Řešení seminárních úloh 7

1. Vlnová funkce základního stavu elektronu v atomu vodíku (kvantová čísla $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$) má ve sférických souřadnicích tvar $\psi_{100}(r, \theta\varphi) = R_{10}(r)Y_{00}(\theta, \varphi)$, kde:

$$
\begin{aligned}
R_{10}(r) &= \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right), \\
Y_{00}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}},
\end{aligned}
$$

a_0 je Bohrův poloměr. Hustota pravděpodobnosti výskytu elektronu v bodě o souřadnicích (r, θ, φ) je $\psi_{100}\psi_{100}^*$ (* značí komplexní sdružení). Vypočítejte marginální hustotu pravděpodobnosti $f_r(r)$ pro vzdálenost elektronu od jádra.

Řešení:
Marginální hustota pravděpodobnosti pro vzdálenost elektronu od jádra je dána jako určitý integrál celkové hustoty pravděpodobnosti přes zbývající proměnné θ a φ. V případě integrace přes sférické souřadnice θ a φ nesmíme zapomenout na násobení elementů dθ a dφ Laméovými koeficienty $h_\theta = r$ a $h_\varphi = r \sin\theta$.

$$
\begin{aligned}
f_r(r) &= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \psi_{100}(r, \theta\varphi)\, \psi_{100}^*(r, \theta\varphi)\, r^2 \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi \\
f_r(r) &= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \left[\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)\right]^2 r^2 \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi \\
f_r(r) &= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \frac{1}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) r^2 \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi \\
f_r(r) &= \frac{r^2}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta \\
f_r(r) &= \frac{r^2}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) [\varphi]_0^{2\pi} [-\cos\theta]_0^{\pi} \\
f_r(r) &= \frac{r^2}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \cdot 2\pi \cdot 2 \\
f_r(r) &= \frac{4r^2}{a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right)
\end{aligned}
$$

2. Při experimentu bylo proveden 10 opakovaných měření náhodných proměnných a, b, c, které mají normální rozdělení. Byly získány následující hodnoty:

a	b	c
30	10.1	9.9
31	9.5	9.5
39	12.1	9.2
40	12.5	9.0
41	13.5	9.1
42	12.4	8.9
39	11.4	9.3
45	12.6	8.8
36	8.8	10.2
46	13.0	8.7

Na základě naměřených dat vyšetřete korelaci náhodných proměnných a, b, c.
Proveďte odhad očekávané hodnoty a chyby veličiny $y = \frac{3ab}{c^2}$.

Řešení:
Spočítejme si pomocné veličiny $\langle a \rangle$, $\langle b \rangle$, $\langle c \rangle$, $\langle ab \rangle$, $\langle ac \rangle$, $\langle bc \rangle$, $\hat{\sigma}_a$, $\hat{\sigma}_b$ a $\hat{\sigma}_c$ pro počet naměřených hodnot $N = 10$:

$$\langle a \rangle = \sum_{i=1}^{N} a_i = 38.9$$

$$\langle b \rangle = \sum_{i=1}^{N} b_i = 11.59$$

$$\langle c \rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i = 9.26$$

$$\langle ab \rangle = \sum_{i=1}^{N} a_i b_i = 457.01$$

$$\langle ac \rangle = \sum_{i=1}^{N} a_i c_i = 358.33$$

$$\langle bc \rangle = \sum_{i=1}^{N} b_i c_i = 106.703$$

$$\hat{\sigma}_a = \sqrt{\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(a_i - \langle a \rangle)^2} \doteq 5.301$$

$$\hat{\sigma}_b = \sqrt{\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(b_i - \langle b \rangle)^2} \doteq 1.592$$

$$\hat{\sigma}_c = \sqrt{\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(c_i - \langle c \rangle)^2} \doteq 0.4835$$

Kovarianci náhodných proměnných a, b, resp. a, c a b, c, odhadneme jako:

$$\begin{aligned} \hat{\text{cov}}(a,b) &= \langle ab \rangle - \langle a \rangle \langle b \rangle \\ \hat{\text{cov}}(a,b) &= 6.159 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{\text{cov}}(a,c) &= \langle ac \rangle - \langle a \rangle \langle c \rangle \\ \hat{\text{cov}}(a,c) &= -1.884 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{\text{cov}}(b,c) &= \langle bc \rangle - \langle b \rangle \langle c \rangle \\ \hat{\text{cov}}(b,c) &= -0.6204 \end{aligned}$$

Korelace je rovna podílu kovariance a součinu příslušných standardních odchylek:

$$\hat{\rho}(a,b) = \frac{\hat{\text{cov}}(a,b)}{\hat{\sigma}_a\hat{\sigma}_b} = \frac{\langle ab \rangle - \langle a \rangle \langle b \rangle}{\hat{\sigma}_a\hat{\sigma}_b}$$

$$\hat{\rho}(a,b) = 0.7298$$

$$\hat{\rho}(a,c) = \frac{\hat{\text{cov}}(a,c)}{\hat{\sigma}_a\hat{\sigma}_c} = \frac{\langle ac \rangle - \langle a \rangle \langle c \rangle}{\hat{\sigma}_a\hat{\sigma}_c}$$

$$\hat{\rho}(a,c) = -0.7351$$

$$\hat{\rho}(b,c) = \frac{\hat{\text{cov}}(b,c)}{\hat{\sigma}_b\hat{\sigma}_c} = \frac{\langle bc \rangle - \langle b \rangle \langle c \rangle}{\hat{\sigma}_b\hat{\sigma}_c}$$

$$\hat{\rho}(b,c) = -0.8060$$

Nakonec vypočítáme odhad chyby (odhadu) korelace jako:

$$\sigma_{\hat{\rho}(a,b)} = \frac{1 - \hat{\rho}^2(a,b)}{\sqrt{N-1}}$$

$$\sigma_{\hat{\rho}(a,b)} \doteq 0.156$$

$$\sigma_{\hat{\rho}(a,c)} = \frac{1 - \hat{\rho}^2(a,c)}{\sqrt{N-1}}$$

$$\sigma_{\hat{\rho}(a,c)} \doteq 0.153$$

$$\sigma_{\hat{\rho}(b,c)} = \frac{1 - \hat{\rho}^2(b,c)}{\sqrt{N-1}}$$

$$\sigma_{\hat{\rho}(b,c)} \doteq 0.117$$

Výsledek tedy zapíšeme jako:

$$\hat{\rho}(a,b) = 0.73 \pm 0.16$$

$$\hat{\rho}(a,c) = -0.74 \pm 0.15$$

$$\hat{\rho}(b,c) = -0.81 \pm 0.12$$

případně se zaokrouhlování chyb na jednu platnou číslici jako:

$$\hat{\rho}(a,b) = 0.7 \pm 0.2$$

$$\hat{\rho}(a,c) = -0.7 \pm 0.2$$

$$\hat{\rho}(b,c) = -0.8 \pm 0.1$$

Očekávanou hodnotu veličiny y odhadneme pomocí průměrných hodnot $\langle a \rangle$, $\langle b \rangle$, $\langle c \rangle$.

$$\langle y \rangle = \frac{3 \langle a \rangle \langle b \rangle}{\langle c \rangle^2}$$
$$\langle y \rangle = 15.77$$

Chybu veličiny y odhadneme metodou přenosu chyb.

$$\sigma_y^2 \approx \left(\frac{\partial y}{\partial a}\right)^2 \hat{\sigma}_a^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial b}\right)^2 \hat{\sigma}_b^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial c}\right)^2 \hat{\sigma}_c^2$$
$$+ 2\frac{\partial y}{\partial a}\frac{\partial y}{\partial b}\hat{\mathrm{cov}}(a,b) + 2\frac{\partial y}{\partial a}\frac{\partial y}{\partial c}\hat{\mathrm{cov}}(a,c) + 2\frac{\partial y}{\partial b}\frac{\partial y}{\partial c}\hat{\mathrm{cov}}(b,c)$$

$$\sigma_y^2 \approx \left(\frac{3\langle b \rangle}{\langle c \rangle^2}\right)^2 \hat{\sigma}_a^2 + \left(\frac{3\langle a \rangle}{\langle c \rangle^2}\right)^2 \hat{\sigma}_b^2 + \left(-\frac{6\langle a \rangle \langle b \rangle}{\langle c \rangle^3}\right)^2 \hat{\sigma}_c^2$$
$$+ 2\frac{3\langle b \rangle}{\langle c \rangle^2}\frac{3\langle a \rangle}{\langle c \rangle^2}\hat{\mathrm{cov}}(a,b) - 2\frac{3\langle b \rangle}{\langle c \rangle^2}\frac{6\langle a \rangle \langle b \rangle}{\langle c \rangle^3}\hat{\mathrm{cov}}(a,c) - 2\frac{3\langle a \rangle}{\langle c \rangle^2}\frac{6\langle a \rangle \langle b \rangle}{\langle c \rangle^3}\hat{\mathrm{cov}}(b,c)$$

$$\sigma_y^2 \approx \frac{9\langle b \rangle^2}{\langle c \rangle^4}\hat{\sigma}_a^2 + \frac{9\langle a \rangle^2}{\langle c \rangle^4}\hat{\sigma}_b^2 + \frac{36\langle a \rangle^2 \langle b \rangle^2}{\langle c \rangle^6}\hat{\sigma}_c^2$$
$$+ \frac{18\langle a \rangle \langle b \rangle}{\langle c \rangle^4}\hat{\mathrm{cov}}(a,b) - \frac{36\langle a \rangle \langle b \rangle^2}{\langle c \rangle^5}\hat{\mathrm{cov}}(a,c) - \frac{36\langle a \rangle^2 \langle b \rangle}{\langle c \rangle^5}\hat{\mathrm{cov}}(b,c)$$

$$\sigma_y^2 \doteq 5.46$$

Výsledek tedy zapíšeme jako:

$$y = 15.8 \pm 5.5,$$

případně se zaokrouhlením chyby na jednu platnou číslici jako:

$$y = 16 \pm 5$$