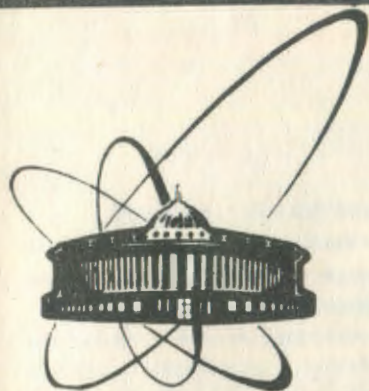


90-109



объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

27

Л 871

P2-90-109

И.В. Луценко*, В.М. Тер-Антонян *

НЕОДНОРОДНОСТЬ КЛАССИЧЕСКИХ
И КВАНТОВЫХ СМЕСЕЙ

Общая концепция

Направлено в журнал "Journal of Physics A"

*Ереванский государственный университет

1990

1. Введение. Предлагаемая работа преследует две цели. Во-первых, мы даем развернутое изложение идей, впервые высказанных в работах^{/1/}, во-вторых, обобщаем эти идеи на случай квантовых смесей.

Предметом нашего внимания являются классические и квантовые смеси. Наглядным примером классической смеси является руда: в ней полезный компонент перемешан с пустой породой. В общем случае классической смесью мы называем любое множество, в элементах которого можно выделить подэлементы, отличающиеся друг от друга по значениям признаков, которые они (подэлементы) на себе несут. Под квантовой смесью, как это принято, мы понимаем любую суперпозицию квантовых состояний (когерентную смесь). В примере с рудой элементами смеси являются куски руды, подэлементами - компоненты, значениями признаков - массы компонентов в элементах. Не всегда легко в объекте опознать смесь и выявить ее структурные категории (элемент, подэлемент и т.д.). В этом отношении могут оказаться полезными следующие примеры. Представим себе:

(а) предприятия данной отрасли производства с распределенными между ними средствами; (б) участки неба со светящимися на них объектами; (в) пленки с фиксированными на них треками элементарных частиц; (г) адронные мультиплеты; (д) межбазисные разложения в системах со скрытой симметрией. Все это - примеры смесей. В них признаками могут служить: (а) средства, распределенные между предприятиями; (б) светимость либо другая физическая характеристика небесного тела; (в) импульсы либо углы между конечными продуктами исследуемого процесса столкновения элементарных частиц; (г) квантовые состояния отдельных кварков в адронах; (д) полный набор физических величин, определяющих квантовые состояния, суперпозиция которых рассматривается.

О том, что мы собираемся исследовать в смесях, будет сказано позднее. Пока же отметим следующее. Как правило, смеси многокомпонентны. Следить за всеми компонентами одновременно весьма сложно, да и не всегда нужно, т.к. не все компоненты смеси бывают интересны в равной мере. Разумно поэтому выделить один либо несколько наиболее важных компонентов, а вклад остальных учитывать лишь интегральным образом - как это принято делать при полуинклюдзивном описании процессов множеств-

венного рождения^{/2/}. Такая тактика, несомненно, имеет преимущества, т.к. позволяет сначала разобраться в главном, перенося все остальное на второй план.

2. Однокомпонентная смесь. Однокомпонентная смесь описывается тремя характеристиками: концентрацией признака, функцией выхода $\gamma(\beta)$ и функцией извлечения $\epsilon(\beta)$. Эти термины взяты из области обогащения руд и поэтому требуют разъяснения.

Рассмотрим смесь полезного компонента с пустой породой. Выделим бесконечно малый объем смеси (элемент) с массой dM и обозначим массу содержащегося в нем признака через dm . Назовем концентрацией признака отношение

$$\beta = \frac{dm}{dM}. \quad (2.1)$$

Ясно, что $0 \leq \beta \leq 1$. Введем наряду с β также среднюю концентрацию $\bar{\beta}$, определив ее как отношение полной массы признака к полной массе смеси M :

$$\bar{\beta} = \frac{m}{M}. \quad (2.2)$$

Далее, обозначим массу смеси, приходящуюся на интервал $(\beta, \beta + d\beta)$, через $dM(\beta)$ и определим функцию $\gamma(\beta)$ через соотношение

$$\gamma(\beta) d\beta = \frac{dM(\beta)}{M}. \quad (2.3)$$

Из (2.3) видно, что функция выхода $\gamma(\beta)$ тождественно плотности распределения массы смеси по концентрации β . Из приведенных выражений легко выводится условие нормировки

$$\int_0^1 \gamma(\beta) d\beta = 1 \quad (2.4)$$

и связь средней концентрации $\bar{\beta}$ с функцией выхода $\gamma(\beta)$

$$\bar{\beta} = \int_0^1 \beta \gamma(\beta) d\beta. \quad (2.5)$$

С каждым элементом смеси $dM(\beta)$ связан элемент признака $dm(\beta)$. Здесь термин "элемент" мы употребляем не в том смысле, как во введении. Именно, $dM(\beta)$ - это суммарная масса всех элементов, в которых $\beta \in (\beta, \beta + d\beta)$, точно так же определяется и $dm(\beta)$. Так как масса смеси распределена по концентрации β , то по ней же распределена и масса признака. Таким образом, однокомпонентная смесь характе-

ризуется не одной, а двумя плотностями распределений. Вторая плотность распределения и есть функция извлечения $\varepsilon(\beta)$, о которой говорилось выше:

$$\varepsilon(\beta)d\beta = \frac{dm(\beta)}{m}. \quad (2.6)$$

Понятно, что, как и в случае с функцией $\gamma(\beta)$, должно выполняться условие нормировки функции $\varepsilon(\beta)$:

$$\int_0^1 \varepsilon(\beta)d\beta = 1. \quad (2.7)$$

Теперь мы можем изложить основную идею, на которой построено все остальное.

3. Неоднородность: качественный подход. Наличие в однокомпонентной смеси двух плотностей распределения приводит к тому, что о представительности, т.е. статистическом весе наблюдаемых в смеси концентраций, можно судить как с позиции функции выхода $\gamma(\beta)$, так и с позиции извлечения $\varepsilon(\beta)$.

(а) Позиция функции выхода: концентрация β тем представительнее, чем большая масса смеси ей соответствует, т.е. чем больше

$$\gamma(\beta)d\beta.$$

(б) Позиция функции извлечения: представительность концентрации β определяется массой признака, приходящегося на интервал $(\beta, \beta+d\beta)$, т.е. величиной $\varepsilon(\beta)d\beta$.

Мы называем далее смесь однородной, если при всех значениях β точки зрения (а) и (б) совпадают, т.е.

$$\gamma(\beta) \equiv \varepsilon(\beta). \quad (3.1)$$

В этом случае элементы смеси и элементы признака статистически равнозначны и из предыдущих формул следует, что $\beta = \bar{\beta}$, т.е. спектр концентраций вырождается в одну точку. Понятно, что такое состояние смеси должно описываться дельтаобразными функциями γ и ε :

$$\gamma(\beta) = \varepsilon(\beta) = \delta(\beta - \bar{\beta}). \quad (3.2)$$

Условимся далее считать смесь тем неоднороднее, чем "сильнее различие между функциями γ и ε ". Ниже мы придадим сказанному четкий математический смысл, а пока обратим внимание на два альтернативных процесса - смешивания и разделения (или извлечения). Смешивание делает смесь все более однородной и в идеале приводит к состоянию (3.2), когда на любые равные массы смеси приходятся равные массы признака. Процесс раз-

деления отделяет признак от остальной части смеси, увеличивая тем самым степень неоднородности. В идеале процесс разделения приводит к двум элементам - чистому признаку ($\beta = 1$) и пустой породе ($\beta = 0$).

Мы пришли к двум важным выводам:

(в) Неоднородность есть продукт физических процессов, в результате которых из "первоначальных" компонентов образуется смесь.

(г) В иерархии состояний неоднородности есть верхний предел, который мы называем состоянием крайней неоднородности; в этом состоянии спектр концентраций вырождается в две точки: с $\beta = 0$ и $\beta = 1$.

Так как в элементах с $\beta = 0$ нет признака, то $dm(0) = 0$, и поэтому ясно, что крайне неоднородному состоянию смеси должны соответствовать следующие дельтаобразные функции γ и ϵ :

$$\gamma(\beta) = 2(1-\bar{\beta})\delta(\beta) + 2\bar{\beta}\delta(\beta-1), \quad (3.3)$$

$$\epsilon(\beta) = 2\delta(\beta-1). \quad (3.4)$$

Коэффициенты перед дельта-функциями выбраны так, чтобы удовлетворить условиям нормировки (2.4) и (2.7), а также формуле (2.5).

4. Критерий неоднородности. Обратимся теперь к проблеме оценки неоднородности смеси. Мы должны научиться отвечать на вопрос: какая смесь более неоднородна? Это поможет нам понять, из какой смеси (при других равных условиях) легче извлечь полезный компонент, а также решать другие проблемы. Нам нужно придать количественный смысл фразе "различие между функциями γ и ϵ ". Понятно, что речь должна идти об интегральном различии, т.к. только ее можно отнести к смеси как к единому целому.

Из формул (2.1) - (2.3) и (2.6) легко заключить, что функции γ и ϵ связаны следующим уравнением:

$$\epsilon(\beta) = \frac{\beta}{\bar{\beta}} \gamma(\beta). \quad (4.1)$$

Начертим графики функций γ и ϵ , учитывая, что согласно (4.1) $\epsilon(0) = 0$ и $\epsilon \leq \gamma$ при $\beta \leq \bar{\beta}$ (см. рис. 1). Отклонение ϵ от γ выражается наличием двух "несовмещенных площадей", расположенных по обе стороны от средней концентрации $\bar{\beta}$, равных по абсолютной величине, но имеющих разные знаки. Мерой неоднородности может служить каждая из этих площадей. Выбирая площадь слева от точки $\bar{\beta}$, введем следующий функционал:

$$\mathcal{L} = \int_0^{\bar{\beta}} \left(1 - \frac{\beta}{\bar{\beta}}\right) \gamma(\beta) d\beta. \quad (4.2)$$

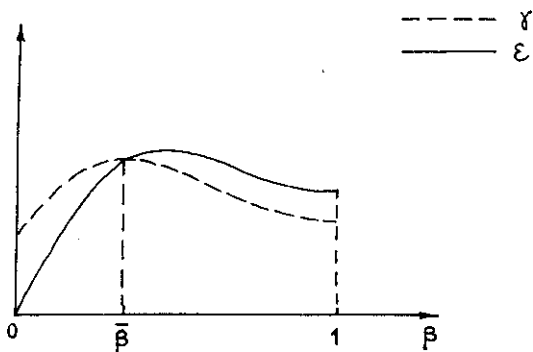


Рис. 1. Графики функций γ и ϵ . Сплошная кривая - функция ϵ , пунктирная кривая - функция γ .

Назовем величину \mathcal{L} критерием неоднородности смеси. Легко показать, что для однородной смеси $\mathcal{L} = 0$, для крайне неоднородной - $\mathcal{L} = 1 - \bar{\beta}$. Отсюда следует неравенство

$$0 \leq \mathcal{L} \leq 1 - \bar{\beta}. \quad (4.3)$$

5. Треугольник неоднородности. Неравенство (4.3) открывает интересную возможность геометрической интерпретации концепции неоднородности. Будем считать, что состояние неоднородности смеси задано, если задана пара чисел $(\bar{\beta}, \mathcal{L})$. Введенное таким образом понятие состояния включает в себя множество "микросостояний", т.е. γ - распределений, и в этом смысле играет роль "макросостояния". Обратимся к плоскости $(\bar{\beta}, \mathcal{L})$. Согласно неравенству (4.3) состояния неоднородности могут размещаться лишь внутри либо на границе равнобедренного треугольника, изображенного на рисунке 2. Однородные состояния лежат на катете OQ , крайне неоднородным состояниям соответствует гипотенуза, все другие состояния лежат внутри треугольника. Горизонтальные

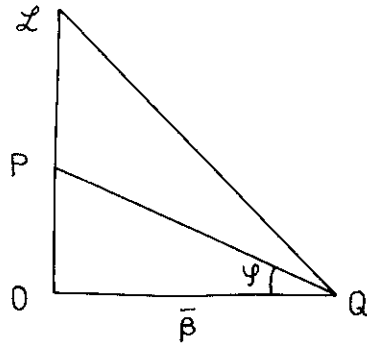


Рис. 2. Треугольник неоднородности.

линии соответствуют смесям, находящимся в состояниях с одинаковой мерой неоднородности, вертикальные - смесям с данной средней концентрацией. Лучи при заданном угле ψ объединяют смеси с одинаковой степенью E неоднородности, которую мы определим как отношение

$$E = \frac{\mathcal{L}}{1 - \bar{\beta}}. \quad (5.1)$$

Разные точки треугольника могут соответствовать как состояниям неоднородности разных смесей, так и различным состояниям одной и той же смеси. В последнем случае число E показывает, насколько смесь далека от состояния крайней неоднородности с тем же значением средней концентрации $\bar{\beta}$. На треугольнике неоднородности параметр E выражается длиной отрезка OP .

Если в смеси происходят процессы, то они могут менять как $\bar{\beta}$, так и \mathcal{L} . Это приводит к возникновению характерных траекторий на треугольнике неоднородности. К таковым, в частности, относятся траектории, которые описывают макросостояния с данным $\bar{\beta}$, \mathcal{L} или E соответственно. Назовем их $\bar{\beta}$ -, \mathcal{L} - и E -кластерами. В духе кластерной терминологии отдельное макросостояние следует интерпретировать как одноточечный кластер, включающий в себя ансамбль "микросостояний". Важным является представление о расстоянии между одноточечными кластерами. В нашем случае это расстояние мы отождествляем с расстоянием между точками, изображающими на треугольнике состояния неоднородности:

$$d(A, B) = \sqrt{(\bar{\beta}_A - \bar{\beta}_B)^2 + (\mathcal{L}_A - \mathcal{L}_B)^2}. \quad (5.2)$$

На базе этой формулы и с учетом того, что на треугольнике есть разного рода траектории, можно задаться целью ввести ряд понятий, отражающих меру близости точечного кластера к произвольной траектории либо меру близости произвольных траекторий и т.д. Однако эти проблемы относятся скорее к предмету кластерного анализа^{/3/} и здесь мы ими заниматься не будем. Ограничимся лишь введением трех типов расстояний:

(а) расстояние между $\bar{\beta}$ -кластерами

$$d(\bar{\beta}_A, \bar{\beta}_B) = |\bar{\beta}_A - \bar{\beta}_B|,$$

(б) расстояние между \mathcal{L} -кластерами

$$d(\mathcal{L}_A, \mathcal{L}_B) = |\mathcal{L}_A - \mathcal{L}_B|,$$

(в) расстояние между E -кластерами

$$d(E_A, E_B) = |\operatorname{tg} \varphi_A - \operatorname{tg} \varphi_B|.$$

На рисунке 3 изображены отрезки, выражающие эти расстояния.

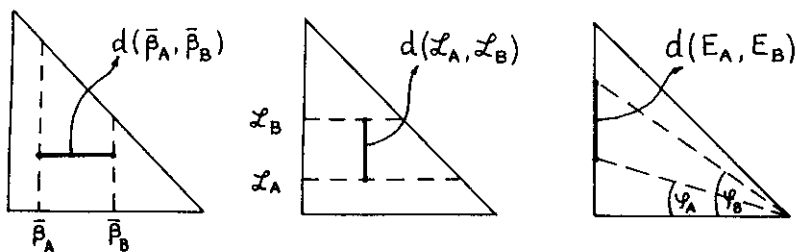


Рис. 3. Расстояния между $\bar{\beta}$ -, \mathcal{L} - и E -кластерами.

Мы и далее будем пользоваться треугольником неоднородности как диаграммой состояний, которая помогает наглядно осмысливать информацию, касающуюся смесей.

6. Некоторые примеры классических смесей. Рассмотрим теперь несколько характерных примеров, конкретизирующих высказанные выше общие утверждения.

(А) Представим себе смесь, состоящую из двух однородных подсмесей с концентрациями β_1 и β_2 ($\beta_1 < \beta_2$). Легко показать, что такая

смесь описывается функцией выхода

$$\gamma(\beta) = \frac{\beta_2 - \bar{\beta}}{\beta_2 - \beta_1} \delta(\beta - \beta_1) + \frac{\bar{\beta} - \beta_1}{\beta_2 - \beta_1} \delta(\beta - \beta_2). \quad (6A.1)$$

Из (6A.1) и (4.2) имеем

$$\mathcal{L} = \frac{(\beta_2 - \bar{\beta})(\bar{\beta} - \beta_1)}{\bar{\beta}(\beta_2 - \beta_1)}. \quad (6A.2)$$

График функции $\mathcal{L}(\bar{\beta})$ на треугольнике неоднородности дается на рисунке 4, из которого следует, что при изменении $\bar{\beta}$ от β_1 до β_2 смесь переходит из однородного состояния $(\beta_1, 0)$ в максимально неоднородное состояние $(\bar{\beta}_0, \mathcal{L}_{\max})$ и при дальнейшем приближении $\bar{\beta}$ к β_2 смесь стремится к однородному состоянию $(\beta_2, 0)$.

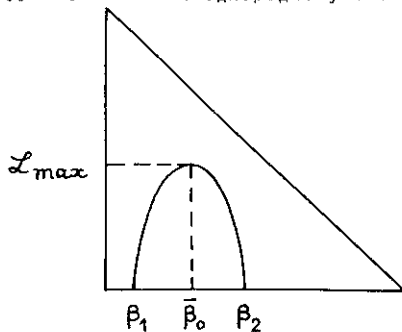


Рис. 4. Зависимость критерия неоднородности от средней концентрации при смешивании двух однородных смесей.

Из (6A.2) следует, что

$$\mathcal{L}_{\max} = \frac{\sqrt{\beta_2} - \sqrt{\beta_1}}{\sqrt{\beta_2} + \sqrt{\beta_1}}, \quad \bar{\beta}_0 = \sqrt{\beta_1 \beta_2}.$$

Варьирование средней концентрации $\bar{\beta}$ при данных концентрациях может быть достигнуто изменением масс подсмесей. Заметим, что формула (6A.2) отражает наши интуитивные представления о неоднородности смеси. Действительно, при $M_2 = 0$ имеется однородная смесь с массой M_1 . После "включения" второй подсмеси возникает неоднородная смесь, при $M_2 \gg M_1$ смесь снова стремится стать однородной.

(Б). Перейдем к более сложному случаю, когда смесь состоит из однородной подсмеси с концентрацией β_0 и двух несмешавшихся остатков, т.е. чистого компонента и пустой породы:

$$\begin{aligned} \gamma(\beta) = & 2 \frac{\beta_0 - \bar{\beta}(1 + \beta_0) + \bar{\beta}^2}{\beta_0} \delta(\beta) + \\ & + \frac{\bar{\beta} - \bar{\beta}^2}{\beta_0(1 - \beta_0)} \delta(\beta - \beta_0) + 2 \frac{\bar{\beta}^2 - \beta_0 \bar{\beta}}{1 - \beta_0} \delta(\beta - 1). \end{aligned} \quad (6Б.1)$$

При вычислении \mathcal{L} - критерия следует различать области $\bar{\beta} < \beta_0$ и $\bar{\beta} > \beta_0$. В первом случае вклад дает только первый член выражения (6Б.1), во втором - оба первых члена. Учитывая сказанное, получим

$$\mathcal{L}(0 < \bar{\beta} \leq \beta_0) = \frac{\beta_0 - \bar{\beta}(1 + \beta_0) + \bar{\beta}^2}{\beta_0}, \quad (6Б.2)$$

$$\mathcal{L}(\beta_0 \leq \bar{\beta} < 1) = \frac{(1 - \bar{\beta})(\bar{\beta}^2 - \bar{\beta}\beta_0)}{\bar{\beta}(1 - \beta_0)}. \quad (6Б.3)$$

Величина $\bar{\beta}^2$ изменяется в пределах $(\bar{\beta})^2 \leq \bar{\beta}^2 \leq \bar{\beta}$. При $\bar{\beta}^2 = \bar{\beta}$ коэффициент перед вторым членом в выражении (6Б.1) обращается в нуль и смесь достигает крайней неоднородности. Значению $\bar{\beta}^2 = (\bar{\beta})^2$ соответствует максимально однородное состояние смеси, причем

$$\mathcal{L}_{\min}(0 < \bar{\beta} \leq \beta_0) = (1 - \bar{\beta}) \left(1 - \frac{\bar{\beta}}{\beta_0}\right),$$

$$\mathcal{L}_{\min}(\beta_0 \leq \bar{\beta} < 1) = (1 - \bar{\beta}) \left(1 - \frac{1 - \bar{\beta}}{1 - \beta_0}\right).$$

Анализ приведенных формул позволяет заключить, что микросостояния (6Б.1) покрывают на треугольнике неоднородности лишь заштрихованную область (см. рис. 5). Максимум нижней границы неоднородности в области $\beta_0 < \bar{\beta} < 1$ достигается в точке β' и равна \mathcal{L}' . При $\bar{\beta} = \beta_0$ смесь может находиться в однородном состоянии.

(В). Вообразим себе смесь с параметрами $(\bar{\beta}, \mathcal{L})$. Пусть из каждой совокупности элементов с соответствующим β выбрано по равному числу элементов и из этих элементов полностью извлечен признак. Понятно, что при этом $\bar{\beta}$ не изменится. Задача в том, чтобы, зная $\bar{\beta}$, \mathcal{L} и долю извлеченного признака $C = \delta m/m$, определить степень

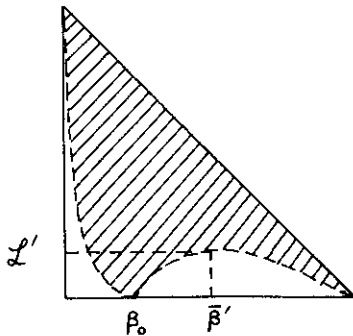


Рис. 5. Физическая область смеси (6Б.1) заштрихована.
Здесь $\mathcal{L}' = (1 - \beta_0)/2$, $\bar{\beta}' = (1 + \beta_0)/2$.

неоднородности смеси, получившейся после такого разделения. Нетрудно понять, что окончательное состояние смеси должно описываться функцией выхода:

$$Y(\beta) = 2(1 - \bar{\beta})C\delta(\beta) + (1 - \bar{C})\delta(\beta) + 2\bar{\beta}C\delta(\beta - 1). \quad (6B.1)$$

Легко убедиться, что средние концентрации, вычисленные по новой и старой функциям выхода - $\delta'(\beta)$ и $\delta(\beta)$ - как и должно быть, совпадают между собой и равны указанному в формуле (6B.1) параметру $\bar{\beta}$. После сказанного с помощью (4.2) имеем

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} + C(1 - \bar{\beta} - \mathcal{L}). \quad (6B.2)$$

Т.н. согласно (3.3) $\mathcal{L} \leq 1 - \bar{\beta}$, то $\mathcal{L}' \geq \mathcal{L}$, т.е. смесь действительно становится более неоднородной.

С позиций треугольника неоднородности результат (6B.2) может быть проинтерпретирован следующим образом (см. рис. 6). Величина \mathcal{L}' определяется по данным $\bar{\beta}$, \mathcal{L} и C с помощью простых построений. Сначала нужно нанести точку $(\bar{\beta}, \mathcal{L})$ на треугольник неоднородности, затем от точки b вверх по вертикальному катету отмерить отрезок с длиной C и тем самым отметить точку b'' . Наконец, соединяя точки b'' и d , находим в пересечении отрезков $b''d$ и $a''a$ точку, изображающую состояние $(\bar{\beta}, \mathcal{L}')$, и тем самым определяем \mathcal{L}' .

(Г). Смешем n смесей со средними концентрациями $\bar{\beta}_i$, степенями неоднородности \mathcal{L}_i и массами M_i . Легко показать, что функция выхода общей смеси определится выражением

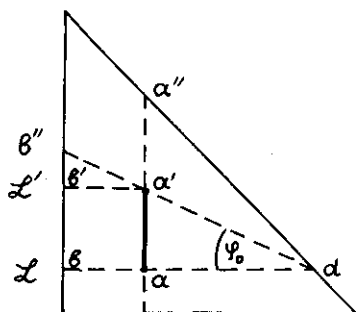


Рис. 6. Интерпретация формулы (6В.2) на треугольнике неоднородности.

$$\gamma(\beta) = \sum_{i=1}^n \frac{\mathcal{M}_i}{M} \gamma_i(\beta), \quad (6Г.1)$$

где $\gamma_i(\beta)$ - это функции выхода исходных смесей, а $M = \sum \mathcal{M}_i$ - полная масса общей смеси. Из (6Г.1) следует, что концентрация новой смеси дается выражением

$$\bar{\beta} = \sum_{i=1}^n \frac{\mathcal{M}_i}{M} \bar{\beta}_i. \quad (6Г.2)$$

Вычислим критерий неоднородности новой смеси

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^n \frac{\mathcal{M}_i}{M} \int_0^{\bar{\beta}} \left(1 - \frac{\beta}{\bar{\beta}}\right) \gamma_i(\beta) d\beta. \quad (6Г.3)$$

Из полученной формулы ясно, что \mathcal{L} не определяется параметрами \mathcal{M}_i , $\bar{\beta}_i$ и \mathcal{L}_i ; необходима более подробная информация, заключенная в функциях выхода $\gamma_i(\beta)$. Есть, однако, приятное исключение из этого общего правила. Именно, если средние концентрации подлежащих смешиванию смесей равны друг другу, то, как следует из (6Г.2), $\bar{\beta}_i = \bar{\beta}$. Тогда стоящие под знаком суммы в (6Г.3) интегралы переходят в \mathcal{L} - критерии соответствующих начальных смесей и мы получаем красивую формулу

$$\mathcal{L} = \frac{\mathcal{M}_1}{M} \mathcal{L}_1 + \dots + \frac{\mathcal{M}_n}{M} \mathcal{L}_n,$$

выражающую своеобразное свойство квазиаддитивности \mathcal{L} - критерия.

7. ЭКСКУРС В МАТЕМАТИЧЕСКУЮ СТАТИСТИКУ. В этом пункте мы собираемся высказать следующие замечания.

(а) Термин "неоднородность" весьма часто используется во многих приложениях математической статистики, причем не всегда в одинаковом смысле. В связи со сказанным нам хотелось бы особо подчеркнуть, что мы в этой работе употребляем термин "неоднородность" лишь в том смысле, который был ему выше придан в пунктах 3 и 4.

(б) В терминах разности $\chi - \epsilon$ выражается не только \mathcal{L} - критерий, но некоторые общеизвестные конструкции математической статистики. Так, дисперсию распределения $\chi(\beta)$ можно представить следующим, весьма необычным образом:

$$\sigma^2 = \bar{\beta} \int_0^1 \beta(\epsilon - \chi) d\beta.$$

Аналогичные формулы можно получить при желании и для центральных моментов более высокого порядка. Это наблюдение мы склонны растолковывать так, что все эти конструкции являются, так сказать, "продуктами" неоднородности, т.е. описывают сопутствующие неоднородности "атрибуты": разброс вокруг среднего; нормированный разброс и т.д. Не удивительно поэтому, что в некоторых случаях по этим конструкциям можно весьма адекватно судить о мере неоднородности смеси. Так, для функции выхода

$$\chi(\beta) = \frac{\theta(\beta - a) - \theta(\beta - b)}{b - a},$$

где $b > a > 0$ и $\theta(x) = (1 + \operatorname{sgn} x)/2$, критерий неоднородности выражается через коэффициент вариации $v = \sqrt{\sigma^2}/\bar{\beta}$ следующим образом:

$$\mathcal{L} = \sqrt{3} v^2/4.$$

Понятно, что о неоднородности такой смеси можно с успехом судить по коэффициенту вариации v .

(в) Есть еще один аспект, на который нам хотелось бы обратить внимание. Неоднородные смеси обязательно наделены некоторым "беспорядком" - отход от однородности всегда можно трактовать как возникновение беспорядка, и в этом смысле "продуктом" неоднородности является также информационная энтропия. Рассмотрим множество смесей со средней концентрацией признака $\bar{\beta} = 0,5$. Среди этих смесей максимумом информационной энтропии S обладает та, элементы которой распределены по концентрациям β равномерно, т.е. смесь с функцией выхода $\chi(\beta) \equiv 1$ (приведенное утверждение является стандартным упражнением по статистической физике). Для такой смеси $\mathcal{L} = 0,25$, и это означает, что система

с максимумом энтропии может быть далека от состояния крайней неоднородности ($\mathcal{L}_{\text{кр}} = 1 - \beta = 0,5$). Следовательно, информационная энтропия может заведомо ошибочно оценивать степень неоднородности смесей, если их стадия неоднородности близка к единице.

8. Относительные корреляции: постановка вопроса. Изложенная выше теория касалась однокомпонентных смесей. Как уже отмечалось, реальные смеси почти всегда многокомпонентны. В связи с этим в них (реальных смесях) наряду с вопросом о неоднородности возникает и ряд других вопросов, среди которых центральным является вопрос о скоррелированности признаков. На локальном уровне скоррелированность признаков V_1 и V_2 в смеси проявляется в том, что эксклюзивная функция выхода $\chi(\beta_1, \beta_2)$ не равна произведению инклюзивных функций распределения $\chi_1(\beta_1)$ и $\chi_2(\beta_2)$ - точный смысл этих терминов разъясняется в следующем пункте. На глобальном уровне, т.е. интегрально о скоррелированности признаков может говорить отличие от нуля выражения $\bar{\beta}_1 \bar{\beta}_2 - \bar{\beta}_1 \bar{\beta}_2$ или подобных ему более сложных конструкций. Такие конструкции, однако, выявляют "абсолютную" взаимосвязь между признаками. Именно, если $\bar{\beta}_1 \bar{\beta}_2 - \bar{\beta}_1 \bar{\beta}_2 \neq 0$, то признаки V_1 и V_2 скоррелированы, но это, так сказать, общая скоррелированность: насколько признак V_1 зависит от признака V_2 , настолько же признак V_2 зависит от признака V_1 .

Каким же образом описывать те реально существующие ситуации, когда признаки зависят друг от друга не симметричным образом? Пусть, например, во всех элементах смеси с фиксированным значением концентрации β_1 встречается только одно определенное значение концентрации β_2 , а элементы смеси с фиксированным значением β_2 содержат разные значения концентрации β_1 . В такой смеси, с позиций здравого смысла, V_2 максимально скоррелирован с признаком V_1 , тогда как зависимость признака V_1 от признака V_2 "слабее". Понятно, что в этом примере симметричные по признакам интегральные конструкции (такие, как $\bar{\beta}_1 \bar{\beta}_2 - \bar{\beta}_1 \bar{\beta}_2$) мало чем полезны. Таким образом, необходимо иметь критерий, дающий меру относительной скоррелированности признаков в смеси. Такой критерий мы введем в пункте 10, а пока остановимся на формальной стороне вопроса о полуинклюзивном описании смеси.

9. Двухкомпонентная смесь. Рассмотрим смесь из двух компонентов V_1 и V_2 с концентрациями β_1 и β_2 . Если число компонентов в смеси больше, то сказанное выше равносильно тому, что среди всех компонентов мы выбрали два главных, а остальные учли инклюзивно. Обозначим через $dM(\beta_1, \beta_2)$ массу смеси, приходящуюся на интервал концентраций $(\beta_1, \beta_1 + d\beta_1)$ и $(\beta_2, \beta_2 + d\beta_2)$, и введем эксклюзивную

(по признакам β_1 и β_2) функцию выхода $\gamma(\beta_1, \beta_2)$ следующим образом:

$$\gamma(\beta_1, \beta_2) d\beta_1 d\beta_2 = \frac{dM(\beta_1, \beta_2)}{M}. \quad (9.1)$$

Здесь через M обозначена полная масса смеси. Из (9.1) видно, что эксклюзивную функцию выхода следует интерпретировать как плотность распределения элементов смеси по концентрациям признаков B_1 и B_2 .

Легко понять, что в двухкомпонентной смеси есть две инклюзивные функции выхода - по первому и по второму признаку соответственно:

$$\gamma_1(\beta_1) d\beta_1 = \frac{dM(\beta_1)}{M}, \quad \gamma_2(\beta_2) d\beta_2 = \frac{dM(\beta_2)}{M}. \quad (9.2)$$

Из смысла величин $dM(\beta_1)$ и $dM(\beta_2)$, а также из предыдущих формул этого пункта следует, что

$$\gamma_1(\beta_1) = \int_0^1 \gamma(\beta_1, \beta_2) d\beta_2, \quad \gamma_2(\beta_2) = \int_0^1 \gamma(\beta_1, \beta_2) d\beta_1. \quad (9.3)$$

Обратимся теперь к функциям извлечения. Нетрудно понять, что в двухкомпонентной смеси есть четыре типа функций извлечения:

$$\varepsilon_1(\beta_1) d\beta_1 = \frac{dm_1(\beta_1)}{m_1}, \quad \varepsilon_1(\beta_2) d\beta_2 = \frac{dm_1(\beta_2)}{m_1 d\beta_2}, \quad (9.4a)$$

$$\varepsilon_2(\beta_1) d\beta_1 = \frac{dm_2(\beta_1)}{m_2}, \quad \varepsilon_2(\beta_2) d\beta_2 = \frac{dm_2(\beta_2)}{m_2}. \quad (9.4b)$$

Здесь m_1 и m_2 - полные массы компонентов B_1 и B_2 .

Введем представление о матрице извлечения

$$\|\varepsilon_i(\beta_k)\| = \begin{pmatrix} \varepsilon_1(\beta_1) & \varepsilon_1(\beta_2) \\ \varepsilon_2(\beta_1) & \varepsilon_2(\beta_2) \end{pmatrix}. \quad (9.5)$$

Диагональные элементы матрицы извлечения - это объекты, с которыми мы знакомы по однокомпонентным смесям. Для этих элементов справедливы уравнения связи

$$\varepsilon_1(\beta_1) = \frac{\beta_1}{\beta_1} \gamma_1(\beta_1), \quad \varepsilon_2(\beta_2) = \frac{\beta_2}{\beta_2} \gamma_2(\beta_2). \quad (9.6)$$

Выясним смысл недиагональных элементов, которые мы называем функциями сопутствующего извлечения. Выражение $\varepsilon_1(\beta_2) d\beta_2$ есть доля признака B_1 , приходящаяся на все элементы смеси с фиксированной концентрацией β_2 признака B_2 . Точно так же расшифровывается смысл величины $\varepsilon_2(\beta_1) d\beta_1$.

Легко показать, что

$$\varepsilon_1(\beta_2) = \frac{\bar{\beta}_1(\beta_2)}{\bar{\beta}_1} \gamma_2(\beta_2), \quad \varepsilon_2(\beta_1) = \frac{\bar{\beta}_2(\beta_1)}{\bar{\beta}_2} \gamma_1(\beta_1), \quad (9.7)$$

где введены обозначения

$$\bar{\beta}_1(\beta_2) = \frac{dm_1(\beta_2)}{dM(\beta_2)}, \quad \bar{\beta}_2(\beta_1) = \frac{dm_2(\beta_1)}{dM(\beta_1)}. \quad (9.8)$$

Величина $\bar{\beta}_1(\beta_2)$ - это среднее значение концентрации признака B_1 в "подсмеси", для всех элементов которой концентрация β_2 признака B_2 фиксирована; аналогичный смысл имеет и $\bar{\beta}_2(\beta_1)$.

По смыслу величин $dm_1(\beta_2)$ и $dm_2(\beta_1)$ имеем

$$dm_1(\beta_2) = \int_0^1 \beta_1 dM(\beta_1, \beta_2), \quad dm_2(\beta_1) = \int_0^1 \beta_2 dM(\beta_1, \beta_2).$$

Отсюда с помощью (9.1) и (9.8) можно вывести формулы

$$\bar{\beta}_1(\beta_2) = \frac{\int_0^1 \beta_1 \gamma(\beta_1, \beta_2) d\beta_1}{\int_0^1 \gamma(\beta_1, \beta_2) d\beta_1}, \quad (9.9a)$$

$$\bar{\beta}_2(\beta_1) = \frac{\int_0^1 \beta_2 \gamma(\beta_1, \beta_2) d\beta_2}{\int_0^1 \gamma(\beta_1, \beta_2) d\beta_2}, \quad (9.9b)$$

выражающие величины $\bar{\beta}_1(\beta_2)$ и $\bar{\beta}_2(\beta_1)$ через эксклюзивную функцию выхода $\gamma(\beta_1, \beta_2)$.

Связь средних $\bar{\beta}_1$ и $\bar{\beta}_2$ со средними $\bar{\beta}_1(\beta_2)$ и $\bar{\beta}_2(\beta_1)$ дается соотношениями

$$\bar{\beta}_1 = \int_0^1 \bar{\beta}_1(\beta_2) \gamma_2(\beta_2) d\beta_2, \quad \bar{\beta}_2 = \int_0^1 \bar{\beta}_2(\beta_1) \gamma_1(\beta_1) d\beta_1, \quad (9.10)$$

которые легко доказываются и смысл которых понятен.

10. Критерии относительных корреляций. Применим введенный выше формализм к вопросу об относительных корреляциях признаков в смеси.

Назовем признак B_1 независимым от признака B_2 , если $\bar{\beta}_1(\beta_2)$ не зависит от β_2 и, следовательно, равно $\bar{\beta}_1$:

$$\bar{\beta}_1(\beta_2) = \bar{\beta}_1. \quad (10.1a)$$

Точно так будем считать, что признак B_2 независим от признака B_1 , если

$$\bar{\beta}_2(\beta_1) = \bar{\beta}_2. \quad (10.1b)$$

Наряду с независимостью в иерархии корреляций есть другой крайний предел, когда корреляция максимальна. Мы имеем в виду случай, в котором признак B_1 является однозначной функцией признака B_2 , и наоборот. Пусть $\beta_1 = F_1(\beta_2)$. Тогда

$$\bar{\beta}_1(\beta_2) = \frac{dm_1(\beta_2)}{dM(\beta_2)} = \frac{dm_1(\beta_1)}{dM(\beta_1)} = \beta_1. \quad (10.2a)$$

Аналогично, если $\beta_2 = F_2(\beta_1)$, то

$$\bar{\beta}_2(\beta_1) = \frac{dm_2(\beta_1)}{dM(\beta_1)} = \frac{dm_2(\beta_2)}{dM(\beta_2)} = \beta_2. \quad (10.2b)$$

Формулы (10.1) и (10.2), как отмечалось, соответствуют двум крайностям, обычно же встречается промежуточная ситуация и весь вопрос заключается в том, как оценивать меру скоррелированности признаков в этом случае.

Начнем с того, что придадим условиям (10.1) другой вид. Из (9.7) следует, что условия (10.1) тождественны условиям

$$E_1(\beta_2) = \gamma_2(\beta_2), \quad E_2(\beta_1) = \gamma_1(\beta_1). \quad (10.3)$$

Первое из этих равенств утверждает, что признак B_1 не зависит от признака B_2 , второе - что признак B_2 не зависит от признака B_1 . Таким образом, (10.3) - это условия относительной независимости двух признаков, записанные на языке функции γ и ϵ .

При нарушении условий (10.3) за меры относительных корреляций признаков естественно принять следующие функционалы:

$$\mathcal{L}_{12} = \int_{\Delta_2} [\gamma_2(\beta_2) - \epsilon_1(\beta_2)] d\beta_2, \quad (10.4a)$$

$$\mathcal{L}_{21} = \int_{\Delta_1} [\gamma_1(\beta_1) - \epsilon_2(\beta_1)] d\beta_1. \quad (10.4b)$$

Интегрирования в этих формулах ведутся по областям Δ_2 и Δ_1 , в которых соответствующие подынтегральные выражения положительны. Подчеркнем, что \mathcal{L}_{12} есть мера зависимости признака B_1 от признака B_2 , \mathcal{L}_{21} - мера зависимости признака B_2 от признака B_1 . Конструкция критериев \mathcal{L}_{12} и \mathcal{L}_{21} имеет много общего с конструкцией \mathcal{L} - критерия, введенного в пункте 4. Учитывая это, определим матрицу

$$\| \mathcal{L}_{ij} \| = \begin{pmatrix} \mathcal{L}_{11} & \mathcal{L}_{12} \\ \mathcal{L}_{21} & \mathcal{L}_{22} \end{pmatrix} \quad (10.5)$$

и назовем ее матрицей неоднородности. Диагональные элементы матрицы (10.5) даются формулами

$$\mathcal{L}_{11} = \int_0^{\bar{\beta}_1} \left(1 - \frac{\beta_1}{\bar{\beta}_1}\right) \gamma_1(\beta_1) d\beta_1, \quad (10.6a)$$

$$\mathcal{L}_{22} = \int_0^{\bar{\beta}_2} \left(1 - \frac{\beta_2}{\bar{\beta}_2}\right) \gamma_2(\beta_2) d\beta_2 \quad (10.6b)$$

и имеют смысл критериев неоднородности смеси по признакам B_1 и B_2 .

Выражения (10.4) можно переписать в виде, из которого следует единство - в конструктивном смысле - всех элементов матрицы неоднородности. В самом деле, подставляя (9.7) в (10.4), имеем

$$\mathcal{L}_{12} = \int_{\Delta_2} \left(1 - \frac{\bar{\beta}_1(\beta_2)}{\bar{\beta}_1}\right) \gamma_2(\beta_2) d\beta_2, \quad (10.7a)$$

$$\mathcal{L}_{21} = \int_{\Delta_1} \left(1 - \frac{\bar{\beta}_2(\beta_1)}{\bar{\beta}_2}\right) \gamma_1(\beta_1) d\beta_1. \quad (10.7b)$$

Как видно из этих формул, области Δ_2 и Δ_1 определяются неравенствами:

$$\Delta_2 : \quad 0 \leq \bar{\beta}_1(\beta_2) \leq \bar{\beta}_1, \quad (10.8a)$$

$$\Delta_1 : \quad 0 \leq \bar{\beta}_2(\beta_1) \leq \bar{\beta}_2. \quad (10.8b)$$

Критерии \mathcal{L}_{12} и \mathcal{L}_{21} достигают своих верхних граней, если выполняются условия (10.2a) и (10.2b) соответственно, т.к. именно в этих случаях признаки B_1 и B_2 связаны максимально. Тогда $\bar{\beta}_1(\beta_2) = \beta_1$ и $\bar{\beta}_2(\beta_1) = \beta_2$, а также справедлива цепочка равенств

$$\gamma_2(\beta_2) d\beta_2 = \frac{dM(\beta_2)}{M} = \frac{dM(\beta_1)}{M} = \gamma_1(\beta_1) d\beta_1.$$

Если ко всему сказанному добавить еще, что уравнения областей Δ_2 и Δ_1 теперь определяются неравенствами

$$0 \leq \beta_1 \leq \bar{\beta}_1, \quad 0 \leq \beta_2 \leq \bar{\beta}_2,$$

то становится очевидным, что

$$\sup \mathcal{L}_{12} = \mathcal{L}_{11} = \mathcal{L}_1, \quad \sup \mathcal{L}_{21} = \mathcal{L}_{22} = \mathcal{L}_2,$$

и потому справедливы условия

$$0 \leq \mathcal{L}_{12} \leq \mathcal{L}_1, \quad 0 \leq \mathcal{L}_{21} \leq \mathcal{L}_2. \quad (10.9)$$

Резюмируя, можем сказать, что верхняя грань критерия \mathcal{L}_{ij} (при $i \neq j$) совпадает с критерием неоднородности по признаку B_i .

11. Об абсолютной и относительной независимости. Условия (10.1) независимости признаков B_1 и B_2 можно записать на языке эксклюзивной функции выхода $\gamma(\beta_1, \beta_2)$, если учесть формулы (9.9):

$$\int_0^1 \beta_1 [\gamma(\beta_1, \beta_2) - \gamma_1(\beta_1) \gamma_2(\beta_2)] d\beta_1 = 0, \quad (11.1a)$$

$$\int_0^1 \beta_2 [\gamma(\beta_1, \beta_2) - \gamma_1(\beta_1) \gamma_2(\beta_2)] d\beta_2 = 0. \quad (11.1b)$$

Условия эти выполняются автоматически, если признаки абсолютно независимы, т.е. если

$$\gamma(\beta_1, \beta_2) = \gamma_1(\beta_1) \gamma_2(\beta_2). \quad (11.2)$$

В отличие от (11.1) при абсолютной независимости признаков B_1 и B_2 наряду с (11.1) справедливы аналогичные равенства, в которых, однако, вместо β_1 и β_2 перед квадратной скобкой стоит любая степень от этих концентраций, т.е. $(\beta_1)^n$, $(\beta_2)^n$. Умножая (11.1a) на $f_2(\beta_2)$, а (11.1b) - на $f_1(\beta_1)$ и интегрируя по $d\beta_1$ и $d\beta_2$ соответственно, приходим к равенствам:

$$\overline{\beta_1 f_2(\beta_2)} = \overline{\beta_1} \overline{f_2(\beta_2)}, \quad (11.3a)$$

$$\overline{\beta_2 f_1(\beta_1)} = \overline{\beta_2} \overline{f_1(\beta_1)}. \quad (11.3b)$$

Полученные формулы - это еще один вариант выразить факт взаимной относительной независимости признаков B_1 и B_2 . На таком же языке абсолютная независимость этих признаков имеет вид

$$\overline{f_1(\beta_1) f_2(\beta_2)} = \overline{f_1(\beta_1)} \overline{f_2(\beta_2)}, \quad (11.4)$$

где f_1 и f_2 - произвольные функции. Понятно, что (11.4) - это более сильное условие, чем (11.3). Значит есть смеси, в которых нарушается условие абсолютной независимости (11.2) и соблюдаются условия относительной независимости (11.1).

Приведем два примера таких смесей - с дискретным и с непрерывным спектром концентраций.

Рассмотрим таблицу 1.

Таблица 1

| | | | | | | | |
|------|------|------|------|------|------|------|------|
| 0,1 | 0,2 | 0,1 | 0,2 | 0,3 | 0,1 | 0,4 | 0,1 |
| 0,01 | 0,01 | 0,02 | 0,04 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 0,03 |
| 0,2 | 0,4 | 0,1 | 0,4 | 0,2 | 0,4 | 0,2 | 0,1 |
| 0,01 | 0,03 | 0,01 | 0,01 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,01 |
| 0,2 | 0,1 | 0,3 | 0,2 | 0,1 | 0,2 | 0,2 | 0,1 |
| 0,04 | 0,01 | 0,01 | 0,01 | 0,02 | 0,02 | 0,01 | 0,04 |
| 0,1 | 0,3 | 0,2 | 0,3 | 0,01 | 0,4 | 0,2 | 0,1 |
| 0,03 | 0,01 | 0,01 | 0,04 | 0,01 | 0,02 | 0,01 | 0,02 |
| 0,1 | 0,3 | 0,1 | 0,1 | 0,2 | 0,2 | 0,2 | 0,2 |
| 0,01 | 0,01 | 0,02 | 0,02 | 0,01 | 0,03 | 0,04 | 0,01 |

В каждой клетке таблицы указаны два числа. Верхнее число означает концентрацию признака β_1 , нижнее - концентрацию признака β_2 . Элементами смеси являются клетки. По данным таблицы 1 легко вычислить эксклюзивную функцию выхода $\gamma(\beta_1, \beta_2)$, разделив число клеток с данной парой концентраций (β_1, β_2) на общее число клеток. Полученную таким образом функцию $\gamma(\beta_1, \beta_2)$ мы сочли удобным задать в виде таблицы 2.

Таблица 2

| Эксклюзивная функция выхода $\gamma(\beta_1, \beta_2)$ | | | | |
|---|-------|-------|-------|-------|
| $\beta_1 \backslash \beta_2$ | 0,01 | 0,02 | 0,03 | 0,04 |
| 0,1 | 0,175 | 0,125 | 0,05 | 0,025 |
| 0,2 | 0,25 | 0,025 | 0,025 | 0,075 |
| 0,3 | 0,075 | 0,025 | 0 | 0,025 |
| 0,4 | 0,05 | 0,05 | 0,025 | 0 |

Используя эту функцию, легко вычислить инклюзивные функции $\chi_1(\beta_1)$, $\chi_2(\beta_2)$ и все функции извлечения. Если теперь вычислить матрицу неоднородности, то оказывается, что

$$\| \mathcal{L}_{ij} \| = \begin{pmatrix} 0,1875 & 0 \\ 0 & 0,2445 \end{pmatrix},$$

т.е. признаки относительно независимы; при этом условие (11.2) нарушено для любых пар (β_1, β_2) .

Приведем также пример системы, когда переменные β_1, β_2 изменяются непрерывно и признаки B_1, B_2 независимы относительно друг друга, но в которой условие (11.2) опять нарушено:

$$\begin{aligned} \chi(\beta_1, \beta_2) = & \beta_1^2 \beta_2^2 - \beta_1^2 \beta_2 - \beta_1 \beta_2^2 + 0.5(\beta_1^2 + \beta_2^2)/3 + \\ & + 2\beta_1 \beta_2 + (\beta_1 + \beta_2)/3 + 5/18. \end{aligned}$$

12. Квантовая смесь. Изложенный выше подход легко обобщается на случай квантовых смесей. Мы здесь будем работать лишь с когерентными смесями, т.е. с суперпозицией квантовых состояний:

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n. \quad (12.1)$$

Здесь $\{\Psi_n\}$ - полная система собственных функций эрмитова оператора \hat{f} . Пусть N - полное число опытов, в которых измеряется физическая величина f , N_i - число опытов с исходом f_i . Тогда для функции выхода χ , соответствующей смеси (12.1), мы имеем:

$$\chi(f_i) = \frac{N_i}{N} = |C_i|^2. \quad (12.2)$$

Далее, $f_i N_i$ - количество признака, приходящееся на N_i событий, $\sum f_i N_i$ - общее количество признака в N опытах. Отсюда ясно, что роль функции извлечения \mathcal{E} для смеси (12.1) играет величина

$$\mathcal{E}(f_i) = \frac{f_i N_i}{\sum f_i N_i} = \frac{f_i}{f} \chi(f_i). \quad (12.3)$$

Обратим внимание на то, что мы попутно получили уравнение связи между функциями \mathcal{E} и χ .

После сказанного совершенно ясно, что критерий неоднородности квантовой смеси (12.1) определяется выражением

$$\mathcal{L} = \sum_i \left(1 - \frac{f_i}{\bar{f}}\right) |C_i|^2, \quad (12.4)$$

в котором суммирование ведется в пределах $f_i \in (f_{\min}, \bar{f})$.

Рассмотрим теперь два примера.

(А) Пусть φ_1 и φ_2 - собственные функции, соответствующие собственным значениям f_1 и f_2 , причем $0 < f_1 < f_2$. Составим квантовую смесь

$$\Psi = \cos \psi \varphi_1 + \sin \psi \varphi_2. \quad (12.A.1)$$

Легко убедиться, что

$$\bar{f} = (f_1 - f_2) \cos^2 \psi + f_2,$$

и затем вычислить критерий неоднородности

$$\mathcal{L} = \frac{(\bar{f} - f_1)(f_2 - \bar{f})}{\bar{f}(f_2 - f_1)}. \quad (12.A.2)$$

Сравнивая этот результат с формулой (6.A.2), убеждаемся, что (12.A.1) есть квантовый аналог смеси, восстановленной из двух однородных под-смесей.

(Б) Пусть φ_0 , φ_2 и φ_1 - собственные функции, соответствующие собственным значениям $(0, \ell, 1)$, причем $0 < \ell < 1$.

Составим квантовую смесь

$$\Psi = \alpha \sin \psi \varphi_0 + \cos \psi \varphi_2 + \beta \sin \psi \varphi_1, \quad (12Б.1)$$

в которой α и β - вещественные числа, причем $\alpha^2 + \beta^2 = 1$. Простое вычисление показывает, что справедливы формулы

$$\cos^2 \psi = \frac{\bar{f} - \bar{f}^2}{\ell(1-\ell)}, \quad \beta^2 = \frac{\ell\bar{f} - \bar{f}^2}{\ell - 1 - \bar{f} - \bar{f}^2}$$

и что критерий неоднородности дается выражениями

$$\mathcal{L}(\bar{f} < \ell) = \frac{\ell - \bar{f}(1+\ell) + \bar{f}^2}{\ell} \quad (12Б.2)$$

$$\mathcal{L}(l \leq f < 1) = \frac{(1 - \bar{f})(\bar{f}^2 - \bar{f}l)}{\bar{f}(1 - l)}, \quad (12Б.3)$$

которые в точности повторяют результаты (6Б.2) и (6Б.3).

С точки зрения треугольника неоднородности смеси (12 А.1) и (12Б.1) не отличаются от своих классических партнеров. Различие между этими смесями проявляется лишь на уровне "микросостояний". Именно, добавляя к коэффициентам разложений (12 А.1) и (12Б.1) произвольные фазовые множители, мы получаем новое "микросостояние", которому, однако, соответствует прежнее место на треугольнике неоднородности. Это различие между квантовой и классической смесью имеет принципиальный характер.

13. Квантовая смесь (два компонента). Перейдем теперь к двухкомпонентной квантовой смеси. Такой смесью является суперпозиция состояний Ψ_{fg} , в которых одновременно измеримы физические величины f и g :

$$\Psi = \sum_{fg} W_{fg} \Psi_{fg}. \quad (13.1)$$

Введем следующие обозначения: N - полное число опытов, в которых измеряются величины f и g ; N_{fg} - число опытов с конкретным выходом (f, g); $N_f = \sum_g N_{fg}$ и $N_g = \sum_f N_{fg}$ - число опытов с выходами f и g соответственно. После сказанного понятно, что для эксклюзивной и двух инклюзивных функций выхода имеем

$$\delta(f, g) = \frac{N_{fg}}{N} = |W_{fg}|^2, \quad (13.2)$$

$$\delta(f) = \frac{N_f}{N} = \sum_g |W_{fg}|^2, \quad (13.2a)$$

$$\delta(g) = \frac{N_g}{N} = \sum_f |W_{fg}|^2. \quad (13.2b)$$

Точно так

$$\bar{f} = \sum_f f N_f / N = \sum_f f \delta(f), \quad (13.3a)$$

$$\bar{g} = \sum_g g N_g / N = \sum_g g \chi(g), \quad (13.36)$$

$$\bar{f}(g) = (\sum_f f N_{fg}) / N_g = (\sum_f f \chi(f, g)) / \chi(g), \quad (13.40)$$

$$\bar{g}(f) = (\sum_g g N_{fg}) / N_f = (\sum_g g \chi(f, g)) / \chi(f). \quad (13.46)$$

Выпишем также формулы, определяющие функции извлечения $\mathcal{E}_f(f)$, $\mathcal{E}_g(g)$ и функции сопутствующего извлечения $\mathcal{E}_f(g)$ и $\mathcal{E}_g(f)$:

$$\mathcal{E}_f(f) = f N_f / \sum_f f N_f = \frac{f}{\bar{f}} \chi(f), \quad (13.50)$$

$$\mathcal{E}_g(g) = g N_g / \sum_g g N_g = \frac{g}{\bar{g}} \chi(g), \quad (13.56)$$

$$\mathcal{E}_f(g) = (\sum_f f N_{fg}) / \sum_f f N_f = \frac{\bar{f}(g)}{\bar{f}} \chi(g), \quad (13.60)$$

$$\mathcal{E}_g(f) = (\sum_g g N_{fg}) / \sum_g g N_g = \frac{\bar{g}(f)}{\bar{g}} \chi(f). \quad (13.66)$$

Остается привести выражения для элементов матрицы неоднородности:

$$\mathcal{L}_{ff} = \sum_{f=f_{\min}}^{\bar{f}} \left(1 - \frac{f}{\bar{f}}\right) \chi(f), \quad (13.70)$$

$$\mathcal{L}_{gg} = \sum_{g=g_{\min}}^{\bar{g}} \left(1 - \frac{g}{\bar{g}}\right) \chi(g), \quad (13.76)$$

$$\mathcal{L}_{fg} = \sum_{\Delta g} \left(1 - \frac{\bar{f}(g)}{\bar{f}}\right) \chi(g), \quad (13.80)$$

$$\mathcal{L}_{gf} = \sum_{\Delta_f} \left(1 - \frac{\bar{g}(f)}{g}\right) \chi(f). \quad (13.86)$$

В последних двух формулах суммирования ведутся по областям Δ_f и Δ_g , в которых все слагаемые неотрицательны. Мы видим, что в математическом отношении классические и квантовые смеси идентичны.

14. Дополнения и замечания. Наша работа не будет полной, если мы оставим в стороне ряд вопросов.

(А) В основе изложенного выше лежало предположение о том, что спектр признака — это набор неотрицательных чисел. В смесях со знакопеременным спектром признака возникает два затруднения:

а) может оказаться так, что знак $\beta/\bar{\beta}$ отрицателен и тогда функция \mathcal{E} теряет свой физический смысл (по крайней мере для квантовой смеси);

б) при знакопеременном спектре не исключен случай, когда $\bar{\beta} = 0$ и для всех β (кроме, возможно, $\beta = 0$) $\mathcal{E} = \infty$!

В связи с этим разумно в такой смеси спектр значений признака разбить на два спектра с определенным знаком и считать, что в смеси есть два признака. Иными словами, с точки зрения формализма неоднородности смеси с одним знакопеременным признаком — это двухкомпонентная смесь и ей должна соответствовать эксклюзивная функция выхода $\chi(\beta, \beta^-)$, т.е. две инклюзивные функции выхода и четыре инклюзивные функции извлечения.

(Б) В конце пункта 10 мы доказали, что $\sup \mathcal{L}_{12} = \mathcal{L}_1$ и $\sup \mathcal{L}_{21} = \mathcal{L}_2$. Здесь мы хотим пояснить истинный смысл этих формул. Начнем с того, что $M = m_1 + m_2$, где m_1 — масса признака, m_2 — масса основы (в основу входит всё остальное), M — масса смеси. Это простое равенство говорит о том, что $\beta_1 + \beta_2 = 1$, где β_1 — концентрация признака, а β_2 — "коллективная" концентрация всего остального. Мы видим, что β_1 и β_2 связаны функционально. Согласно тексту (см. пункт 10) это означает, что $\mathcal{L}_{12} = \mathcal{L}_{21} = \mathcal{L}_1 = \mathcal{L}_2$, т.е. что неоднородность является частным случаем относительных корреляций. Точнее, критерий неоднородности по данному признаку равен критерию скоррелированности этого признака со всей остальной частью смеси. Из сказанного следует, что матрицу неоднородности можно трактовать как матрицу относительных корреляций.

(В) В пункте 11 было введено представление об относительной независимости признаков и подчеркнуто, что она (относительная незави-

симость) слабее соответствующего условия абсолютной независимости. В связи со сказанным обсудим следующий вопрос. Пусть признак B_1 не зависит ни от признака B_2 , ни от признака B_3 . Какая из этих относительных независимостей ближе к абсолютной? Имея ответ на этот вопрос, мы могли бы установить иерархию относительных независимостей.

Введем следующее определение: признак B_i не зависит от признака B_j в N -м поколении, если

$$\overline{(\beta_i)^N f(\beta_j)} = \overline{(\beta_i)^N} \overline{f(\beta_j)} \quad (14B.1)$$

для всякой функции f . При $N = 1$ это определение переходит в определение, данное в пункте 11.

Представление о независимости в N -м поколении позволяет выразить абсолютную независимость на языке относительных независимостей. В самом деле, разлагая в выражении $\overline{f_i(\beta_i) f_j(\beta_j)}$ функцию $f_i(\beta_i)$ в ряд и считая, что выполняется условие (14B.1) во всех поколениях, легко показать, что отсюда вытекает условие (11.4). Таким образом, можно сказать, что абсолютная независимость признаков представлена в виде, вообще говоря, бесконечной последовательности этапов, в каждом из которых реализуется относительная независимость в соответствующем поколении. Возвращаясь к поставленному ранее вопросу, заметим, что мы уже имеем на него определенный ответ, а именно: если признак B_1 не зависит от признаков B_2 и B_3 в поколениях N_{12} и N_{13} соответственно, то близость этих независимостей к абсолютной независимости определяется тем, какое из чисел N_{12} и N_{13} больше.

Условие (14B.1) можно записать и в более удобном виде

$$\overline{(\beta_i)^n (\beta_j)^m} = \overline{(\beta_i)^n} \overline{(\beta_j)^m}, \quad (14B.2)$$

где $m = 0, 1, \dots$. В эквивалентности условий (14B.1) и (14B.2) можно убедиться, пользуясь разложением в ряд. Соответствующее доказательство элементарно, и мы его опускаем.

(Г) Рассмотрим пример смеси, информация о которой приведена в таблице 3.

Из приведенных данных следует, что $\bar{\beta} = 0.125$, $\bar{\alpha} = 0.35$, $E = 0.4$. Далее, события с $\beta = 1$, как видим, являются исключительно редкими (точка зрения функции выхода), но весьма существенными с позиций функции извлечения, т.к. несут на себе заметную часть признака. Такие события геологи называют "пиковыми пробами", и их следует обяза-

Таблица 3

| | | | |
|------------|--------|-------|------|
| β | 0,0625 | 0,125 | 1 |
| γ | 0,7 | 0,25 | 0,05 |
| ϵ | 0,35 | 0,25 | 0,4 |

тельно учитывать при оценке запасов месторождений полезных ископаемых. Классическим примером "пиковых проб" в физике элементарных частиц являются редкие события с большим углом рассеяния в опыте Резерфорда по рассеянию α - частиц. Для этих событий $\theta/\bar{\theta} \gg 1$ при больших θ , и поэтому с точки зрения функции извлечения ϵ они должны нести на себе важную информацию, хотя функция выхода "не считает" их достойными внимания. Есть еще один пример из той же области, где неявно используется функция ϵ , а именно процесс глубоконеупругого рассеяния электрона на нуклоне. Нуклон - это смесь партонов, причем концентрации β соответствует скейлинговая переменная x . Как известно, безразмерные структурные функции нуклона $F_1(x)$ и $F_2(x)$ выражаются через функцию $f(x)$ - плотность распределения партонов по переменной x :

$$2F_1(x) = f(x), \quad F_2(x) = x f(x).$$

Из последнего равенства следует, что структурная функция $F_2(x)$ с точностью до постоянной совпадает с функцией извлечения $\epsilon(x) = x f(x) / \bar{x}$.

Заключение. Подводя итоги, остановимся на наиболее важных моментах работы.

1. Однокомпонентная смесь - это объект, характеризуемый двумя плотностями распределения: функцией выхода $\gamma(\beta)$ и функцией извлечения $\epsilon(\beta)$.
2. Однокомпонентные смеси можно выстроить в своеобразную иерархическую последовательность по степеням неоднородности; эта последовательность имеет верхний предел - состояние крайней неоднородности.
3. Состояние неоднородности есть результат некоего компромисса между двумя альтернативными физическими процессами - смешивания и разделения.
4. Баланс между указанными выше процессами определяет величину критерия неоднородности и, следовательно, место смеси в иерархической последовательности состояний.
5. Состояния неоднородности могут быть интерпретированы как точки на диаграмме, названной треугольником неоднородности.

6. Двухкомпонентная смесь на инклюзивном уровне описания характеризуется двумя функциями выхода и четырьмя функциями извлечения.

7. В смеси признаки, как правило, зависят друг от друга несимметричным образом, и поэтому эта зависимость должна описываться не одним, а двумя числами. Таковыми являются недиагональные элементы введенной в пункте 10 матрицы неоднородности. Диагональные ее элементы суть критерии неоднородности по соответствующим признакам.

8. При абсолютной независимости признаков в смеси эксклюзивная функция выхода факторизуется. В работе приводятся примеры, когда признаки независимы в относительном смысле и зависимы в абсолютном.

9. Пределы возможных изменений критериев относительных корреляций даются неравенствами $0 \leq L_{12} \leq L_1$, $0 \leq L_{21} \leq L_2$, где L_1 и L_2 - критерии неоднородности смеси по признакам B_1 и B_2 .

Мы благодарны В.И.Луценко и А.Н.Сисакяну за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.И.Луценко, И.В.Луценко, В.М.Тер-Антонян. Доклады АН Арм.ССР, т. 74, № 5, 213 (1982); т. 76, № 3, 133 (1983).
2. Berger E.L. Nucl. Phys., 1975, B85, p. 61.
3. Б.Дюрон, П.Оделл. Кластерный анализ, М., 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел
13 февраля 1990 года.