Taller 4 - Métodos computacionales

20. La fórmula general del coeficiente binomial es

$$\binom{n}{r} = C(n,r) = \frac{n!}{r!\,(n-r)!}$$

Dado que en las combinaciones con repetición se permite seleccionar un elemento varias veces, sumamos $r-1$ a n

$$C(n+r-1,r) = \frac{(n+r-1)!}{r!\,(n+r-1-r)!} = \frac{(n+r-1)!}{r!\,(n-1)!} = \binom{n+r-1}{r}$$

22. Podemos imaginar que tenemos 12 espacios, 10 espacios para albergar cada uno una unidad y 2 espacios para agregar dos barras para separar los 3 grupos de unidades (que cada uno equivale a un número), al variar la posición de las barras se variará el total de cada grupo de unidades. Por tanto, n=12 y r=2

$$C(12,2) = \frac{(12)!}{2!\,(12-2)!} = 66$$

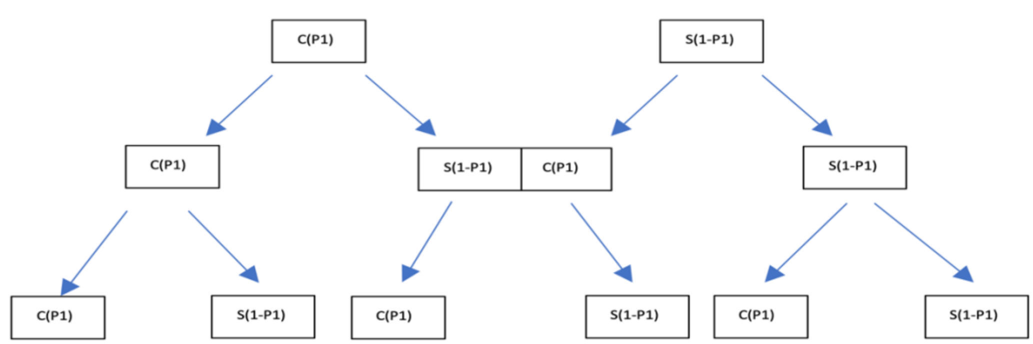
Generales de probabilidad

4.

$$P(n) = \frac{365}{365}\cdot\frac{365-1}{365}\cdot\frac{365-2}{365}\cdot\ldots\cdot\frac{365-n+1}{365}$$

9. Hay seis formas posibles de obtener dos caras y dos sellos en cuatro lanzamientos de monedas: C - C - S - S, C - S - C - S, C - S - S - C, S - C - C - S, S - C - S - C, S - S - C - C.

El árbol que muestra las probabilidades es:



La probabilidad buscada será la suma de las probabilidades de los 6 escenarios:

$$P(2\ caras\ y\ 2\ sellos) = P(C-C-S-S) + P(C-S-C-S) + P(C-S-S-C) + P(S-C-C-S) + P(S-C-S-C) + P(S-S-C-C)$$
$$= p1 * p1 * (1-p1) * (1-p1) + p1 * (1-p1) * p1 * (1-p1) + p1 * (1-p1) * (1-p1) * p1 + (1-p1) * p1 * p1 * (1-p1) + (1-p1) * p1 * (1-p1) * p1 + (1-p1) * (1-p1) * p1 * p1$$

Simplificando

$$P(2\ caras\ y\ 2\ sellos) = 6 * p1^2 * (1-p1)^2$$

12.

a) Vamos a usar el coeficiente binomial para representar el número de formas en que se pueden seleccionar n0 objetos de un conjunto de N objetos

$$\binom{n}{r} = C(n,r) = \frac{n!}{r!\,(n-r)!}$$

$$\binom{N}{n_0} = C(N,n_0) = \frac{N!}{n_0!\,(N-n_0)!} = \frac{N!}{n_0!\,(n_1)!}$$

b)

$$S(N,n_0) = k_B ln(\Omega) = k_B ln(\Omega) = k_B ln(\frac{N!}{n_0!\,(n_1)!})$$

Aplicando la fórmula de Stirling en el numerador

$$S(N,n_0) = k_B[Nln(N) - N - ln(n_0!\,n_1!)] = k_B[Nln(N) - N - ln(n_0!) - ln(n_1!)]$$

Aplicando nuevamente la fórmula de Stirling

$$S(N,n_0) = k_B[Nln(N) - N - [n_0 ln(n_0) - n_0] - [n_1 ln(n_1) - n_1]]$$
$$= k_B[Nln(N) - n_0 ln(n_0) - n_1 ln(n_1) - (N - n_0 - n_1)] =$$

Usando las restricciones, simplificamos

$$S(N,n_0) = k_B[Nln(N) - n_0 ln(n_0) - n_1 ln(n_1) - n_1] = k_B[Nln(N) - \sum_{i=0}^{1} n_i ln(n_i)]$$

c)

$$S(N,n_0) = k_B[Nln(N) - n_0 ln(n_0) - n_1 ln(n_1) - n_1]$$

Dado que $x = \frac{n_1}{N}$, reescribimos las siguientes expresiones

$$n_1 = Nx$$
$$n_0 = N(1-x)$$

y sustituimos en la fórmula de entropía

$$\begin{aligned} S(N,n_0) &= k_B[Nln(N) - N(1-x)ln(N(1-x)) - Nxln(Nx) - Nx] \\ &= k_B[Nln(N) - Nln(N(1-x)) + Nx(ln(N(1-x)) - Nxln(x) - Nx] \\ &= k_B[-Nln(1-x) + Nxln(1-x) - Nxln(x) - Nx] \\ &= -k_B[N(xln(x) + (1-x)ln(1-x)] \end{aligned}$$

f)

Límite de temperatura baja (T → 0):

$$\lim_{T\to 0} x = 0$$

Límite de temperatura alta (T → ∞):

$$x = \frac{E - N\epsilon_0}{N(\epsilon_1 - \epsilon_0)}$$

$$\lim_{T\to\infty} x = \frac{n_1}{N}$$

Ahora, procedemos a la demostración de la entropía a altas temperaturas

$$S(N,n_0)] = -k_B[N(xln(x) + (1-x)\ln(1-x)]$$

Reemplazamos $x = \frac{n_1}{N}$, en la fórmula de entropía

$$S(N,n_0)] = -k_B[N(\frac{n_1}{N} ln(\frac{n_1}{N}) + (1-\frac{n_1}{N})\ln(1-\frac{n_1}{N})]$$

Como $x = \frac{n_1}{N}$ en el nivel más alto de energía, podemos reemplazar de nuevo

$$S(N,n_0)] = -k_B[N(xln(x) + (1-x)\ln(1-x)]$$

Cuando x=1, tenemos

$$S(N,n_0)] = 0$$

g.

$$\Delta S = nRln(V2/V1) = nRln(2V/V) = nRln(2) = (N/Avogadro)Rln(2)$$

Dado que $R = k_B * Avogadro$, podemos reescribir

$$\Delta S = Nk_B ln(2)$$

Esto muestra que el cambio de entropía en la expansión isotérmica de un gas de V1 a V2 es igual al límite de entropía en altas temperaturas.

Distribuciones discretas de probabilidad

3. La probabilidad de seleccionar (2 - X) microchips no defectuosos es:

$$P(No\ defectuosos) \ = \ (7 - X)/15$$

El número de formas posibles de seleccionar X microchips defectuosos de los 3 disponibles es:

$$\binom{3}{X}$$

El número de formas posibles de seleccionar (2 - X) microchips no defectuosos de los 7 disponibles es:

$$\binom{7}{2 - X}$$

El número total de formas posibles de seleccionar 2 microchips de los 10 disponibles es:

$$\binom{10}{2}$$

$$P(X) = P(X \ = \ 0) \ * \ P(No\ defectuosos) \ * \ \binom{3}{0} * \binom{7}{2 - 0} / \binom{10}{2} + \ P(X \ = \ 1) \ * \ P(No\ defectuosos) \ * \ \binom{3}{1} \ * \ \binom{7}{2 - 1} \ / \ \binom{10}{2} + \ P(X \ = \ 2) \ * \ P(No\ defectuosos) \ * \ \binom{3}{2} * \binom{7}{2 - 2} / \binom{10}{2}$$

Reemplazando y ordenando

$$P(X) = (7/15) * \ (7 - X)/15 * \binom{3}{0} * \binom{7}{2} / \binom{10}{2} + \ (7/15) \ * \ (7 - X)/15 * \binom{3}{1} * \binom{7}{1} \ / \ \binom{10}{2} + \ (1/15) \ * (7 - X)/15 \ * \ \binom{3}{2} * \binom{7}{0} / \binom{10}{2}$$

Simplificando aún más

$$P(X) = \binom{7}{2-X}\binom{3}{X}/\binom{10}{2}$$

b.

$$E[X] = 0 * P(X = 0) + 1 * P(X = 1) + 2 * P(X = 2)$$
$$= 0 * (7/15) + 1 * (7/15) + 2 * (1/15) = 0 + 7/15 + 2/15$$
$$= 3/5$$

4.

Número total de partículas = 3+2+3 = 8

El número total de formas de seleccionar una muestra de 4 partículas de un conjunto de 8 partículas es $\binom{8}{4}$.

Hay $\binom{3}{X}$ formas de seleccionar x electrones de los 3 disponibles.

Como quedan 4-x partículas por seleccionar, hay $\binom{4-X}{Y}$ formas de seleccionar y protones de los restantes.

Como quedan 4-x-y partículas por seleccionar, hay $\binom{3}{4-X-Y}$ formas de seleccionar esos neutrones.

Entonces la probabilidad conjunta es

$$f(x,y) = \binom{3}{X}\binom{4-X}{Y}\binom{3}{4-X-Y}/\binom{8}{4} = \binom{3}{X}\binom{2}{Y}\binom{3}{4-X-Y}/\binom{8}{4}$$

b.

$$g(x) = \sum_{y=0}^{2}\binom{3}{X}\binom{2}{Y}\binom{3}{4-X-Y}/\binom{8}{4}$$

$$h(y) = \sum_{x=0}^{3}\binom{3}{X}\binom{2}{Y}\binom{3}{4-X-Y}/\binom{8}{4}$$

c.

$$E(x) = \sum_{x=0}^{3} x \binom{3}{X}\binom{2}{Y}\binom{3}{4-X-Y} / \binom{8}{4}$$
$$= 0 * \binom{3}{0}\binom{2}{0}\binom{3}{4-0-0} / \binom{8}{4} + 1 * \binom{3}{1}\binom{2}{0}\binom{3}{4-1-0} / \binom{8}{4} + 2 * \binom{3}{2}\binom{2}{0}\binom{3}{4-2-0} / \binom{8}{4} + 3 * \binom{3}{3}\binom{2}{Y}\binom{3}{4-3-0} / \binom{8}{4} = 105/70$$

d.

$$E(y) = \sum_{y=0}^{2} Y \binom{3}{0}\binom{2}{Y}\binom{3}{4-0-Y} / \binom{8}{4} + \sum_{y=0}^{2} Y \binom{3}{1}\binom{2}{Y}\binom{3}{4-1-Y} / \binom{8}{4} + \sum_{y=0}^{2} Y \binom{3}{2}\binom{2}{Y}\binom{3}{4-2-Y} / \binom{8}{4} + \sum_{y=0}^{2} Y \binom{3}{3}\binom{2}{Y}\binom{3}{4-3-Y} / \binom{8}{4} = 1$$

e.

$$\sigma_{xy} = E(xy) - E(x)E(y)$$

Como ya calculamos $E(x)$ y $E(y)$, calculamos $E(xy)$

$$E(xy) = \sum_{y=0}^{2}\sum_{x=0}^{3} xy \binom{3}{X}\binom{2}{Y}\binom{3}{4-X-Y} / \binom{8}{4} = 90/70$$

$$\sigma_{xy} = E(xy) - E(x)E(y) = 90/70 - 1 * 105/70 = -15/70 = -3/14$$

f.

$$\sigma_{xy} = E((x-\hat{\mu}_x)(y-\hat{\mu}_y)) = E((x-105/70)(y-70/70))$$
$$= \sum_{y=0}^{2}\sum_{x=0}^{3} (x-105/70)(y-70/70) * \binom{3}{X}\binom{2}{Y}\binom{3}{4-X-Y} / \binom{8}{4}$$
$$= -3/14$$

g. No, dado que $f(x, y)$ no se puede factorizar entre $g(x) * h(y)$