Universität Konstanz

Mathematik I

für Chemie, Life Science und Nanoscience

Vorlesung 2: Beispiele zur Kombinatorik

Dr. Stefan Frei, 24.10.19

Bsp. Permutation (1)

In einem winzigen Teil eines DNA-Strangs befindet sich je 1 Adenin(A)-, 1 Thymin(T)-, 1 Guanin(G)- und 1 Cytosin(C)-Molekül.
Wir nehmen der Einfachheit halber an, dass diese beliebig aneinander gereiht werden können.

Frage: Wie viele Möglichkeiten gibt es diese Moleküle aneinanderzureihen?

Bsp. Permutation (1)

In einem winzigen Teil eines DNA-Strangs befindet sich je 1 Adenin(A)-, 1 Thymin(T)-, 1 Guanin(G)- und 1 Cytosin(C)-Molekül.
Wir nehmen der Einfachheit halber an, dass diese beliebig aneinander gereiht werden können.

Frage: Wie viele Möglichkeiten gibt es diese Moleküle aneinanderzureihen?

Lösung: $N = 4$. Es gibt

$$N! = 4! = 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = 24$$

Möglichkeiten.

Bsp. Permutation (2)

In einem winzigen Teil eines DNA-Strangs befinden sich je 10 Adenin(A)-, 10 Thymin(T)-, 10 Guanin(G)- und 10 Cytosin(C)-Bausteine.
Wir nehmen der Einfachheit halber an, dass diese beliebig aneinander gereiht werden können.

Frage: Wie viele verschiedene Stränge können von diesen Molekülen gebildet werden?

Bsp. Permutation (2)

In einem winzigen Teil eines DNA-Strangs befinden sich je 10 Adenin(A)-, 10 Thymin(T)-, 10 Guanin(G)- und 10 Cytosin(C)-Bausteine.
Wir nehmen der Einfachheit halber an, dass diese beliebig aneinander gereiht werden können.

Frage: Wie viele verschiedene Stränge können von diesen Molekülen gebildet werden?

Lösung: $N = 40$, $N_1 = N_2 = N_3 = N_4 = 10$. Es gibt

$$\frac{N!}{N_1!N_2!N_3!N_4!}$$

Möglichkeiten.

Bsp. Permutation (2)

In einem winzigen Teil eines DNA-Strangs befinden sich je 10 Adenin(A)-, 10 Thymin(T)-, 10 Guanin(G)- und 10 Cytosin(C)-Bausteine.
Wir nehmen der Einfachheit halber an, dass diese beliebig aneinander gereiht werden können.

Frage: Wie viele verschiedene Stränge können von diesen Molekülen gebildet werden?

Lösung: $N = 40$, $N_1 = N_2 = N_3 = N_4 = 10$. Es gibt

$$\frac{N!}{N_1!N_2!N_3!N_4!}$$

Möglichkeiten.
Es ist $40! \approx 8,16 \cdot 10^{47}$ und $10! \approx 3,63 \cdot 10^6$. Damit ergeben sich

$$\frac{40!}{(10!)^4} \approx 4,71 \cdot 10^{21}$$

Möglichkeiten.

Bsp. Permutation (3)

Gegeben sei ein linearer Kohlenwasserstoff mit 8 Kohlenstoffatomen, bei dem an den beiden Enden ein Iod- und ein Chloratom substituiert ist.

Frage: Wie viele Isomere gibt es, die genau 3 Doppelbindungen haben, z.B.

$$I - CH_2 - CH = C = C = CH - CH_2 - CH_2 - CH_2 - Cl\,?$$

Bsp. Permutation (3)

Gegeben sei ein linearer Kohlenwasserstoff mit 8 Kohlenstoffatomen, bei dem an den beiden Enden ein Iod- und ein Chloratom substituiert ist.

Frage: Wie viele Isomere gibt es, die genau 3 Doppelbindungen haben, z.B.

$$I - CH_2 - CH = C = C = CH - CH_2 - CH_2 - CH_2 - Cl\,?$$

Lösung: $N = 7$ (Zahl der $C - C$ Bindungen), $N_1 = 3$, $N_2 = 4$, d.h. es gibt

$$\frac{N!}{N_1!N_2!} \left(= \binom{N}{N_1} \right) = \frac{7 \cdot 6 \cdot 5}{3 \cdot 2 \cdot 1} = 35$$

Isomere.

Bsp. Partition (1): Zahlenlotto (6 aus 49)

Es werden 6 Kugeln gezogen und zur Seite gelegt. Wie viele verschiedene Möglichkeiten können auftreten?

Bsp. Partition (1): Zahlenlotto (6 aus 49)

Es werden 6 Kugeln gezogen und zur Seite gelegt. Wie viele verschiedene Möglichkeiten können auftreten?

Lösung: Es ergibt sich eine Partition mit 6 (gezogenen) Kugeln auf der einen Seite und 43 auf der anderen: $N = 49$, $N_1 = 6$, $N_2 = 43$. Dafür gibt es

$$\binom{N}{N_1} = \frac{N!}{N_1!N_2!} = \frac{49!}{6! \cdot 43!} = 13983816$$

Möglichkeiten.

Bsp. Partition (1): Zahlenlotto (6 aus 49)

Es werden 6 Kugeln gezogen und zur Seite gelegt. Wie viele verschiedene Möglichkeiten können auftreten?

Lösung: Es ergibt sich eine Partition mit 6 (gezogenen) Kugeln auf der einen Seite und 43 auf der anderen: $N = 49$, $N_1 = 6$, $N_2 = 43$. Dafür gibt es

$$\binom{N}{N_1} = \frac{N!}{N_1!N_2!} = \frac{49!}{6! \cdot 43!} = 13983816$$

Möglichkeiten.
Da jede gleich wahrscheinlich ist, beträgt die Wahrscheinlichkeit jeder Partition (d.h. die Chance auf 6 Richtige)

$$\frac{1}{13983816}.$$

Bsp. Partition (2): Gastheorie

Ein Gas bestehe aus N Molekülen, die jeweils mit 50% Wahrscheinlichkeit im Energiezustand ϵ_1 oder im Energiezustand $\epsilon_2 > \epsilon_1$ auftreten. Berechnen Sie für den Fall $N = 4$ die Gesamtenergie ϵ in allen möglichen Fällen und deren Wahrscheinlichkeit.

Bsp. Partition (2): Gastheorie

Ein Gas bestehe aus N Molekülen, die jeweils mit 50% Wahrscheinlichkeit im Energiezustand ϵ_1 oder im Energiezustand $\epsilon_2 > \epsilon_1$ auftreten. Berechnen Sie für den Fall $N = 4$ die Gesamtenergie ϵ in allen möglichen Fällen und deren Wahrscheinlichkeit.

Sei $N_i =$# Moleküle im Zustand ϵ_i $(i = 1, 2)$. Es gibt folgende Fälle:

- $N_1 = 0, N_2 = 4, \epsilon = 4\epsilon_2$. Zahl der Repräsentanten: $\frac{4!}{0! \cdot 4!} = 1$
- $N_1 = 1, N_2 = 3, \epsilon = \epsilon_1 + 3\epsilon_2$. Zahl der Repräsentanten: $\frac{4!}{1! \cdot 3!} = 4$
- $N_1 = 2, N_2 = 2, \epsilon = 2\epsilon_1 + 2\epsilon_2$. Zahl der Repräsentanten: $\frac{4!}{2! \cdot 2!} = 6$
- $N_1 = 3, N_2 = 1, \epsilon = 3\epsilon_1 + \epsilon_2$. Zahl der Repräsentanten: $\frac{4!}{3! \cdot 1!} = 4$
- $N_1 = 4, N_2 = 0, \epsilon = 4\epsilon_1$. Zahl der Repräsentanten: $\frac{4!}{4! \cdot 0!} = 1$

Bsp. Partition (2): Gastheorie

Ein Gas bestehe aus N Molekülen, die jeweils mit 50% Wahrscheinlichkeit im Energiezustand ϵ_1 oder im Energiezustand $\epsilon_2 > \epsilon_1$ auftreten. Berechnen Sie für den Fall $N = 4$ die Gesamtenergie ϵ in allen möglichen Fällen und deren Wahrscheinlichkeit.

Sei $N_i =$# Moleküle im Zustand ϵ_i $(i = 1, 2)$. Es gibt folgende Fälle:

- $N_1 = 0$, $N_2 = 4$, $\epsilon = 4\epsilon_2$. Zahl der Repräsentanten: $\frac{4!}{0!\cdot 4!} = 1$ (Wahrsch. $\frac{1}{16}$)
- $N_1 = 1$, $N_2 = 3$, $\epsilon = \epsilon_1 + 3\epsilon_2$. Zahl der Repräsentanten: $\frac{4!}{1!\cdot 3!} = 4$ (Wahrsch. $\frac{4}{16} = \frac{1}{4}$)
- $N_1 = 2$, $N_2 = 2$, $\epsilon = 2\epsilon_1 + 2\epsilon_2$. Zahl der Repräsentanten: $\frac{4!}{2!\cdot 2!} = 6$ (Wahrsch. $\frac{6}{16} = \frac{3}{8}$)
- $N_1 = 3$, $N_2 = 1$, $\epsilon = 3\epsilon_1 + \epsilon_2$. Zahl der Repräsentanten: $\frac{4!}{3!\cdot 1!} = 4$ (Wahrsch. $\frac{4}{16} = \frac{1}{4}$)
- $N_1 = 4$, $N_2 = 0$, $\epsilon = 4\epsilon_1$. Zahl der Repräsentanten: $\frac{4!}{4!\cdot 0!} = 1$ (Wahrsch. $\frac{1}{16}$)

Die Gleichverteilung ist am wahrscheinlichsten!