} = \big\{\nu \in P_{\mathrm{I}} \,\big|\, \forall N \in \nu : |N| \leq k'\big\}$$


Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])
Szalay, Kökényesi, PRA **86**,032341 (2012) (arXiv:1206.6253 [quant-ph])

# Sokrész korrelációk – struktúra

II. szint: több lehetséges felosztás háló struktúra: $P_{\mathrm{II}} = \mathcal{O}_{\downarrow}(P_{\mathrm{I}}) \setminus \{\emptyset\}$

- partíciók ideálja: $\boldsymbol{\xi} = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{|\boldsymbol{\xi}|}\} \subseteq P_{\mathrm{I}}$ (zárt lefelé $\preceq$-re)
- részben rendezés: $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi}$ def.: $\boldsymbol{\upsilon} \subseteq \boldsymbol{\xi}$,
- *$\boldsymbol{\xi}$-korrelálatlan állapotok*: $\mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}} = \cup_{\xi\in\boldsymbol{\xi}} \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}$,
  $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi} \Leftrightarrow \mathcal{D}_{\boldsymbol{\upsilon}\text{-unc}} \subseteq \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}$
- *$\boldsymbol{\xi}$-szeparálható állapotok*: $\mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-sep}} = \operatorname{Conv} \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}$,
  $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi} \Leftrightarrow \mathcal{D}_{\boldsymbol{\upsilon}\text{-sep}} \subseteq \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-sep}}$
- spec.: $k$-partícionálható és $k'$-produkálható (láncok)
  $$\boldsymbol{\mu}_k = \big\{\mu \in P_{\mathrm{I}} \,\big|\, |\mu| \geq k\big\}, \qquad \boldsymbol{\nu}_{k'} = \big\{\nu \in P_{\mathrm{I}} \,\big|\, \forall N \in \nu : |N| \leq k'\big\}$$
- ezekkel megadva:
  *$k$-particionálhatóan* és *$k'$-produkálhatóan korrelálatlan*, és
  *$k$-partícionálhatóan* és *$k'$-produkálhatóan szeparálható* állapotok


Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])
Szalay, Kökényesi, PRA **86**,032341 (2012) (arXiv:1206.6253 [quant-ph])

## Sokrész korrelációk – mértékek

II. szint: több lehetséges felosztás háló struktúra: $P_{\mathrm{II}} = \mathcal{O}_{\downarrow}(P_{\mathrm{I}}) \setminus \{\emptyset\}$

- *$\xi$-korreláció*:

$$C_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = \min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}} D(\varrho || \sigma) = \min_{\xi \in \boldsymbol{\xi}} C_{\xi}(\varrho)$$

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])

II. szint: több lehetséges felosztás háló struktúra: $P_{\mathrm{II}} = \mathcal{O}_{\downarrow}(P_{\mathrm{I}}) \setminus \{\emptyset\}$

- *$\xi$-korreláció*:

$$C_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = \min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}} D(\varrho || \sigma) = \min_{\xi \in \boldsymbol{\xi}} C_{\xi}(\varrho)$$

- *$\xi$-(formációs) összefonódás*:

$$E_{\boldsymbol{\xi}}(\pi) = C_{\boldsymbol{\xi}}|_{\mathcal{P}}(\pi), \qquad E_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = \min\left\{ \sum_i p_i E_{\boldsymbol{\xi}}(\pi_i) \;\middle|\; \sum_i p_i \pi_i = \varrho \right\}$$

összefonódás monoton

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])

# Sokrész korrelációk – mértékek

II. szint: több lehetséges felosztás    háló struktúra: $P_{\mathrm{II}} = \mathcal{O}_{\downarrow}(P_{\mathrm{I}}) \setminus \{\emptyset\}$

- *$\xi$-korreláció*:

$$C_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = \min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}} D(\varrho||\sigma) = \min_{\xi \in \boldsymbol{\xi}} C_{\xi}(\varrho)$$

- *$\xi$-(formációs) összefonódás*:

$$E_{\boldsymbol{\xi}}(\pi) = C_{\boldsymbol{\xi}}|_{\mathcal{P}}(\pi), \qquad E_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = \min\Big\{\sum_i p_i E_{\boldsymbol{\xi}}(\pi_i) \;\Big|\; \sum_i p_i \pi_i = \varrho\Big\}$$

  összefonódás monoton

- diszkrimináns (hű): $C_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = 0 \Leftrightarrow \varrho \in \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}$, $E_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = 0 \Leftrightarrow \varrho \in \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-sep}}$

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])

# Sokrész korrelációk – mértékek

II. szint: több lehetséges felosztás     háló struktúra: $P_{\mathrm{II}} = \mathcal{O}_{\downarrow}(P_{\mathrm{I}}) \setminus \{\emptyset\}$

- *$\xi$-korreláció*:

$$C_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = \min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}} D(\varrho||\sigma) = \min_{\xi \in \boldsymbol{\xi}} C_{\xi}(\varrho)$$

- *$\xi$-(formációs) összefonódás*:

$$E_{\boldsymbol{\xi}}(\pi) = C_{\boldsymbol{\xi}}|_{\mathcal{P}}(\pi), \qquad E_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = \min\Big\{ \sum\nolimits_i p_i E_{\boldsymbol{\xi}}(\pi_i) \;\Big|\; \sum\nolimits_i p_i \pi_i = \varrho \Big\}$$

  összefonódás monoton
- diszkrimináns (hű): $C_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = 0 \Leftrightarrow \varrho \in \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}$, $E_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = 0 \Leftrightarrow \varrho \in \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-sep}}$
- sokrész monoton: $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi} \Leftrightarrow C_{\boldsymbol{\upsilon}} \geq C_{\boldsymbol{\xi}}, E_{\boldsymbol{\upsilon}} \geq E_{\boldsymbol{\xi}}$

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])

II. szint: több lehetséges felosztás    háló struktúra: $P_{\mathrm{II}} = \mathcal{O}_{\downarrow}(P_{\mathrm{I}}) \setminus \{\emptyset\}$

- *$\xi$-korreláció*:

$$C_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = \min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}} D(\varrho || \sigma) = \min_{\xi \in \boldsymbol{\xi}} C_{\xi}(\varrho)$$

- *$\xi$-(formációs) összefonódás*:

$$E_{\boldsymbol{\xi}}(\pi) = C_{\boldsymbol{\xi}}|_{\mathcal{P}}(\pi), \qquad E_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = \min\Big\{ \sum\nolimits_i p_i E_{\boldsymbol{\xi}}(\pi_i) \;\Big|\; \sum\nolimits_i p_i \pi_i = \varrho \Big\}$$

összefonódás monoton

- diszkrimináns (hű): $C_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = 0 \Leftrightarrow \varrho \in \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}$, $E_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = 0 \Leftrightarrow \varrho \in \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-sep}}$
- sokrész monoton: $\boldsymbol{\upsilon} \preceq \boldsymbol{\xi} \Leftrightarrow C_{\boldsymbol{\upsilon}} \geq C_{\boldsymbol{\xi}}, E_{\boldsymbol{\upsilon}} \geq E_{\boldsymbol{\xi}}$
- spec.: $k$-particionálhatóság és $k'$-produkálhatóság
  *$k$-partitionálhatósági* és *$k'$-produkálhatósági korreláció*,
  *$k$-particionálhatósági* és *$k'$-produkálhatósági összefonódás*

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)
Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])

# Korreláció alapú klaszterezés

Kétrész korrelációs klaszterezés:

a $(L, C_{\{\{i\},\{j\}\}})$ gráf összefüggőségi klaszterezése $(\gamma = \{C_1, C_2, \dots, C_{|\gamma|}\})$

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)

# Korreláció alapú klaszterezés

Kétrész korrelációs klaszterezés:

a $(L, C_{\{\{i\},\{j\}\}})$ gráf összefüggőségi klaszterezése $(\gamma = \{C_1, C_2, \dots, C_{|\gamma|}\})$

Sokrész korrelációs klaszterezés:

adjuk meg a $\beta = \{B_1, B_2, \dots, B_{|\beta|}\}$ partíciót, *ha létezik*, amire

- a $B \in \beta$ részrendszerek gyengén korreláltak egymással
- az elemi részrendszerek $\{i\} \subseteq B$ erősen korreláltak egymással
- vagyis $C_\beta$ gyenge, és $C_{k\text{-part},B}$, $C_{k\text{-prod},B}$ erős

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)

# Korreláció alapú klaszterezés

Kétrész korrelációs klaszterezés:

a $(L, C_{\{\{i\},\{j\}\}})$ gráf összefüggőségi klaszterezése $(\gamma = \{C_1, C_2, \dots, C_{|\gamma|}\})$

Sokrész korrelációs klaszterezés:

adjuk meg a $\beta = \{B_1, B_2, \dots, B_{|\beta|}\}$ partíciót, *ha létezik*, amire

- a $B \in \beta$ részrendszerek gyengén korreláltak egymással
- az elemi részrendszerek $\{i\} \subseteq B$ erősen korreláltak egymással
- vagyis $C_\beta$ gyenge, és $C_{k\text{-part},B}$, $C_{k\text{-prod},B}$ erős

Problémák:

- rejtett korrelációk: $\gamma \prec \beta$
- $\beta$-t nehéz megtalálni, túl sok lehetőséget kell ellenőrizni
- „$C_\beta$ gyenge" és „$C_{k\text{-part},B}$, $C_{k\text{-prod},B}$ erős" jelentése/definíciója

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)

# Korreláció alapú klaszterezés

Kétrész korrelációs klaszterezés:

a $(L, C_{\{\{i\},\{j\}\}})$ gráf összefüggőségi klaszterezése $(\gamma = \{C_1, C_2, \dots, C_{|\gamma|}\})$

Sokrész korrelációs klaszterezés:

adjuk meg a $\beta = \{B_1, B_2, \dots, B_{|\beta|}\}$ partíciót, *ha létezik*, amire

- a $B \in \beta$ részrendszerek gyengén korreláltak egymással
- az elemi részrendszerek $\{i\} \subseteq B$ erősen korreláltak egymással
- vagyis $C_\beta$ gyenge, és $C_{k\text{-part},B}$, $C_{k\text{-prod},B}$ erős

Problémák:

- rejtett korrelációk: $\gamma \prec \beta$
- $\beta$-t nehéz megtalálni, túl sok lehetőséget kell ellenőrizni
- „$C_\beta$ gyenge” és „$C_{k\text{-part},B}$, $C_{k\text{-prod},B}$ erős” jelentése/definíciója

Van egy módszerünk ezek megoldására.

Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)

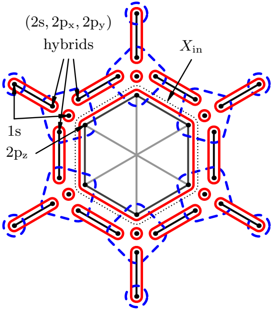
# Példa: molekulák elektronszerkezete

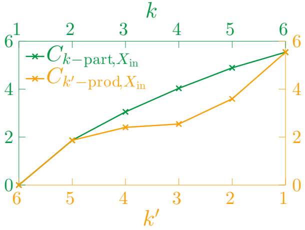
- elemi részrendszerek: lokalizált atomi pályák (Pipek-Mezey)
- „atomic split”: $\alpha = \{A_1, A_2, \dots, A_{|\alpha|}\}$ (kék)
- „bond split”: $\beta = \{B_1, B_2, \dots, B_{|\beta|}\}$ (piros)

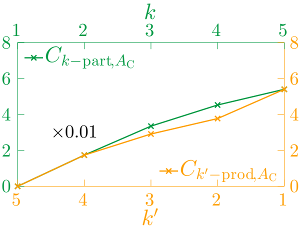
# Példa: molekulák elektronszerkezete

- elemi részrendszerek: lokalizált atomi pályák (Pipek-Mezey)
- „atomic split”: $\alpha = \{A_1, A_2, \dots, A_{|\alpha|}\}$ (kék)
- „bond split”: $\beta = \{B_1, B_2, \dots, B_{|\beta|}\}$ (piros)

benzol ($C_6H_6$): $C_\alpha = 29.52$, $C_\beta = 2.33$



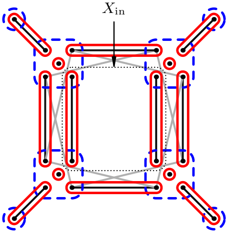



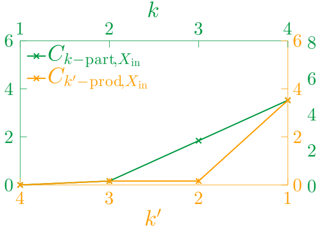



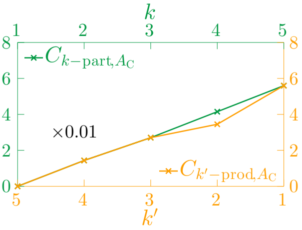

(ln 4 egységekben)

- elemi részrendszerek: lokalizált atomi pályák (Pipek-Mezey)
- „atomic split": $\alpha = \{A_1, A_2, \ldots, A_{|\alpha|}\}$ (kék)
- „bond split": $\beta = \{B_1, B_2, \ldots, B_{|\beta|}\}$ (piros)

ciklobutadién ($\mathrm{C_4H_4}$): $C_\alpha = 19.48$, $C_\beta = 3.17$




(ln 4 egységekben)

# Nyitott kérdések és további lehetőségek

Korreláció és összefonódás elmélet:

- rejtett korrelációk / összefonódási monogámia
- klaszterező módszer továbbfejlesztése
- további alkalmazások

# Nyitott kérdések és további lehetőségek

Korreláció és összefonódás elmélet:

- rejtett korrelációk / összefonódási monogámia
- klaszterező módszer továbbfejlesztése
- további alkalmazások

Molekula-fizika:

- kötésközti és kötésen belüli korrelációk bázisfüggőek:
  az eredmények a kiinduló bázis-készletre
  és a Pipek-Mezey lokalizációra nézve érvényesek
- optimalizáció ezekre nézve
- nemegyensúlyi számítások

# Mit vigyünk haza

Korreláció fogalmak:

- a klasszikus tiszta állapotok korrelálatlanok (szorzat)
- ha egy tiszta állapot korrelált, akkor ez a korreláció kvantumos eredetű, ezt hívjuk összefonódásnak

# Mit vigyünk haza

Korreláció fogalmak:

- a klasszikus tiszta állapotok korrelálatlanok (szorzat)
- ha egy tiszta állapot korrelált, akkor ez a korreláció kvantumos eredetű, ezt hívjuk összefonódásnak
- kevert állapot: korrelálatlan/korrelált, és ha kikeverhető korrelálatlanokból, akkor szeparálható, különben összefont

# Mit vigyünk haza

Korreláció fogalmak:

- a klasszikus tiszta állapotok korrelálatlanok (szorzat)
- ha egy tiszta állapot korrelált, akkor ez a korreláció kvantumos eredetű, ezt hívjuk összefonódásnak
- kevert állapot: korrelálatlan/korrelált, és ha kikeverhető korrelálatlanokból, akkor szeparálható, különben összefont

Korrláció mértékek:

- ”annyira korrelált, amennyire nem korrelálatlan”

# Mit vigyünk haza

Korreláció fogalmak:

- a klasszikus tiszta állapotok korrelálatlanok (szorzat)
- ha egy tiszta állapot korrelált, akkor ez a korreláció kvantumos eredetű, ezt hívjuk összefonódásnak
- kevert állapot: korrelálatlan/korrelált, és ha kikeverhető korrelálatlanokból, akkor szeparálható, különben összefont

Korrláció mértékek:

- ”annyira korrelált, amennyire nem korrelálatlan”
- tiszta állapotra: annyira összefont, amennyire korrelált,<br>kevert állapotra: az optimális dekompozíció átlagos összefonódása

# Mit vigyünk haza

Korreláció fogalmak:

- a klasszikus tiszta állapotok korrelálatlanok (szorzat)
- ha egy tiszta állapot korrelált, akkor ez a korreláció kvantumos eredetű, ezt hívjuk összefonódásnak
- kevert állapot: korrelálatlan/korrelált, és ha kikeverhető korrelálatlanokból, akkor szeparálható, különben összefont

Korrláció mértékek:

- ”annyira korrelált, amennyire nem korrelálatlan”
- tiszta állapotra: annyira összefont, amennyire korrelált, kevert állapotra: az optimális dekompozíció átlagos összefonódása

Ezeket az elveket alkalmaztuk sokrész rendszerekre.

# Mit vigyünk haza

Korreláció fogalmak:

- a klasszikus tiszta állapotok korrelálatlanok (szorzat)
- ha egy tiszta állapot korrelált, akkor ez a korreláció kvantumos eredetű, ezt hívjuk összefonódásnak
- kevert állapot: korrelálatlan/korrelált, és ha kikeverhető korrelálatlanokból, akkor szeparálható, különben összefont

Korrláció mértékek:

- ”annyira korrelált, amennyire nem korrelálatlan”
- tiszta állapotra: annyira összefont, amennyire korrelált,
  kevert állapotra: az optimális dekompozíció átlagos összefonódása

Ezeket az elveket alkalmaztuk sokrész rendszerekre.

Kémiai kötés: ahol az elektronok szabadon mozoghatnak,
ez megjelenik a betöltések korrelációiban.

Köszönöm a figyelmet!

[Szalay, Barcza, Szilvási, Veis, Legeza, arXiv:1605.06919 [quant-ph] (2016)]

[Szalay, PRA **92**, 042329 (2015) (arXiv:1503.06071 [quant-ph])]