

Problemas del Tema 6

Ejercicio 1

Escriba una función en Maxima que aplique cambios de variable sobre funciones de densidad de probabilidad en una variable.

input:

- Función de densidad de probabilidad en términos de x .
- Intervalo de valores posibles de x .
- Cambio de variable $y = y(x)$.

output:

- Función de densidad de probabilidad en términos de y .
- Intervalo de valores posibles de y .

Para hacer este ejercicio deberá despejar x en función de y resolviendo $y = y(x)$. Programe esta parte suponiendo que es posible resolver esta ecuación de forma analítica.

Para determinar el intervalo de valores posibles de y suponga que la función $y = y(x)$ es o bien estrictamente creciente o bien estrictamente decreciente.

Dado que el enunciado del problema no precisa con todo detalle la estructura del input, vamos a suponer que el input de la función que se pide programar es el siguiente:

input:

- **f**: Función de densidad de probabilidad en términos de x .
- **intervalo**: Intervalo de valores posibles de x , definido como una lista $[a, b]$ con $a < b$.
- **cambio**: Cambio de variable $y = y(x)$, suponemos que este input se proporciona en forma de una lista $[y, y(x)]$, donde el primer elemento es la nueva variable y , y el segundo elemento la función $y(x)$ que define esta nueva variable como función de x .

El primer paso que debemos dar es despejar x de la ecuación $y = y(x)$. El enunciado del problema dice que podemos suponer que x puede despejarse de forma analítica, por tanto podemos emplear para ello la función `solvesust` definida en las notas del tema 6 (página 6-6). Con la notación que acabamos de definir para el input, la solución de $y = y(x)$ está dada por `solvesust(cambio[2] - cambio[1], x)[1]` (`solvesust` proporciona una lista de soluciones, el `[1]` al final indica que nos quedamos con la primera).

Antes de programar la función es necesario realizar otra aclaración. El enunciado del problema indica que la función de densidad de probabilidad en términos de la variable nueva ($g(y)$) está dada

por

$$g(y) = f[x(y)] \frac{dx(y)}{dy}$$

Esto es cierto si $dx(y)/dy > 0$, es decir, si la función $y(x)$ es estrictamente creciente. Si la función $y(x)$ es decreciente, entonces al calcular el intervalo de definición de y sustituyendo $y = y(x)$ en el intervalo $[a, b]$ de la variable x encontramos el intervalo $[y(a), y(b)]$ en el que $y(a) > y(b)$ (ya que estamos suponiendo que $y(x)$ es decreciente y que $a < b$). Por ejemplo, supongamos la función de densidad de probabilidad $f(x) = 1$ con $x \in [0, 1]$, sustituyendo el cambio de variable $y = -x$ encontraríamos $g(y) = -1$, y como nuevo intervalo encontraríamos $y \in [-1, 0]$. Cuando sucede esto lo más natural es redefinir el intervalo de la variable y como $[y(b), y(a)]$, lo cual implica que hemos invertido el sentido de la integral, y por tanto debemos multiplicar $dx(y)/dy$ por -1 . Por tanto, en realidad más que $dx(y)dy$ debemos tomar el "valor absoluto" de $dx(y)dy$.

Resumiendo: Al aplicar el cambio $x \rightarrow y = y(x)$ sobre la función de densidad de probabilidad $f(x)$ obtenemos

$$g(y) = f[x(y)] \left| \frac{dx(y)}{dy} \right|$$

siendo el intervalo de definición de la nueva variable $[y_1, y_2]$ donde $y_1 \equiv \min(y(a), y(b))$, $y_2 \equiv \max(y(a), y(b))$. (Recordamos que el símbolo $|\dots|$ denota valor absoluto y que por hipótesis la función $y(x)$ es, o bien estrictamente creciente, o bien estrictamente decreciente. Esto último implica que la función $x(y)$ será estrictamente creciente en el primer caso y estrictamente decreciente en el segundo).

La función `cambiovvariablePDF` realiza el cambio de variable pedido:

```

/*
   Funcion cambiovvariablePDF: Aplica el cambio de variable definido por "cambio" a la
   func. de densidad de probabilidad f, definida como func. de x en el intervalo "intervalo".
*/
cambiovvariablePDF(f, intervalo, cambio) := block([aux, signo, nuevoint],
/*
INPUT:
   f: func. de densidad de probabilidad de la variable vieja (x)
   intervalo: dominio de def. [a, b] de la variable x
   cambio: lista
           cambio[1]: la nueva variable,
           cambio[2]: la func. que define la nueva variable como func. de x
OUTPUT:
   lista:
           [1]: func. de densidad de prob. de la variable nueva
           [2]: dominio de def. [a, b] de la variable nueva
*/
/* calculamos el intervalo de def. de la nueva var */
aux : [subst(intervalo[1], x, cambio[2]), subst(intervalo[2], x, cambio[2])],
nuevoint : [min(aux[1], aux[2]), max(aux[1], aux[2])],
/* si y[a] < y[b], entonces el signo de dy/dx es positivo */
signo : +1,
/* si y[a] > y[b], dy/dx es negativo y debemos multiplicar por -1 */
if aux[1] > aux[2] then signo : -1,
/* cargamos la func. solvesust */

```

```

batchload("Docencia/Grado-en-Fisica/1-Fisica-Computacional-I/apuntes/c-05/solve_sust.mc"),
/* despejamos x de y = y(x), guardamos el resultado en aux */
aux : solvesust(cambio[2] - cambio[1], x)[1],
/* sustituimos x por su expres. como func. de la nueva variable en f(x)
multiplicamos el resultado por dx/dy, calculado como d(aux)/d(cambio[1])
multiplicamos el resultado por signo (= +1 si dy/dx > 0, = -1 si dy/dx < 0 )
*/
aux : subst(aux, x, f) * diff(aux, cambio[1]) * signo,
/* finalmente el resultado pedido es */
[aux, nuevoint]
)$
/* Fin */

```

Ejercicio 2

Dada una función de distribución de velocidades de las moléculas de un gas escriba una función en Maxima que calcule la función de distribución de energía cinética de las moléculas del gas.

input: • Función de densidad de probabilidad en términos de las componentes cartesianas de la velocidad $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$.

output: • Función de densidad de probabilidad en términos de la energía cinética $E = (1/2)mv^2$.

Para hacer este ejercicio suponga que todas las moléculas del gas tienen la misma masa m . El intervalo de valores posibles de las componentes de la velocidad es $v_i \in (-\infty, +\infty)$ y el de la energía cinética es (obviamente) $E \in (0, \infty)$. Los pasos que deben darse para hacer este ejercicio son los siguientes:

- Aplicar el cambio de variable de cartesianas a esféricas. Con esto pasamos de la función de densidad de probabilidad en términos de las componentes cartesianas de la velocidad $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ a la densidad de probabilidad en términos del módulo de la velocidad v y de los dos ángulos (θ, ϕ) que definen la orientación del vector velocidad.
- Integramos la función de distribución obtenida en el apartado anterior respecto de θ y ϕ para todos los valores posibles de estos ángulos. Con esto obtenemos la función de densidad de probabilidad en términos del módulo de la velocidad v , independientemente de su orientación.
- Aplicamos el cambio de variable $E = (1/2)mv^2$

En coordenadas esféricas el vector $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ está descrito por el módulo de la velocidad

$$v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$$

el ángulo θ formado por \mathbf{v} y el eje z

$$\theta = \arccos(v_z/v)$$

y el ángulo ϕ formado por la proyección de \mathbf{v} en el plano xy con el eje x

$$\phi = \arctan(v_y/v_x)$$

y viceversa, las coordenadas cartesianas de \mathbf{v} en términos de (v, θ, ϕ) están dadas por

$$v_x = v \sin \theta \cos \phi, \quad v_y = v \sin \theta \sin \phi, \quad v_z = v \cos \theta$$

donde los dominios de definición de todas estas variables son: $v_x, v_y, v_z \in (-\infty, \infty)$, mientras que $v \in (0, \infty)$, $\theta \in (0, \pi)$, y $\phi \in (0, 2\pi)$. Con esto, el elemento diferencial de volumen en el espacio (v_x, v_y, v_z) en términos de unas y otras variables está dado por

$$dV = dv_x dv_y dv_z = v^2 \sin \theta dv d\theta d\phi$$

Este resultado se obtiene calculando el determinante de la matriz jacobiana de este cambio de variable. Es un ejercicio interesante verificar este resultado con Maxima, para ello basta con hacer lo siguiente:

```
old : [v * sin(theta) * cos(phi), v * sin(theta) * sin(phi), v * cos(theta)];
new : [v, theta, phi];
J : apply( matrix,
           makelist(
             makelist(
               diff(old[i], new[j])
             , j, 1, length(old) )
           , i, 1, length(old) )
);
trigsimp( determinant(J) );
```

El resultado de ejecutar este código es el factor $v^2 \sin \theta$. Como puede verse, este código calcula la matriz Jacobiana, y posteriormente su determinante, sean cuales sean la lista de variables viejas como función de las nuevas (**old**) y la lista de variables nuevas (**new**).

Volviendo al problema 2, la probabilidad dP de que el vector velocidad \mathbf{v} tome valores en un elemento diferencial de volumen dV alrededor del punto (v_x, v_y, v_z) es

$$dP = f(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z$$

En términos de las variables (v, θ, ϕ) esta probabilidad puede expresarse como

$$dP = f(v \sin \theta \cos \phi, v \sin \theta \sin \phi, v \cos \theta) v^2 \sin \theta dv d\theta d\phi$$

identificando esto con $dP = g(v, \theta, \phi) dv d\theta d\phi$ encontramos

$$g(v, \theta, \phi) = f(v \sin \theta \cos \phi, v \sin \theta \sin \phi, v \cos \theta) v^2 \sin \theta$$

Una vez calculada la densidad de probabilidad de \mathbf{v} en coordenadas esféricas, lo que nos interesa ahora es calcular la densidad de probabilidad de encontrar el valor v , independientemente de la orientación de \mathbf{v} , es decir, independientemente de los ángulos θ y ϕ . Vamos a llamar sencillamente $g(v)$ a esta densidad de probabilidad

$$g(v) = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi g(v, \theta, \phi)$$

Una vez calculada $g(v)$, que depende de una única variable, para obtener la función de densidad de probabilidad en términos de la energía cinética E (llamémosla $h(E)$) lo único que queda por hacer es aplicar el cambio de variable $v \rightarrow E(v) = (1/2)mv^2$ (obsérvese que en este caso la función $E(v)$ es estrictamente creciente), de donde deducimos $v(E) = \sqrt{2E/m}$, por tanto

$$dv = \frac{dv}{dE} dE = \frac{dE}{\sqrt{2mE}}$$

por tanto, la densidad de probabilidad en términos de la energía cinética está finalmente dada por

$$h(E) = g\left(\sqrt{\frac{2E}{m}}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2mE}}$$

El código incluido a continuación implementa este cambio de variable:

```

/*
  Funcion PDFvelmolecular2PDFenercin: Genera la func. de densidad de probabilidad de la
  energ\i a cin\etica de las mol\eculas un gas (E), a partir de la func. de densidad
  de probabilidad de las velocidades moleculares, expresada en func. de las componentes
  cartesianas del vector velocidad.
*/
PDFvelmolecular2PDFenercin(f) := block([old, g],
  /*
  INPUT:
    f(vx, vy, vz): func. de densidad de probabilidad de las velocidades
    moleculares en cartesianas
  OUTPUT:
    h(E): func. de densidad de probabilidad de la energ\i a cin\etica
  */
  /* La lista de variables viejas como func. de las nuevas para el cambio a
  esf\ericas es */
  old : [v * sin(theta) * cos(phi), v * sin(theta) * sin(phi), v * cos(theta)],
  /* sustituimos esto en f(vx, vy, vz) y multiplicamos el resultado por el
  factor v^2 * sin(theta) */
  g : subst(old [1], vx, f),
  g : subst(old [2], vy, g),
  g : subst(old [3], vz, g),
  g : g * v^2 * sin(theta),
  /* integramos este resultado respecto de todas las orientaciones posibles, para
  quedarnos finalmente con g(v) */
  g : integrate( integrate( g, theta, 0, %pi), phi, 0, 2*%pi),

```

```
/* sustituimos el cambio de variable  $v \rightarrow v(E) = \sqrt{2*E/m}$  en el resultado anterior */  
  
subst( sqrt(2*E/m), v, g) / sqrt(2 * m * E)  
  
)$  
  
/* Fin */
```