Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra

Matemática Numérica II

DATA: 24/04/2023 FOLHA DE PROBLEMAS #2 ANO: 2022/2023

1. Seja $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ uma função duas vezes diferenciável e com matriz Hessiana definida positiva em $\mathbb{R}^n$. Considere a mudança de variável:

$$x \;=\; Ry, \quad \text{em que } R \in \mathbb{R}^{n\times n} \text{ é uma matriz não singular.}$$

Considere a função $g : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ definida por $g(y) = f(Ry)$. Por derivação composta (prove!), tem-se que

$$\nabla g(y) \;=\; R^\top \nabla f(Ry) \quad \text{e} \quad \nabla^2 g(y) \;=\; R^\top \nabla^2 f(Ry) R.$$

   (a) Prove que a matriz Hessiana de g também é definida positiva em $\mathbb{R}^n$.

   (b) Mostre que o método de Newton é invariante ao escalonamento nas variáveis, ou seja, que as fórmulas

$$x_{k+1} \;=\; x_k - \nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k) \quad \text{e} \quad y_{k+1} \;=\; y_k - \nabla^2 g(y_k)^{-1} \nabla g(y_k)$$

   são equivalentes.

   (c) Mostre que quando a matriz R é ortogonal,

$$x_{k+1} \;=\; x_k - \nabla f(x_k) \quad \text{e} \quad y_{k+1} \;=\; y_k - \nabla g(y_k)$$

   são equivalentes.

2. A "velocidade média" das moléculas de um gás ideal é dada por

$$\overline{v} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{M}{2RT}\right)^{3/2} \int_0^\infty v^3 e^{-Mv^2/(2RT)}\, dv,$$

onde M é o peso molecular do gás, R a constante do gás, T a temperatura do gás e v a velocidade molecular.

   (a) Mostre que

$$\overline{v} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}}.$$

   (b) Com recurso a uma linguagem de programação, aproxime o integral para diferentes valores de M, R e T, usando as fórmulas de integração estudadas.

   (c) Compare os resultados obtidos com a solução exacta, evidenciando a ordem de convergência dos métodos usados.