

5 Calcolo Combinatorio

Il Calcolo Combinatorio è costituito da metodi per determinare il numero di elementi di un insieme finito; ed elencarli, eventualmente.

In questa Lezione faremo dei modesti accenni alla Probabilità Combinatoria, basata in modo ovvio sul Calcolo Combinatorio.

5.1 Un po' di Calcolo Combinatorio in Farmacia

Vediamo alcuni dei molti casi di ricorrenza del Calcolo Combinatorio nella Farmacia.

- Il Calcolo Combinatorio ricorre nella chimica dei farmaci. Una rivista scientifica internazionale è *Combinatorial Chemistry* [Link->](#). Leggiamo su Wikipedia, l'enciclopedia libera:

Spesso il ricercatore si imbatte in un composto che dimostra una certa attività biologica, che però non è sufficiente per garantire il successo clinico (e commerciale) del composto. A questo punto inizia un processo di screening "quasi casuale": vengono preparati e testati tutti i possibili composti che mantengono una analogia strutturale per il nucleo fondamentale, ma ne differiscono per i sostituenti collegati.

- Il Calcolo Combinatorio ricorre anche nelle questioni di elencazione, catalogazione e archiviazione dei prodotti e delle attività di una farmacia. Per esempio il Calcolo Combinatorio risponderà alla domanda: in quanti modi posso ordinare 4 prodotti su una brochure pubblicitaria? Sono 24 modi, possono essere elencati facilmente, e poi assoggettati a considerazioni sanitarie e/o di marketing, per sceglierne uno per la stampa finale.

5.2 Introduzione a Calcolo e Probabilità Combinatori

La **probabilità combinatoria elementare** si basa su 2 cose:

- la **concezione classica della probabilità**, quella della probabilità come *casi favorevoli / casi possibili*;
- il **calcolo combinatorio**, costituito da metodi per determinare il numero di elementi di un insieme finito E , cioè la sua **cardinalità**, indicata con $\#E$ (e da altri con $\text{card}E$ o $|E|$); conteggiare gli elementi degli insiemi finiti adesso serve proprio per contare i casi favorevoli e i casi possibili di cui sopra.

In questa trattazione elementare, trattiamo il **calcolo combinatorio** – che di per sè sarebbe una matematica elementare – in 3 porzioni:

- una parte l'abbiamo già trattata nell'insiemistica: in particolare
 - **prodotto cartesiano**
 - **insieme delle parti**
- un'altra parte in questa lezione con accenni al Calcolo delle Probabilità:
 - **elencazione con conteggio**
 - **cardinalità dell'unione**
 - **permutazioni**
 - **combinazioni**
 - **disposizioni**
- una terza parte in una lezione molto successiva, nell'ambito del Calcolo delle Probabilità:
 - **dismutazioni**.

Per esempio col prodotto cartesiano, e l'elencazione con conteggio, **si trova facilmente** la probabilità che la somma dei punteggi di 2 dadi sia un numero primo:

$$p = \frac{\# \text{ casi favorevoli}}{\# \text{ casi possibili equiprobabili}} = \frac{15_{\leftarrow \text{elencazione con conteggio}}}{6 \times 6_{\leftarrow \text{prodotto cartesiano}}} = \frac{5}{12}$$

5.3 Elencazione con conteggio

L'elencazione con conteggio è adeguata quando è più semplice dell'applicazione di formule. Per esempio per determinare quanti sono i numeri primi minori di 25

$$2, 3, 5, 7, 11, 13, 17, 19, 23 \quad \rightarrow \text{sono } 9$$

o (col computer) di 10000.

Esempio di lencazione con conteggio – Anagrammi dorati

ESERCIZIO _{μ_{2024}} (R) * Dire quanti sono (a prescindere dal senso eventuale) gli anagrammi della parola *oro*, ovvero in quanti modi si può riordinare il dataset

o, r, o

3

(L'elencazione con conteggio risolve⁽⁴¹⁾ subito il problema, e qua lo applichiamo al dataset considerato:

r, o, o

o, r, o

o, o, r,

e si trova 3 – e similmente considerando gli anagrammi, a prescindere dal senso: *roo*, *oro*, *oor*).

⁴¹Errato è invece applicare la formula dell' $n!$, ora $3!$, del numero di permutazioni di un insieme di n elementi, perchè qua abbiamo un dataset di 3 elementi ma non un insieme di 3 elementi; gli elementi sono 2 – o, r – e non c'entra nulla, a causa della ripetizione di un elemento; sarebbe anche possibile applicare una formula – *formula delle permutazioni con ripetizione* – per trovare il risultato 3, ma più complessa dell'elencazione con conteggio, e ben poco nota).

Un esempio applicato al Calcolo delle Probabilità. La probabilità che un numero primo minore di 25 scelto a caso sia dispari è

$$\frac{8}{9} \approx 0.889 = 88.9\%$$

perché $\#\{2, 3, 5, 7, 11, 13, 17, 19, 23\} = 9$ e solo il 2 non è dispari, restandone 8.

Questo sopra, triplice, è il modo in cui in questa trattazione elementare in generale esprimeremo la probabilità, ma si noti che il secondo (0.889), tipico della Matematica, è poco usato nella pratica della Farmacia. Anzi, si faccia attenzione a non confondere 0.889 con 0.889%, che è la centesima parte.

5.4 Cardinalità dell'unione

Per gli insiemi finiti, dei quali soli ora ci occupiamo, vale (teorema) questa (ovvia: si disegnano i diagrammi di Eulero-Venn) formula (che lega le cardinalità dell'unione e dell'intersezione):

$$\#(A \cup B) = \#A + \#B - \#(A \cap B)$$

In particolare se A e B sono disgiunti (l'intersezione ha 0 elementi) la cardinalità dell'unione è la somma della [cardinalità](#).

ESERCIZIO _{μ 2018}

* Supponiamo che di 116 individui con anticorpo $VIS\alpha$ oppure $VIS\gamma$, 73 hanno l'anticorpo $VIS\alpha$, e 53 l'anticorpo $VIS\gamma$. Quanti hanno entrambi gli anticorpi?

SVOLGIMENTO

Sappiamo che per gli insiemi finiti la numerosità ovvero cardinalità degli insiemi unione e intersezione vale

$$\#(A \cup B) = \#A + \#B - \#(A \cap B)$$

cioè equivalentemente vale

$$\#(A \cap B) = \#A + \#B - \#(A \cup B)$$

e ora con

$$A = \{\text{soggetti con VIS}\alpha\}$$

$$B = \{\text{soggetti con VIS}\gamma\}$$

si ha

numero di soggetti con entrambi gli anticorpi =

$$= \#(A \cap B) = \#A + \#B - \#(A \cup B) =$$

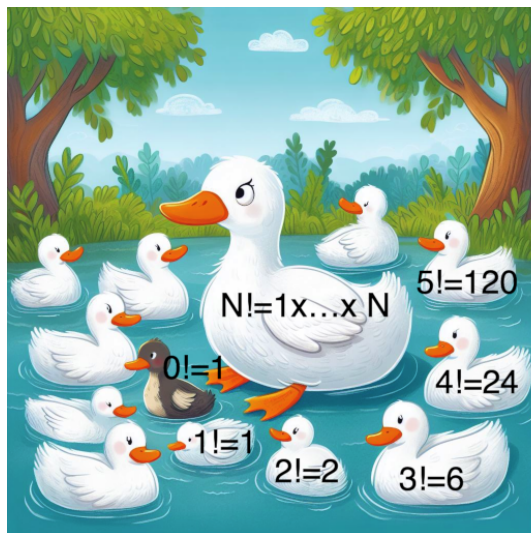
$$= 73 + 53 - 116 =$$

10

BOZZA - DRAFT

5.5 Fattoriale

Di amplissima ricorrenza nel calcolo combinatorio è il fattoriale.



Il fattoriale di 0 è 1,
una sorta di brutto anatroccolo
isolato fra i fattoriali;
il fattoriale di ogni
N intero > 0 è il
prodotto
dei numeri 1, 2...
fino a N.

Figure 3: Bing Image Creator, rielaborata con l'aggiunta di testo.

Si ricordi per fissare le idee

$$3! = 1 \cdot 2 \cdot 3 = 6$$

eventualmente anche col seguente mnemonico:

Nùmer sei fattorial tu sei di tre.

(È un endecasillabo *a maggiore* e gioca sul doppiosenso “sei”).

☺ *All'università ho scoperto che $2 + 4$ è uguale a $3!$*

Si noti la grande rapidità con cui crescono i fattoriali:

1, 1, 2, 6, 24, 120, 720, 5040....

Addirittura $100!$ ha già 158 cifre.

Ne ripareremo a proposito delle *successioni*.

5.6 Permutazioni

Ogni ordinamento totale di un insieme finito non vuoto A si dice *permutazione* degli elementi di A . Esso viene identificato con l'unica $(\#A)$ -upla di elementi di A che "rappresenta" quell'ordinamento totale. Per esempio dall'unica 5-upla – come (b, d, a, e, c) – che rappresenta un determinato ordinamento totale di A se esso ha 5 elementi.

Il numero delle permutazioni di un insieme di n elementi si indica talvolta con P_n e si pone anche $P_0 := 1$.

Il numero delle permutazioni di un insieme di n elementi è dato dal *fattoriale*[†] di n , che vale 1 se $n = 0$ e altrimenti $1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot n$:

$$P_n = n! .$$

Per esempio 4 prodotti possono essere pubblicizzati ciascuno su 1 di 4 pagine di una brochure in $4!$ cioè 24 ordini diversi.

Esempio. In quanti ordini diversi si possono mettere in un contenitore di acqua 8 sostanze chimiche diverse?

Che probabilità c'è di ordinarle in un particolare fissato modo mettendole a caso?

È un problema di permutazioni, dell'insieme $\{x_1, \dots, x_8\}$ o più semplicemente $\{1, \dots, 8\}$ delle sostanze considerate, che ha 8 elementi. Gli elementi si possono riordinare in $8! = 40\,320$ modi. La probabilità è $1/40\,320 \approx 0.0000231 = 0.00231\%$

Esercizio. In quanti modi diversi si possono allineare 5 prodotti farmaceutici su un espositore?

5.7 Combinazioni semplici

Consideriamo un insieme di $n = 7$ elementi e scegliamone $k = 3$. In quanti modi si può fare? La risposta è data dalle *combinazioni (semplici)* che ora vedremo.

(Ma se anche riteniamo ordinata la terna scelta, si può fare in molti più modi, $3! = 6$ volte tante, e sono le *disposizioni semplici*, considerate nel successivo paragrafo 5.8).

Combinazioni semplici. Dato un insieme E di $n > 0$ elementi (cioè non vuoto) e un numero naturale k tale che $0 \leq k \leq n$, i sottoinsiemi di E di k elementi si chiamano *combinazioni (semplici)* di n oggetti a k a k (per esempio a 3 a 3) e il numero di esse si chiama *coefficiente binomiale*, e si indica con $C_{n,k}$ o $\binom{n}{k}$ e si pone per convenzione $C_{n,0} := 1$. Questo numero si calcola col Triangolo di Tartaglia, oppure con una formula di esso

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$$

Nota. Numeri enormi li lasceremo indicati, per esempio scriveremo $\binom{365}{23} =$

$$= \frac{365!}{23!342!}$$

senza procedere ulteriormente nel calcolo.

5.8 Disposizioni semplici

Disposizioni semplici. Dato un insieme E di $n > 0$ elementi (cioè non vuoto) e un numero naturale k tale che $0 \leq k \leq n$, i sottoinsiemi ordinati di E di k elementi si dicono *disposizioni (semplici)* di n oggetti a k a k (per esempio a 3 a 3), e il numero di esse si indica con $D_{n,k}$ e si pone per convenzione $D_{n,0} := 1$.
 è (teorema)

$$D_{n,k} = \frac{n!}{(n-k)!}$$

Mnemonici:

combinazioni... **co**n $k!$ e **co**sì **co**mpare **co**nto **co**rto

dispo sizioni... **di**menticati $k!$ e **di**sponi ordinatamente

Esempi. 3 elementi ordinati si possono scegliere da 7 in $\frac{7!}{(7-3)!} = \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6 \cdot 7}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4} = 5 \cdot 6 \cdot 7 = 210$ modi, e senza riguardo all'ordine in $\binom{7}{3} = \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6 \cdot 7}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4} = 35$ modi. (Riordinabili in $3! \cdot 35 = 210$ modi). Si provi a elencare i 35 modi. (Si fissi per esempio $E := \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\}$).

Esercizio. In quanti modi si possono scegliere 4 elementi chimici diversi della tavola periodica ("classica") di 92 elementi? E quante sono le quaterne ordinate di 4 elementi?

Per il primo quesito, sono

$$\begin{aligned} \binom{92}{4} &= \frac{92!}{4!(92-4)!} = \frac{92!}{4!88!} = \frac{92 \cdot 91 \cdot 90 \cdot 89}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4} = \\ &= 23 \cdot 91 \cdot 15 \cdot 89 = 2\,794\,155 \end{aligned}$$

(Si provi con Wolframalpha `Binomial[92,4]`).

Per il secondo quesito, sono

$$\begin{aligned} D_{92,4} &= \frac{92!}{(92-4)!} = \frac{92!}{88!} = 92 \cdot 91 \cdot 90 \cdot 89 = \\ &= 67\,059\,720 \end{aligned}$$

Esercizi. In quanti modi si possono scegliere 23 giorni diversi del 2018? Con o senza significato, quante "parole" di 4 lettere si possono comporre con le lettere C, R, O, N, I, S, T, A?

Esempio sulle combinazioni semplici. Che probabilità c'è di vincere giocando una cinquina su una ruota del lotto? Per essere sicuri di vincere giochiamo 1 euro su ciascuna di esse. Quanto guadagniamo?

Di casi favorevoli ce n'è 1, e i casi possibili sono le [combinazioni](#)

semplici di 90 oggetti a 5 a 5, che sono in numero di $\binom{90}{5}$, e allora la probabilità è

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{\binom{90}{5}} = \frac{1}{\frac{90!}{5!(90-5)!}} = \frac{5!85!}{90!} = \frac{1 \cdot \dots \cdot 5 \cdot 1 \cdot \dots \cdot 85}{1 \cdot \dots \cdot 90} = \\ &= \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5}{86 \cdot 87 \cdot 88 \cdot 89 \cdot 90} = \frac{1}{86 \cdot 87 \cdot 22 \cdot 89 \cdot 3} = \frac{1}{43\,949\,268}. \end{aligned}$$

Abbiamo speso 43 949 268 euro e 1 cinquina da noi giocata vince; poiché si vince 6 milioni di volte la posta, vinciamo 6 milioni di euro, con un guadagno di -37 949 268 euro. (Ciclopica perdita) ☹

Esempio sulle disposizioni semplici. Quanti sono i numeri esadecimali di 5 “cifre” (da 00000 a FFFFF) con le “cifre” tutte diverse?

è un problema di disposizioni semplici. Consideriamo i sottoinsiemi ordinati di $\{0, 1, \dots, 9, A, \dots, F\}$ di 5 elementi, che – in base al teorema – sono in numero di

$$\begin{aligned} D_{16,5} &= \frac{16!}{(16-5)!} = \frac{16!}{11!} = \\ &= \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6 \cdot 7 \cdot 8 \cdot 9 \cdot 10 \cdot 11 \cdot 12 \cdot 13 \cdot 14 \cdot 15 \cdot 16}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6 \cdot 7 \cdot 8 \cdot 9 \cdot 10 \cdot 11} = 524\,160. \end{aligned}$$

Complementi

5.9 Complementi – Triangolo di Tartaglia e potenze

il *Triangolo di Tartaglia* (o *di Pascal*), è la scrittura

$$\begin{array}{cccc}
 & & & 1 & \\
 & & & & 1 & \\
 & & 1 & 2 & 1 & \\
 & 1 & 3 & 3 & 1 & \\
 & & & & & \dots
 \end{array}$$

variamente estesa con la Formula di Pascal

$$\binom{n}{k} = \binom{n-1}{k} + \binom{n-1}{k-1}$$

(e cioè ogni numero è la somma dei 2 soprastanti, a parte gli 1 ai margini) dove n è il numero di riga a partire dalla 0-esima e k è la posizione nella riga a partire dalla 0-esima.

Il Triangolo di Tartaglia consente il calcolo dei *coefficienti binomiali* $\binom{n}{k}$ mediante sole somme. Ciò è utile sia nel problema delle [combinazioni semplici](#) che nella *potenza del binomio*

$$\begin{aligned}
 (a+b)^n &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} a^k b^{n-k} \quad \text{ovvero} \\
 &= \binom{n}{0} a^n + \binom{n}{1} a^{n-1} b + \binom{n}{2} a^{n-2} b^2 + \binom{n}{3} a^{n-3} b^3 + \dots + \binom{n}{n} b^n
 \end{aligned}$$

(si noti che nella seconda formula gli a e b nel secondo membro sono scambiati fra loro rispetto alla prima formula, come se là fosse scritto $a^{n-k} b^k$, ma è equivalente). I vari coefficienti dei monomi si trovano semplicemente sulla n -esima riga del Triangolo di Tartaglia (intendendo come 1-esima quella con due 1), per esempio $(a+b)^4 = a^4 + 4a^3b + 6a^2b^2 + 4ab^3 + b^4$.

5.10 Complementi – Costante di Lieb

Vediamo un notevole risultato di Calcolo Combinatorio, applicato alla Chimica.

Traiamo da Wikipedia, l'enciclopedia libera.

In statistical mechanics, the ice-type models or six-vertex models are a family of vertex models for crystal lattices with hydrogen bonds. The first such model was introduced by Linus Pauling in 1935 to account for the residual entropy of water ice.

An $n \times n$ grid graph (with periodic boundary conditions and $n \geq 2$) has n^2 vertices and $2n^2$ edges; it is 4-regular, meaning that each vertex has exactly four neighbors. An orientation of this graph is an assignment of a direction to each edge; it is an Eulerian orientation if it gives each vertex exactly two incoming edges and exactly two outgoing edges.

Denote the number of Eulerian orientations of this graph by $f(n)$.

È ben evidente che $f(n)$ tende all'infinito. Ma quanto rapidamente? Precisamente

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n^2]{f(n)} = \left(\frac{4}{3}\right)^{\frac{3}{2}} = \frac{8\sqrt{3}}{9} = 1.5396007\dots$$

che si chiama *costante di Lieb del ghiaccio quadrato*.

5.11 ESERCIZI SULLA LEZIONE 5

5.11.1 Esercizio risolto a – Gruppo di studenti

μ_{2024} (R) * In quanti modi diversi si può scegliere un sottogruppo di 4 studenti fra 5 studenti? (O di 4 farmaci fra 5, o di 4 bilance fra 5).

5

(Le scelte possibili sono tante quanti i modi di scegliere un unico studente da escludere dal gruppo dei 5 per costituire il sottogruppo di 4 e questo si può fare ovviamente in 5 modi; più tecnicamente si tratta del numero di *combinazioni* di 5 elementi a 4 a 4 che sono in numero di

$$\binom{5}{4} = \frac{5!}{4!(5-4)!} = \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 1} = 5$$

e addirittura, in questo caso, anche l'elencazione con conteggio sarebbe *al limite accettabile* come metodo risolutivo).

5.11.2 Esercizio da risolvere – Numeri scelti a caso

Che probabilità c'è che un numero < 10 preso a caso sia primo? E < 25? E nei 2 casi, che sia quadrato? Triangolare? Pari?

5.11.3 Esercizio tanto carino quanto difficile

Che probabilità c'è di vincere giocando il terno 1, 2, 3 su una ruota del lotto, per esempio Venezia?

II – Funzioni, Algebra e Piano Cartesiano

BOZZA - DRAFT